Aalto University
School of Science

PHYS-C0240 Materiaalifysiikka (5op), Kevät 2019

Emppu Salonen
Martti Puska
Kristoffer Simula

Luento 5, torstai 16.5.2019
OSA 1: Käänteishila

(2 ja) 3D atomistiset mallit, käänteishila

- Käänteishilaan tutustuttiin jo 1D hilavärähtelyiden ja tiukan sidoksen approksimaation yhteydessä
- Nyt siirrytään 3D tilanteeseen, pohjana (Bravais) hilan formalismi
- Sovelletaan yleisemmin erilaisten kidehiloissa ”elävien” aaltojen tapauksissa, fononien sijaan nyt tarkastellaan erityisesti Röntgen-säteilyä ja elektronitiloja kiteisissä aineissa. Miten ulkoiset kentät vaikuttavat elektroneihin? Mitä fononi-elektroni, fononi-fotoni –vuorovaikutukset aiheuttavat?

Aiheet tällä viikolla

- Hilatasot ja hilatasoperheet
- Käänteishila ja Brillouin’n vyöhykkeet
- Millerin indeksit
- Sirontateoria (esitetään pohjautuen Röntgen-sirontaan):
  - Braggin ja Lauen sirontaehdot
  - Puuttuvat heijastukset, valintasäännöt
- Sirontakokeet: Röntgen-säteet, elektronit, neutronit, atomit

Aalto University
School of Science

Käänteishila

Osaamistavoitteet

- Osaat määritellä ja omin sanoin selittää käänteishilan käsitteen.
- Osaat selittää mitä ovat hilatasot ja hilatasoperheet, sekä mikä on näiden yhteys käänteishilan vektoreihin $\mathbf{G}$.
- Osaat määrittää hilatasoille (ja hilatasoperheille) niitä vastaavat Millerin indeksit kuutiollisissa rakenteissa.

1D käänteishila

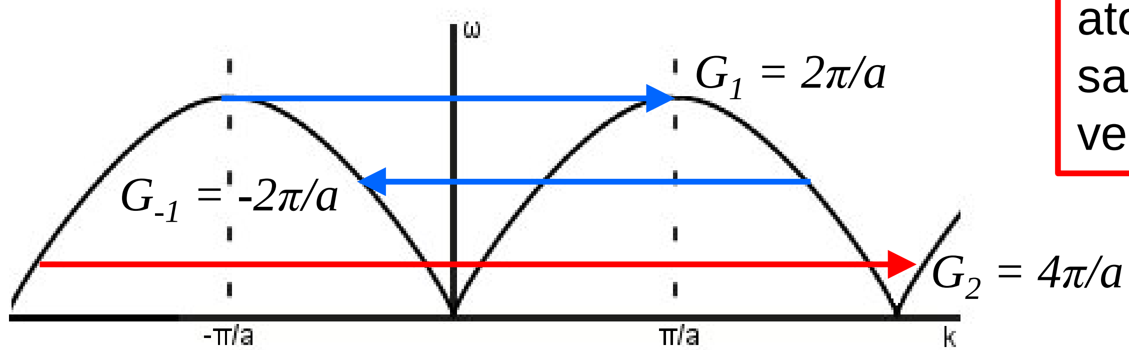
Esim. atomiketjun värähtely

$$\delta x_n = Ae^{i(\omega t - kna)} \qquad (\text{Itseasiassa } \Re\mathrm{e}\,(\delta x_n))$$
$$\omega = \text{värähtelytaajuus}, \qquad \mathrm{k} = \text{aaltovektori}$$

$$\delta x_n(k) = \delta x_n(k + p\frac{2\pi}{a}) \quad , \quad \omega(k) = \omega(k + p\frac{2\pi}{a})$$

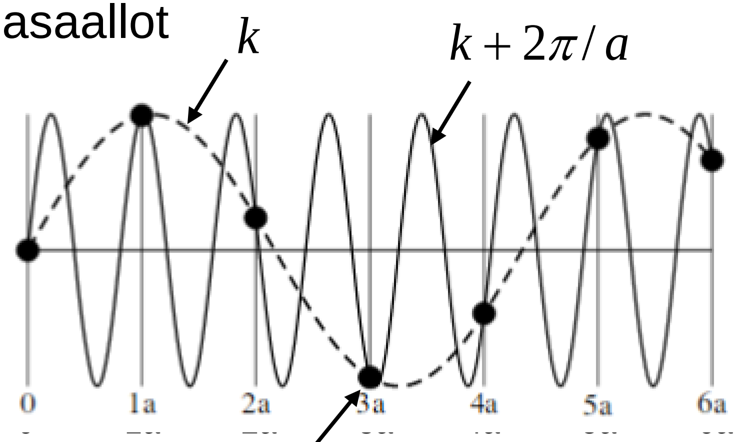
Käänteishila

$$G_p = p\frac{2\pi}{a} \quad \left(\ldots\ -2\frac{2\pi}{a},\ -\frac{2\pi}{a},\ 0,\ \frac{2\pi}{a},\ 2\frac{2\pi}{a},\ \ldots\right)$$



Jäätynyt aalto $\delta x_n = Ae^{-ikna}$, ei aikariippuvuutta

Aliasaallot



Sama fyysinen toteuma!

Aallon poikkeama sama jokaisen atomin kohdalla ja aallon taajuus sama kaikilla k, jotka eroavat G_p:n verran toisistaan.

1D käänteishila

Olkoon

$$\boxed{k = G_p = p\frac{2\pi}{a}}$$

Atomiväli = aallonpituuden $\lambda = 2\pi/G_p$ monikerta

Joka hetki aallon vaihe sama jokaisen atomin kohdalla kaikilla $\mathbf{G_p}$

Atomien poikkeamat

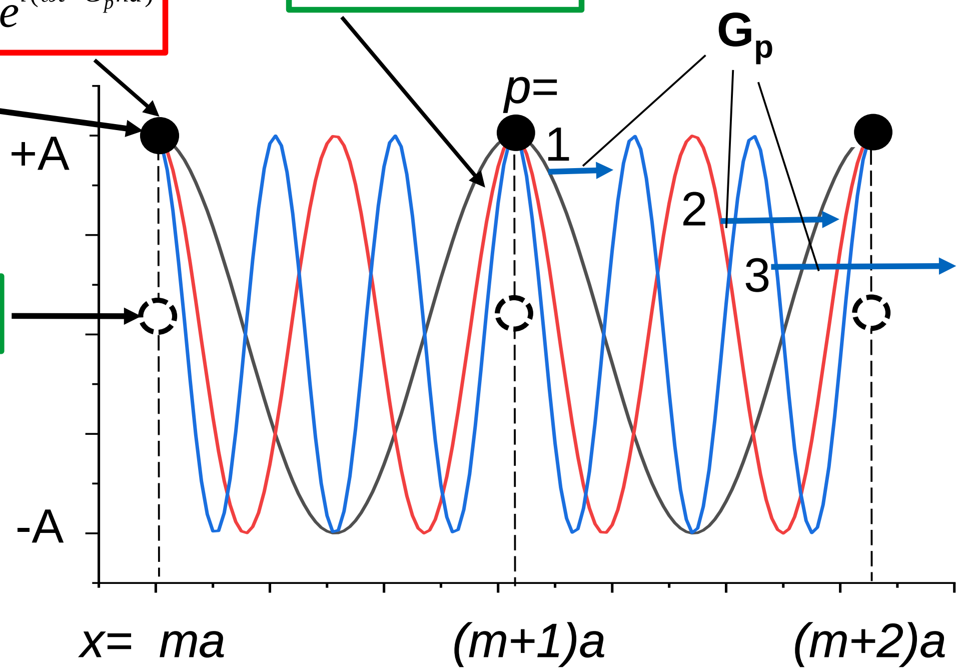
$$\boxed{\delta x_n = Ae^{i(\omega t - G_p na)}}$$

Fiktiivinen jatkuva aalto

$$\boxed{\delta x = Ae^{i(\omega t - G_p x)}}$$

$\boxed{t = 0}$

$\boxed{t = t_1 > 0}$



Pohdintaa

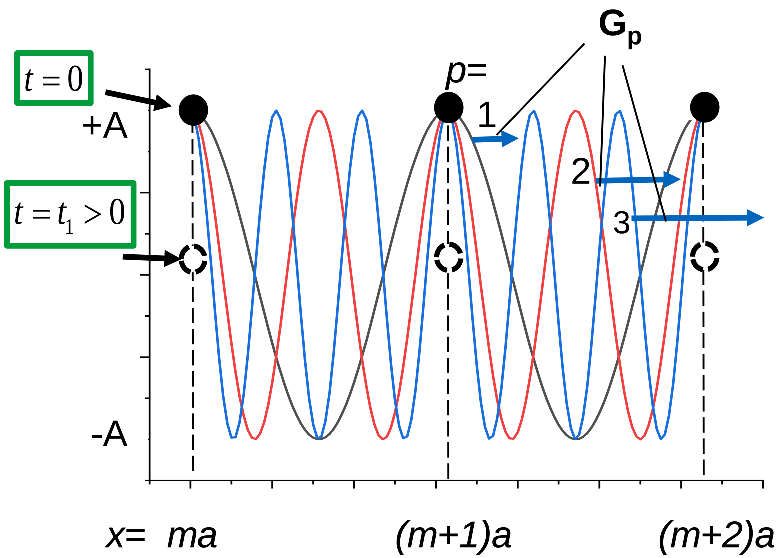
Mitä tämä tarkoittaa teoria-mallissa?
Mitä tapahtuu todellisuudessa?
Mitkä ovat seuraukset?

