

SCPY 371

Solid State Physics

Structure ในระบบที่เราเรียกว่า Solid state.

↳ pattern ที่เห็นแบบ periodic

มีคาบ ↑ มีแบบที่ซ้ำ ๆ กัน.

pattern ใน microscopic scale ← โดยวิธี x-ray } diffraction
↳ ปรากฏใน macroscopic ได้ } electron }
neutron }

คุณสมบัติ ของการมี pattern มี periodic structure.

=> เราสามารถอธิบายปรากฏการณ์เชิงฟิสิกส์ ของสาร ทั้งก้อน โดยให้ ข้อมูล น้อยลง

Periodic Structure : โครง skeleton

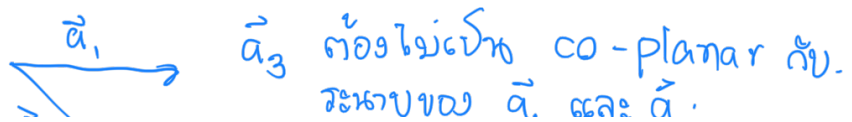
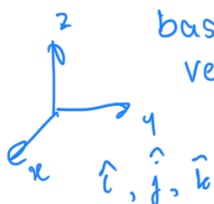
↳ mathematical object.

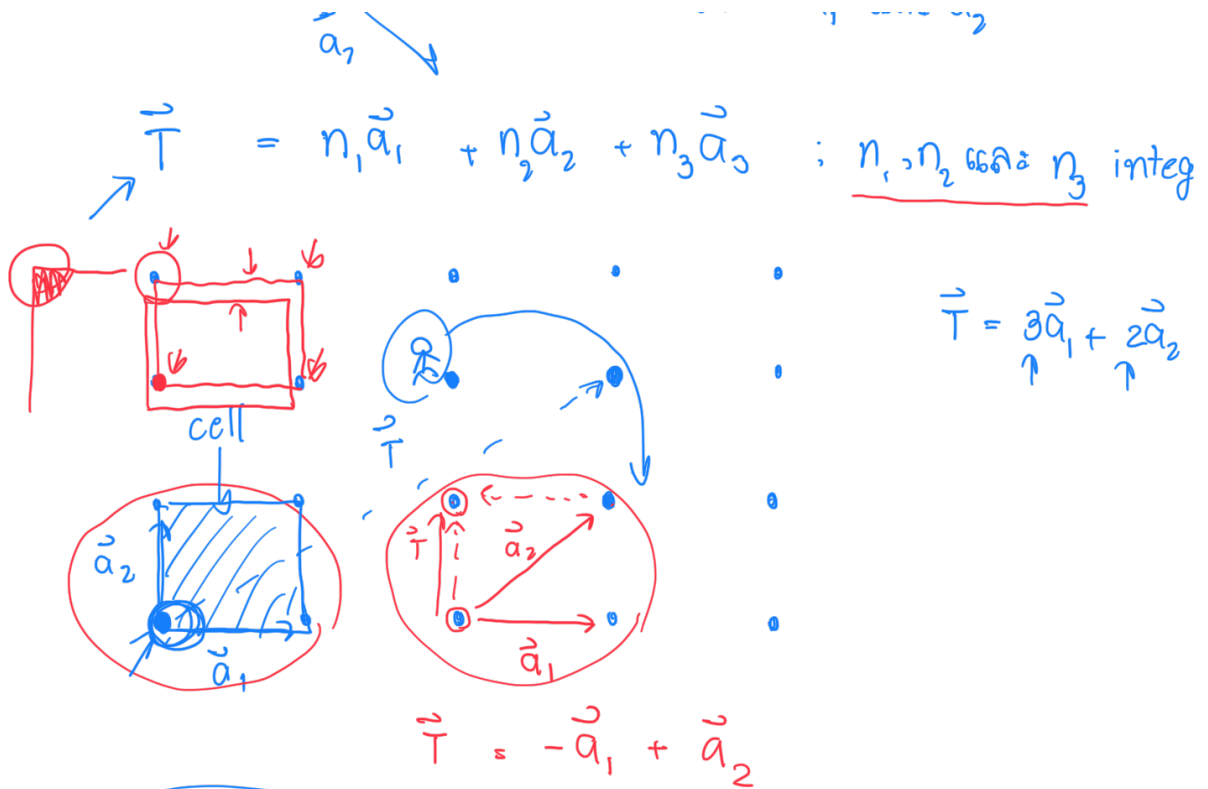
Bravais lattice

set ของจุด (discrete point) เพื่อคณิตศาสตร์ ทางคณิตศาสตร์ เราจะนิยามการเรียงตัวของ discrete point โดยให้ vectors,

2D 2 vectors } สี่ตัว ↓
3D 3 vectors } lattice translation vector.

3D : $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ไม่จำเป็นต้องตั้งฉากกัน
basis vector. ต้องไม่เชิง co-linear not orthogonal.

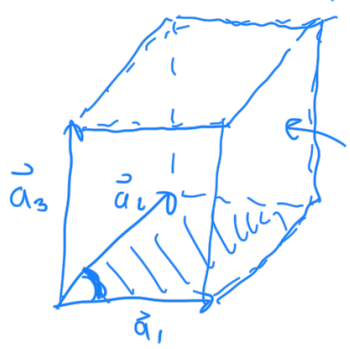




$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ มีผลสร้าง cell. ใน 3D.
