Temat 1. Ciało stałe. Sieć krystaliczna doskonała. Symetrie kryształów.

Zadanie 1.1
Wykazać, że część objetości wypełniona przez nieściśliwe kule tworzące różne sieci wynosi

a). regularna prosta: $\frac{\pi}{6} \approx 0{,}52$,

b) BCC: $\frac{\pi}{8}\sqrt{3} \approx 0{,}68$,

c) FCC: $\frac{\pi}{6}\sqrt{2} \approx 0{,}74$,

d) HCP: $\frac{\pi}{6}\sqrt{2} \approx 0{,}74$,

e) sieć diamentu: $\frac{\pi}{16}\sqrt{3} \approx 0{,}34$.

Zadanie 1.2
Wyznaczyć kąty między wektorami prymitywnymi sieci Bravais'ego oraz objętość komórki zbudowanej na tych wektorach
a) dla monoatomowej sieci FCC,
b) dla monoatmowej sieci BCC.

Zadanie 1.3
Znaleźć postać symetrycznego rzeczywistego tensora przenikalności elektrycznej $[\boldsymbol{\varepsilon}_\mathbf{r}]$ (tensor 2 rangi) kryształu o danej symetrii w układzie jego osi krystalograficznych.
a) symetria 2, zakładając, że oś 2 jest równoległa do osi krystalograficznej *Z*.
b) symetria $\bar{1}$,
c) symetria *m*, zakładając, że $m \perp Z$,
d) symetria 4, zakładając, że 4 || Z,
e) symetria $\bar{4}$, zakładając, że 4 || *Z*,
f) symetria *mmm*.

Zadanie 1.4
W nieabsorbujących ośrodkach aktywnych optycznie tensor przenikalności elektrycznej [**K**] jest zespolony, przy czym jego część rzeczywista $[\boldsymbol{\varepsilon}_\mathbf{r}]$ jest symetryczna, natomiast część urojona [**G**] jest antysymetryczna

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0\{[\boldsymbol{\varepsilon}_\mathbf{r}]\mathbf{E} + \mathrm{i}\,\mathbf{G} \times \mathbf{E}\} = \varepsilon_0\{[\boldsymbol{\varepsilon}_\mathbf{r}] + \mathrm{i}\,[\mathbf{G}]\}\mathbf{E} = \varepsilon_0[\mathbf{K}]\mathbf{E},$$

gdzie tensor [**G**] można zawsze wyrazić poprzez składowe wektora skręcenia $\mathbf{G} = (G_1, G_2, G_3)$

$$[\mathbf{G}] = \begin{bmatrix} 0 & -G_3 & G_2 \\ G_3 & 0 & -G_1 \\ -G_2 & G_1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Znaleźć postać antysymetrycznego tensora [**G**] dla przypadków symetrii ośrodka wymienionych w zadaniu 1.3.

Zadanie 1.5

Tensor przewodnictwa elektrycznego [σ] opisuje związek wektora gęstości prądu **j** z wektorem natężeniem pola elektrycznego **E**

$$\mathbf{j} = [\sigma]\mathbf{E}.$$

Znaleźć postać tensora przewodnictwa elektrycznego [σ] dla przypadków symetrii ośrodka wymienionych w zadaniu 1.3 nie zakładając przy tym żadnej symetrii tensora niezależnej od ośrodka.

Zadanie 1.6

Wykazać, że względna nieprzenikalność elektryczna **B** (ang. *impermeability tensor*) zdefiniowana jako odwrotność tensora względnej przenikalności $\boldsymbol{\varepsilon}$, tzn.

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\varepsilon}^{-1} \quad \text{albo inaczej} \quad \mathbf{B}\,\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{1} \text{ (macierz jednostkowa 3 x 3)},$$

lub w zapisie odnoszącym się do składowych tensorów

$$B_{ik}\,\varepsilon_{kj} = \delta_{ij}\ ,$$

jest także tensorem i dla danego ośrodka wykazuje taką samą symetrię jak tensor $\boldsymbol{\varepsilon}$.

Zadanie 1.7

Niech **a** będzie macierzą przekształcenia izometrycznego, tzn. przekształcenia zachowującego odległości:

$$\text{dla każdego wektora wodzącego } \mathbf{r}: \quad |\mathbf{r}| = |\mathbf{a}\,\mathbf{r}|.$$

Wykazać, że macierz transformacji odwrotnej $\mathbf{a}^{-1}$ jest tożsama z macierzą transponowaną $\mathbf{a}^{T}$.

