

## Лекция 1. Кристаллическая структура твердых тел

*Цель лекции:* познакомить студентов с основами кристаллографии: разъяснить понятия кристаллическая решетка, основные решетки Браве, индексы Миллера и другие, которые будут использоваться в курсе для объяснения и расчета конкретных приборов микроэлектроники. Уделить внимание основам кристаллофизики, как фундаментальной науки в понимании связи физических свойств кристаллов и других анизотропных материалов с симметрией их структуры и изменение этих свойств под влиянием внешних воздействий.

*План лекции:*

- 2.1. Строение кристаллов
- 2.2. Решетки Браве
- 2.3. Индексы Миллера
- 2.4. Симметрия кристаллических решеток
- 2.5. Анизотропия кристаллов

### 2.1. Строение кристаллов

Твердые тела практически все относятся к кристаллам. Хотя есть и исключения: к примеру, стекла и пластмассы. Такие твердые тела называют аморфными. Их частицы расположены в беспорядке, как в жидкости.

Идеальный кристалл можно представить как периодически повторяющиеся в пространстве одинаковые элементарные структурные единицы – элементарные ячейки кристалла. Элементарная ячейка в общем случае имеет форму косоугольного параллелепипеда. Все расположенные в ней атомы принято называть базисом элементарной ячейки кристалла. Отметим отличие терминов кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Кристаллическая решетка – это математическая абстракция – регулярное расположение точек в пространстве. Тогда как кристаллическая структура или просто кристалл – это физический объект, в котором с каждой точкой решетки связан базис – группа атомов или молекул.

Закономерности строения элементарной ячейки и базиса, в частности степень их симметричности, определяет многие свойства кристалла, в первую очередь электрические, магнитные и механические.

На рис. 1 изображена элементарная ячейка  $\alpha$ -железа. Она представляет собой куб, в углах и в центре которого расположены атомы железа. Решетку, образованную данной элементарной ячейкой, принято называть объемно-центрированной кубической (ОЦК).

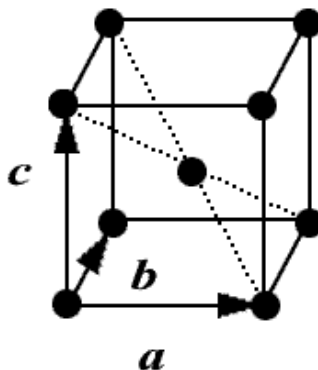


Рис. 1. Элементарная ячейка ОЦК решетки

Кристаллическую решетку определяют три базисных вектора  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  и  $\vec{c}$  (рис. 1) таких, что любая трансляция на вектор

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad (1)$$

переводит кристаллическую решетку саму в себя ( $n_1$ ,  $n_2$  и  $n_3$  – целые числа). Вектор  $\vec{T}$  называют вектором трансляции. Таким образом, всю структуру кристалла можно получить трансляцией элементарной ячейки, осуществляя параллельные переносы на векторы  $\vec{T}$ .

## 2.2. Решетки Браве

С помощью теории групп было показано, что все многообразие кристаллов может быть описано с помощью 14 типов кристаллических решеток (решеток Браве), изображенных на рис. 3. Их принято группировать в семь систем, различающихся видом элементарной ячейки: триклинную, моноклинную, ромбическую, тетрагональную, тригональную, гексагональную и кубическую.

Каждая система имеет свои соотношения между сторонами элементарной ячейки  $a$ ,  $b$  и  $c$  и кристаллографическими углами  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  (см. рис. 2).

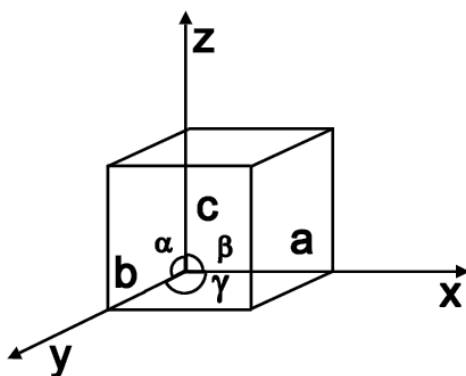


Рис. 2. Кристаллографические оси координат и углы между ними

Соотношения между величинами  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  для разных кристаллографических систем представлены в табл. 1.

