



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

Perovskite Understanding for Prospective  
Photovoltaics by Infrared and Electronic Spectroscopy.

# ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ

Теперь можно считать, что твёрдое тело было

Троицк, 2021

# КРИСТАЛЛ

Желательно идеальный, конечно

## Основные определения

Кристаллическая решётка — места точек, получающихся применением трансляций к исходной точке.

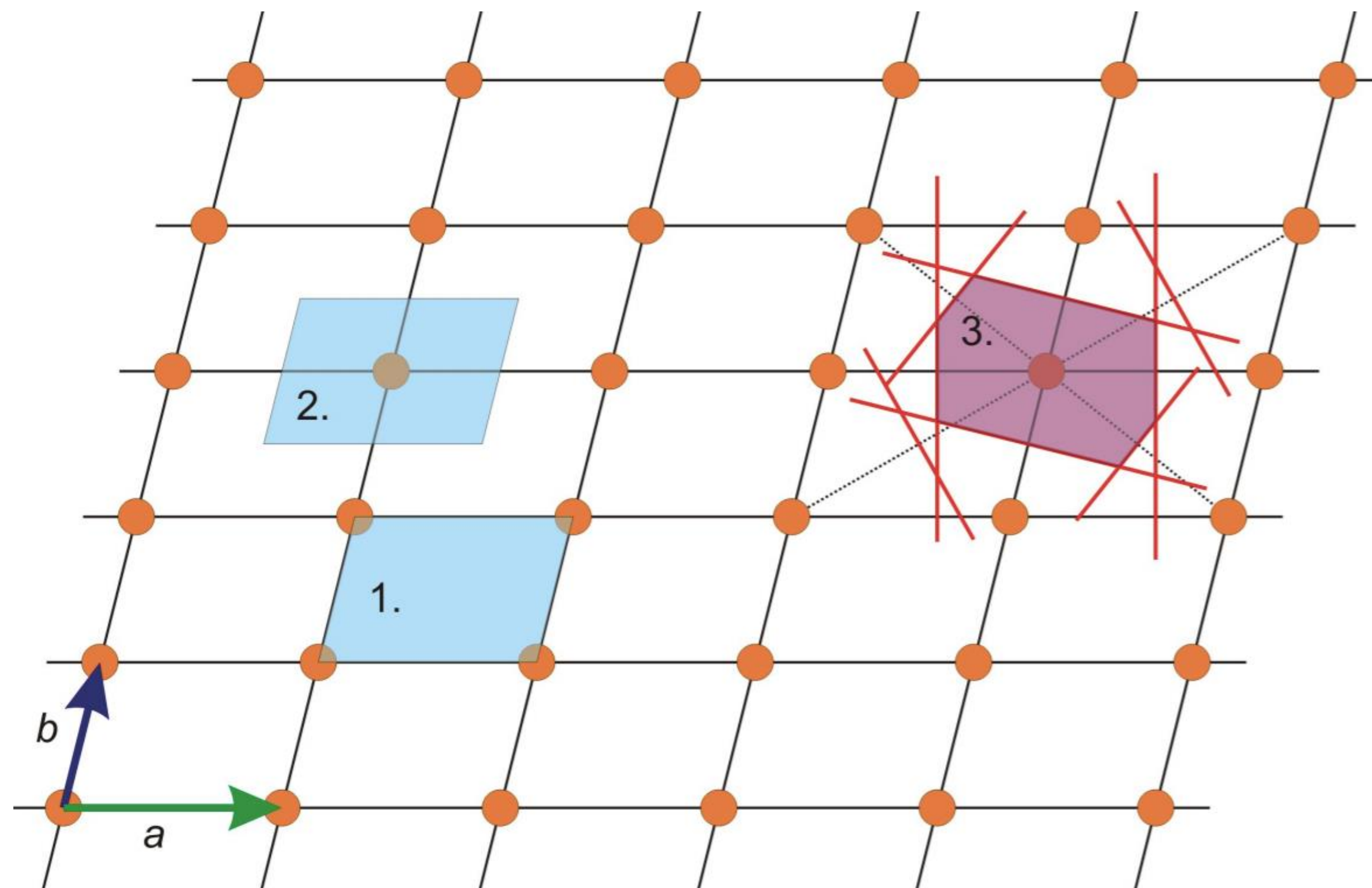
Базис (кристаллографический базис) — группа атомов, применением к которой операций трансляции можно полностью восстановить пространственное расположение атомов в данном теле.

Кристаллическая структура = решетка + базис

Элементарная ячейка — элемент кристаллической структуры, созданный базисом

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + i\vec{x} + j\vec{y} + k\vec{z}$$

$$\{i, j, k\} \subset \mathbb{Z}$$



# РАЗНЫЕ ФАМИЛИИ

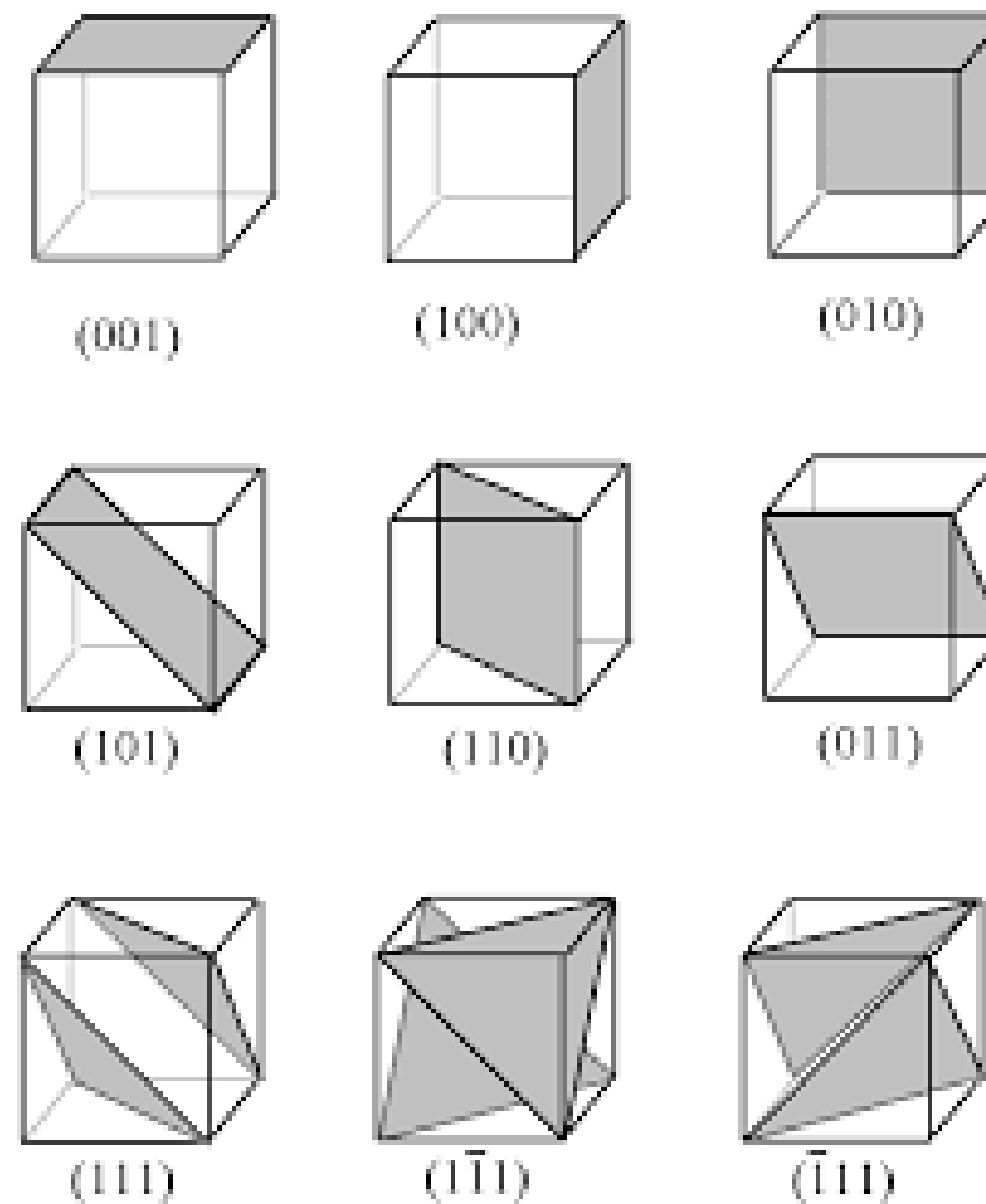
Решётки Браве. Индексы Миллера.  
Ячейка Вигнера-Зейтца.