 ถ้า cell มีเพียง 1 lattice point อยู่ภายใน.

primitive translation vectors.
 cell ที่เล็กที่สุด \rightarrow primitive unit cell.

ปริมาตรของ primitive unit cell หาได้จาก



$$V_c = |\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)|$$

$$= |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$$

ถ้าใน n เซลล์ความหนาแน่นของ lattice point
 \rightarrow จำนวนของ lattice ต่อ 1 หน่วยปริมาตร.

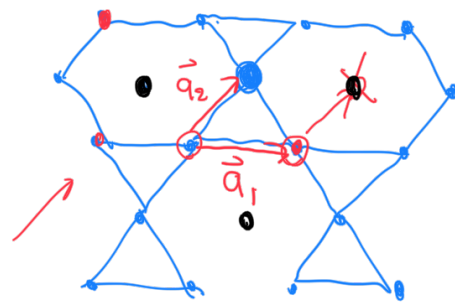
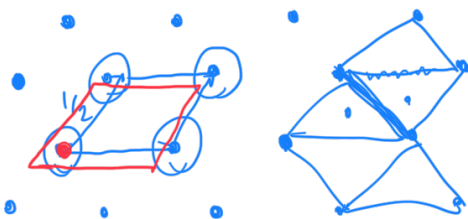
$$\Rightarrow \boxed{n \cdot V_c = 1}$$

นิยามของ Bravais lattice.

1. Bravais lattice เป็น infinite array ของ discrete points ที่มีรูปแบบซ้ำๆ กัน และเงื่อนไขแบบเดียวกันไม่ว่าจะมองจากจุดไหนใน lattice ก็ตาม.

→ 2. ใน Bravais lattice ทุกๆ จุดจะถูกเชื่อมต่อกันโดย lattice translation vector \vec{T} set ของ lattice translation จะครอบคลุม (spans space).

triangular lattice edge-sharing corner-sharing
kagome lattice

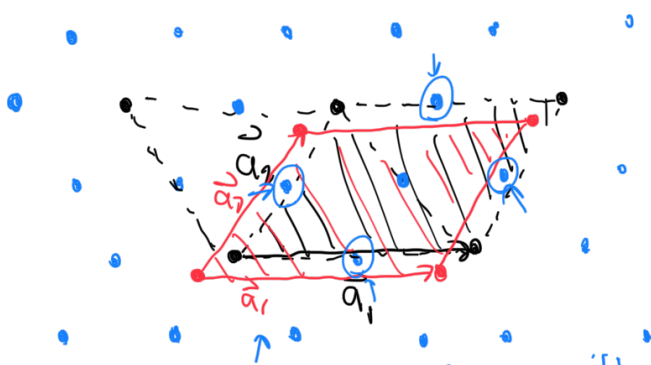


Bravais lattice?
 ไม่ใช่

kagome lattice

ไม่ใช่ Bravais lattice ของ kagome lattice.