Таблица 1

Соотношение между сторонами и кристаллографическими углами  
для основных решеток Браве

| Кристаллографическая система | Соотношение между сторонами элементарной ячейки | Соотношение между кристаллографическими углами       |
|------------------------------|-------------------------------------------------|------------------------------------------------------|
| Триклинная                   | $a \neq b \neq c$                               | $\alpha \neq \beta \neq \gamma$                      |
| Моноклинная                  | $a \neq b \neq c$                               | $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$              |
| Ромбическая                  | $a \neq b \neq c$                               | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                 |
| Тетрагональная               | $a = b \neq c$                                  | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                 |
| Кубическая                   | $a = b = c$                                     | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                 |
| Тригональная                 | $a = b = c$                                     | $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$ |
| Гексагональная               | $a = b \neq c$                                  | $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$      |

Некоторые из решеток Браве имеют разновидности: примитивная –  $P$ , объемноцентрированная (ОЦ) –  $I$ , гранецентрированная (ГЦ) –  $F$  и с одной парой центрированных противоположных граней –  $C$ .

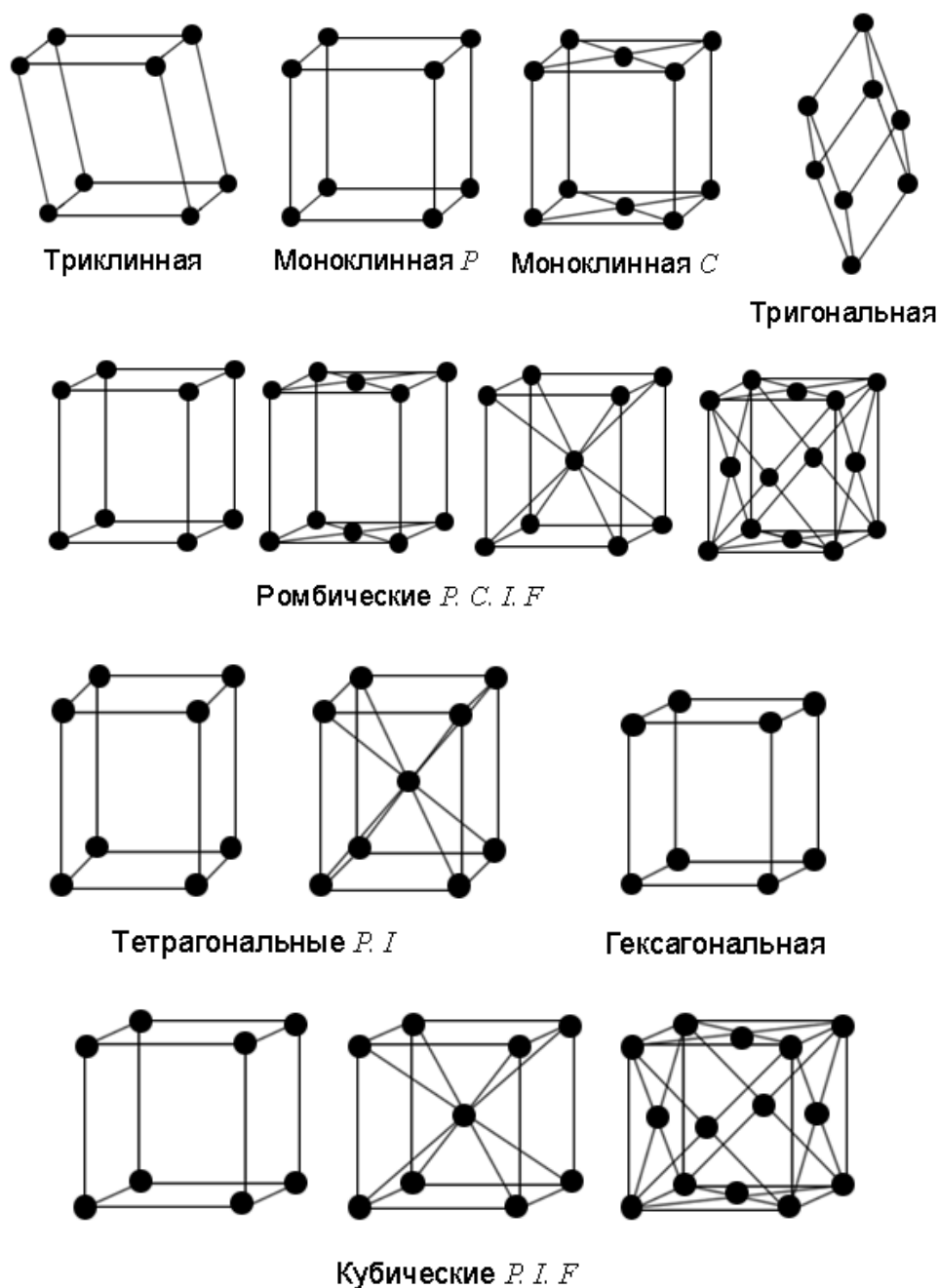


Рис. 3. Решетки Браве

В триклинной системе как все углы не равны друг другу, так и все длины сторон не равны друг другу. В моноклинной системе ячейка имеет форму прямой призмы с ребрами разной длины. Ячейка может быть с центрированными основаниями прямой призмы  $C$  и примитивной  $P$ . В ромбической системе ячейка имеет форму прямоугольного параллелепипеда с ребрами разной длины. Ячейка имеет все 4 разновидности:  $P, I, F, C$ . В

