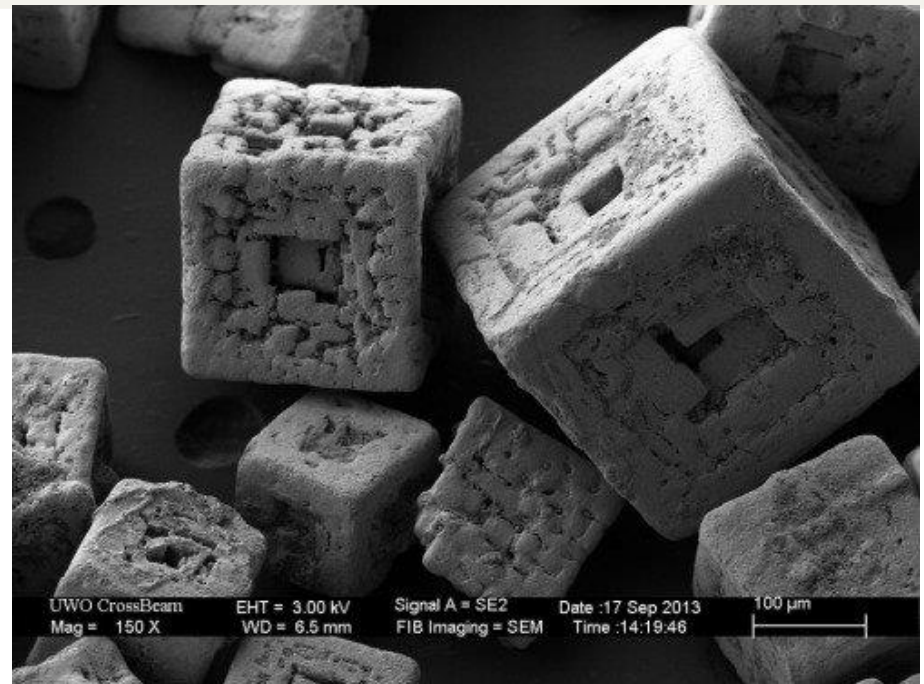


Кристаллы

- Симметрия кристаллов
- Кристаллическая решетка
- Элементарная ячейка
- Решетки Браве
- Обозначение плоскостей и направлений в кристалле
- Индексы Миллера.

Кристаллы



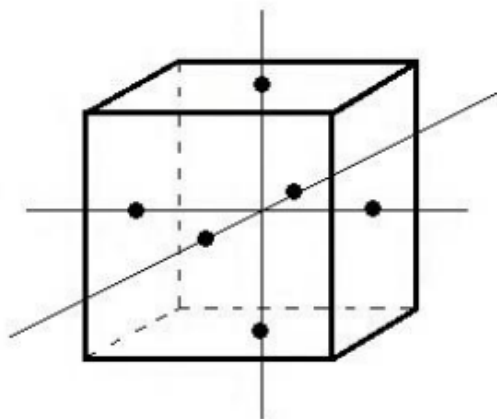
Симметрия - способность твердого тела совмещаться с самим собой в результате его движения или воображаемых операций над его точками.

Чем большим числом способов такое совмещение возможно, тем более симметричной является форма тела.

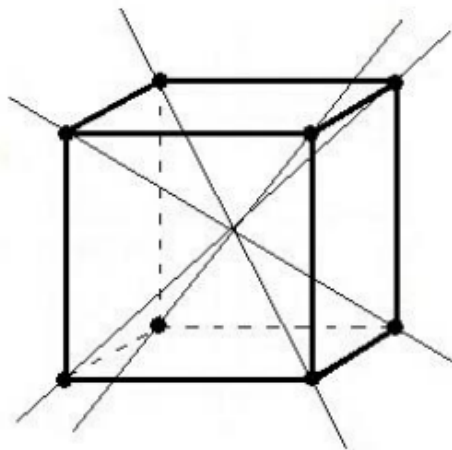
Элементы симметрии

- **Ось симметрии n -го порядка.** Если тело совмещается само с собой при повороте вокруг некоторой оси на угол $2\pi/n$, то эта ось называется осью симметрии n -го порядка.
- **Плоскость симметрии.** Если тело совмещается само с собой в результате зеркального отражения его точек в некоторой плоскости, то эта плоскость называется плоскостью симметрии тела.
- **Центр симметрии.** Если тело совмещается с самим собой при инверсии относительно некоторой точки, то эти точки называются центром симметрии

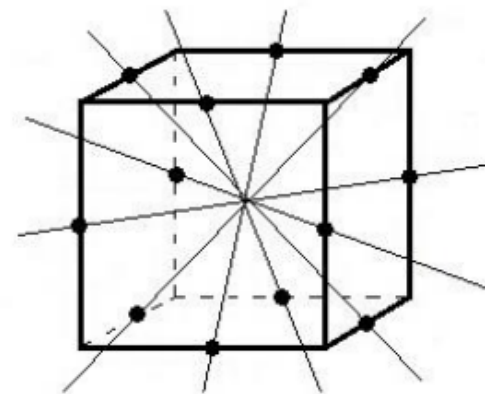
Элементы симметрии



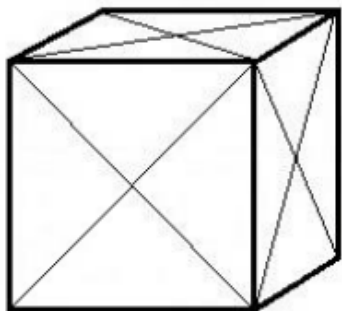
Оси 4-ого порядка



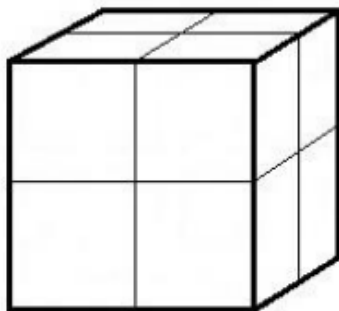
Оси 3-его порядка



Оси 2-ого порядка



Плоскости симметрии



Центр инверсии

Операция симметрии

- **Операция симметрии** – преобразование, при котором объект совмещается сам с собой.

Основные типы симметрических преобразований

Поворот $\alpha = \frac{2\pi}{n}$
(прямая или ось)

Зеркальное отражение
(плоскость)

Инверсия
(точка или центр симметрии)

Трансляция
(только для бесконечных сред)

Операция симметрии

Инверсия

- **Преобразование инверсии** – называется одновременное изменение всех троих пространственных координат частиц.

$$x \rightarrow -x$$

$$y \rightarrow -y$$

$$z \rightarrow -z$$

Произведение операций симметрии группы квадрата

- Последовательное применение двух любых элементов также является ее элементом.
- Операторы симметрии могут не коммутировать друг с другом.

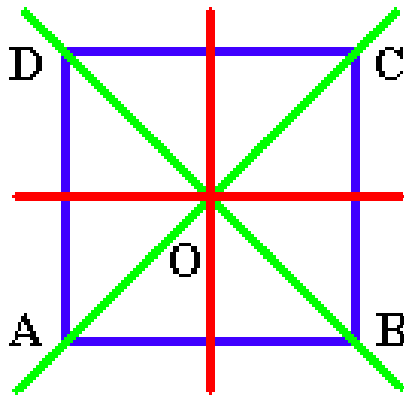
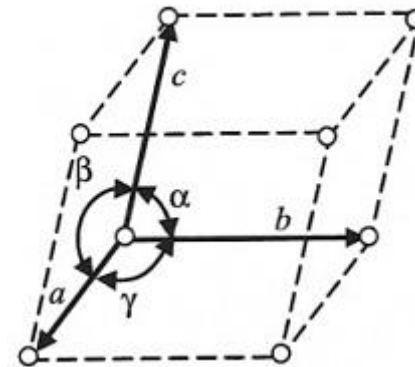
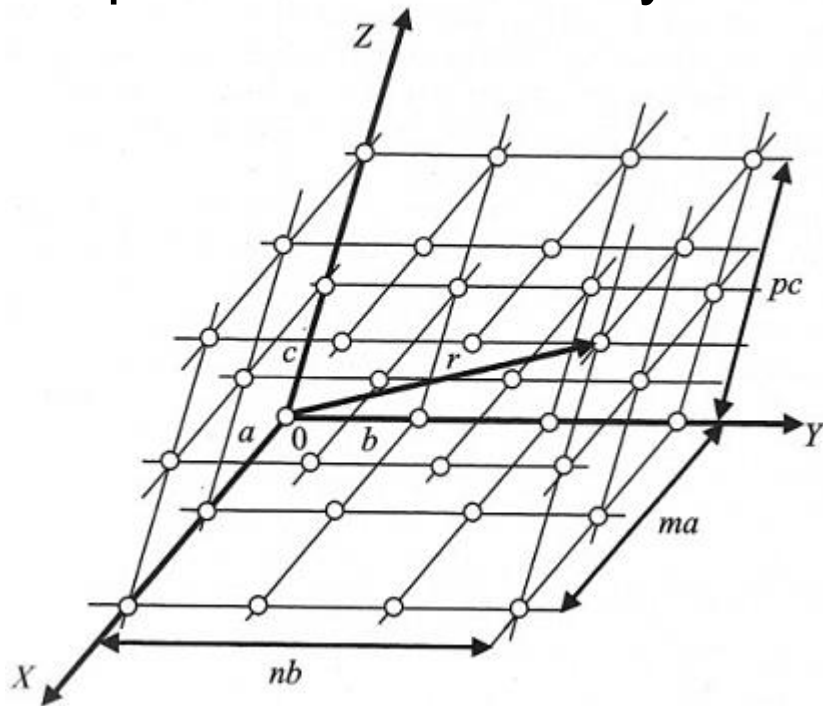