Miten vaikuttaa vaihenopeus ω/k ?

Pohdintaa: $k = G_p$

$$k = G_p = p\frac{2\pi}{a}$$

Atomiväli = aallonpituuden $\lambda = 2\pi/G_p$ monikerta



Malli

Sidokset levossa → Värähtely-energia (ω) = 0

Todellisuus

Kide osa suurta massaa →

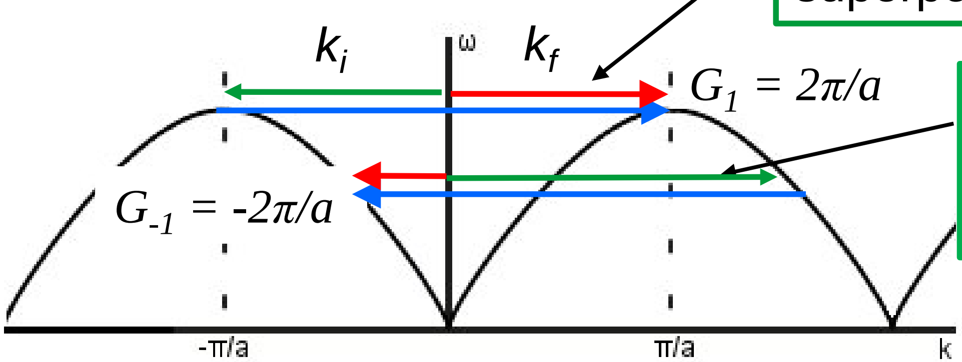
Sivuhuom. 6 sivu 142, (13 s. 85)

G_p moodin osallistuminen sirontaan ei vaadi rekyylienergian siirtoa, vain värähtelyn liikemäärä muuttuu.

Seuraukset

Aaltoon $k = -\pi/2$ voidaan superponoida aalto k = **G_p**

→ Elastisesti heijastunut aalto $k = +\pi/2$



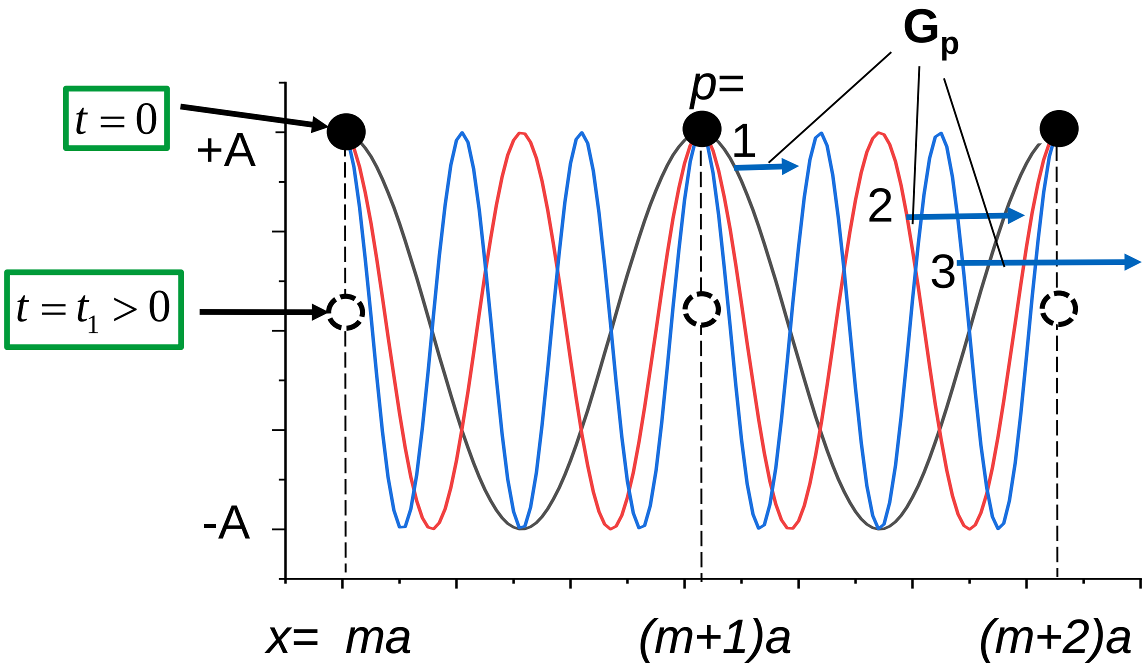
Fononisironnan jälkeen voi olla $|k| > \pi/2$. Kideliikemäärä **k** + **G_p** ja energiavirta kääntyvät (Umklapp prosessi).

→ Äärellinen lämmönjohtavuus

1D ➔ 3D, Hilatasot ja hilatasoperheet

$$\boxed{k = G_p = p\frac{2\pi}{a}}$$

Atomiväli = aallonpituuden
$\lambda = 2\pi/G_p$ monikerta



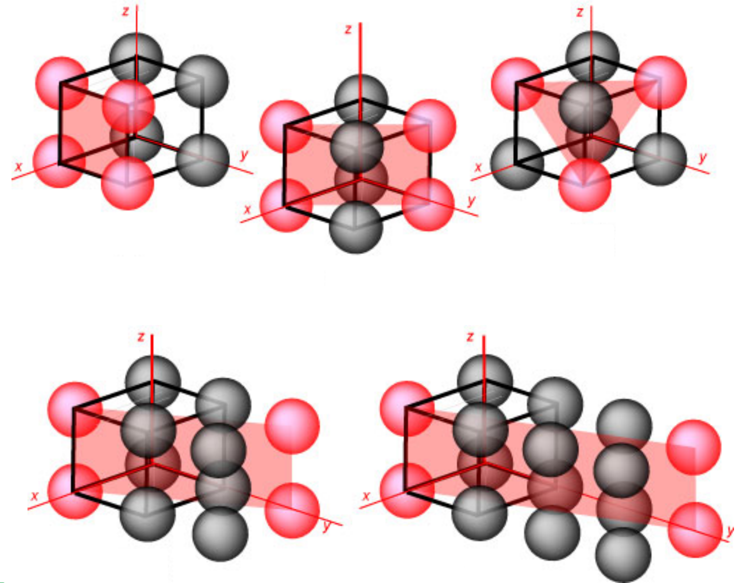
Yleistetään tämä tärkeä tapaus 3D Bravais (kide)hiloihin ja tasoaaltoihin, joilla sama vaihe tietyn hilatasoperheen atomien kohdalla.

➔ 3D hilan käänteishila, joka on Bravais-hila ja matemaattinen käsite

1D ➔ 3D, Hilatasot ja hilatasoperheet

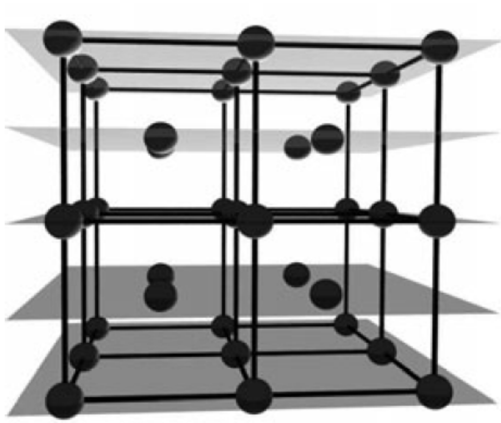
Hilataso

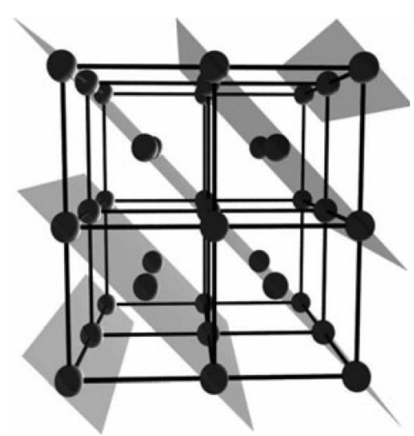
Määritellään kolmen hilapisteen avulla, jotka eivät samalla suoralla. Tasolla ääretön määrä hilapisteitä.