## Индексы Миллера

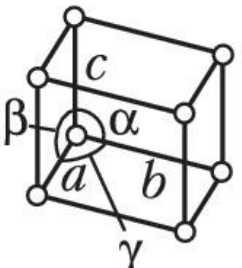
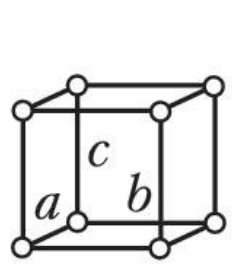
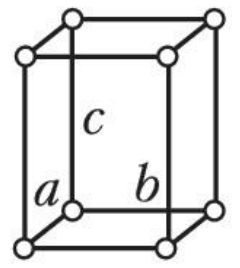
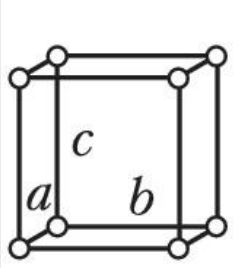
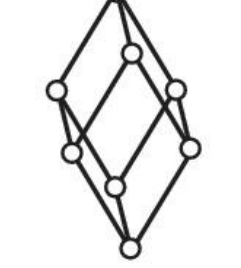
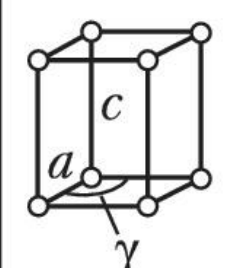
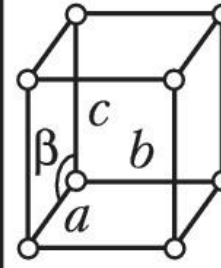
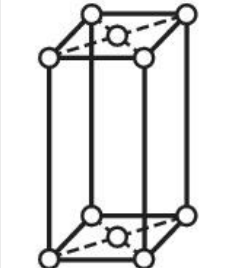
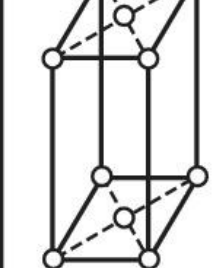
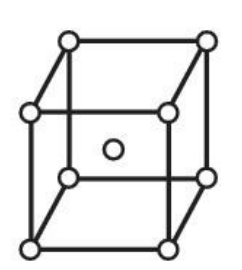
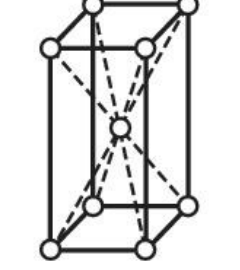
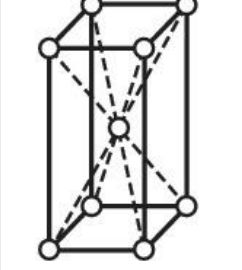
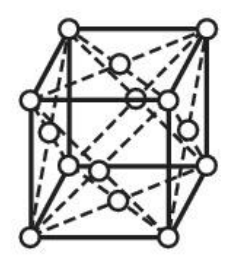
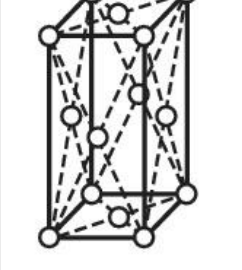
Индексы Миллера — кристаллографические индексы, характеризующие расположение атомных плоскостей в кристалле.

Для нахождения необходимо:

- 1) построить плоскость до пересечения с кристаллографическими осями координат
- 2) определить какие отрезки отсекает эта плоскость от осей координат
- 3) взять обратные к этим числам
- 4) привести их к наименьшему целому кратному этим числам
- 5) минусы записываются сверху



## Решётки Бравэ

Сингония Тип решётки	Три- клинная	Куби- ческая	Тетраго- нальная	Ромби- ческая	Триго- нальная (ромбоэд- рическая)	Гексаго- нальная	Моно- клинная
Примитивный							
Базоцентри- рованный							
Объёмноцен- трированный							
Гранецентри- рованный							



# ЕЩЁ НЕМНОГО ФАМИЛИЙ

Обратная решётка. Зоны Бриллюэна. Теорема Блоха.

## Обратная решётка

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{[\vec{b} \times \vec{c}]}{(\vec{a}[\vec{b} \times \vec{c}])}$$
$$\vec{b}^* = 2\pi \frac{[\vec{c} \times \vec{a}]}{(\vec{a}[\vec{b} \times \vec{c}])}$$
$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{[\vec{a} \times \vec{b}]}{(\vec{a}[\vec{b} \times \vec{c}])}$$

## Зона Бриллюэна

Первая зона Бриллюэна — ячейка Вигнера-Зейтца в пространстве обратной решётки

## Теорема Блоха

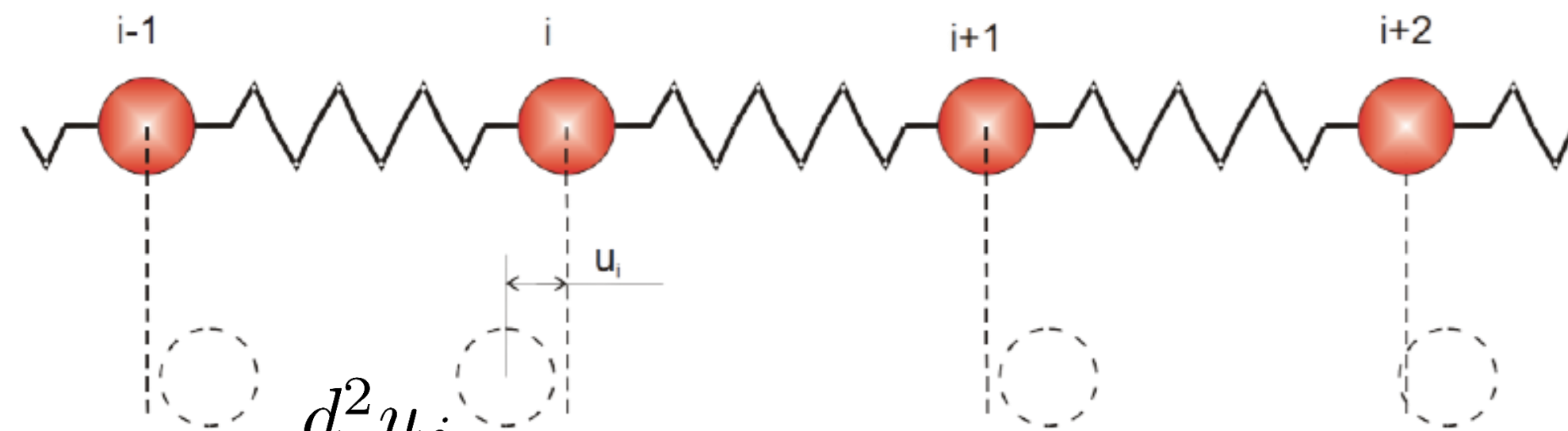
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r})$$

$$\psi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

# КОЛЕБАНИЯ АТОМОВ В РЕШЁТКЕ

Многое мы уже обсуждали



$$M \frac{d^2 u_j}{dt^2} = C (u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j)$$