Рис. 1

E	C_{4z}^+	C_{2z}	C_{4z}^3	σ_x	σ_y	σ_v	$\sigma_{v'}$
C_{4z}	C_{2z}	C_{4z}^3	E	σ_v	$\sigma_{v'}$	σ_y	σ_x
C_{2z}	C_{4z}^3	E	C_{4z}	σ_y	σ_x	$\sigma_{v'}$	σ_v
C_{4z}^3	E	C_{4z}	C_{2z}	$\sigma_{v'}$	σ_v	σ_x	σ_y
σ_x	$\sigma_{v'}$	σ_y	σ_v	E	C_{2z}	C_{4z}^3	C_{4z}
σ_y	σ_v	σ_x	$\sigma_{v'}$	C_{2z}	E	C_{4z}	C_{4z}^3
σ_v	σ_x	$\sigma_{v'}$	σ_y	C_{4z}	C_{4z}^3	E	C_{2z}
$\sigma_{v'}$	σ_y	σ_v	σ_x	C_{4z}^3	C_{4z}	C_{2z}	E

Трансляция

- **Трансляция** – операция перемещения кристалла параллельно самому себе. ($\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$)

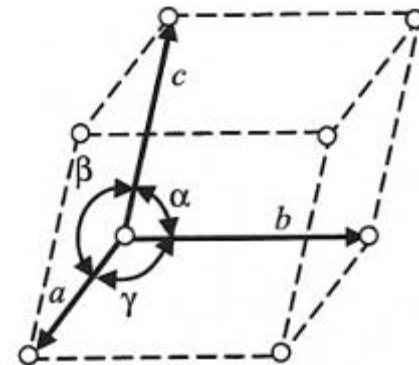
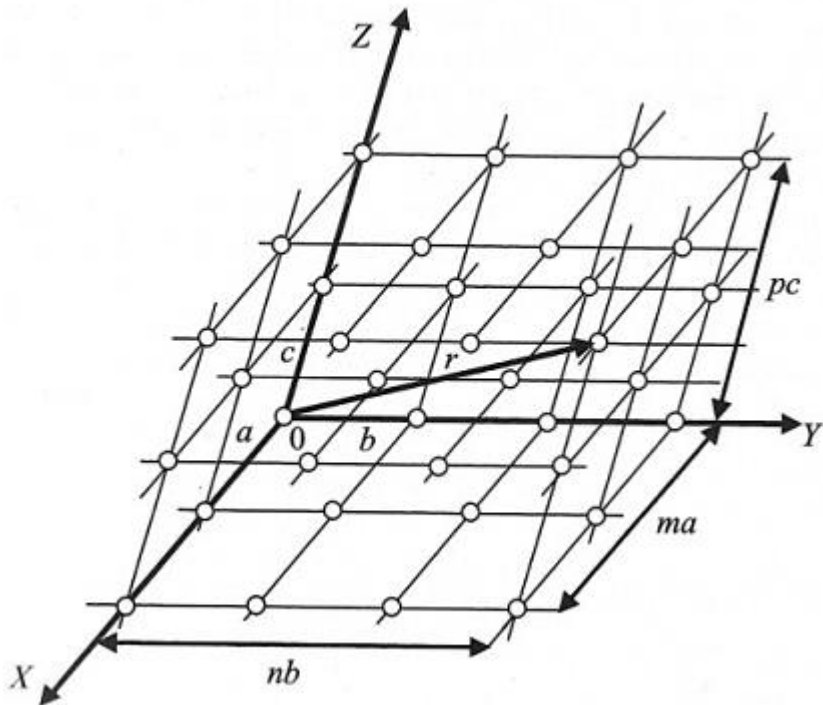


- **Элементарная ячейка** — это любая ячейка, обладающая тем свойством, что применение к ней операции трансляции заполнит все пространство.

Трансляция

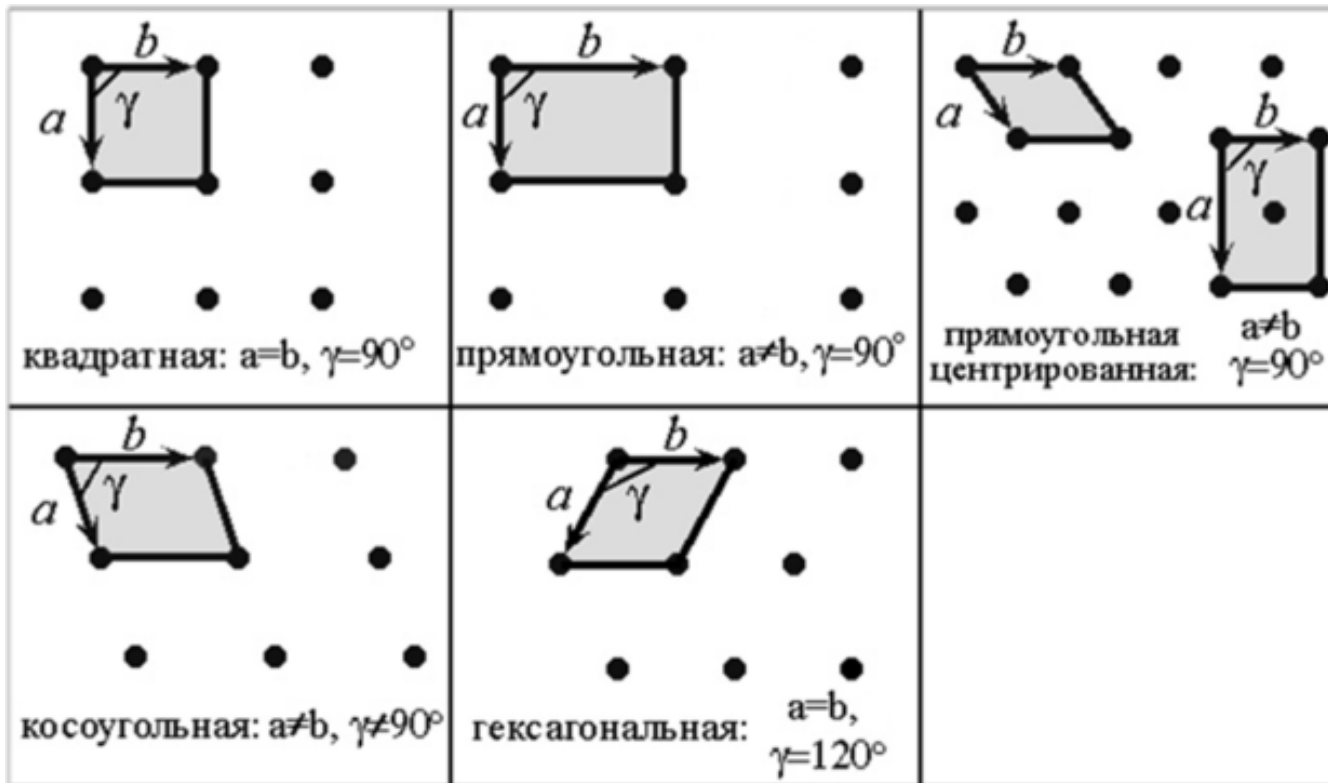
Идеальный кристалл – тело, состоящее из атомов, расположенных в пространственной решетке, так что существует три вектора элементарных смещений **a**, **b**, **c** обладающих тем свойством, что атомное расположение имеет одинаковый вид как и при рассмотрении его из некоторой произвольной точки **r**, так из точки **r'**.

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

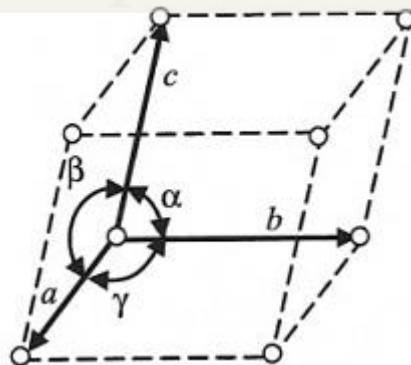


Решетка Бравэ (2D)

- **Примитивная ячейка** — это любая элементарная ячейка наименьшего объема. Соответствующая кристаллическая решетка называется примитивной или решёткой Бравэ.

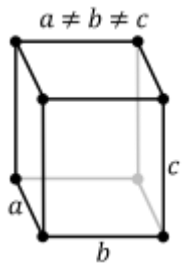


Классификация решёток по симметрии (Сингонии решёток Бравэ)

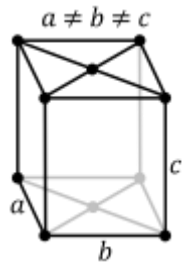


Триклинная	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Моноклинная	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ромбическая или ортогональная	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тетрагональная	$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригональная	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Гексагональная	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$
Кубическая	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

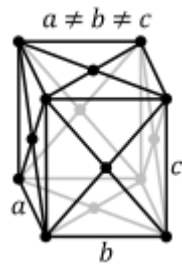
Типы центрировок решёток Браве



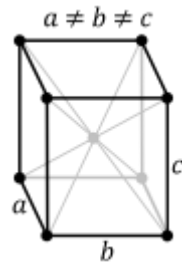
Примитивная



Базоцентрированная



Гранецентрированная






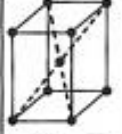
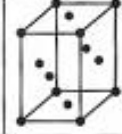

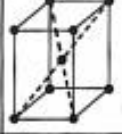




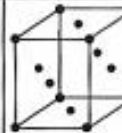


Объёмноцентрированная



Дважды-объёмноцентрированная
(Ромбоэдрическая)

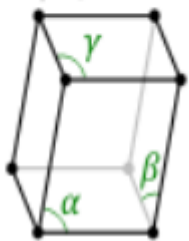
Типы решёток Бравэ (3D)

Сингония	Решетка				
	Простая	БЦ	ОЦ	ГЦ	Ромбоэдр
Триклинная					
Моноклинная					
Ромбическая					
Тетрагональная					
Тригональная					
Гексагональная					
Кубическая					

Типы решёток Бравэ

Триклинная
(параллелепипед)

$$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$$

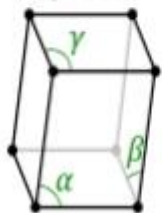


Моноклинная
(призма с параллелограммом

в основании)