Zadanie 1.8

Wykazać, że we wszystkich punktowych grupach symetrii posiadających środek symetrii (np. grupa *mmm*) efekt Pockelsa, czyli liniowy efekt elektro-optyczny nie może istnieć. Jako tensor efektu elektro-optycznego przyjąć tensor $r_{ijk} = r_{jik}$, którego składowe pojawiają się w wyrazie liniowym rozwinięcia składowych tensora nieprzenikalności elektrycznej B_{ij} dla częstotliwości optycznych w szereg potęgowy względem natężenia przyłożonego pola elektrycznego niskiej częstotliwości o składowych E_i

$$B_{ij} = B_{ij}^0 + r_{ijk}E_k + g_{ijkl}E_k E_l + \ldots .$$

Zadanie 1.9

a). Wykazać, że we wszystkich punktowych grupach symetrii posiadających środek symetrii aktywność optyczna nie jest możliwa w żadnym kierunku propagacji światła.

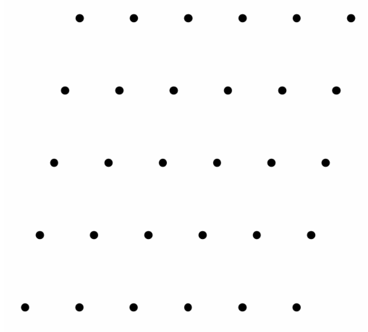
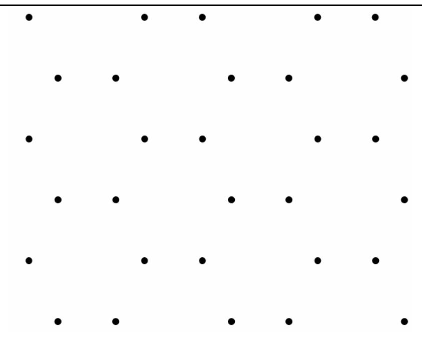
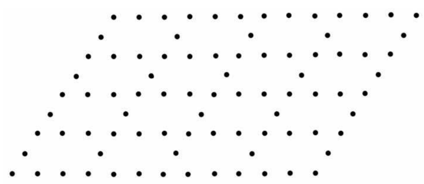
b). Czy obecność osi inwersyjnej $\bar{4}$, przy braku środka symetrii $\bar{1}$, również gwarantuje całkowity brak aktywności optycznej?

Wskazówka: aktywność optyczna jest opisana symetrycznym **pseudotensorem** 2-ej rangi [**g**], który jest specyficzny dla danego ośrodka. Znając tensor [**g**] można znaleźć wektor skręcenia **G** (wprowadzony w zad. 1.4), który zależy od kierunku propagacji światła danego wektorem jednostkowym **s**

$$\mathbf{G} = [\mathbf{g}]\mathbf{s}.$$

Zadanie 1.10

Dla pokazanych poniżej dwuwymiarowych struktur narysować: wektory translacji generujące sieć Bravais'go, komórkę elementarną, komórkę prostą rozpiętą na wektorach bazowych (o najmniejszej objętości) oraz bazę. Czy te elementy są wybieralne jednoznacznie?

		
a)	b)	c)

Zadanie 1.11

Wektor (2,3) wybrano za jeden z wektorów bazowych płaskiej sieci regularnej. Jak wybrać drugi wektor bazowy sieci?

Wskazówka: niezależnie od wyboru wektorów bazowych, powierzchni jednej komórki prostej o najmniejszej objętości i rozpiętej na tych wektorach odpowiada zawsze jeden węzeł sieci. Powierzchnia każdej poprawnie zbudowanej komórki prostej musi więc być niezależna od wyboru wektorów bazowych sieci.

Zadanie 1.12

Wśród płaszczyzn sieciowych o wskaźnikach Millera (110), $(\bar{1}10)$, $(1\bar{1}0)$ i $(\bar{1}\bar{1}0)$ wskaż płaszczyzny należące do jednej rodziny płaszczyzn sieciowych.

Zadanie 1.13

Rozpatrz następujący wzór jako płaską sieć krystaliczną.

... ...
... q p d b q p d b ...
... d b q p d b q p ...
... q p d b q p d b ...
... d b q p d b q p ...
... ...

Zaznacz: a) komórkę elementarną, b) bazę. Rozważ jakie elementy symetrii posiada dana sieć.

Zadanie 1.14

Dla sieci regularnej udowodnij, że kierunek [*hkl*] jest prostopadły do płaszczyzny o tych samych wskaźnikach (*hkl*).

Zadanie 1.15

Wektory bazowe $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ komórki umownej pewnej sieci tetragonalnej mają długości odpowiednio 3Å, 3Å, 7Å. Znajdź kąty między płaszczyznami sieciowymi o wskaźnikach

a). (110) i $(\bar{1}10)$,

b). (011) i $(0\bar{1}1)$.