тригональной системе ячейку принято выбирать в виде ромбоэдра, все грани которого – одинаковые ромбы с углом при вершине  $\neq 90^\circ$ . В тетрагональной системе ячейка имеет форму прямоугольного параллелепипеда с квадратным основанием. Ячейка может быть примитивной  $P$  и ОЦ  $I$ . В кубической системе ячейка имеет форму куба. Ячейка может быть с центрированными гранями куба (ГЦК – гранецентрированный куб) или центром (ОЦК – объемноцентрированный куб). В гексагональной системе ячейка имеет форму прямой призмы с ромбом в основании, причем угол в ромбе равен  $60$  градусам. Часто рассматривают утроенную ячейку (см. рис. 4), имеющую вид правильной шестигранной призмы.

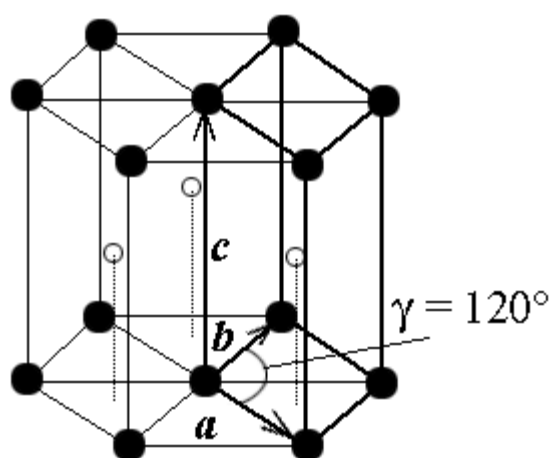


Рис. 4. Элементарная ячейка гексагональной решетки

Решетку, представленную на рис. 4, называют также плотнейшей гексагональной. Чтобы яснее представить себе расположение атомов в этой решетке, возьмем бильiardные шары и начнем укладывать их как можно плотнее. Прежде всего, составим первый слой – он выглядит так, как бильiardные шары, собранные треугольником перед началом игры. Отметим, что шар внутри треугольника имеет шесть соседей и эти соседи образуют шестиугольник (слой  $A$  на рис. 5). Продолжим укладку наложением слоев друг на друга. Если поместить шары следующего слоя непосредственно над шарами первого слоя, то такая упаковка была бы неплотной. Стараясь разместить в определенном объеме наибольшее число шаров, мы должны положить шары второго слоя в лунки первого (слой  $B$  на рис. 5), а третьего – в лунки второго и т.д. В гексагональной плотнейшей упаковке шары третьего слоя размещены так, что центры этих шаров лежат над центрами шаров первого слоя.