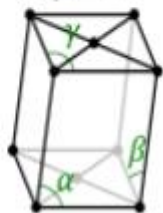
$$\beta \neq 90^\circ$$

$$\alpha, \gamma = 90^\circ$$

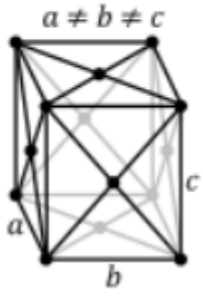
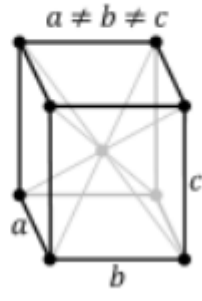
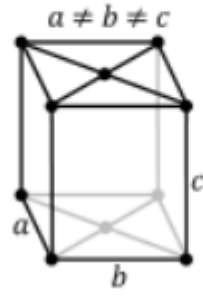
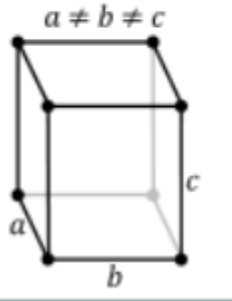


$$\beta \neq 90^\circ$$

$$\alpha, \gamma = 90^\circ$$



Ромбическая (прямоугольный параллелепипед)



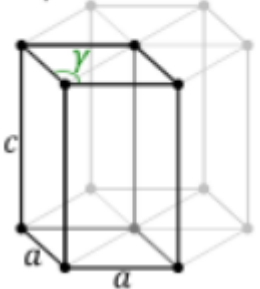
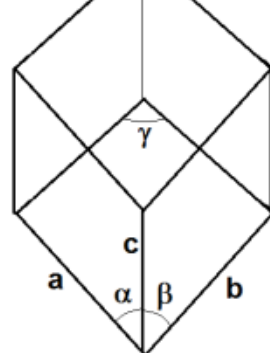
Тригональная
(ромбоэдрическая)

Гексагональная
(шестигранная

призма)

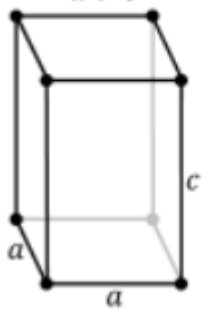
$$a=b=c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

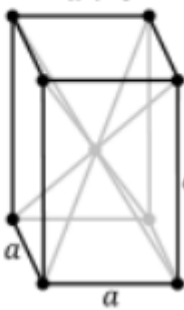


Тетрагональная
(прямоугольный параллелепипед
с квадратом в основании)

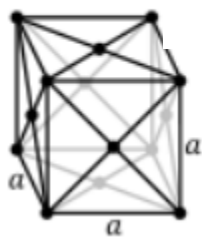
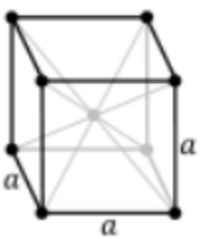
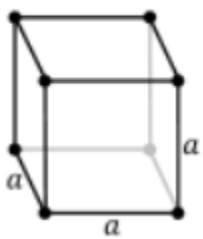
$$a \neq c$$



$$a \neq c$$

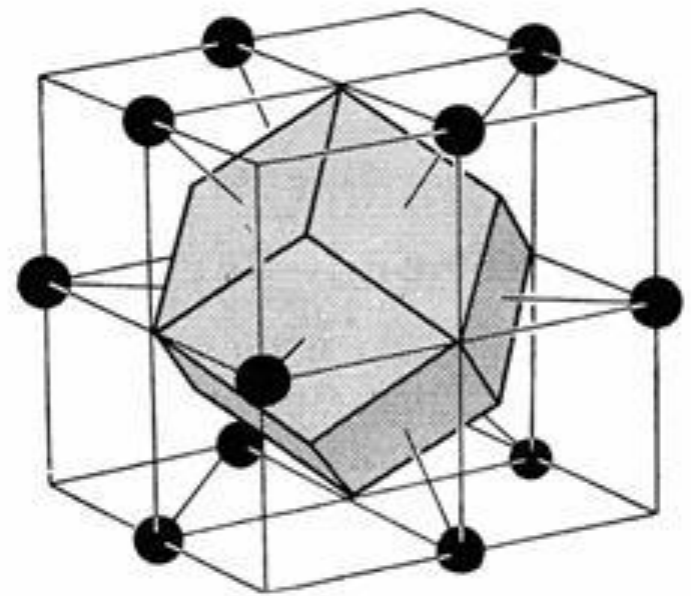
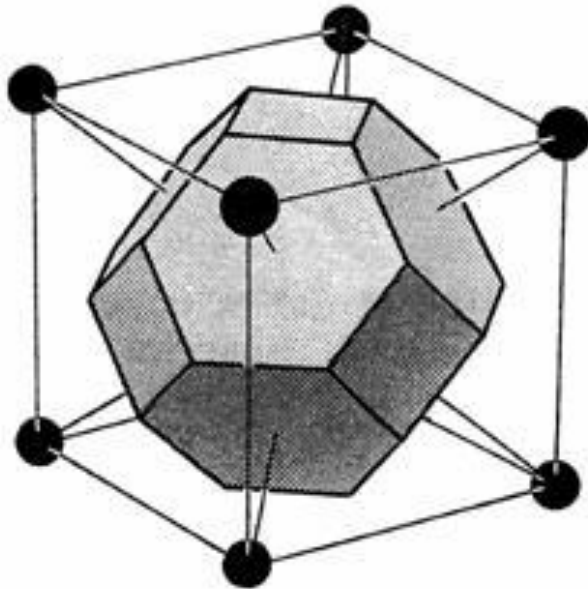


Кубическая (куб)



Примитивная ячейка (Ячейка Вигнера-Зейтца)

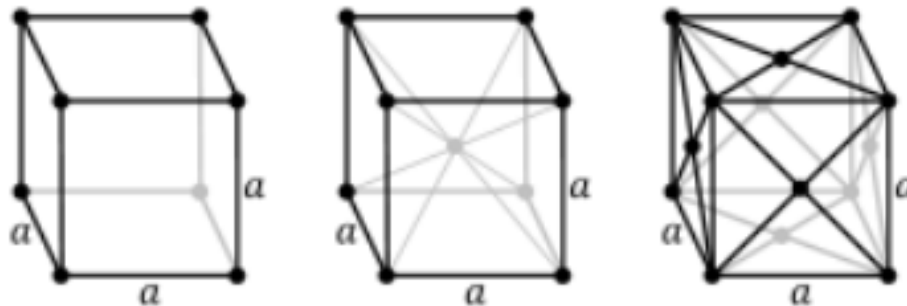
- **Примитивная ячейка** — это любая элементарная ячейка наименьшего объема.



Характеристики кубических решеток

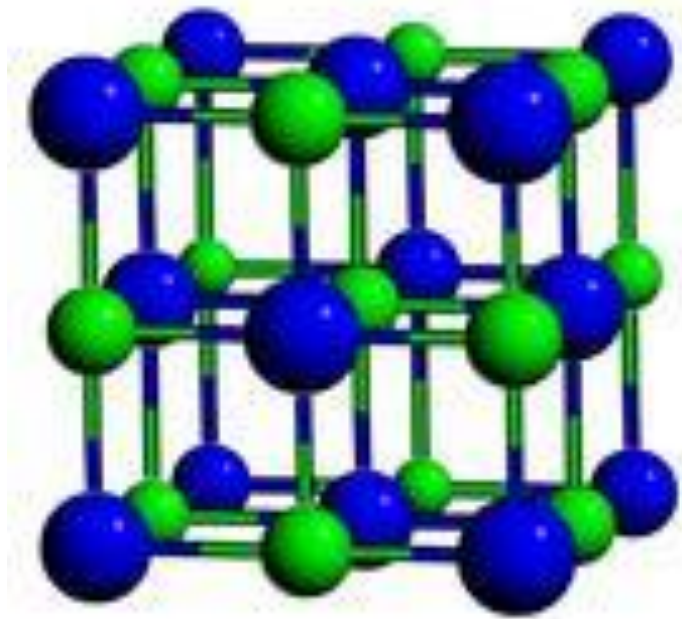
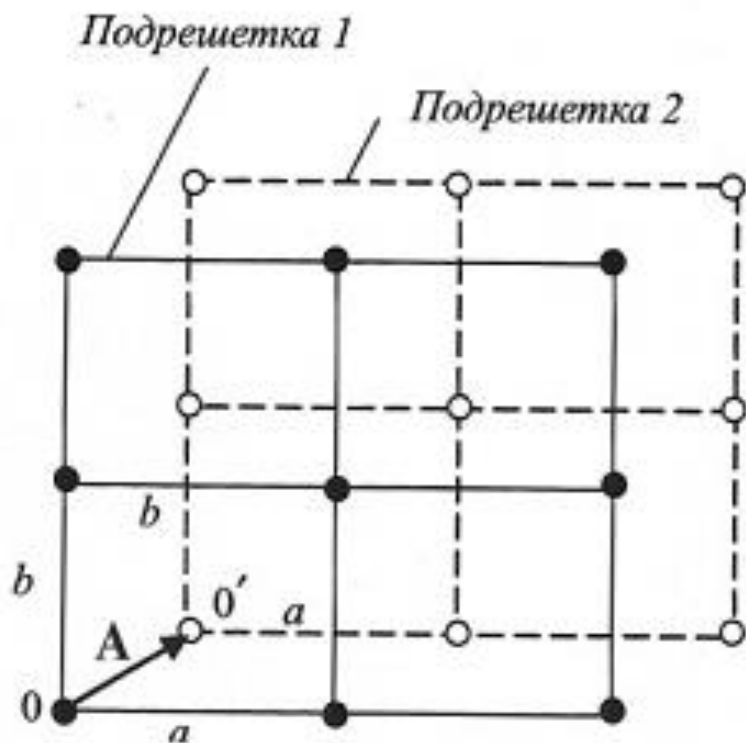
- Параметр решетки
- **Координационное число** — число ближайших соседей.
- Матричное представление трансляции

Кубическая (куб)



