VẬT LÝ CHẤT RẮN

TS. Ngô Văn Thanh
Viện Vật Lý

Hà Nội - 2016

Tài liệu tham khảo

[1] Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th Eds. (John Wiley & Sons, 2005)

[2] Đào Trần Cao, Cơ sở vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG Hà Nội, 2007).

[3] Charles Kittel, Mở đầu vật lý chất rắn, (Đặng Mộng Lân và Trần Hữu Phát dịch), (NXB KHKT Hà Nội, 1984).

[4] Nguyễn Ngọc Long, Vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG Hà Nội, 2007).

[5] Lê Khắc Bình, Nguyễn Nhật Khanh, Vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG TP. HCM, 2002)

Website : http://iop.vast.ac.vn/~nvthanh/cours/vatlychatran/

Email : nvthanh@iop.vast.ac.vn

CHƯƠNG 2. SÓNG PHẢN XẠ VÀ MẠNG ĐẢO

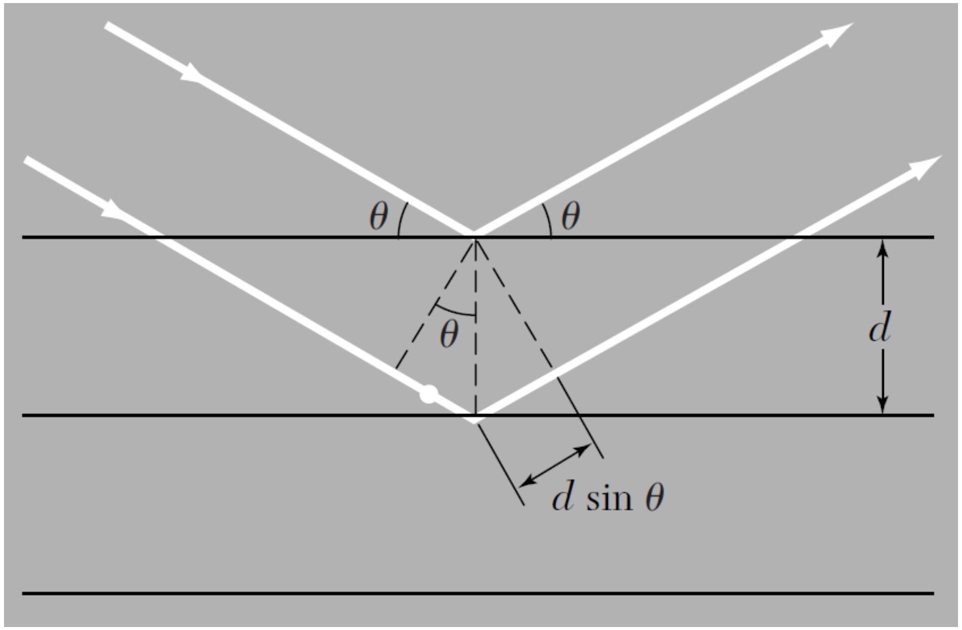
1. Nhiễu xạ của sóng bởi tinh thể
2. Biên độ sóng tán xạ
3. Vùng Brillouin
4. Biểu diễn Fourier của các cơ sở

1. Nhiễu xạ của sóng bởi tinh thể

❖ Diffraction of waves by crystals

➢ *Định luật Bragg*

- Giả thiết sóng tới bị phản xạ từ các mặt phẳng song song của các nguyên tử trong tinh thể
- Tương tự như phản xạ gương: => góc tới = góc phản xạ