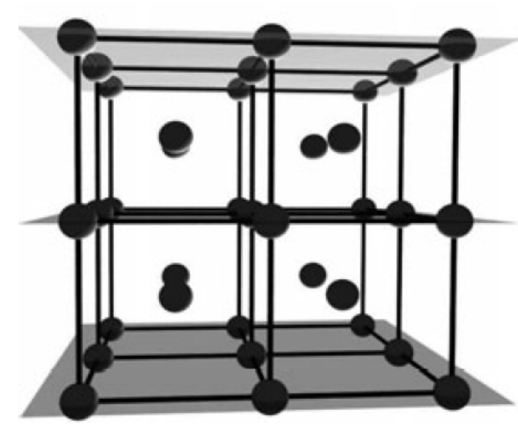


Hilatasoperhe

Tasavälisten ja samansuuntaisten hilatasojen joukko. Sisältää kaikki hilan pisteet.





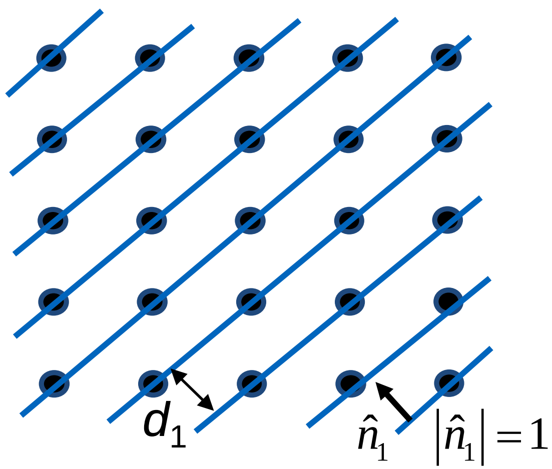


Tämä *ei* ole hilatasoperhe

1D ➔ 3D, Käänteishila

➔ Määritellään hilatasoperhettä vastaavat käänteishilan vektorit

Tasoperhe (kuvassa neliö-hila tai kuutiohilan projektio)



Jäätynyt tasoaalto

$$\boxed{\begin{array}{l} Ae^{-i\vec{k}\bullet\vec{r}} = \text{vakio} \;\Rightarrow \vec{k}\bullet\vec{r} = \text{vakio} \\ \text{Määrittää } \underline{\text{tason } (\vec{r}) \;\perp\; \vec{k}} \end{array}}$$

Vaihe sama koko tasolla

Tasoperheen tason normaalin suuntaan

➔ $\boxed{\vec{k} = k\hat{n}_1}$

Vaaditaan

$$\boxed{\text{Tasoaallon vaihe sama vierekkäisillä tasoilla}}$$

Vrt. 1D –tapaus!

➔ $$\boxed{d_1 = m\lambda = m\frac{2\pi}{k} \quad , \qquad m \in Z}$$

Tasoperhettä 1 vastaavat käänteishilan (KH) vektorit

➔ $$\boxed{\vec{k} = m\frac{2\pi}{d_1}\hat{n}_1 = m\vec{G}_{1,\min}}$$

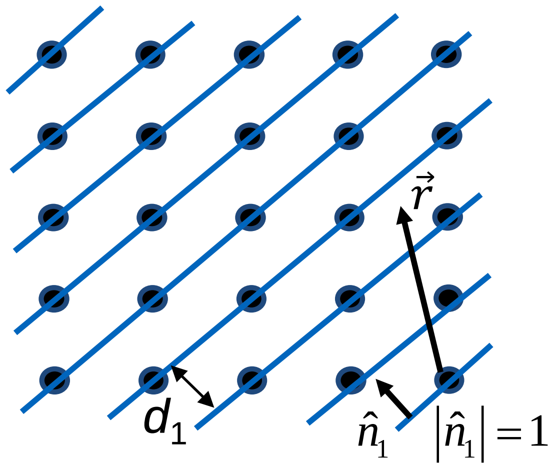
Lyhin tasoperhettä 1 vastaava KH:n vektori

$$\boxed{\vec{G}_{1,\min} = \pm\frac{2\pi}{d_1}\hat{n}_1}$$

1D ➔ 3D, Käänteishila

➔ Lyhin tietyn suuntainen käänteishilan vektori vastaa tiettyä hilatasoperhettä

Tasoperhe (kuvassa neliö-hila tai kuutiohilan projektio)



Lyhin tasoperhettä 1 vastaava KH:n vektori

$$\boxed{\vec{G}_{1,\min} = \frac{2\pi}{d_1}\hat{n}_1}$$

Väitös: tasoperheen yhtälö on

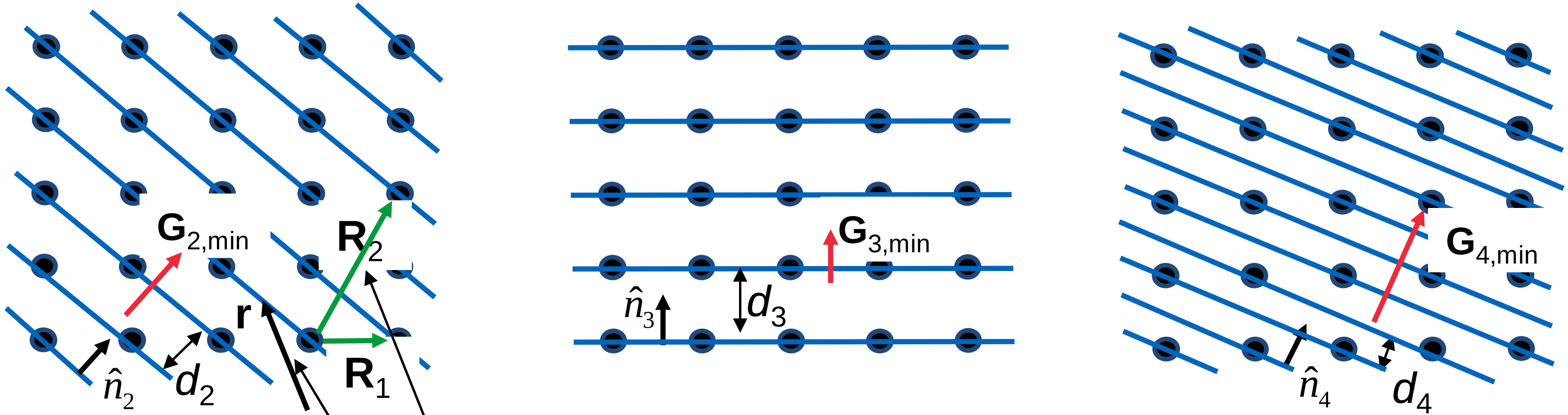
$$\boxed{\vec{G}_{1,\min} \bullet \vec{r} = 2\pi m \quad , \qquad m \in Z}$$ [S(13.7)]

Todistus

$$\begin{aligned}
\vec{G}_{1,\min} \bullet \vec{r} \quad &= 0 && \Rightarrow \quad \text{Origon kautta kulkeva taso} \\
&= \pm 2\pi && \Rightarrow \quad \frac{2\pi}{d_1}\hat{n}_1 \bullet \vec{r} = \pm 2\pi \quad \Rightarrow \quad \hat{n}_1 \bullet \vec{r} = \pm d_1 \quad \Rightarrow \quad \text{Viereiset tasot} \\
&= \pm 4\pi && \Rightarrow \quad \hat{n}_1 \bullet \vec{r} = \pm 2d_1 \quad \Rightarrow \quad \text{Seuraavat viereiset tasot} \\
&= \ldots
\end{aligned}$$

1D ➔ 3D, Käänteishila

➔ KH:n (kompakti) määritelmä



Ääretön määrä eri hilataso-perheitä 1, 2, 3, 4, …

Ääretön määrä KH-vektoreita
$\mathbf{G} = m_1\mathbf{G}_{1,\min},\ m_2\mathbf{G}_{2,\min},\ m_3\mathbf{G}_{3,\min},\ \ldots\ m_i$ € Z

Huom. Vektorit **R** ja **G** eri avaruuksissa: [**R**] = 1m, [**G**] = 1/m! Mutta avaruuksilla on yhteiset suunnat ➔ **R** ja **G** voidaan piirtää samaan kuvaan.