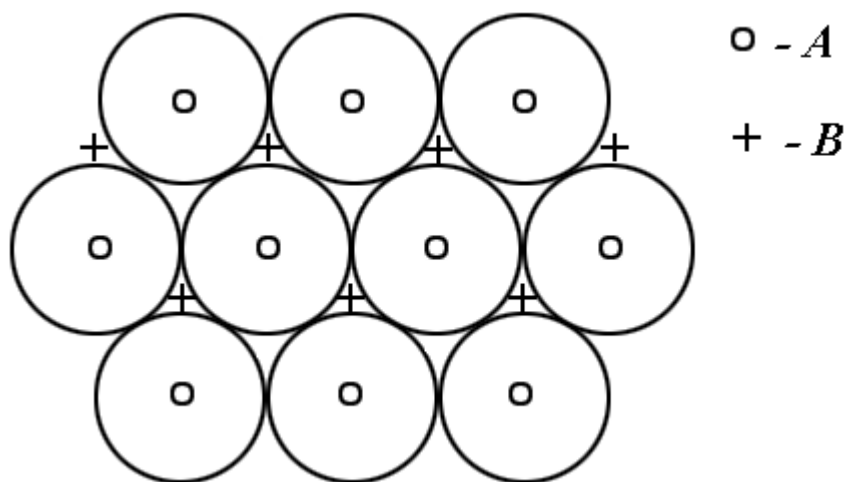


Рис. 5. Вариант расположения атомов в плотноупакованных структурах

*Задание:* предложить еще вариант плотнейшей упаковки шаров.

Наиболее распространены три типа решеток: объемноцентрированная кубическая (ОЦК), гранецентрированная кубическая (ГЦК) и гексагональная с плотнейшей упаковкой (ГПУ). Такие решетки имеют многие простые вещества: ОЦК – Li, Na, K, Cr, Mo; ГЦК – Ca, Al, Cu, Au; ГПУ – Be, Co, Zn.

### 2.3. Индексы Миллера

Из курса геометрии известно, что положение и ориентация плоскостей определяется заданием координат трех точек, не лежащих на одной прямой. Например, если эти точки (в качестве которых могут выступать атомы кристаллических плоскостей) имеют координаты (300), (010), (002) в единицах постоянной решетки, то плоскость может быть охарактеризована тремя числами 3, 1, 2. Но обычно в кристаллографии для описания расположения плоскости в пространстве применяются так называемые индексы Миллера. Для их нахождения нужно проделать следующие операции. Вначале найдем точки, в которых искомая плоскость пересекает кристаллографические оси, и координаты этих точек выразим в единицах постоянной решетки. В примере, указанном на рис. 6 это 3, 1 и 2. Теперь возьмем обратные значения полученных чисел – это  $1/3$ ,  $1$ ,  $1/2$  и приведем их к общему знаменателю, в нашем случае это цифра 6, то есть соответственно  $2/6$ ,  $6/6$ ,  $3/6$ . Числа, полученные в числителе дроби, после указанных преобразований и будут индексами Миллера. Их изображают в круглых скобках, для плоскости, изображенной на рис. 6,

индексы Миллера выглядят так: (263). Если индекс Миллера принимает отрицательное значение, то его изображают цифрой с верхним подчеркиванием, например  $(\bar{2}31)$ . Когда плоскость параллельна оси координат, то соответствующий индекс Миллера равен нулю.

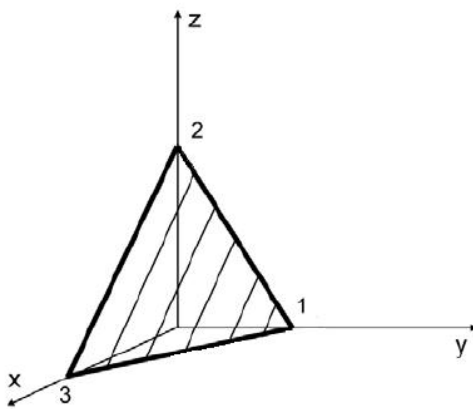


Рис. 6. Кристаллографическая плоскость с индексами Миллера (263)

В отличие от плоскостей, направления в кристаллах обозначаются в квадратных скобках  $[hkl]$ , причем для кубической решетки направление  $[hkl]$  всегда перпендикулярно плоскости  $(hkl)$ .

На рис. 7 изображены основные плоскости для куба.

*Задание:* определить индексы Миллера для этих плоскостей.