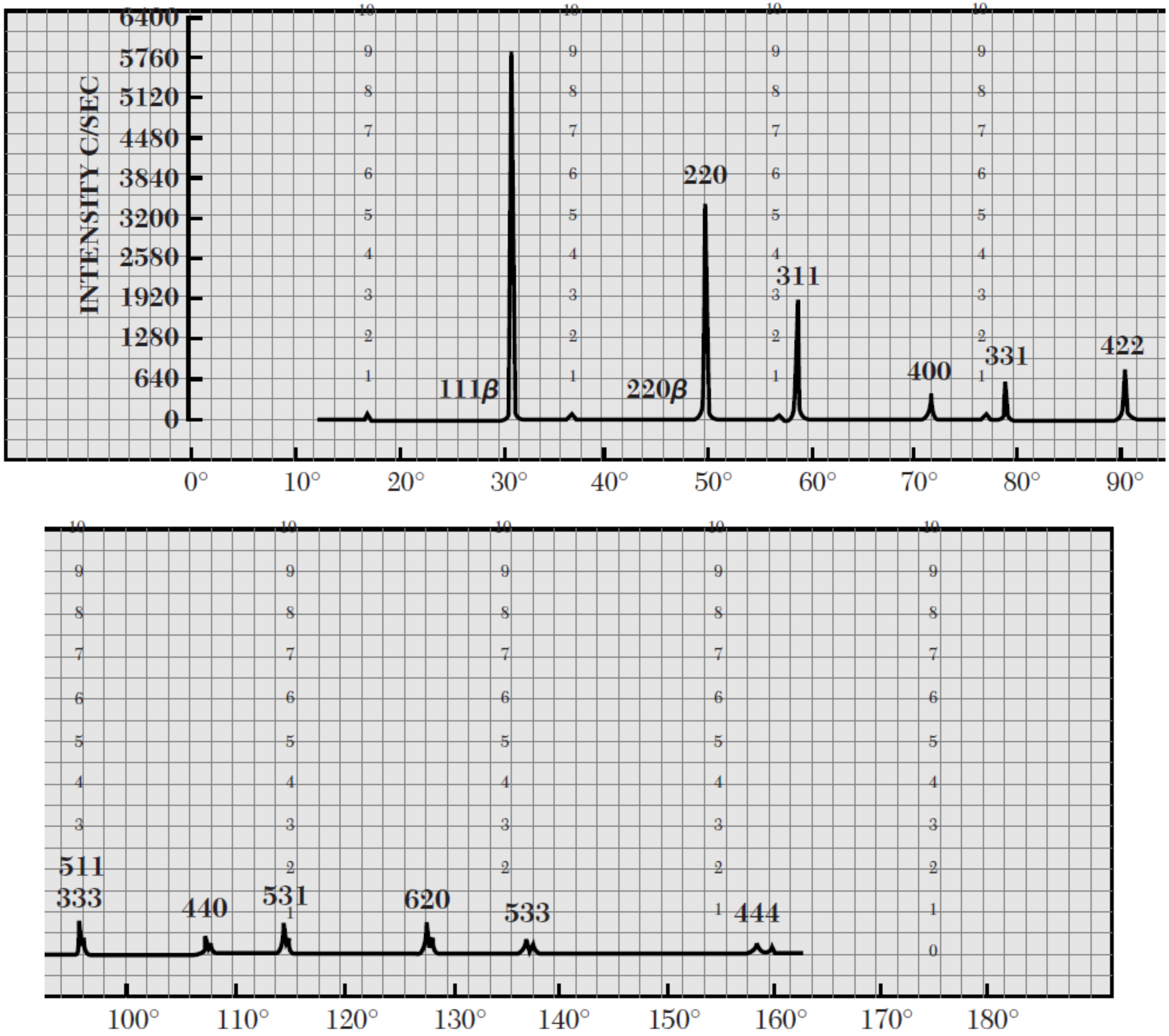


- Chùm nhiễu xạ có thể tìm thấy khi các tia phản xạ từ các mặt phẳng nguyên tử giao thoa tăng cường với nhau
- Xem như là sự tán xạ đàn hồi, năng lượng của tia X không thay đổi khi phản xạ
- Định luật Bragg : điều kiện giao thoa tăng cường:

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

  • Điều kiện này được thỏa mãn khi $\lambda < 2d$
- <u>*Định luật Bragg là hệ quả của tính tuần hoàn mạng tinh thể*</u>

1. Nhiễu xạ của sóng bởi tinh thể



2. Biên độ sóng tán xạ

❖ Giải tích Fouries

- Phép biến đổi tịnh tiến :

$$\vec{T} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$

- Tính chất vật lý : nồng độ hạt tải; mật độ điện tử; mật độ moment từ
  - Bất biến đối với phép biến đổi tịnh tiến
- Mật độ điện tử là một hàm tuần hoàn theo tọa độ