Mikä määrää yo. lyhimpien KH-vektoreiden pituudet?

Jokaisella KH-vektorilla $m_i\mathbf{G}_{i,\min}$ kaikkien tasojen kaikissa pisteissä **r** tasoaallolla exp(i**k**·**r**) on sama vaihe. Piste **r** + **R** on myös perheen *i* jollakin tasolla.

$$e^{i\vec{G}\bullet\vec{r}} = e^{i\vec{G}\bullet(\vec{r}+\vec{R})}$$

Eksponentissa
- ➔ +

KH:n määritelmä

$$e^{i\vec{G}\bullet\vec{R}} = 1$$

Jos tämä pätee kaikille hilavektoreille **R**, **G** on KH-vektori

Käänteishila

KH:n määritelmä

$$\boxed{e^{i\vec{G}\bullet\vec{R}} = 1}$$

Mielivaltaiset KH-vektorit

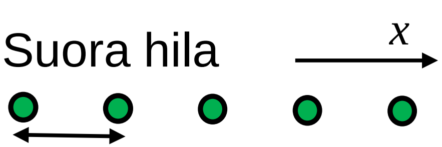
$\boxed{\vec{G}_1 \text{ ja } \vec{G}_2}$ ⇒ $e^{i(\vec{G}_1+\vec{G}_2)\bullet\vec{R}} = e^{i\vec{G}_1\bullet\vec{R}} e^{i\vec{G}_2\bullet\vec{R}} = 1\bullet 1 = 1$ ⇒ Vektori $\vec{G}_1 + \vec{G}_2$ on myös KH:n vektori.

⇒ Tietyn Bravais-hilan KH-vektoreiden joukko on suljettu yhteenlaskun suhteen.

⇒ KH-vektorit virittävät käänteishilan aaltovektoreiden avaruudessa.
KH-hila on Bravais-hila.

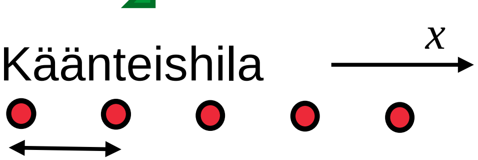
1D

Suora hila



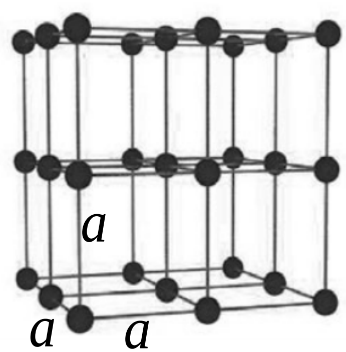
$[a] = 1\ \text{m}$

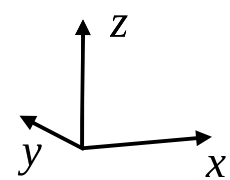
Käänteishila



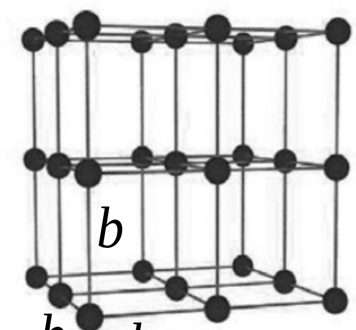
$b = \dfrac{2\pi}{a}$ $\quad [b] = 1/\text{m}$

3D





SC-hila !



$\dfrac{2\pi}{a} = b$

Käänteishilan alkeisvektorit

➔Käytännön tapa määrittää kaikki KH:n vektorit

KH:n vektorit toteuttavat

$$\boxed{e^{i\vec{G}\bullet\vec{R}}=1} \;\Rightarrow\; \boxed{\vec{G}\bullet\vec{R}=j2\pi \quad , \quad j\in Z}$$

Mielivaltainen hilavektori

$$\vec{R}=n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3 \quad , \quad n\in Z$$

Mielivaltainen KH-vektori

$$\vec{G}=m_1\vec{b}_1+m_2\vec{b}_2+m_3\vec{b}_3 \quad , \quad m\in Z$$

Väitös: KH:n alkeisvektorit ovat

$$\vec{b}_1=\frac{2\pi\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} \quad , \quad \vec{b}_2=\frac{2\pi\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} \quad , \quad \vec{b}_3=\frac{2\pi\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}$$

(Syklinen permutointi)

$$\Rightarrow \boxed{\vec{a}_i\cdot\vec{b}_j=2\pi\delta_{ij}}$$

Kohtisuoruus
Skaalaus

Todistus

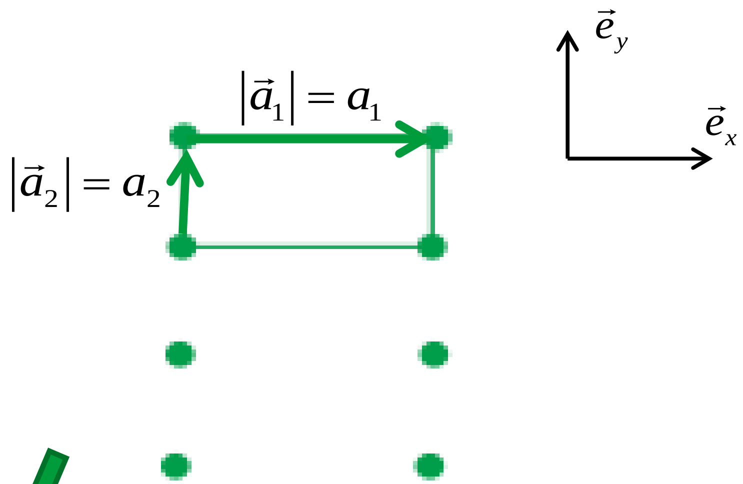
$$\Rightarrow \boxed{\vec{G}\bullet\vec{R}=\left(m_1\vec{b}_1+m_2\vec{b}_2+m_3\vec{b}_3\right)\bullet\left(n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3\right)=2\pi j \quad , \quad j\in Z}$$

Esimerkki: 2D-suorakaidehila

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$$
$$\vec{G} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2$$

Kohtisuoruus,
Skaalaus

$$\vec{a}_\mathrm{i} \cdot \vec{b}_\mathrm{j} = 2\pi\delta_{ij}$$



Sijoitus yo. kaavoihin

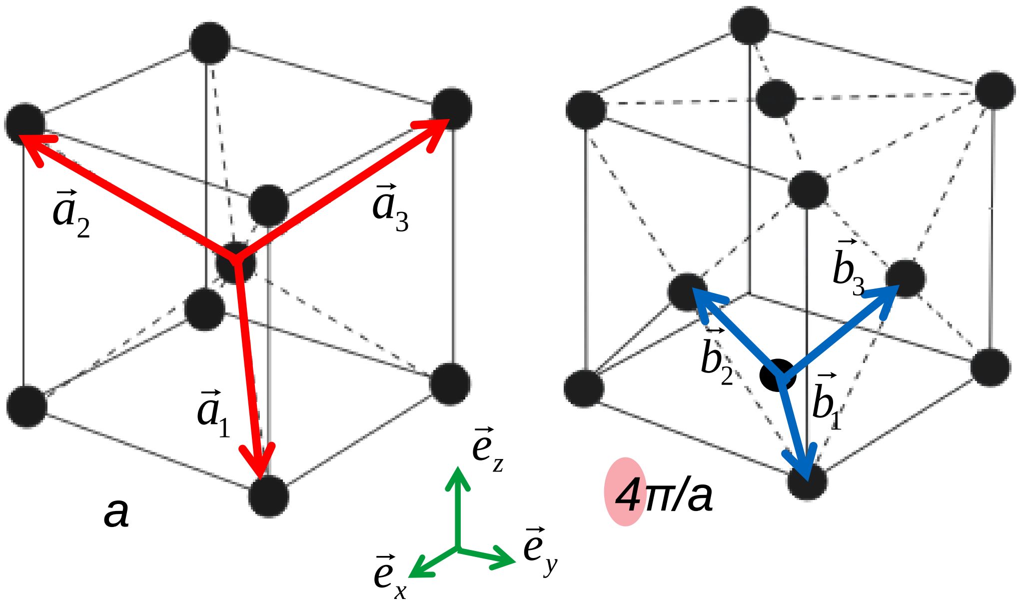
$$\vec{a}_1 = a_1\vec{e}_x \quad , \quad \vec{a}_2 = a_2\vec{e}_y \quad , \quad \vec{a}_3 = 1\vec{e}_z$$

Hilan alkeisvektori ja sen käänteishilan vastaava alkeisvektori yhdensuuntaiset.
Vastaavien alkeisvektoreiden pituudet skaalautuvat: pitkä → lyhyt, lyhyt → pitkä.