↳ มี lattice points มากกว่า 1 จุด.



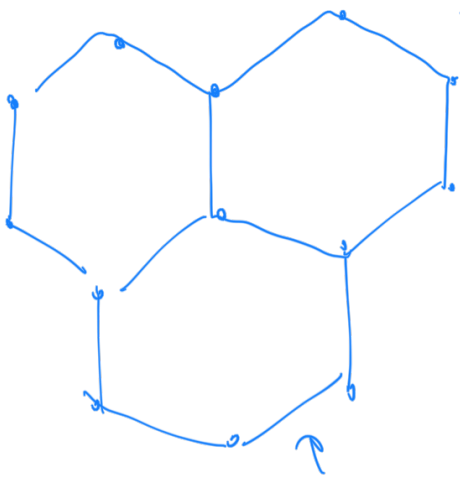
นี่เป็น Bravais lattice

1 ✗

2

3 ✓

kagome ၀ါး Bravais lattice with 3 lattice point 4
 ၆



၀ါး Bravais lattice?
 လီဘရဲ၀ါး ကိုဗိုဗိုဗို
 Bravais lattice ခါးပွဲ

Crystal Structure

Classification of Bravais lattices

- 9 types 2D

1. square lattice : $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$
 มุมของ \vec{a}_1 กับ \vec{a}_2 เท่ากับ $90^\circ \leftarrow \gamma = 90^\circ$

หมายเหตุ: ถ้า $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

α :	มุมระนาบ	\vec{a}_2 กับ \vec{a}_3
β :	"	\vec{a}_1 กับ \vec{a}_3
γ :	"	\vec{a}_1 กับ \vec{a}_2

2. Hexagonal : $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$ $\gamma = 120^\circ$



convention :

3. Rectangular lattice : $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$ $\gamma = 90^\circ$

- * 4. Centered rectangular lattice :

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| \text{ แต่ } \gamma \neq 90^\circ$$



5 Oblique lattice: $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2| \quad \gamma \neq 90^\circ$

- ใน 3D มีทั้งหมด 14 Bravais lattice ใน

ของ point groups. 7 systems
 ↓
 จำนวนของ Bravais lattice

System ชื่อจำกัดเว unit cell

1. cubic	<u>5</u>	<u>3</u> (P, I, F)	<u>15</u>	$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}_3 $ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
2. tetragonal	<u>7</u>	<u>2</u> (P, I)	14	$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
3. Orthorhombic	<u>3</u>	<u>4</u> (P, I, F, C)	12	$ \vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
4. Monoclinic	<u>3</u>	<u>2</u> (P, B)	8	$ \vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
5. triclinic	<u>2</u>	<u>1</u> (P)	2	$ \vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
6. Trigonal	<u>5</u>	<u>1</u> (P)	5	$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}_3 $ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ $< 120^\circ$
7. Hexagonal	<u>7</u>	<u>1</u> (P)	7	$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $ $\gamma = 120^\circ \quad \alpha = \beta = 90^\circ$

32 point groups.

14 Bravais lattice

61 65UU

Space group

230

Centering ของ lattices ใน 3D.