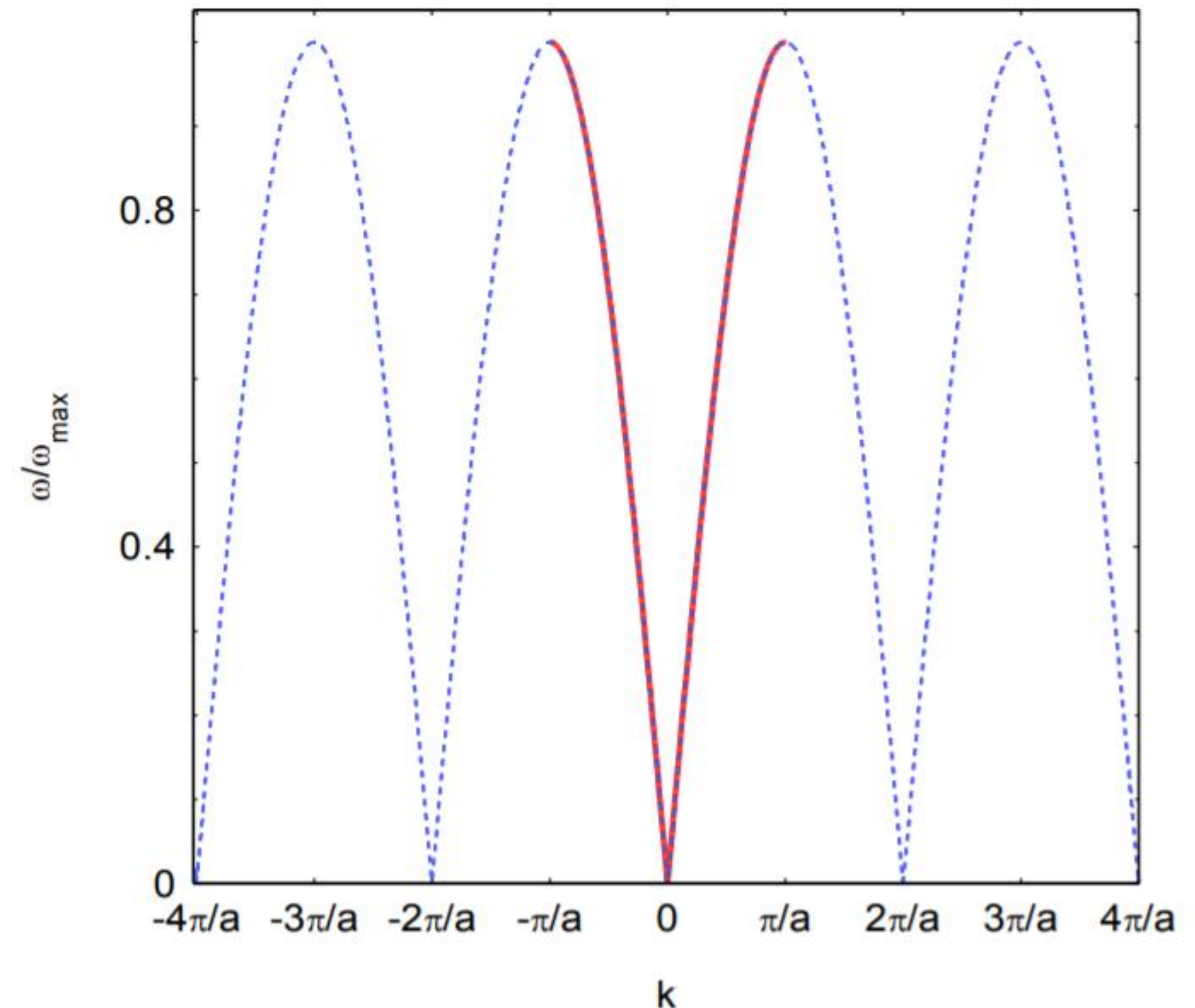
$$u_i = u_0 e^{i(kx_j - \omega t)}$$

$$-M\omega^2 = C (e^{ika} + e^{-ika} - 2)$$

$$-M\omega^2 = -2C(1 - \cos(ka))$$

$$-M\omega^2 = -4C \sin^2 \left( \frac{ka}{2} \right)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin \left( \frac{ka}{2} \right) \right|$$