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$$

- Xét trường hợp 1 chiều, khai triển theo chuỗi Fourier

$$n(x) = n_0 \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a)]$$

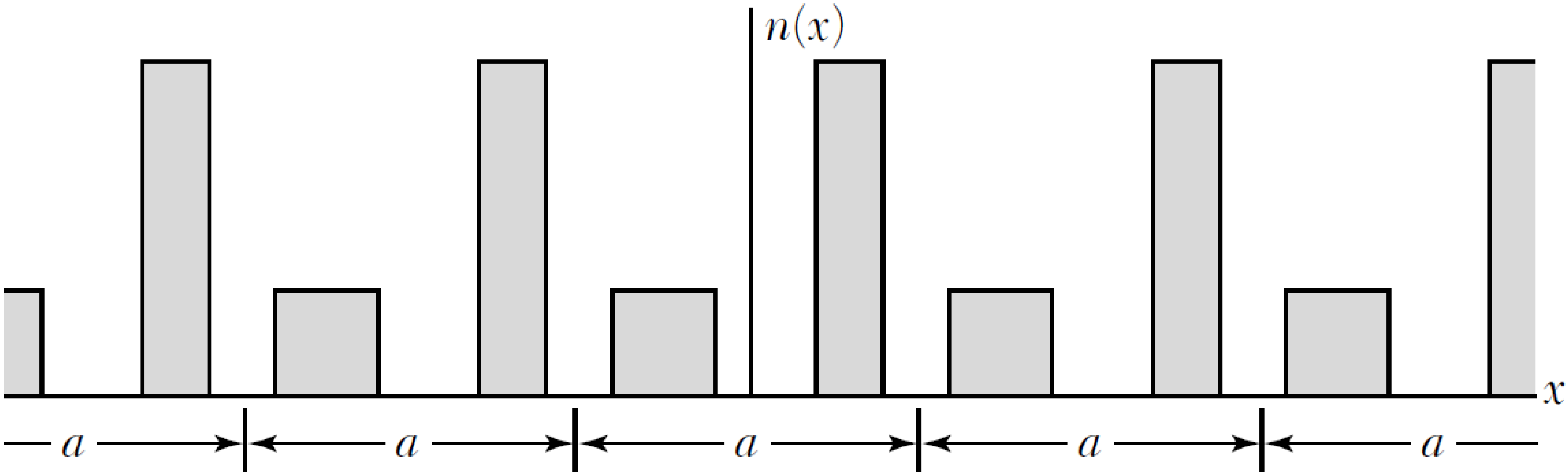
  - p : số nguyên dương
  - C_p, S_p : hằng số thực
  - Đối số góc $2\pi/a$ đảm bảo hàm $n(x)$ là hàm tuần hoàn với chu kỳ a.

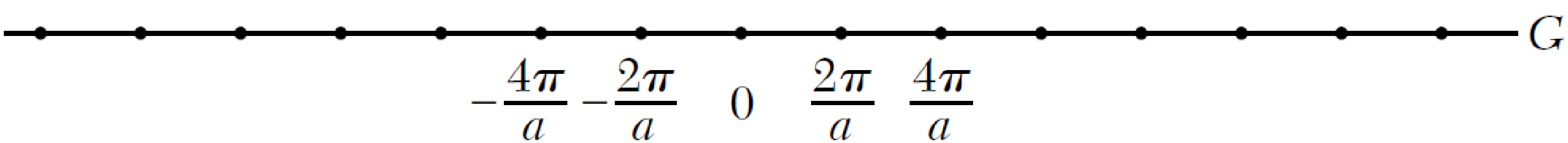
$$n(x+a) = n_0 \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi px/a + 2\pi p) + S_p \sin(2\pi px/a + 2\pi p)]$$

$$= n_0 \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a)] \equiv n(x)$$

2. Biên độ sóng tán xạ

- *Mạng đảo*
  - $p2\pi/a$: là nút của mạng đảo hoặc điểm trong không gian Fourier
    - Là các số hạng khả dĩ trong chuỗi Fourier tương ứng với tính tuần hoàn mạng.





