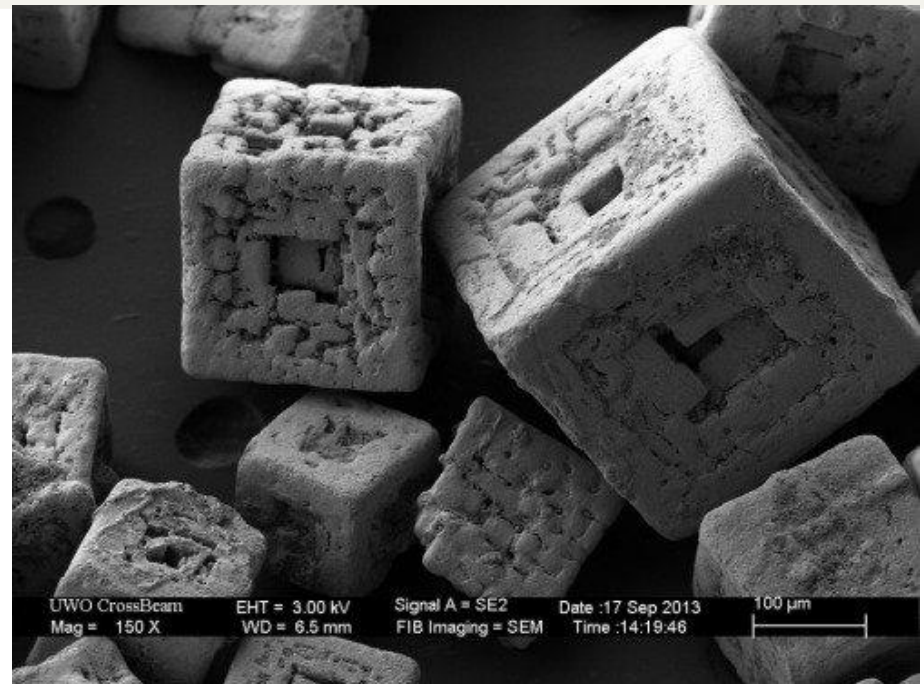


# Кристаллы

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

# Кристаллы



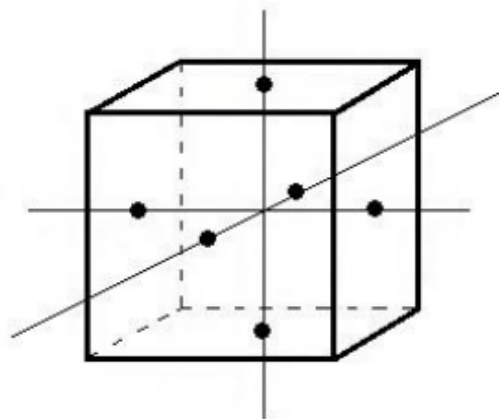
**Симметрия** - способность твердого тела совмещаться с самим собой в результате его движения или воображаемых операций над его точками.