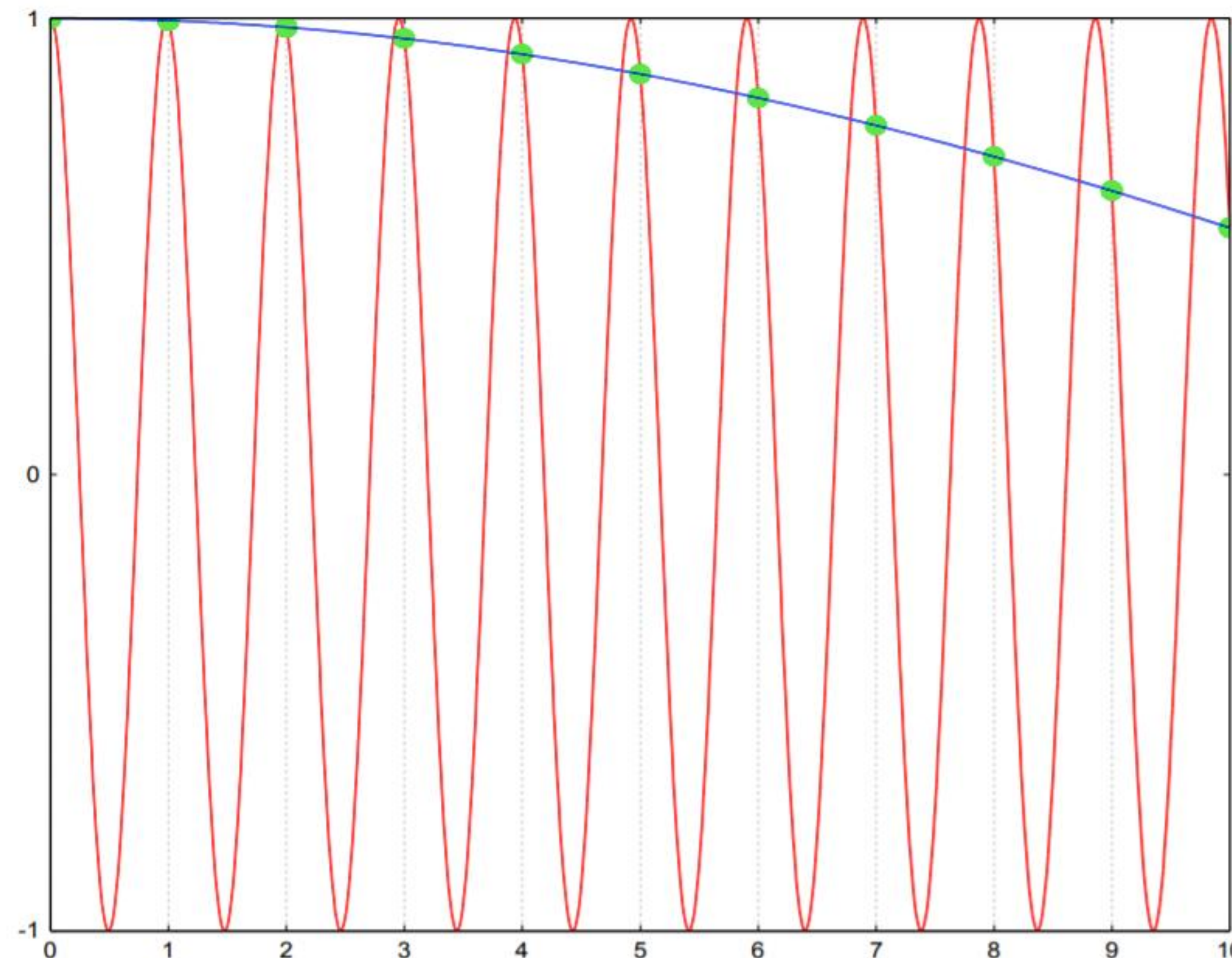


# ПЕРВАЯ ЗОНА БРИЛЛЮЭНА

Зачем её вообще придумывали?

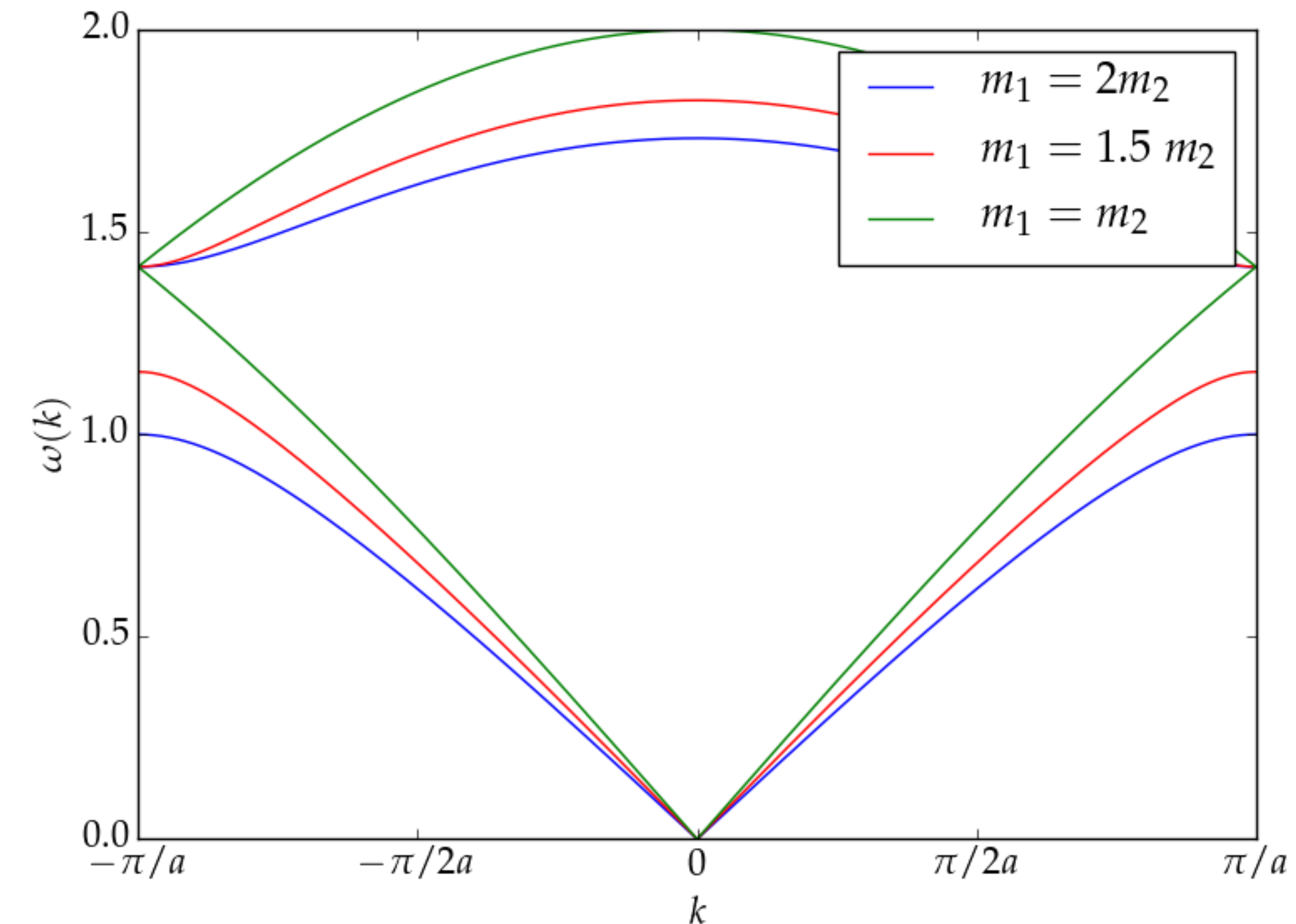
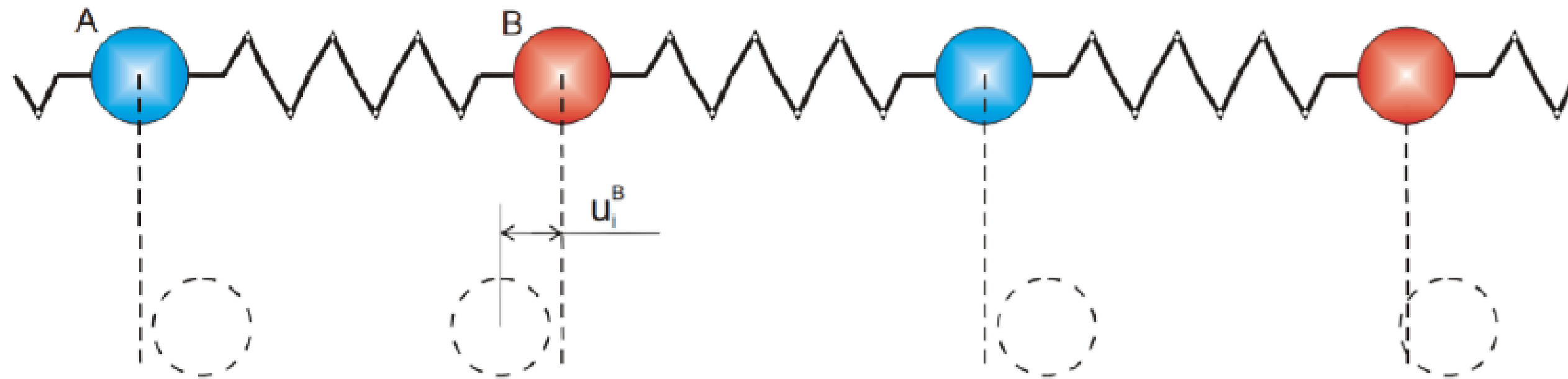
$$\begin{aligned} u(k + 2\pi/a, ja) &= u_0 e^{i((k+2\pi/a)ja - \omega t)} = \\ &= u_0 e^{i(k \cdot ja - \omega t)} e^{i2\pi j} = u(k, ja) \end{aligned}$$

Волновые вектора всех физически различимых колебаний могут быть собраны в первой зоне Бриллюэна.