Решётка с базисом

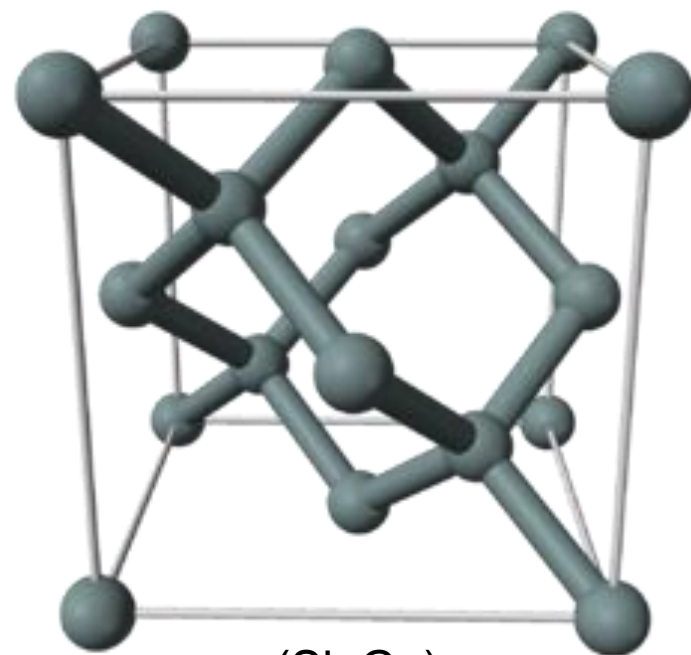
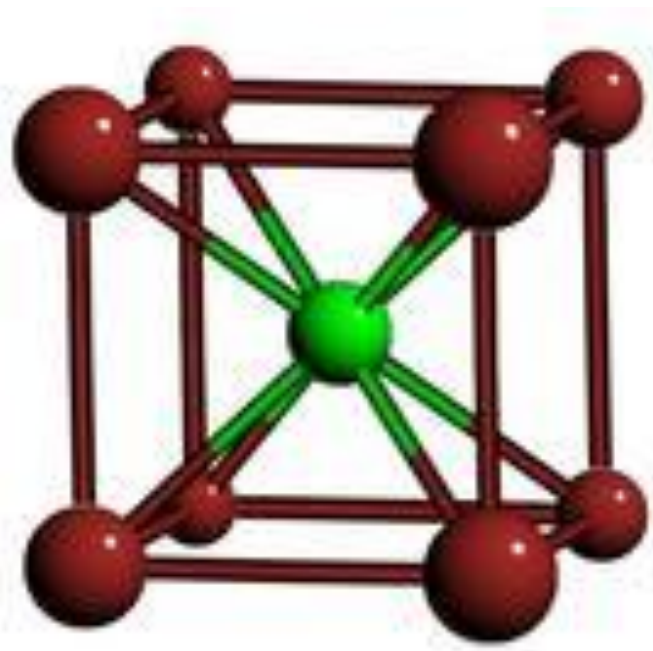
Решетку общего типа называют решеткой с базисом. Ее можно построить с помощью тех же трансляций, что и каждую из составляющих решеток Бравэ, только при этом надо транслировать не один узел, а несколько узлов - базис



(NaCl, LiH, MgO, MnO, AgBr, PbS, KCl, KBr)

Решётка с базисом

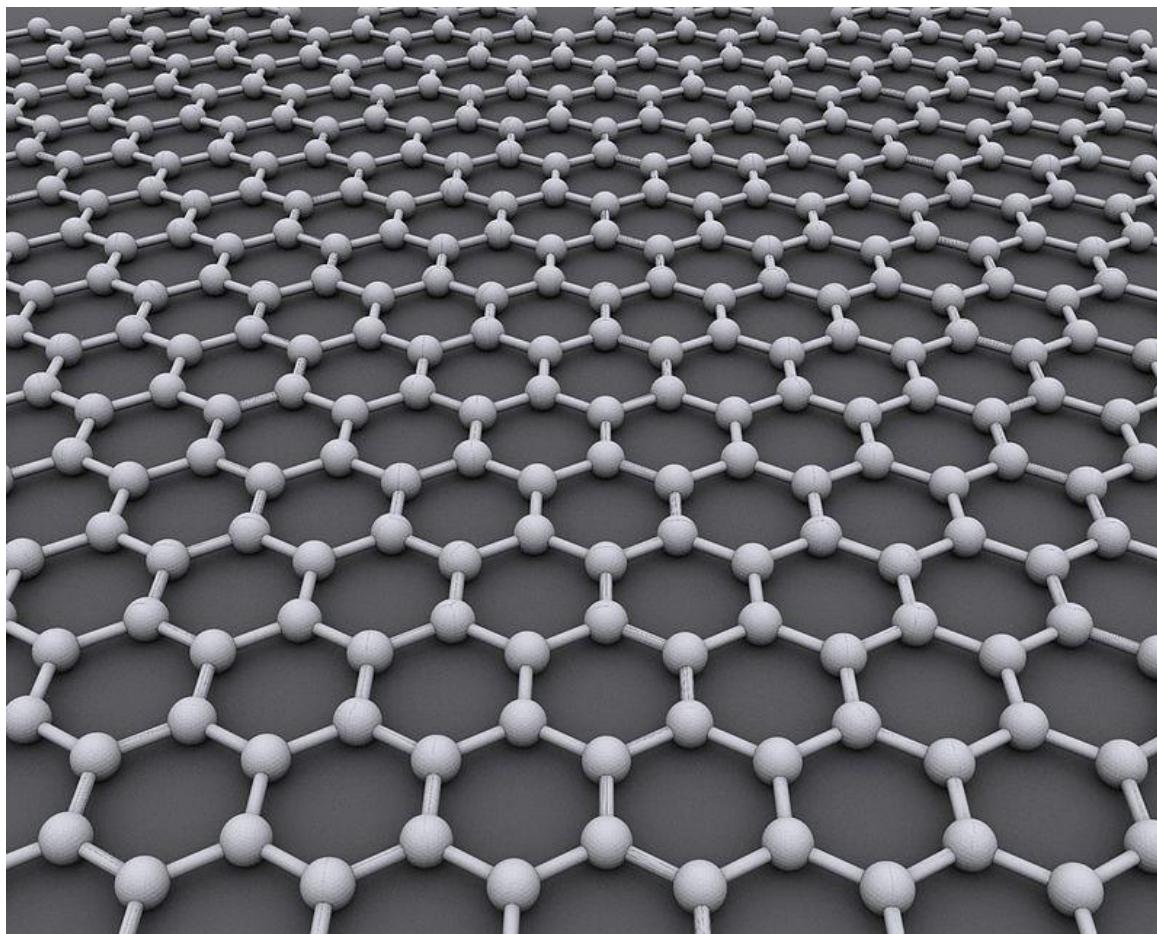
Решетку общего типа называют решеткой с базисом. Ее можно построить с помощью тех же трансляций, что и каждую из составляющих решеток Бравэ, только при этом надо транслировать не один узел, а несколько узлов - базис



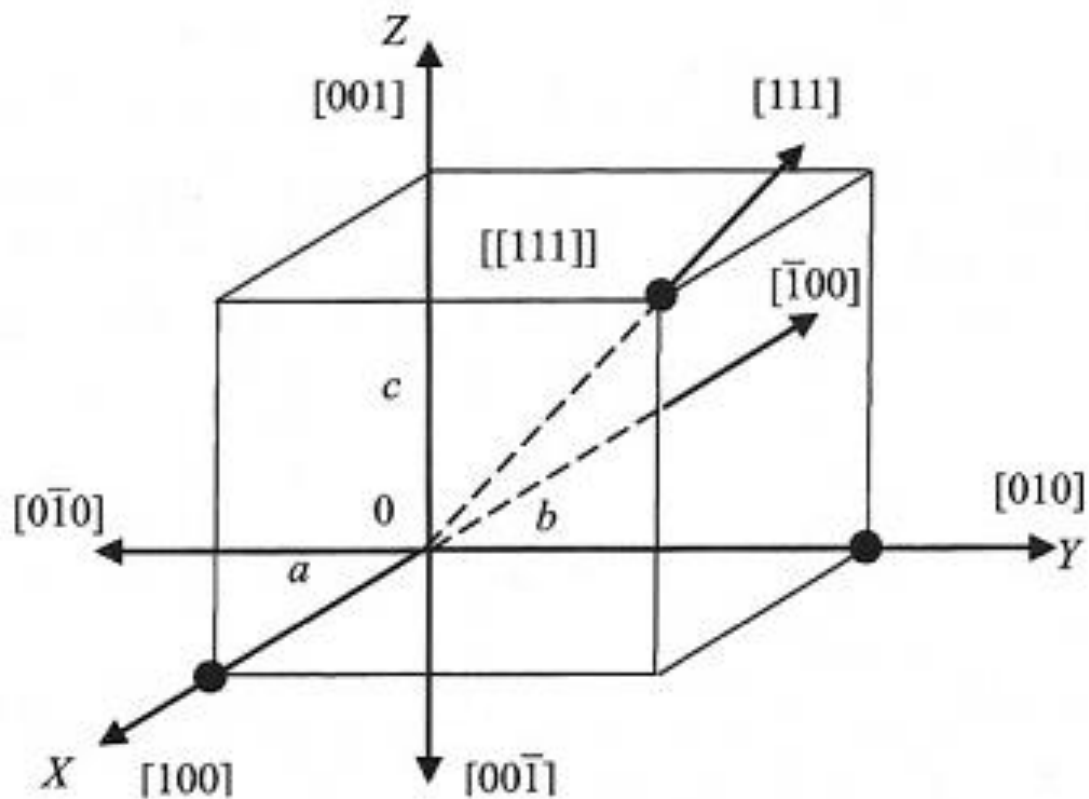
(Si, Ge)

(CsCl, CsBr, CsI, RbCl, AlCo, AgZn, BeCu, MgCe, RuAl, SrTi)