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

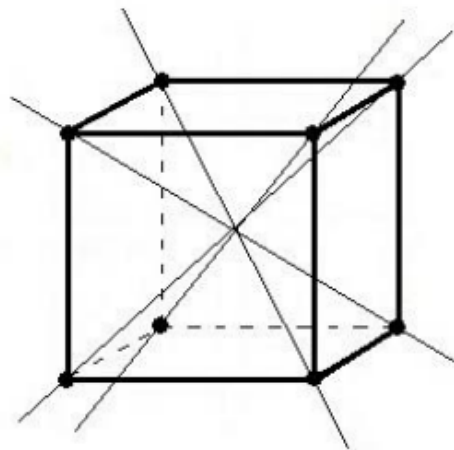
# Элементы симметрии

- **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

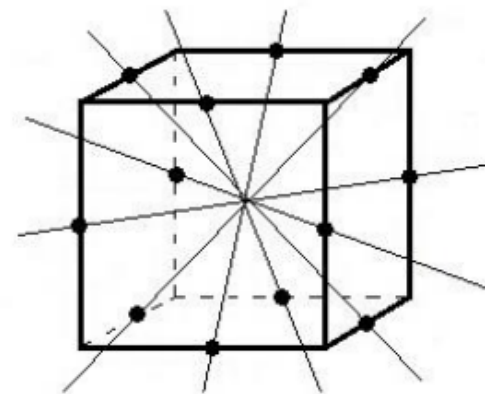
# Элементы симметрии



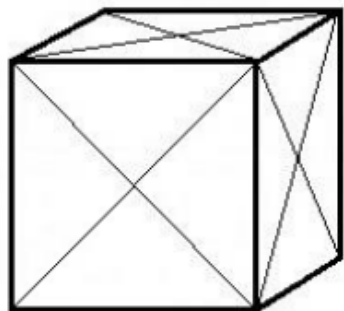
**Оси 4-ого порядка**



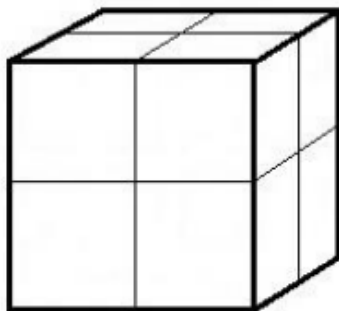
**Оси 3-его порядка**



**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.

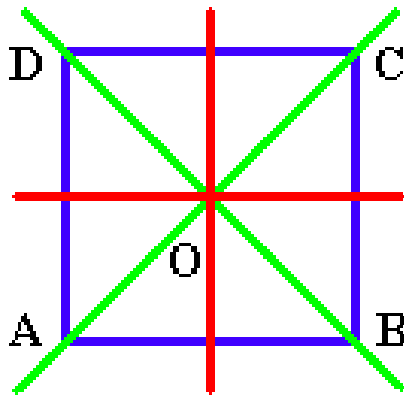
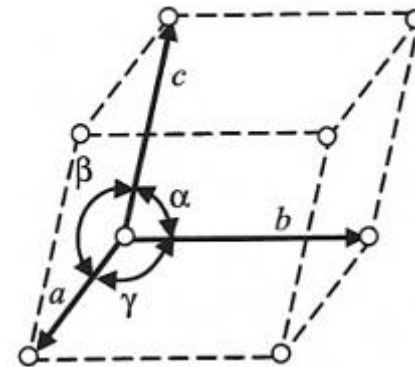
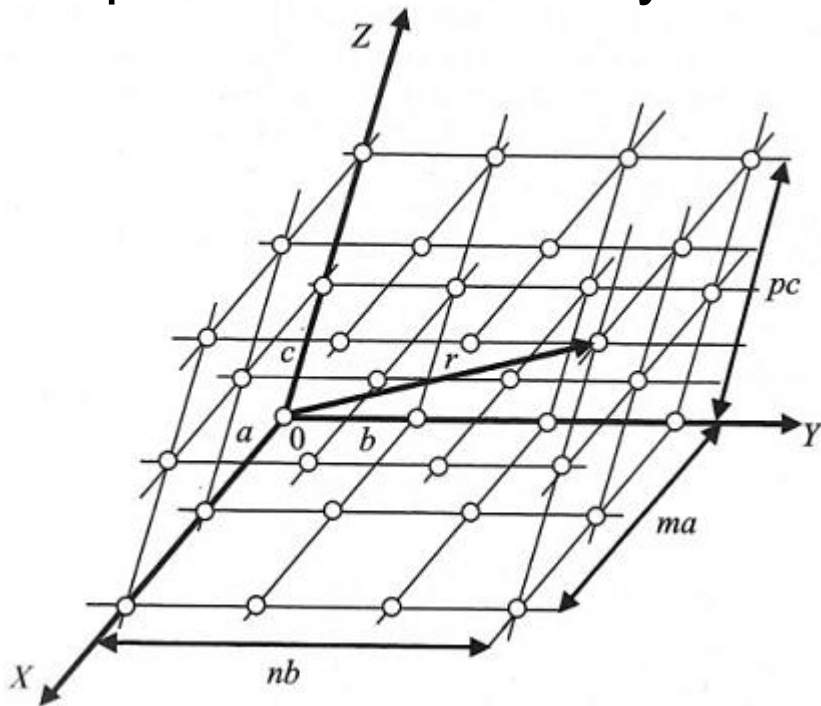