# ЕСЛИ В РЕШЁТКЕ РАЗНЫЕ АТОМЫ

Пружинки оставим одинаковые



$$M_A \frac{d^2 u_j^A}{dt^2} = C (u_{j-1}^B + u_j^B - 2u_j^A)$$

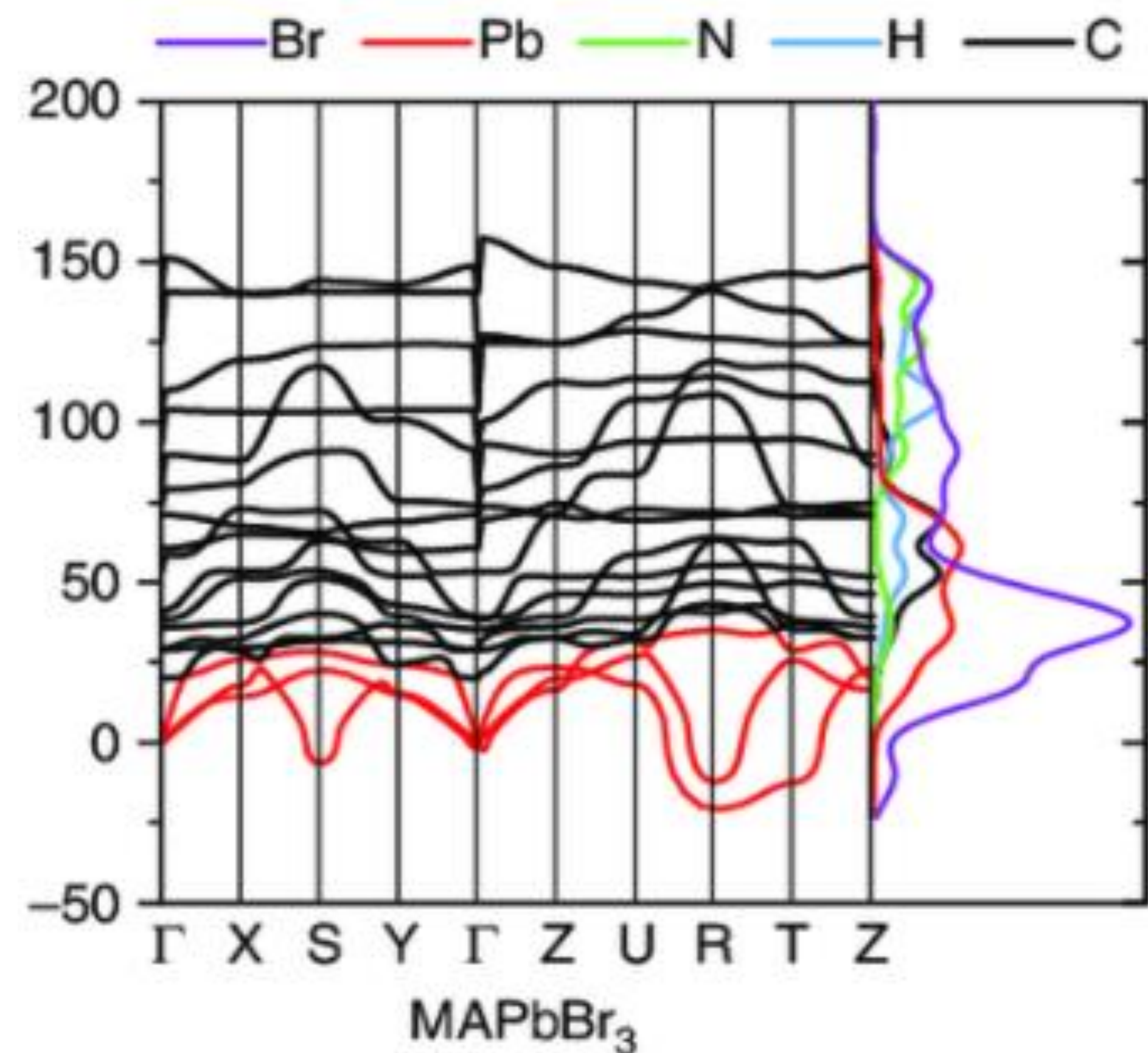
$$M_B \frac{d^2 u_j^B}{dt^2} = C (u_j^A + u_{j+1}^A - 2u_j^B)$$

$$\omega^2 = \frac{C(m_A + m_B)}{m_A m_B} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4m_A m_B}{(m_A + m_B)^2} \sin^2 \frac{ka}{2}} \right)$$