Графен

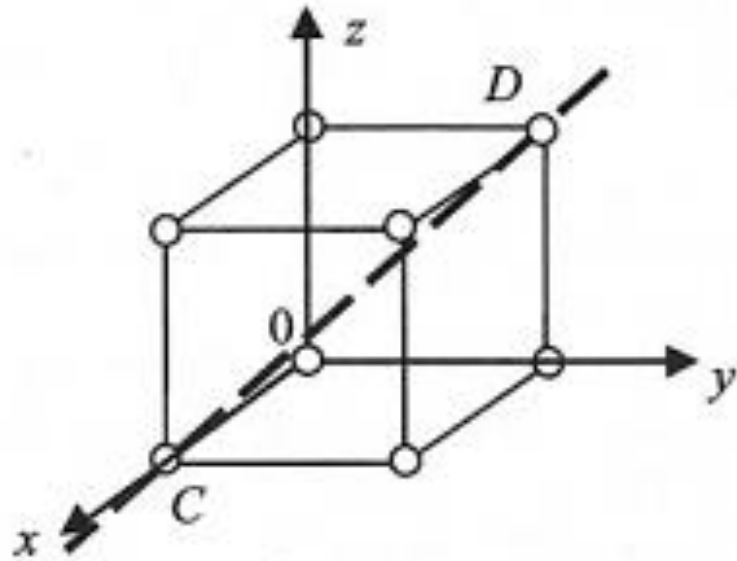
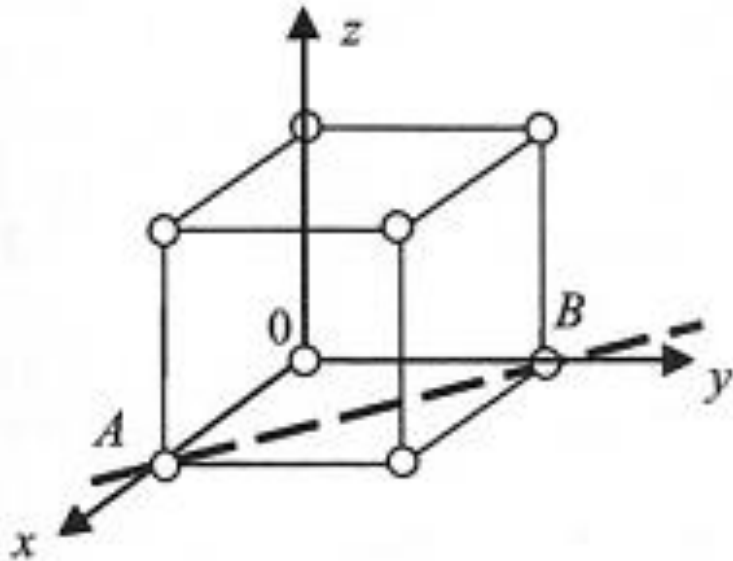


Обозначение узлов, направлений в кристалле Индексы Миллера



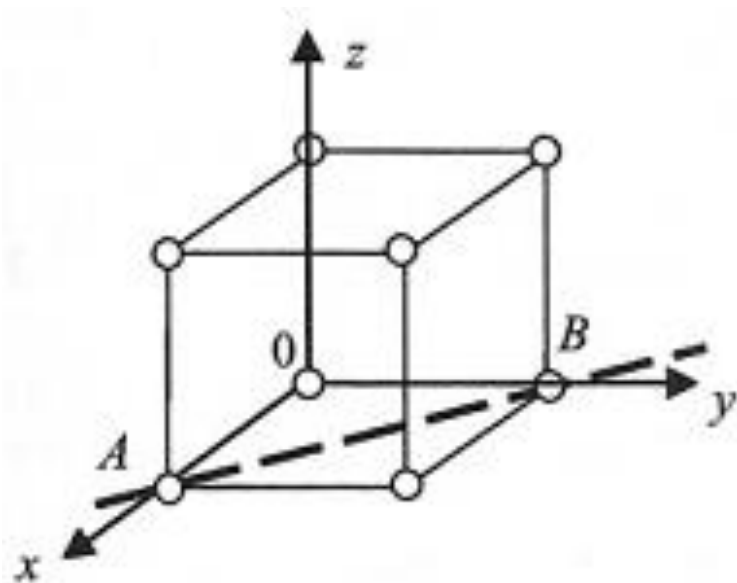
Обозначение узлов, направлений в кристалле Индексы Миллера

[???

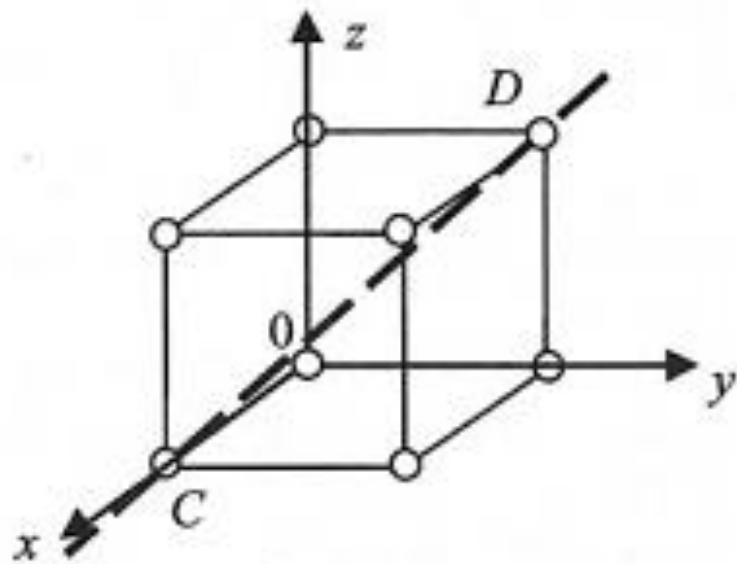


Обозначение узлов, направлений в кристалле Индексы Миллера

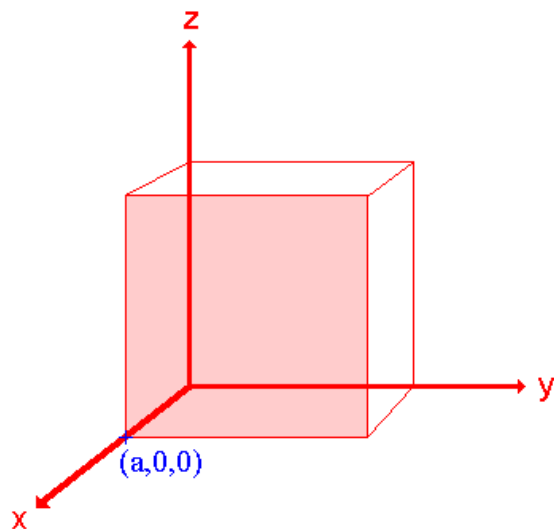
$[-110]$



$[-111]$



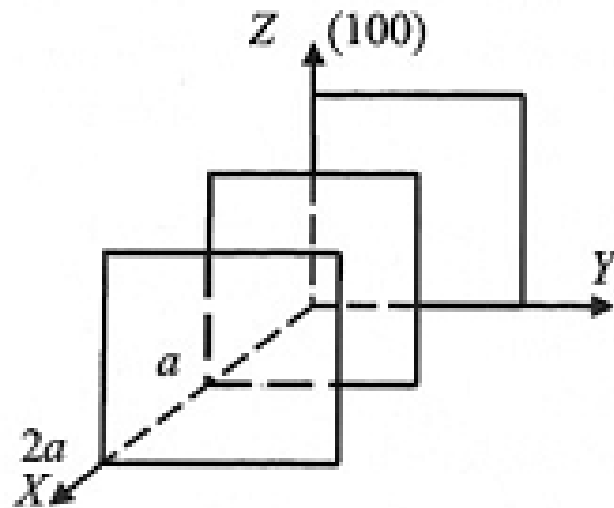
Обозначение плоскостей Индексы Миллера



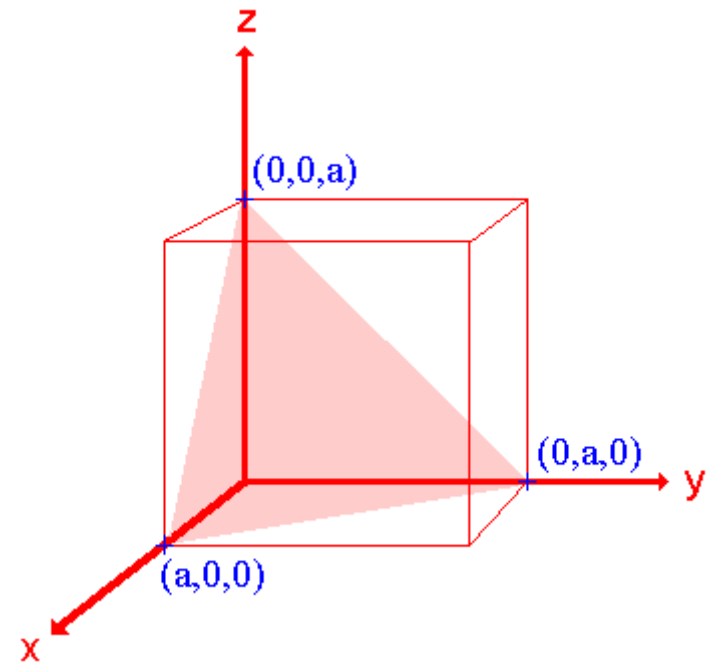
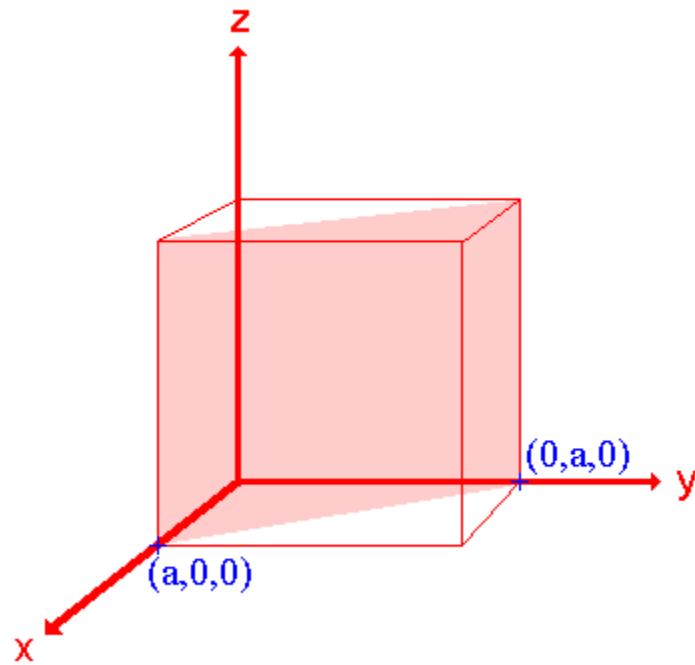
Осевые единицы: a, ∞, ∞