Alkeiskopit ovat samanmuotoiset mutta kiertyneet 90$^\mathrm{o}$ toistensa suhteen.

Vrt. kolmiohilan KH = 30$^\mathrm{o}$ kiertynyt kolmiohila (laskarit)

Käänteishilaesimerkki 2



bcc:

$$\vec{a}_1 = a\left(\frac{1}{2}\vec{e}_x + \frac{1}{2}\vec{e}_y - \frac{1}{2}\vec{e}_z\right)$$

$$\vec{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}\vec{e}_x - \frac{1}{2}\vec{e}_y + \frac{1}{2}\vec{e}_z\right)$$

$$\vec{a}_3 = a\left(-\frac{1}{2}\vec{e}_x + \frac{1}{2}\vec{e}_y + \frac{1}{2}\vec{e}_z\right)$$

fcc:

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{a}\left(\frac{1}{2}\vec{e}_x + \frac{1}{2}\vec{e}_y\right) \qquad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a}\left(\frac{1}{2}\vec{e}_x + \frac{1}{2}\vec{e}_z\right) \qquad \vec{b}_3 = \frac{4\pi}{a}\left(\frac{1}{2}\vec{e}_y + \frac{1}{2}\vec{e}_z\right)$$

$\Rightarrow$ BCC:n käänteishila on FCC

Suoralla laskulla myös

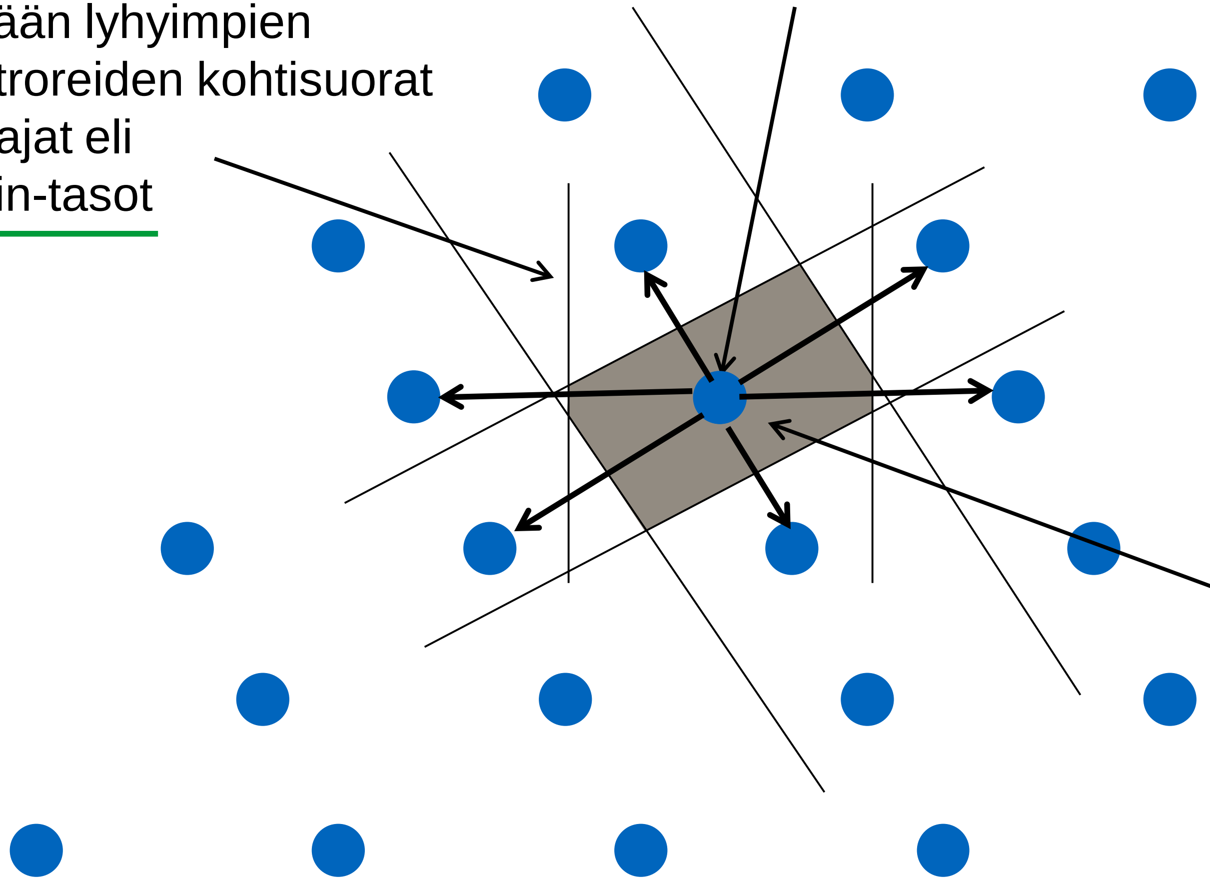
FCC:n käänteishila on BCC, eli käänteishilan käänteishila on suora hila

Brillouin'n vyöhykkeet

2D-hilan 2D-käänteishila

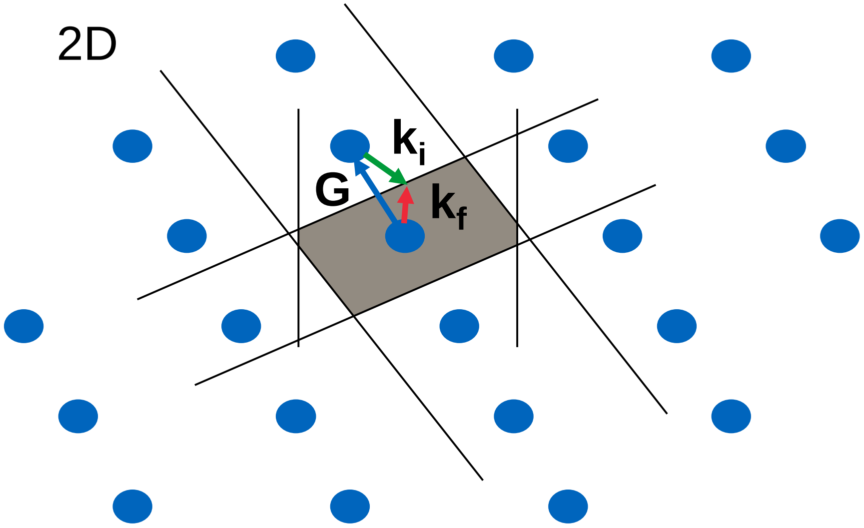
Käänteishilan origo

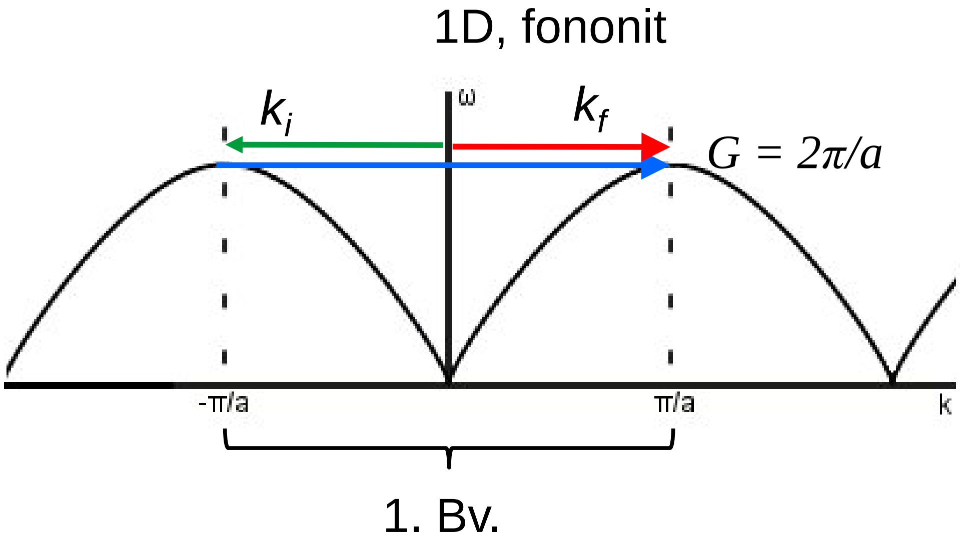
Piirretään lyhyimpien **G**-vektroreiden kohtisuorat puolittajat eli Braggin-tasot



1. Brillouin'n vyöhyke = KH:n Wigner-Seitz -alkeiskoppi

1. Brillouin'n vyöhyke





Merkitys 1D, 2D, 3D:ssa?