# ЗАКОН ДИСПЕРСИИ ФОНОНОВ В РЕАЛЬНОМ МИРЕ

На примере перовскита



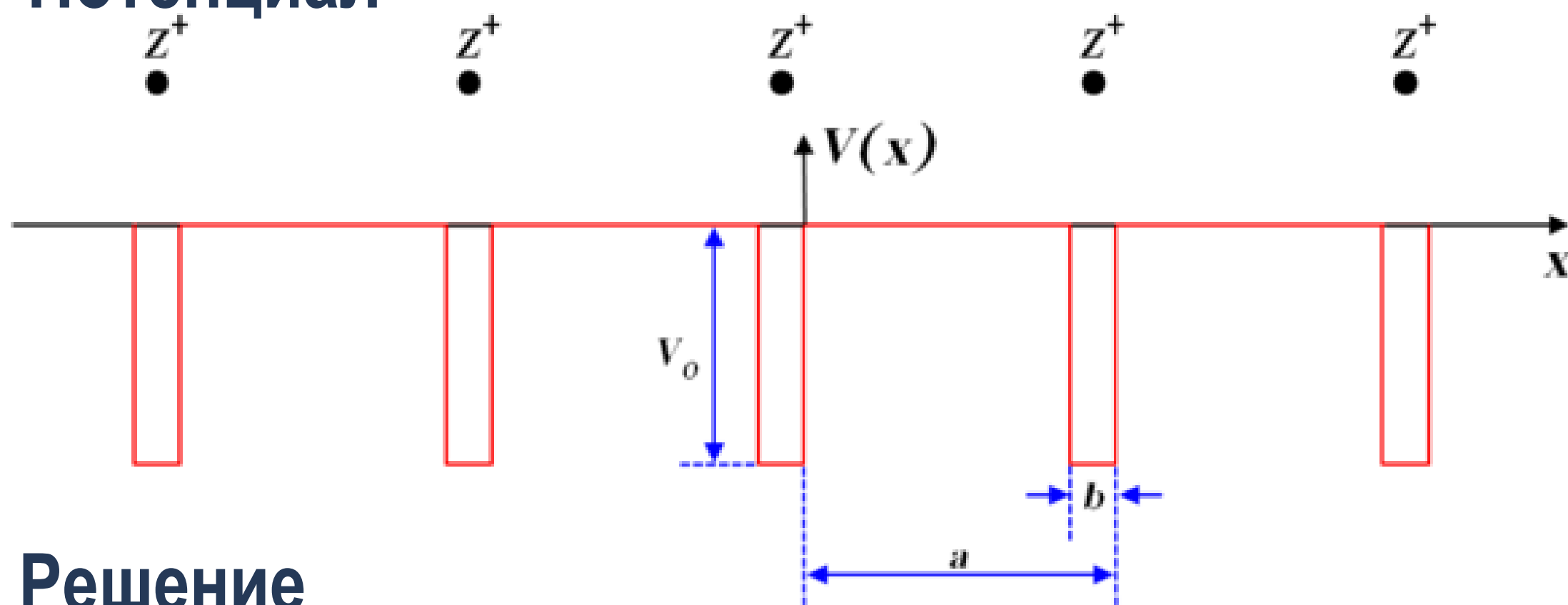




# СОБСТВЕННО, ЗОННАЯ СТРУКТУРА

Модель Кронига - Пенни

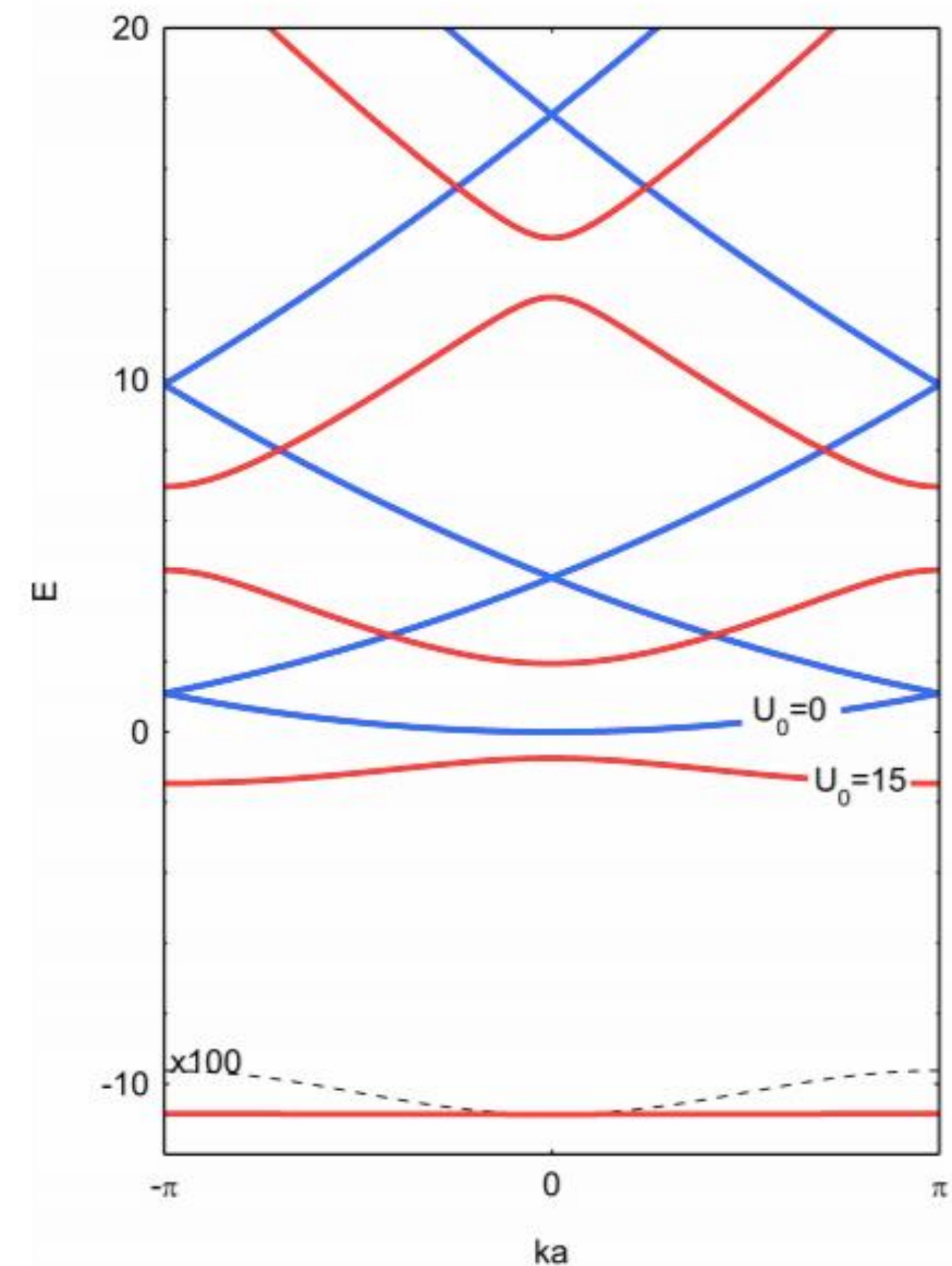
Потенциал



Решение

$$\cos(ka) = \cos \left[ \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0)b} \right] \cos \left[ \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|(a - b)} \right] - \frac{2E + U_0}{2\sqrt{|E|(E + U_0)}} \sin \left[ \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0)b} \right] \sin \left[ \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|(a - b)} \right]$$