Обратные единицы: $a/a, a/\infty, a/\infty$
 $= 1, 0, 0$

Индексы Миллера: $(1\ 0\ 0)$

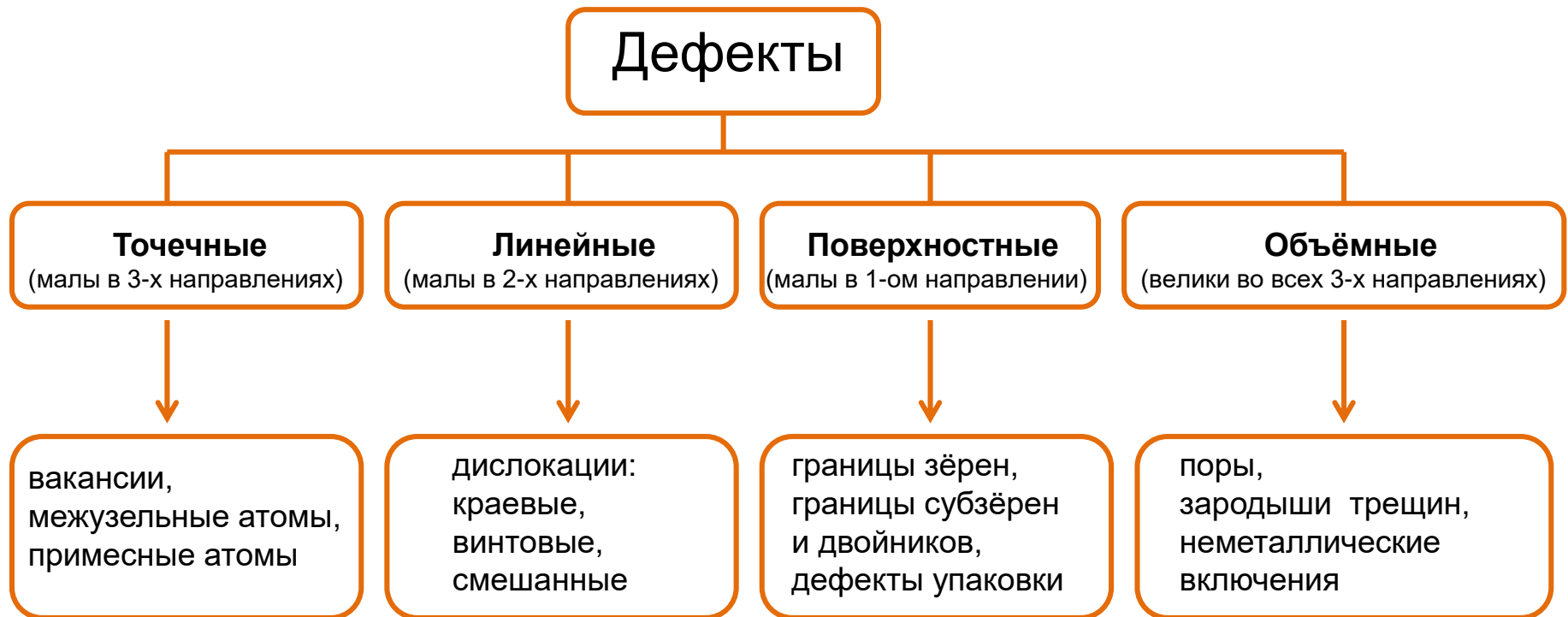


Обозначение плоскостей Индексы Миллера



Классификация дефектов кристаллического строения

Любое отклонение от периодической структуры кристалла называется дефектом



Причины образования дефектов

Дефекты в кристаллах образуются в процессе их роста, под влиянием

воздействий

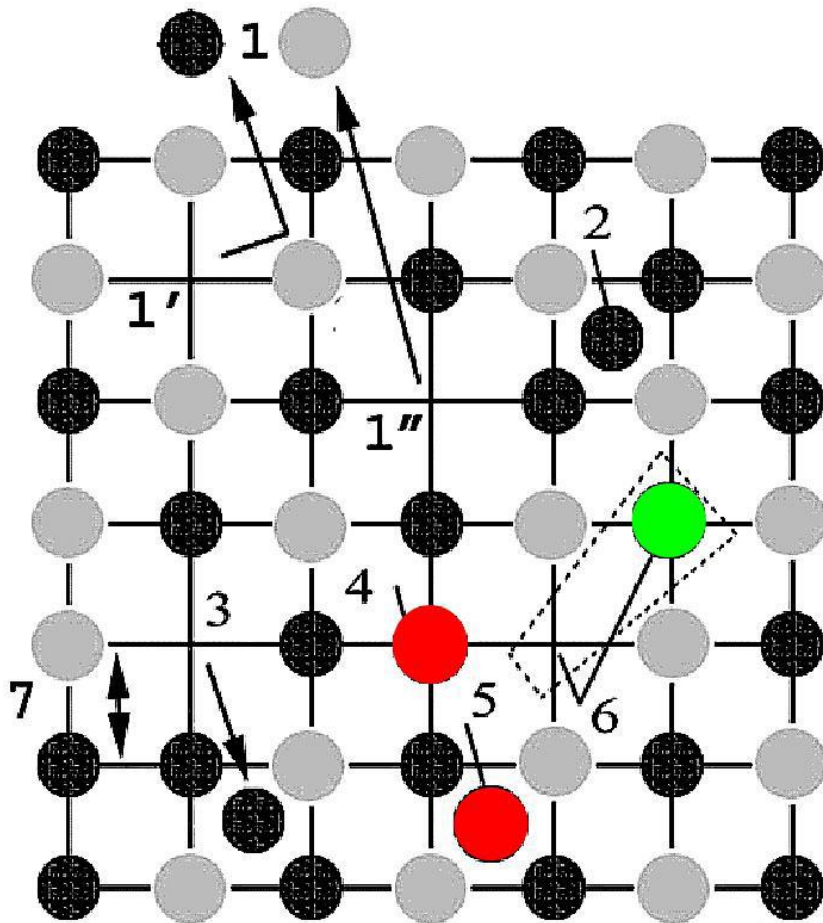
- тепловых,
- механических,
- электрических воздействий;

при облучении

- нейтронами,
- электронами,
- рентгеновскими лучами,
- ультрафиолетовым излучением (радиационные дефекты) и т.п.

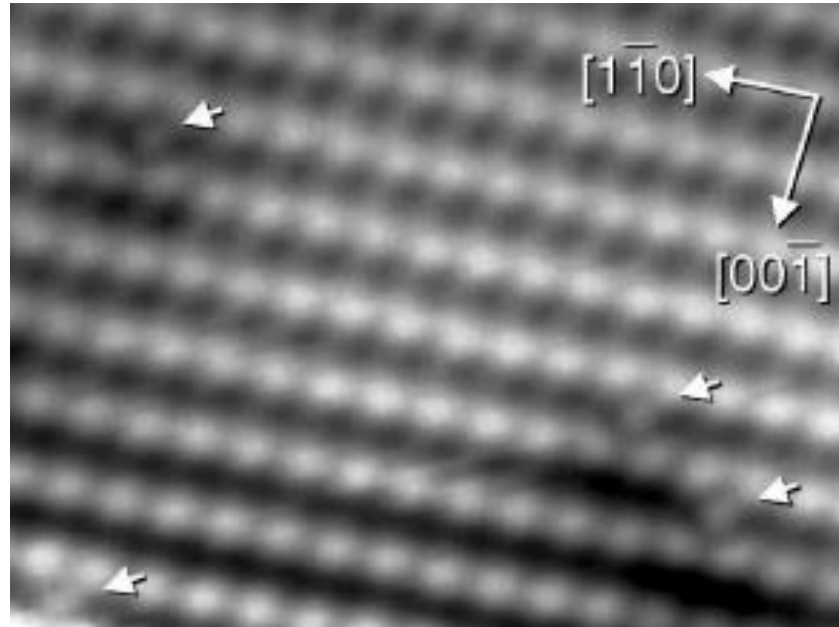
Точечные дефекты

Точечные дефекты - нарушение локализовано в пределах одного или нескольких узлов решетки



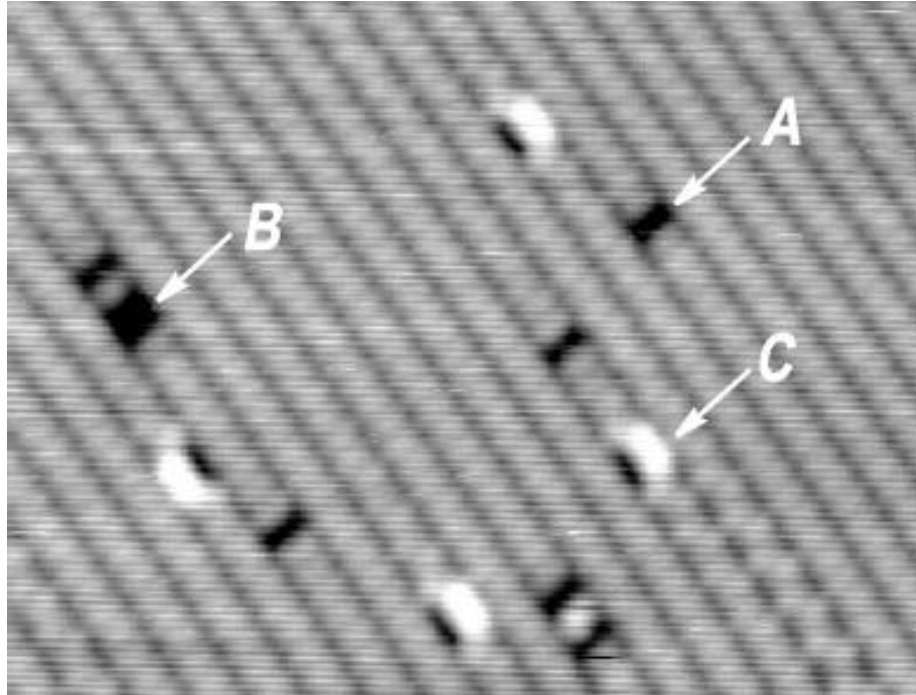
1 – дефект по Шоттки,
1', **1''** – вакансии,
2 – собственный
междоузельный атом,
3 – дефект по Френкелю,
4 – дефект замещения,
5 – дефект внедрения,
6 – гетеровалентное
замещение,
7 – антиструктурные
дефекты

Дефекты замещения на поверхности GaP(110)



СТМ изображение заполненных состояний участка $55 \times 45 \text{ \AA}^2$ сколотой поверхности кристалла GaP(110) n-типа с четырьмя дефектами замещения P_{Ga} (помечены стрелками).