– Fononien ja elektronien aaltovektorit **k** voidaan rajoittaa 1. Brillouin'n vyöhykkeeseen. (Tilojen/ominaismoodien aaltovektori **k** = tilan kvanttiluku)

– Sallittujen **k** –pisteiden määrä 1. Bv:ssä = hilapisteiden määrä periodisten reunaehtojen normitustilavuudessa *V*

– Aallot, joiden aaltovektorit ovat vyöhykkeiden reunoilla (Braggin tasot), heijastuvat: $\mathbf{k_f} = \mathbf{k_i} + \mathbf{G}$ (Sironnan Laue –ehto).

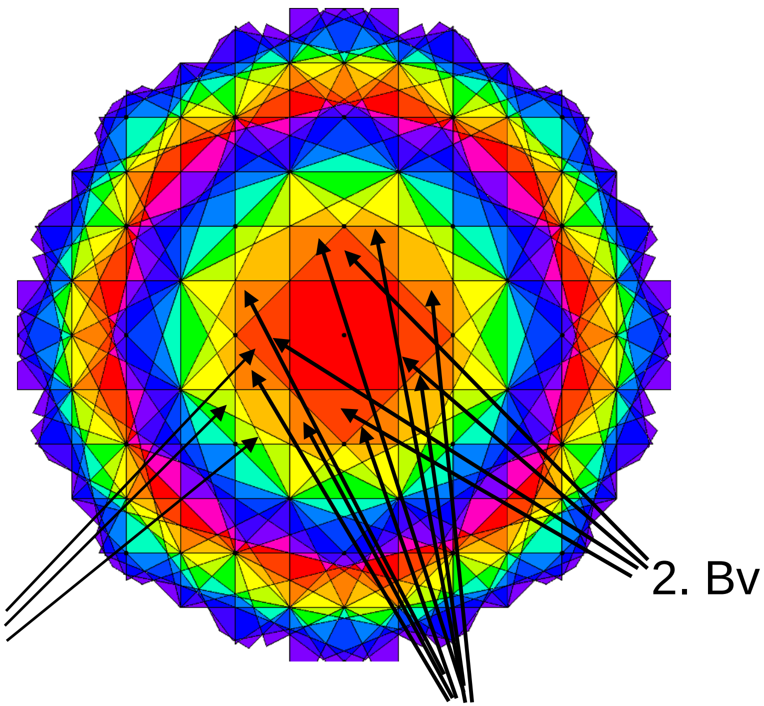
Korkeammat Brillouin'n vyöhykkeet

1. Bv:stä päästään *n*. Bv:een ylittämällä (*n*-1) Braggin tasoa

Jokaisen Bv:n pituus/pinta-ala/tilavuus on sama

Helpottavat (joskus) elektronitilojen havainnollistamista

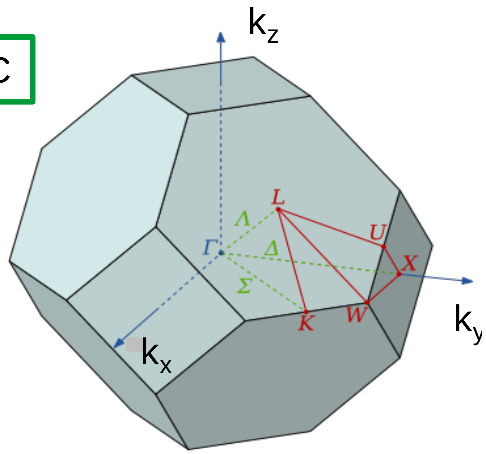
2D neliöhila



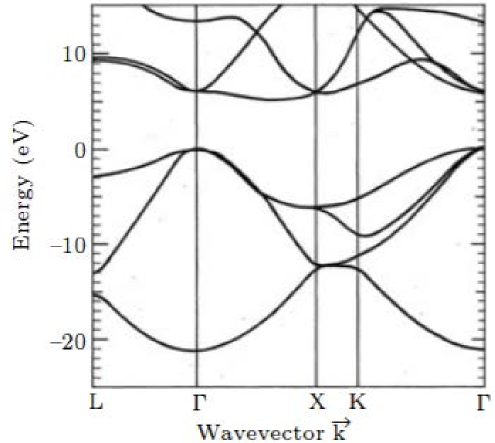
G-vektoreiden kohtisuorat puolittajat

1. Brillouin'n vyöhyke 2 ja 3D:ssa

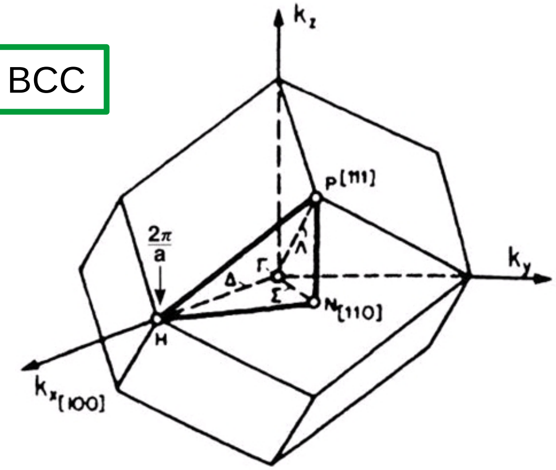
FCC



Timantin elektronivyöt



BCC



(Kuten BCC:n WS-alkeiskoppi)

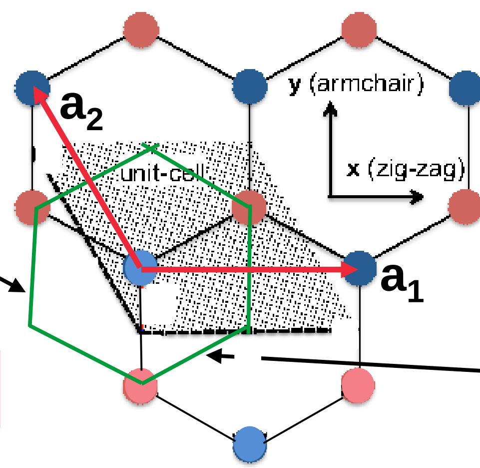
(Kuten FCC:n WS-alkeiskoppi)

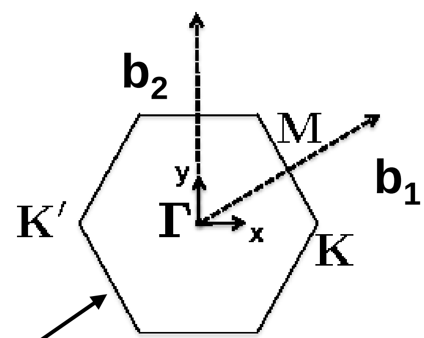
Notaatio: kreikkalaiset kirjaimet: Γ = origo, Λ, Δ, Σ … = suuntia,
latinalaiset kirjaimet: K, L, M, X, … (symmetria) piste Brillouin'n vyöhykkeen reunalla
Merkitys: Käytetään elektronien vyörakenteiden ja fononien dispersiorelaatioiden esittämiseen.