1. Body centering (I)

$$\vec{t} = \frac{\vec{a}_1}{2} + \frac{\vec{a}_2}{2} + \frac{\vec{a}_3}{2} \leftarrow \text{จุดที่เพิ่ม 1 lattice pair}$$

2. Face centering (F)



$$\vec{t}_1 = \frac{\vec{a}_1}{2} + \frac{\vec{a}_2}{2} \quad \vec{t}_2 = \frac{\vec{a}_2}{2} + \frac{\vec{a}_3}{2} \quad \vec{t}_3 = \frac{\vec{a}_1}{2} + \frac{\vec{a}_3}{2}$$

3. One-face centering (A, B, หรือ C)

หรือ

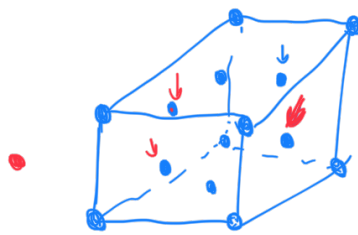
$$A : \vec{t} = \frac{\vec{a}_2}{2} + \frac{\vec{a}_3}{2}$$

หรือ

$$B : \vec{t} = \frac{\vec{a}_1}{2} + \frac{\vec{a}_3}{2}$$

$$C : \vec{t} = \frac{\vec{a}_1}{2} + \frac{\vec{a}_2}{2}$$

Cubic FC



การ characterization ของ 7 systems ตาม point symmetry operators

1. Identity.

2. Rotations ; n : $\frac{2\pi}{n}$ radian

↓
จำนวนครั้งหมุน

$$n = 1, 2, 3, 4, 6$$

$\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$
 $360^\circ \quad 180^\circ \quad 120^\circ \quad 90^\circ \quad 60^\circ$

3. Inversion

$$(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$$

origin \hat{n} $(0,0,0)$ is fixed point.

4. Reflection

5. Rotation - inversion and Rotation-reflection,

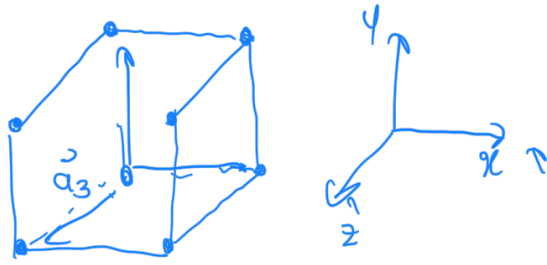
$$61 \rightarrow 230$$

\downarrow

1. Screw axes : rotation + translation
2. Glide plane: : reflection + translation

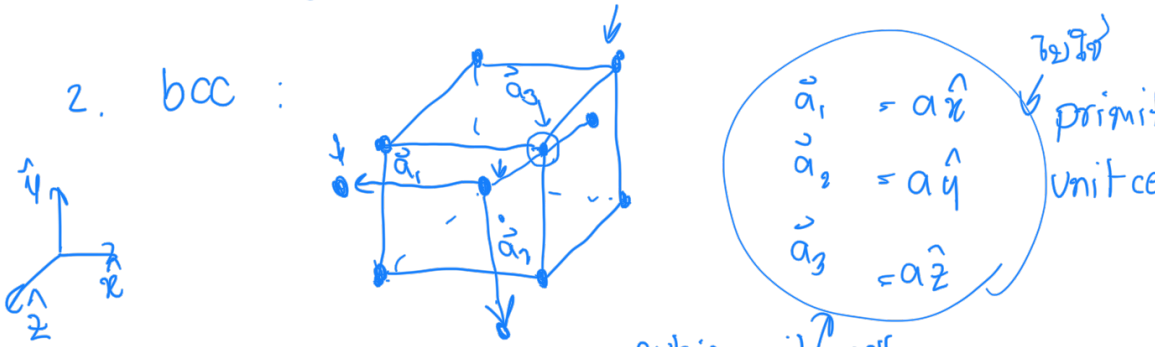
ตัวอย่างของ Bravais lattice ใน 3D,
 มีจำนวนเฉพาะ Cubic system ที่มี 3 Bravais lattices
 ก็คือ \rightarrow P (primitive) I (body-centered) bcc
SC \rightarrow F (face-centered), fcc

1. SC :



$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= a\hat{x} \\ \vec{a}_2 &= a\hat{y} \\ \vec{a}_3 &= a\hat{z} \end{aligned}$$

2. bcc :



primitive lattice vectors \leftarrow 2 lattice points

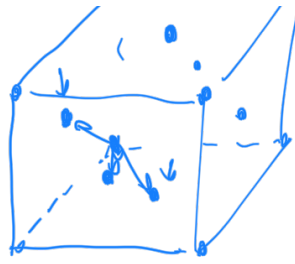
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