Димерные вакансии на поверхности Si(100)2x1

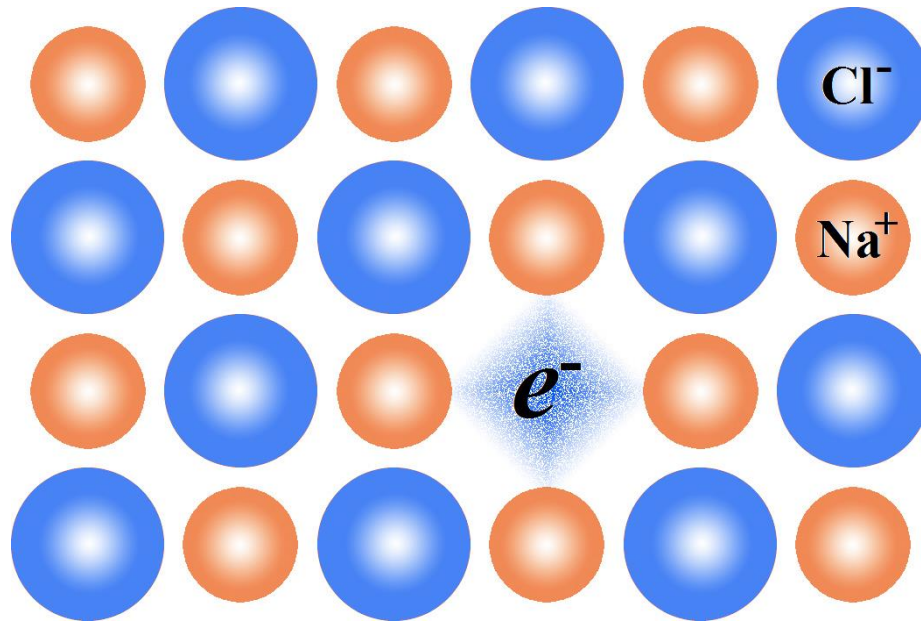


Изображение СТМ ($150 \times 110 \text{ \AA}^2$) заполненных состояний от участка поверхности Si(100)2x1 с димерными вакансиями. Дефекты обозначены как дефекты типа *A*, типа *B* и типа *C*.

Центры окраски

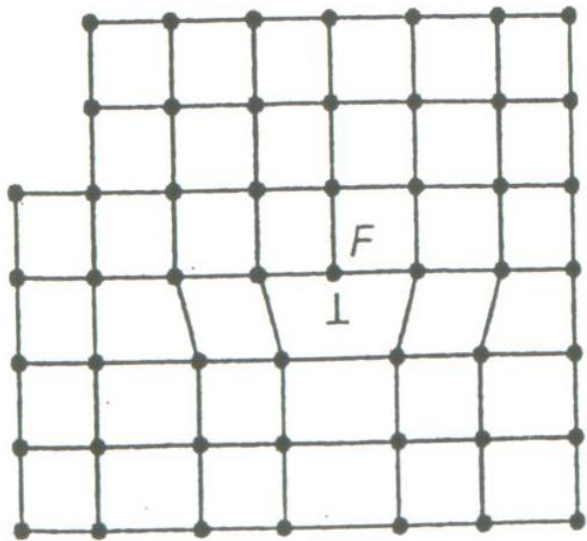
Цэнтры окраскі — точечные дефекты в прозрачных диэлектриках (кристаллах и стёклах), поглощающие оптическое излучение вне области собственного поглощения диэлектрика, то есть в той спектральной области, где поглощение бездефектного диэлектрика отсутствует и он вследствие этого прозрачен.

(F центр)

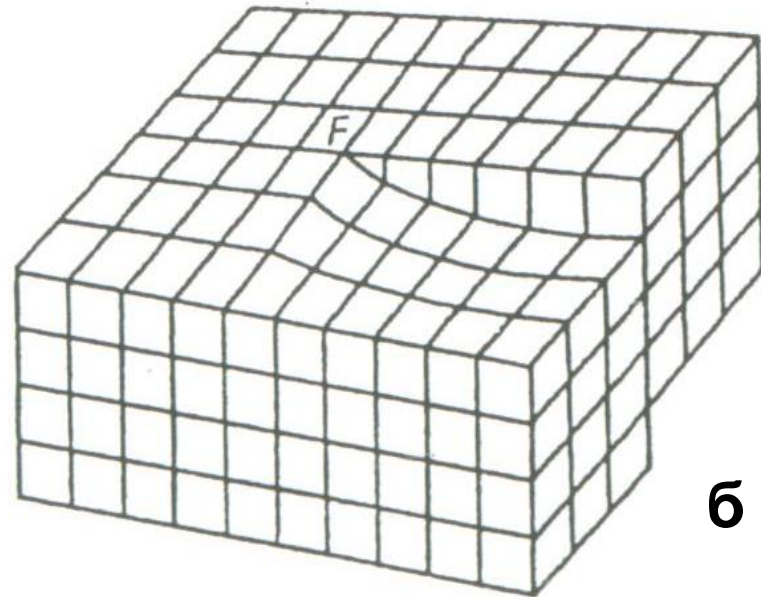


Дислокации

Дислокации – это дефекты кристаллической решётки, искажающие правильное расположение атомных плоскостей



а



б

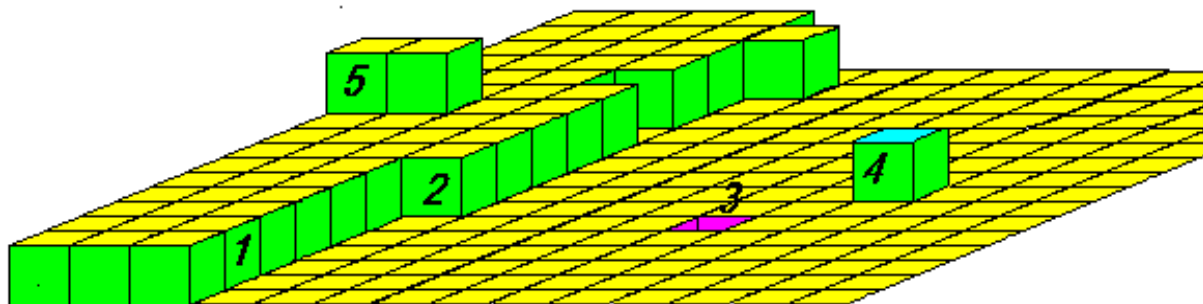
Схема образования краевой (а) и винтовой (б) дислокации

Плоские дефекты

Поверхности всех без исключения кристаллических твердых тел имеют упорядоченное расположение атомов практически до $T_{\text{плавл}}$

Реальная поверхность
не идеальна

Присутствуют дефекты в виде ступеней (1), изломов (2), имеются вакансии (3), атомы в адсорбированном состоянии (4), кластеры (5) и т.д.



Реконструкция

Реконструкция - изменение симметрии двумерной кристаллической решетки поверхности по отношению к соответствующей атомной плоскости внутри кристалла

Реконструкция

консервативная

неконсервативная

**Схематическая иллюстрация
возможных типов
реконструкций:**

а и **в** представляют консервативные реконструкции, то есть случаи, когда концентрация поверхностных атомов сохраняется;

б и **г** представляют неконсервативные реконструкции, то есть случаи, когда концентрация поверхностных атомов изменяется.

только
верхний слой

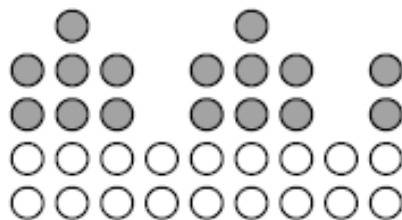
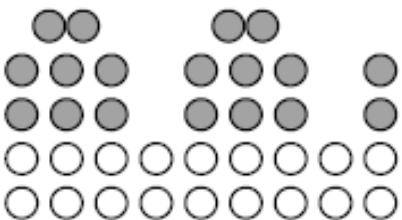
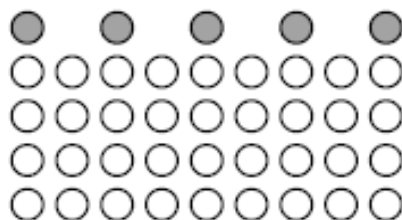
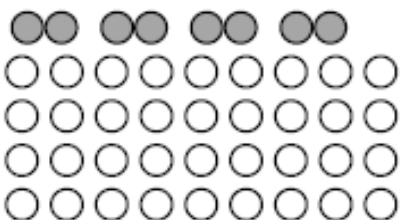
несколько
слоев