Grafeeni

WS-alkeiskoppi

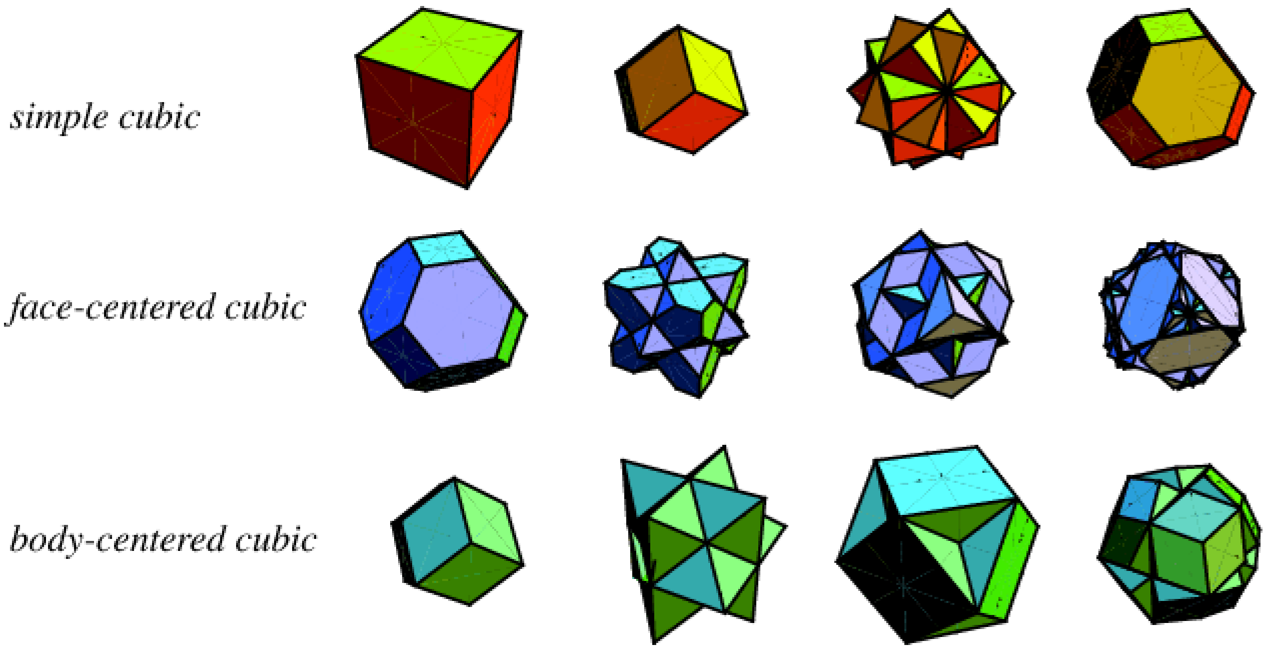
Lasku-harjoitus





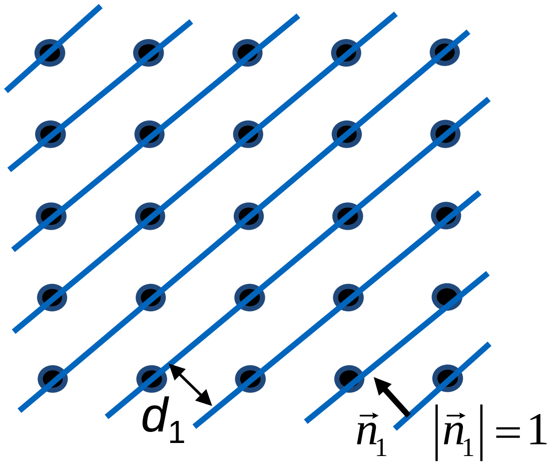
Huom. Kuusikulmio kiertyy 30°

3D Brillouinin vyöhykkeitä



Hilatasojen nimeäminen: Millerin indeksit

Tasoperhe



Lyhin tasoperhettä vastaava KH:n vektori

$$\boxed{\vec{G}_{1,m} = \pm \frac{2\pi}{d_1} \vec{n}_1}$$

KH:n alkeisvektoreiden avulla

$$\boxed{\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad , \quad h,k,l \in Z}$$

h,*k*,*l*: ei yhteisiä tekijöitä

Tasojen Millerin indeksit

$$\boxed{(hkl)}$$

Riippuvat alkeis-vektoreiden valinnasta. Tason merkintä.

Aalto University
School of Science

Millerin indeksit: kuutiolliset hilat

SC

$$\vec a_1 = a\vec e_x \qquad \vec b_1 = \frac{2\pi}{a}\vec e_x$$

$$\vec a_2 = a\vec e_y \qquad \vec b_2 = \frac{2\pi}{a}\vec e_y$$

$$\vec a_3 = a\vec e_z \qquad \vec b_3 = \frac{2\pi}{a}\vec e_z$$

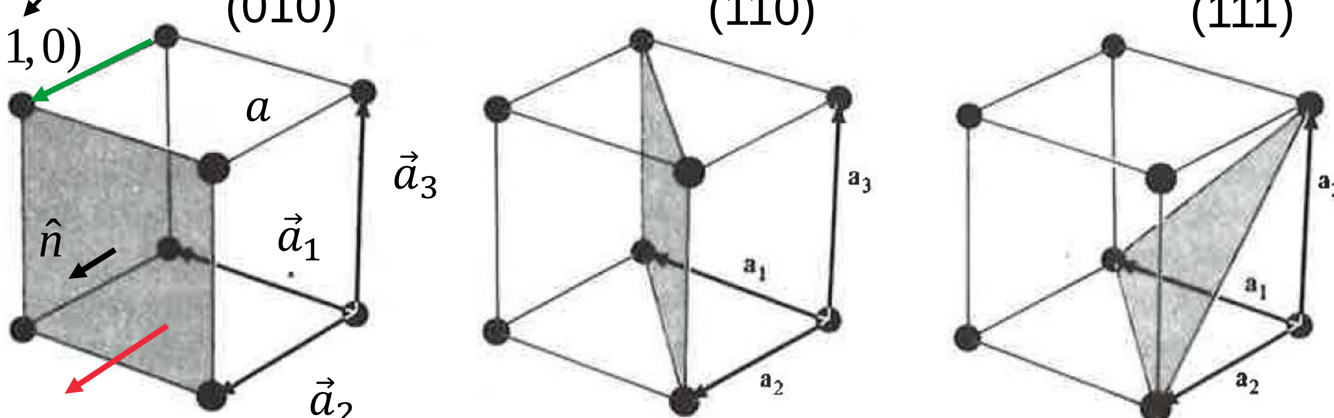
FCC ja BCC = SC + Kanta

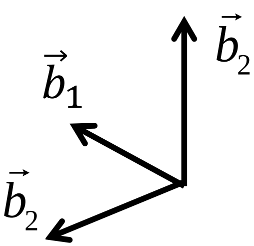
$$\vec G = h\vec b_1 + k\vec b_2 + l\vec b_3 \quad , \quad h,k,l \in Z$$

$\boxed{(hkl)}$ Millerin indeksit

(hkl) = tason yksikkönormaalin koordinaattiesitys

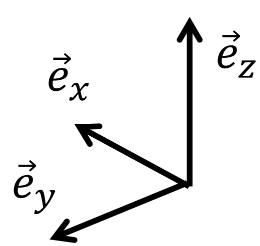
$$a\vec e_y = a\hat n = a(0,1,0)$$





$$\vec G = \frac{2\pi}{a}\vec e_y = \vec b_2$$

$$\Rightarrow (010) \text{ -taso}$$



(h,k,l) –tasojen välimatka

$$d^{cubic} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

[S13.12]

Millerin indeksit: Ortorombinen hila

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad , \quad h,k,l \in Z$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi/a_1\vec{e}_x \ , \quad \vec{b}_2 = 2\pi/a_2\vec{e}_y \ , \quad \vec{b}_3 = 2\pi/a_3\vec{e}_z$$

Tiettyä tasoa vastaava KH-vektori.
Mitkä ovat indeksit *h, k* ja *l* ?