Лучше рисовать

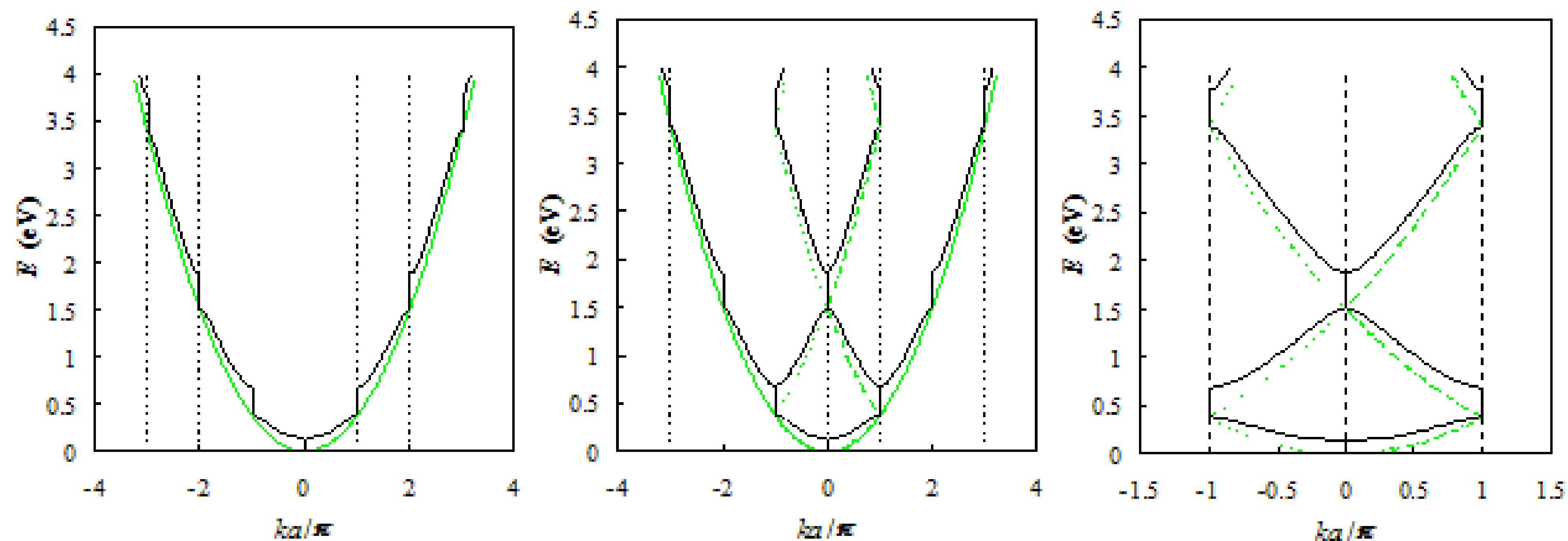




# ШАГ В СТОРОНУ РЕАЛЬНОГО МИРА

Для начала небольшой

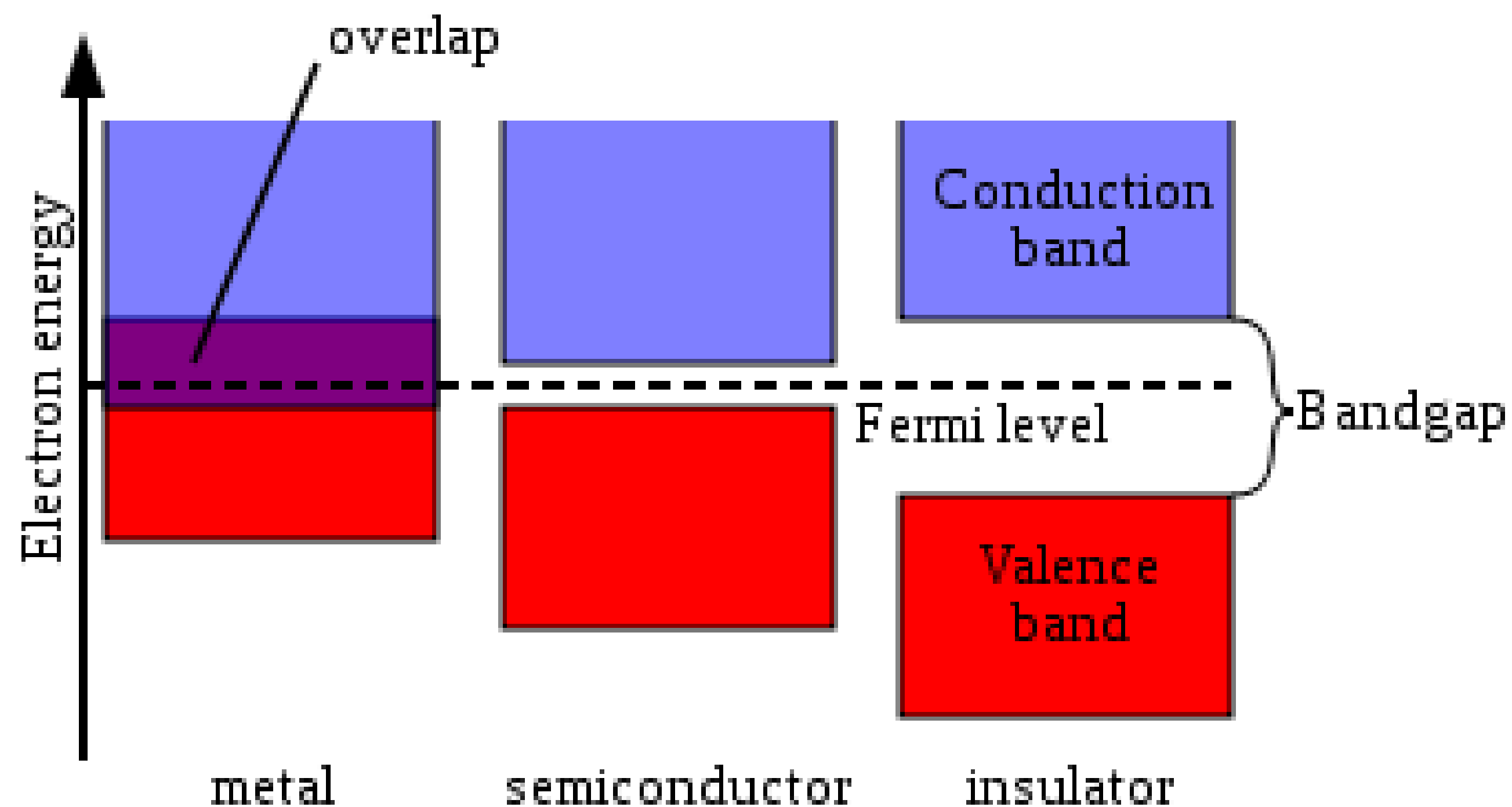
Зелёным – свободные электроны, чёрным – наш потенциал