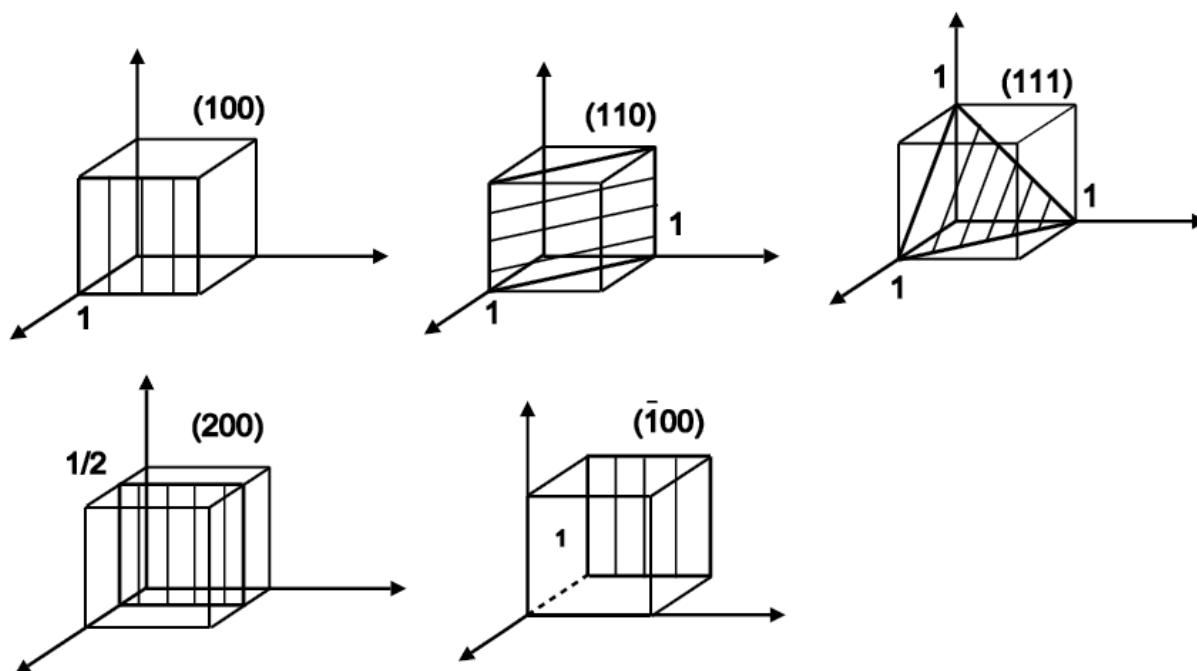


Рис. 7. Примеры индексов Миллера для ряда плоскостей с кубической решеткой

*Задание:* в кубической решетке построить кристаллографические плоскости с индексами Миллера (321) и (210).

## 2.4. Симметрия кристаллических решеток

Следует также сказать несколько слов о преобразованиях симметрии, то есть таких операциях с твердым телом, после совершения которых, тело переходит само в себя. Выше уже было рассмотрено одно преобразование симметрии – трансляция, то есть перемещение на вектор  $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$  всего кристалла (по определению векторов элементарных трансляций перемещение кристалла на такой вектор переместит его в себя). Кроме того, существуют операции симметрии: вращение, зеркальное отражение, центр симметрии (называемые точечными операциями симметрии).

Познакомимся с ними подробнее. Проведем ось через произвольный узел кристаллической решетки. В результате вращения относительно этой оси на определенные углы кристаллическая решетка может быть приведена в самосовмещение. Причем, в кристаллических структурах эти углы не могут быть произвольными, как в случае стереометрических фигур, а имеют ограниченное число значений:  $2\pi$ ,  $2\pi/2$ ,  $2\pi/3$ ,  $2\pi/4$ ,  $2\pi/6$ . Соответствующие оси носят название осей первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков. В курсе кристаллографии доказывается, что не существует кристаллических решеток с осями пятого, седьмого или большего порядков. Например, квадрат имеет ось вращения четвертого порядка.

Операция отражения представляет собой обычное отражение относительно зеркальной плоскости (аналогично тому, что видно в зеркале при поднесении к нему какого либо предмета), при этом твердое тело делится зеркальной плоскостью пополам.