а

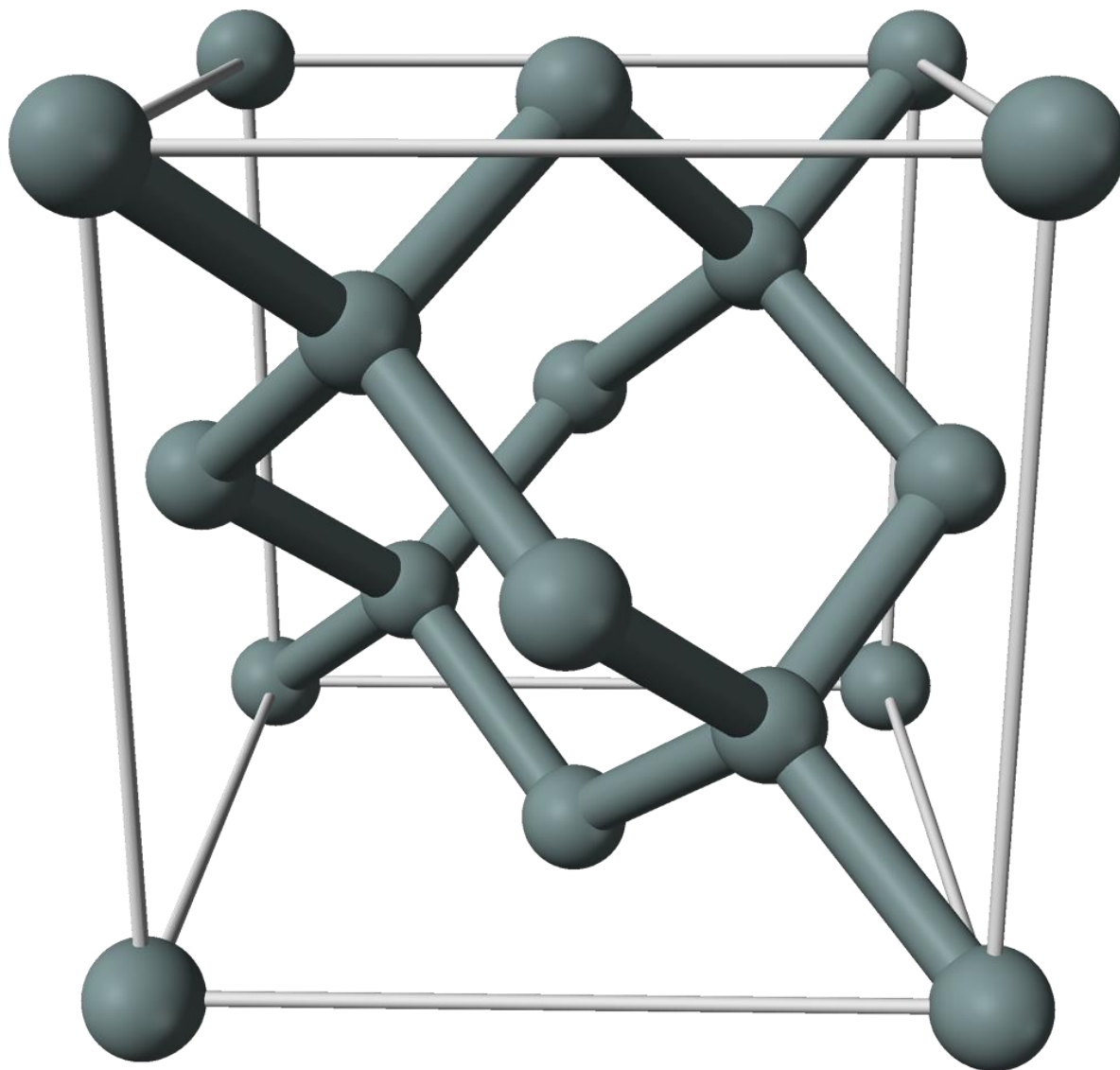
б

в

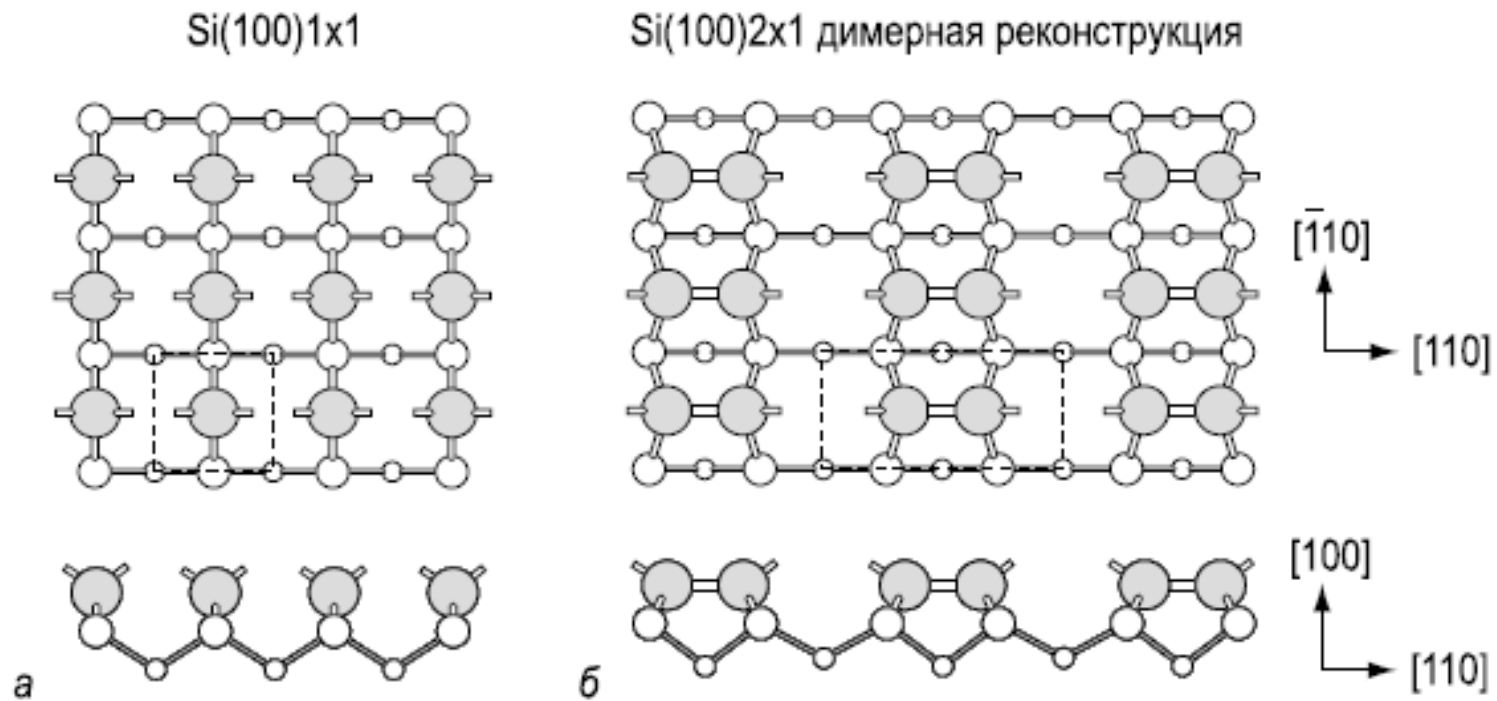
г



Структура алмаза



Поверхности элементарных полупроводников



Схематическая диаграмма, иллюстрирующая атомное строение, а - идеальной нереконструированной поверхности Si(100) 1x1; б - реконструированной (димеризованной) поверхности Si(100) 2x1. Атомы Si верхнего слоя закрашены, элементарные ячейки обведены штриховой линией.

Поверхности элементарных полупроводников

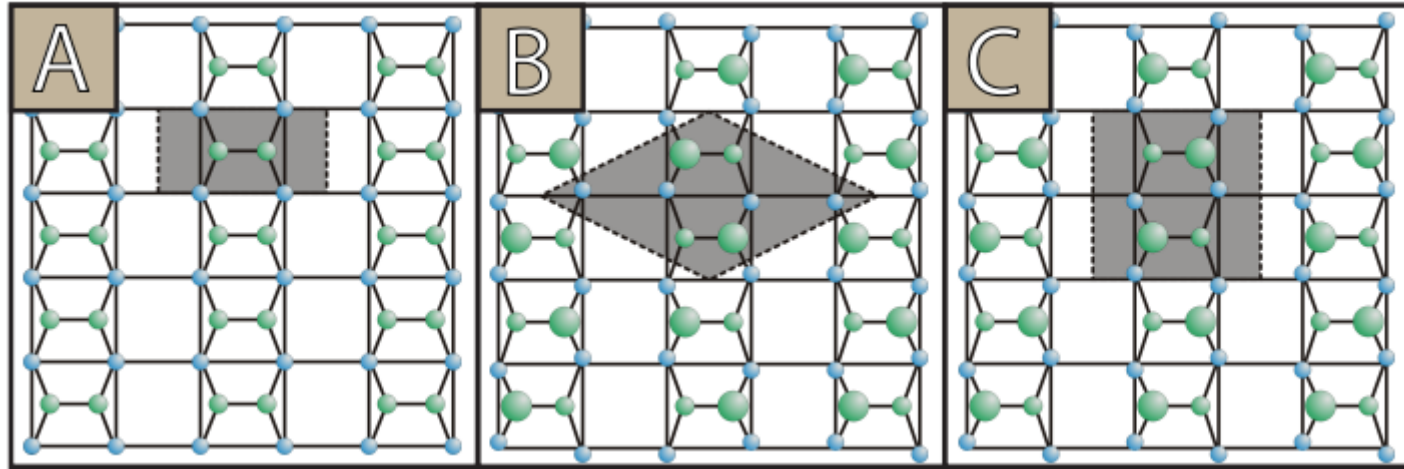


Figure 1.1: Ball and stick model of the different reconstructions that can be found on the Ge(001) surface. (A) the (2×1) reconstruction with symmetric dimers. (B) and (C) asymmetric buckled dimers form the c(4×2) and p(2×2) reconstructions respectively.

Energy differences for the (2 × 1) family of reconstructions of Ge(001) with respect to the (2 × 1) reconstruction

Reconstruction	eV/dimer Ref. [21]	eV/dimer Ref. [22]	eV/dimer Ref. [23]	eV/dimer Refs. [26,27]
(2 × 1)	0.000	0.000	0.000	0.000
c(4 × 2)	-0.050	-0.066	-0.088	$-1.95\chi^2$
p(2 × 2)		-0.069	-0.087	$-2.25\chi^2$
p(4 × 1)		0.035	0.029	$3.23\chi^2$

Поверхности элементарных полупроводников Ge(001)