2. Biên độ sóng tán xạ

➢ *Biểu diễn phức*

$$n(x) = \sum_p n_p \exp\left(i\frac{2\pi p x}{a}\right)$$

- p : số tự nhiên (âm, zero, dương)
- n_p : là số phức để đảm bảo $n(x)$ là số thực
- Điều kiện : $n^*_{-p} = n_p$
- Xét tổng với $\varphi = 2\pi p x / a$

$$n_p(\cos\varphi + i\sin\varphi) + n_{-p}(\cos\varphi - i\sin\varphi) = (n_p + n_{-p})\cos\varphi + i(n_p - n_{-p})\sin\varphi$$

- Sử dụng điều kiện trên, ta có

$$(n_p + n_{-p})\cos\varphi = (n_p + n_p^*)\cos\varphi = 2\Re[n_p]\cos\varphi$$

$$(n_p - n_{-p})\sin\varphi = (n_p - n_p^*)\sin\varphi = i2\Im[n_p]\sin\varphi$$

$$\Rightarrow \quad n_p(\cos\varphi + i\sin\varphi) + n_{-p}(\cos\varphi - i\sin\varphi) = 2\Re[n_p]\cos\varphi - 2\Im[n_p]\sin\varphi$$

➢ *Trường hợp tổng quát (3D)*

- Tìm một vector $\vec{G}$ bất biến đối vơi phép biến đổi tịnh tiến $\vec{T}$, thỏa mãn

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp\left(i\vec{G}\cdot\vec{r}\right)$$

Biên độ tán xạ tia X

2. Biên độ sóng tán xạ

- *Biến đổi ngược chuỗi Fourier (Inversion of Fourier Series)*
  - Biểu thức xác định hệ số Fourier

$$n_p = \frac{1}{a}\int_0^a dx\; n(x)\exp\left(-i\frac{2\pi p x}{a}\right)$$

  - Thay biểu thức mật độ điện tử vào, ta có

$$n_p = \frac{1}{a}\sum_{p'} n_{p'}\int_0^a dx\;\; \exp\left[i\frac{2\pi(p'-p)x}{a}\right]$$

  - Nếu $p \neq p'$, giá trị của tích phân

$$\frac{a}{i2\pi(p'-p)}\left(e^{i2\pi(p'-p)}-1\right) = 0 \qquad \Leftarrow e^{i2\pi m} = 1;\;\; m = \text{integer}$$

  - Nếu $p = p'$, ta có :

$$n_p = \frac{1}{a}\sum_{p'} a = \frac{1}{a} n_p a = n_p$$

  - Trường hợp 3 chiều

$$n_{\vec{G}} = \frac{1}{V_c}\int_{\text{cell}} dV\;\; n(\vec{r})\exp\left(-i\vec{G}\cdot\vec{r}\right)$$

    - V_c : thể tích của ô tinh thể

2. Biên độ sóng tán xạ

❖ Các vector mạng đảo (Reciprocal Lattice Vectors)

➢ *Ký hiệu các vector trục :* $\vec{b}_1,\ \vec{b}_2,\ \vec{b}_3$

$$\vec{b}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot\vec{a}_2\times\vec{a}_3} \qquad \vec{b}_2 = 2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot\vec{a}_2\times\vec{a}_3} \qquad \vec{b}_3 = 2\pi\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\vec{a}_1\cdot\vec{a}_2\times\vec{a}_3}$$

- Nếu $\vec{a}_i$ là các vector tối giản của mạng thuận thì $\vec{b}_i$ cũng là vector tối giản của mạng đảo
- Tính chất trực giao : $\vec{b}_i\cdot\vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$
- Các nút mạng đảo được xác định qua bộ các vector :

$$\vec{G} = v_1\vec{b}_1 + v_2\vec{b}_2 + v_3\vec{b}_3$$

- $\vec{G}$: được gọi là vector mạng đảo
- Xét biến đổi tịnh tiến

$$\vec{T} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$

- đối với mật độ điện tử

$$n(\vec{r}+\vec{T}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}}\exp\left(i\vec{G}\cdot\vec{r}\right)\exp\left(i\vec{G}\cdot\vec{T}\right)$$