3. fcc :





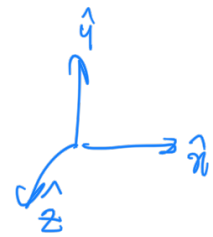
cubic unit cell
 มี 4 lattice point

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})$$

ปริมาตร : $V_c = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$



ปริมาตร cubic unit cell : a^3

ปริมาตร ของ primitive unit cell ของ fcc : $\frac{a^3}{4}$ ✓

$$V_c = \left| \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \cdot \frac{a^2}{2} [(\hat{x} + \hat{y}) \times (\hat{x} + \hat{z})] \right|$$

$$= \frac{a^3}{8} |(\hat{y} + \hat{z}) \cdot (-\hat{y} - \hat{z})|$$

$$= \frac{a^3}{8} |-2| = \frac{a^3}{4} \quad \checkmark$$

Program : VESTA (free)

Download : .cif file.

↑
 crystallographic information file.

Hexagonal closed-packed structure (hcp).

Bravais lattice

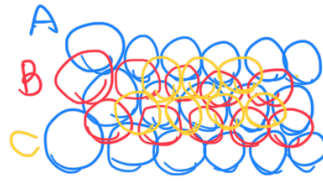
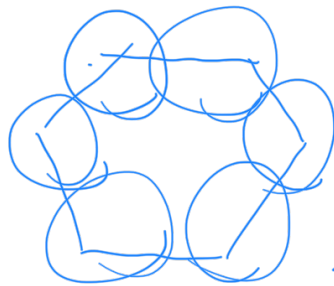
interpenetrating² hexagonal lattice.

โดยที่ 1 hexagonal lattice มี origin อยู่ที่ $(0, 0, 0)$

โดยที่ 2

โดยที่ 1

$$\frac{a_1}{3} + \frac{a_2}{3} + \frac{a_3}{2}$$

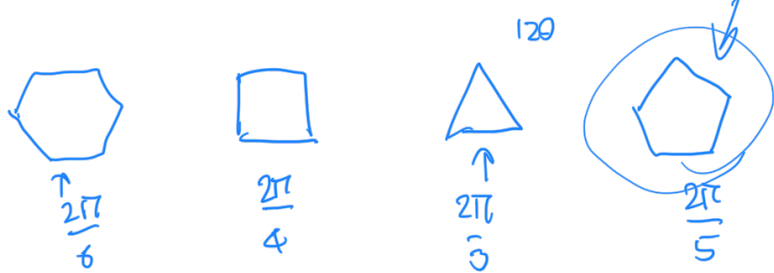


- ABABAB ... ← hcp.
- ABCABCABC ... fcc
- ABCABABABC ... random

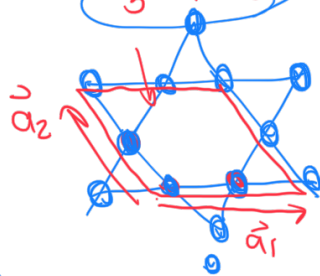
กรณี Rotation :

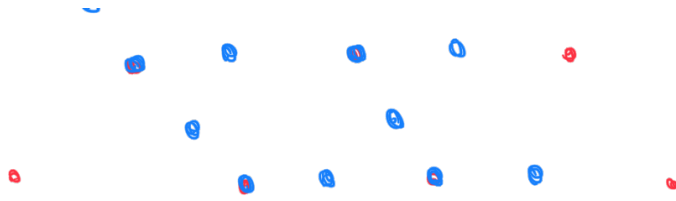
$$\frac{2\pi}{n} : 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 6 \quad \frac{2\pi}{5} \quad \frac{360}{5}$$

กรณี $n = 5$ ไม่พบในธรรมชาติ



Kagome : 3 atoms ← basis





Crystal structure.

Bravais lattice + ^{atom} basis = crystal structure