Центр симметрии или центр инверсии – особая точка внутри фигуры, при отражении в которой фигура совмещается сама с собой, то есть операция инверсии состоит в отражении в точке, фигура после отражения получается перевернутой и обращенной.

Кроме простых поворотных осей в кристаллах встречаются сложные оси симметрии – инверсионные. При инверсионной оси кристалл совмещается сам с собой при повороте вокруг некоторой оси и его последующем отражении в центре тяжести кристалла как в центре симметрии.



На рис. 8 изображены некоторые элементы симметрии куба: а) 3 плоскости симметрии, перпендикулярные ребрам куба; б, в) 4 из 6 плоскостей симметрии, перпендикулярные диагоналям граней куба; г) 2 из 6 осей симметрии 2-го порядка, параллельные диагоналям граней куба, проходящие через середины противоположных ребер; д) 3 оси симметрии 4-го порядка, перпендикулярные граням куба и проходящие через их центры; е) 4 оси симметрии 3-го порядка, параллельные диагоналям куба, проходящие через его вершины.

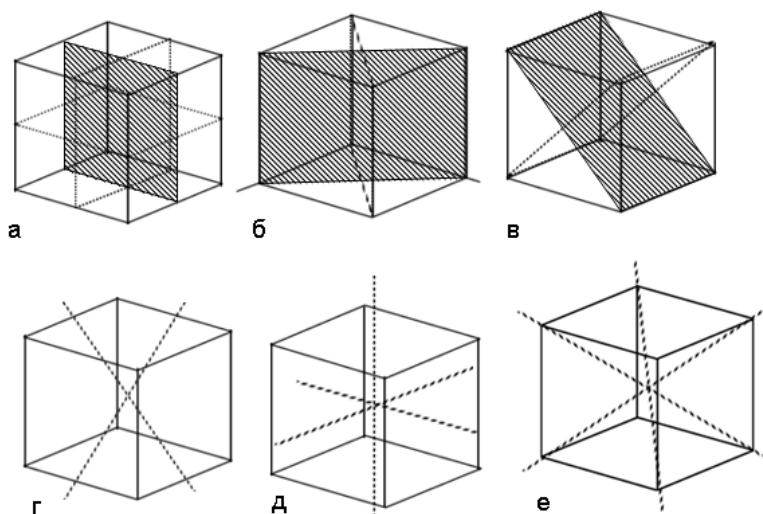


Рис. 8. Элементы симметрии куба

Таким образом, кубическая решетка имеет три плоскости симметрии, параллельные граням, шесть диагональных плоскостей симметрии, перпендикулярных диагоналям граней, три оси четвертого порядка, шесть осей второго порядка, четыре оси третьего порядка и центр симметрии в центре куба.

*Задание:* определить элементы симметрии решеток Браве.

## 2.5. Анизотропия кристаллов

Некоторые макроскопические физические свойства кристаллов не зависят от направления, то есть являются скалярными величинами и кристалл можно рассматривать как однородную среду. Пример таких свойств: плотность вещества, удельная теплоемкость.

В то же время другие свойства существенно зависят от направления и являются в общем случае тензорными величинами, причем, различного ранга. Для одних и тех же кристаллов возможны различные типы физических свойств: от скаляра до тензора 4-ранга. Каковы же закономерности связи физических свойств кристалла с типом его кристаллической решетки (и в частности, его симметрией) и есть ли такая связь вообще. Изучением таких обобщенных свойств занимается наука кристаллофизика.

Оказалось, что физические свойства и симметрия кристалла взаимосвязаны. Симметрия решетки определяет анизотропию (различные значения по различным направлениям) физических свойств. Анизотропия некоторых физических свойств может быть предсказана по виду элементарной ячейки. Например, для ромбической, моноклинной и триклинной решеток, обладающих сравнительно малым числом элементов симметрии, наблюдается анизотропия многих характеристик, например относительной электрической проницаемости, коэффициента теплопроводности. Эти характеристики веществ обычно описывают тензорами второго ранга. В случае симметричной кубической решетки эти величины могут превратиться в скалярные; для тетрагональной или гексагональной решетки свойства кристалла могут оказаться одинаковыми в плоскости, перпендикулярной ребру  $c$ .