# ЗОННАЯ СТРУКТУРА РАЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Проводники, диэлектрики, полупроводники

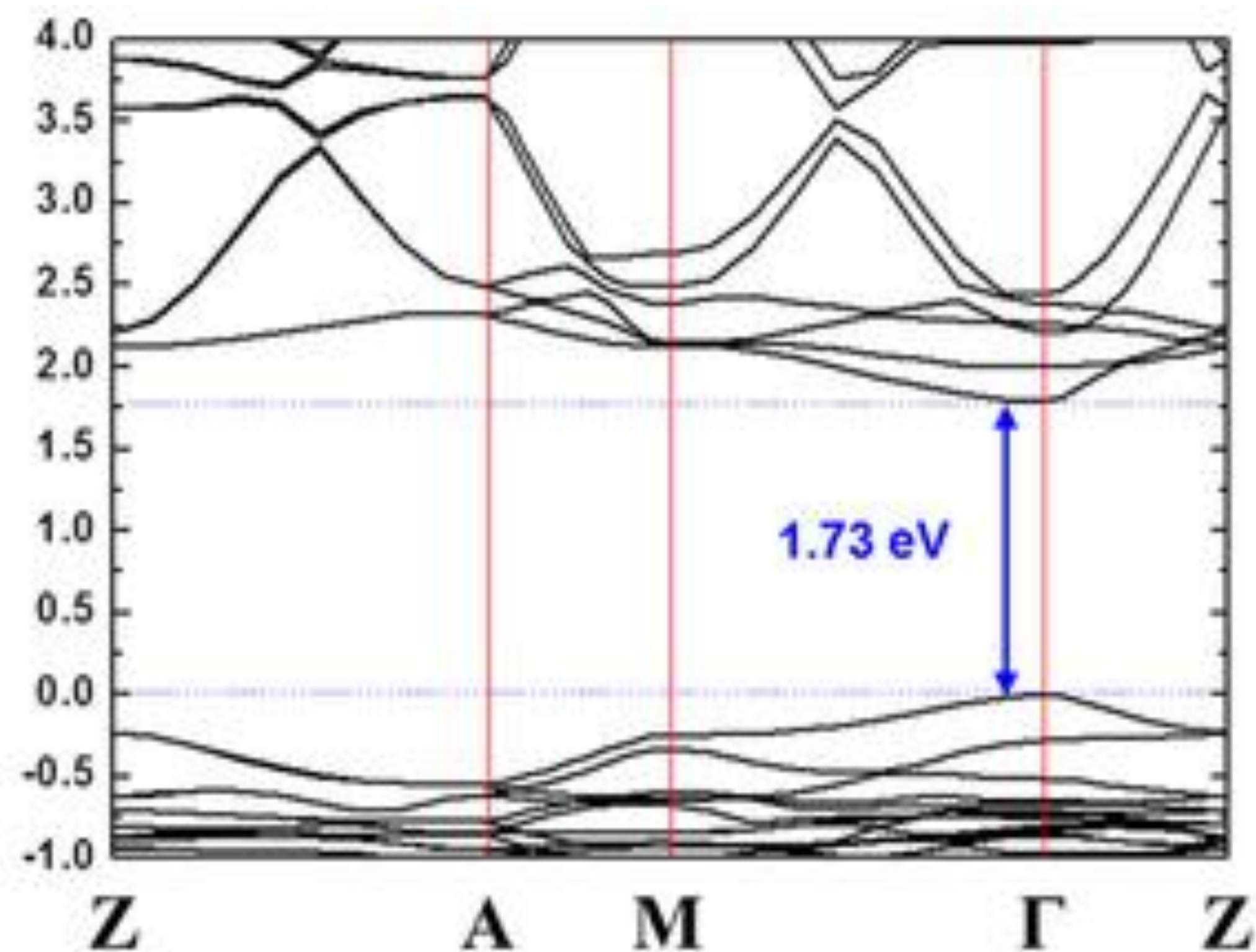
Валентная зона и зона проводимости





# ЗОННАЯ СТРУКТУРА В РЕАЛЬНОМ МИРЕ

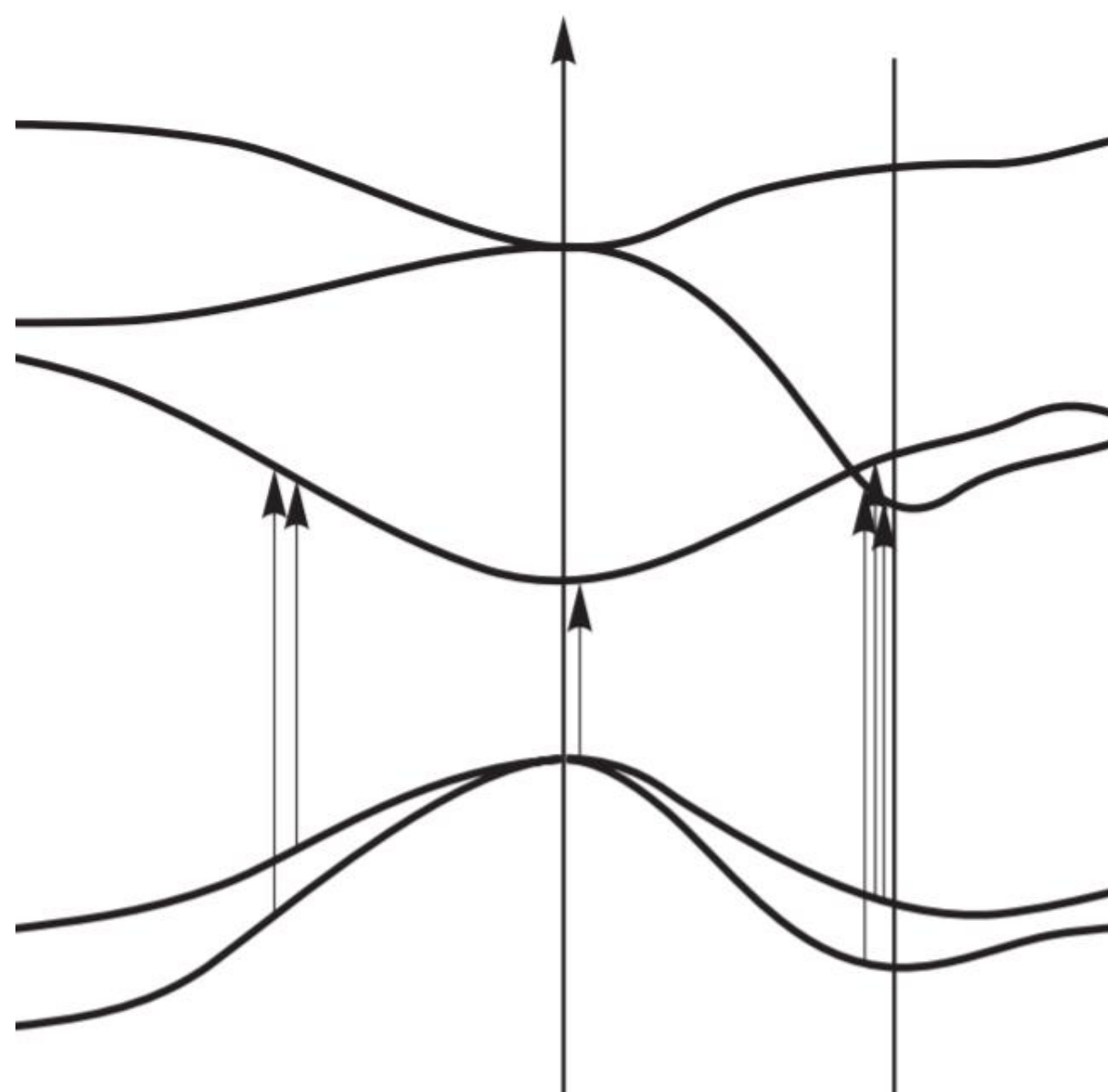
На примере перовскита



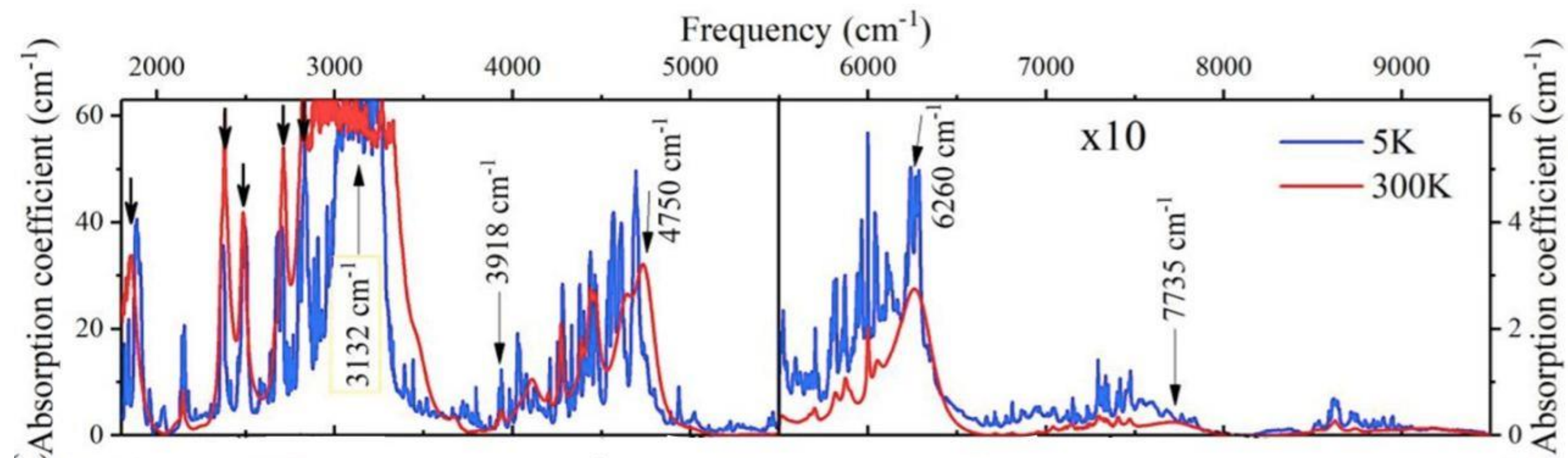
# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СО СВЕТОМ

Спектроскопия всё-таки

Межзонные переходы



Взаимодействие света с фононами





# КВАЗИЧАСТИЦЫ

Некоторых уже видели

- **Фононы**
  - Оптические
  - Акустические
- **Экситоны**
  - Френкеля
  - Ванье—Мотта
- **Плазмоны**
- **Поляритоны**
- **Поляроны**