Hilataso $\in$ jatkuva taso

s.e. $\vec{G}\bullet\vec{r} = A$

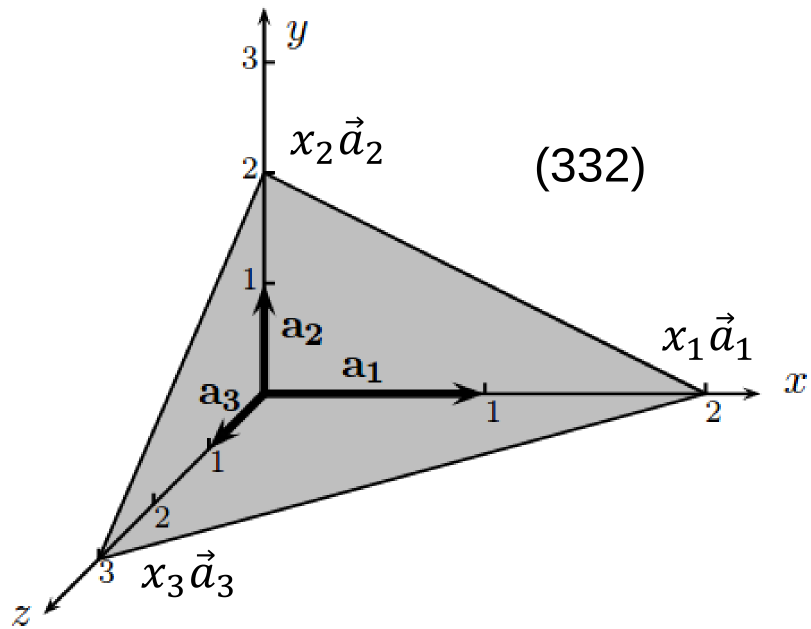
Hilataso leikkaa alkeisvektorien suuntaiset suorat pisteissä $x_1\vec{a}_1,\ x_2\vec{a}_2,\ x_3\vec{a}_3$

$$\Rightarrow \quad \vec{G}\bullet\left(x_i\vec{a}_i\right) = A$$

$$\vec{G}\bullet\vec{a}_1 = 2\pi h$$
$$\vec{G}\bullet\vec{a}_2 = 2\pi k$$
$$\vec{G}\bullet\vec{a}_3 = 2\pi l$$

$$\Rightarrow \quad x_1 = \frac{A}{2\pi h} \qquad x_2 = \frac{A}{2\pi k} \qquad x_3 = \frac{A}{2\pi l}$$

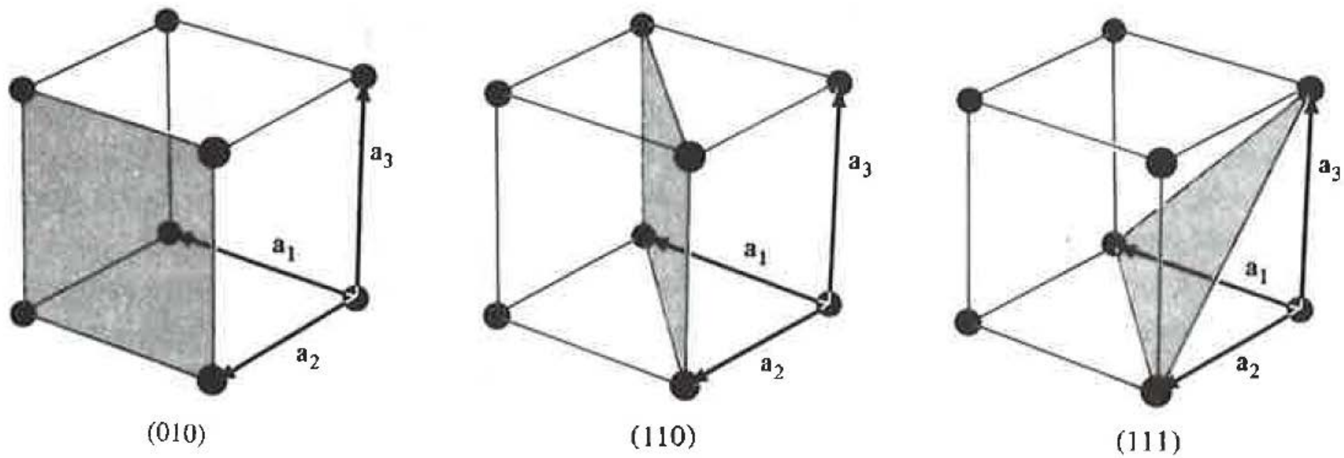
$$\Rightarrow \quad h : k : l = \frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3}$$



Määritettäessä näin Millerin indeksit vaaditaan:

$h,\ k,\ l,\ \in Z,$ eikä niillä ole yhteisiä tekijöitä

Hilatasojen ja –suuntien merkinnät



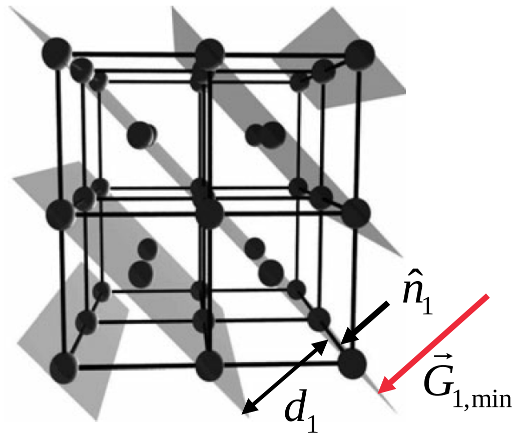
= -1

Tietty hilataso	Ekvivalentit hilatasot	Esim.
$\boxed{(hkl)}$	$\boxed{\{hkl\}}$	$\boxed{(100), (010), (001), (\bar{1}00) \ldots \in \{100\}}$

Tietty hilasuunta	Ekvivalentit hilasuunnat	Esim.
$\boxed{[hkl]}$	$\boxed{< hkl >}$	$\boxed{[100], [010], [001]\ [\bar{1}00] \ldots \in < 100 >}$

Mitä opimme käänteishiloista?

Hilatasot ja hilatasoperheet



KH:n vektorit

$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1$$

Alkeisvektorit

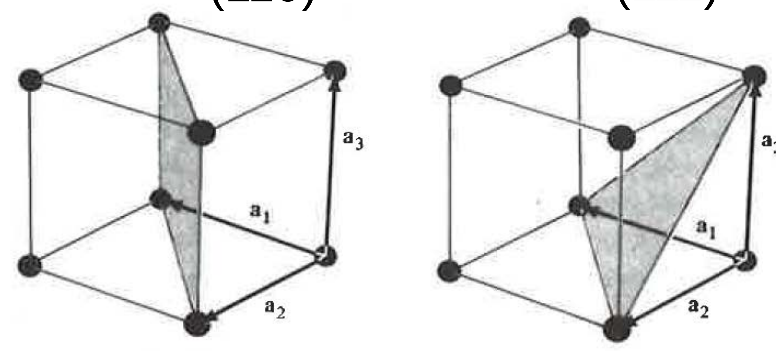
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \ldots$$

Lyhin tasoperhettä vastaava KH:n vektori

$$\vec{G}_{1,\min} = \pm \frac{2\pi}{d_1} \hat{n}_1$$

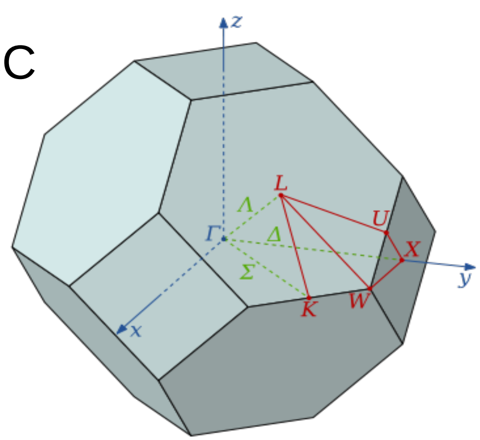
Millerin indeksit

(110) (111)

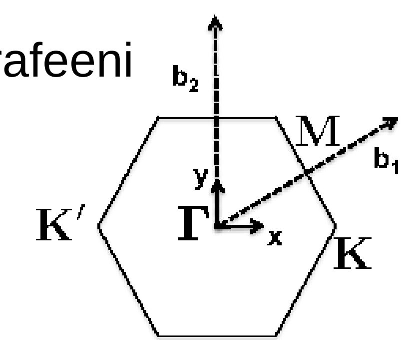


1. Brillouin'n vyöhyke

FCC



Grafeeni



Sirontateoria

Elektronitilat periodisessa kiteessä

Pohdintatehtävä, värähtelyn $\mathbf{k = G_p}$ -moodi

Malli(M), Todellisuus (T), Sovellukset (S)

Energia: millaista, kuinka suuri? (M,T) ks. Simon, sivuhuomautukset 6 s. 142 ja 13 s. 85

Fononi-fononi sironta: Mitä siroaa? (T) Liikemäärän ja energian säilyminen? (T,S)

Lämmönjohtavuus: Mikä kuljettaa lämpöä? Mikä rajoittaa lämmönjohtavuutta? (T,S)