Рис. 1

$E$	$C_{4z}^+$	$C_{2z}$	$C_{4z}^3$	$\sigma_x$	$\sigma_y$	$\sigma_v$	$\sigma_{v'}$
$C_{4z}$	$C_{2z}$	$C_{4z}^3$	$E$	$\sigma_v$	$\sigma_{v'}$	$\sigma_y$	$\sigma_x$
$C_{2z}$	$C_{4z}^3$	$E$	$C_{4z}$	$\sigma_y$	$\sigma_x$	$\sigma_{v'}$	$\sigma_v$
$C_{4z}^3$	$E$	$C_{4z}$	$C_{2z}$	$\sigma_{v'}$	$\sigma_v$	$\sigma_x$	$\sigma_y$
$\sigma_x$	$\sigma_{v'}$	$\sigma_y$	$\sigma_v$	$E$	$C_{2z}$	$C_{4z}^3$	$C_{4z}$
$\sigma_y$	$\sigma_v$	$\sigma_x$	$\sigma_{v'}$	$C_{2z}$	$E$	$C_{4z}$	$C_{4z}^3$
$\sigma_v$	$\sigma_x$	$\sigma_{v'}$	$\sigma_y$	$C_{4z}$	$C_{4z}^3$	$E$	$C_{2z}$
$\sigma_{v'}$	$\sigma_y$	$\sigma_v$	$\sigma_x$	$C_{4z}^3$	$C_{4z}$	$C_{2z}$	$E$

# Трансляция

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

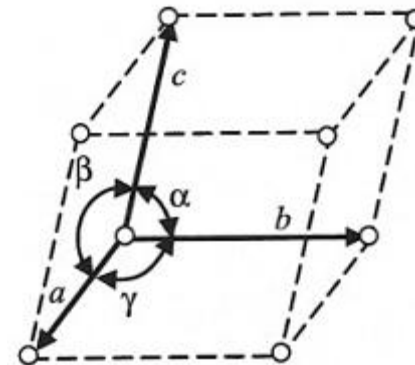
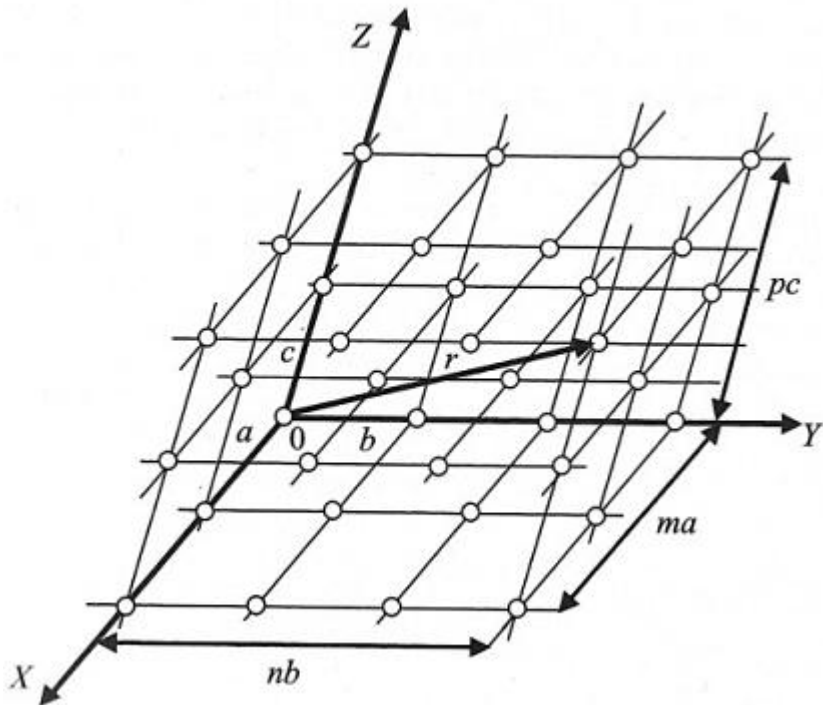


- **Элементарная ячейка** — это любая ячейка, обладающая тем свойством, что применение к ней операции трансляции заполнит все пространство.

# Трансляция

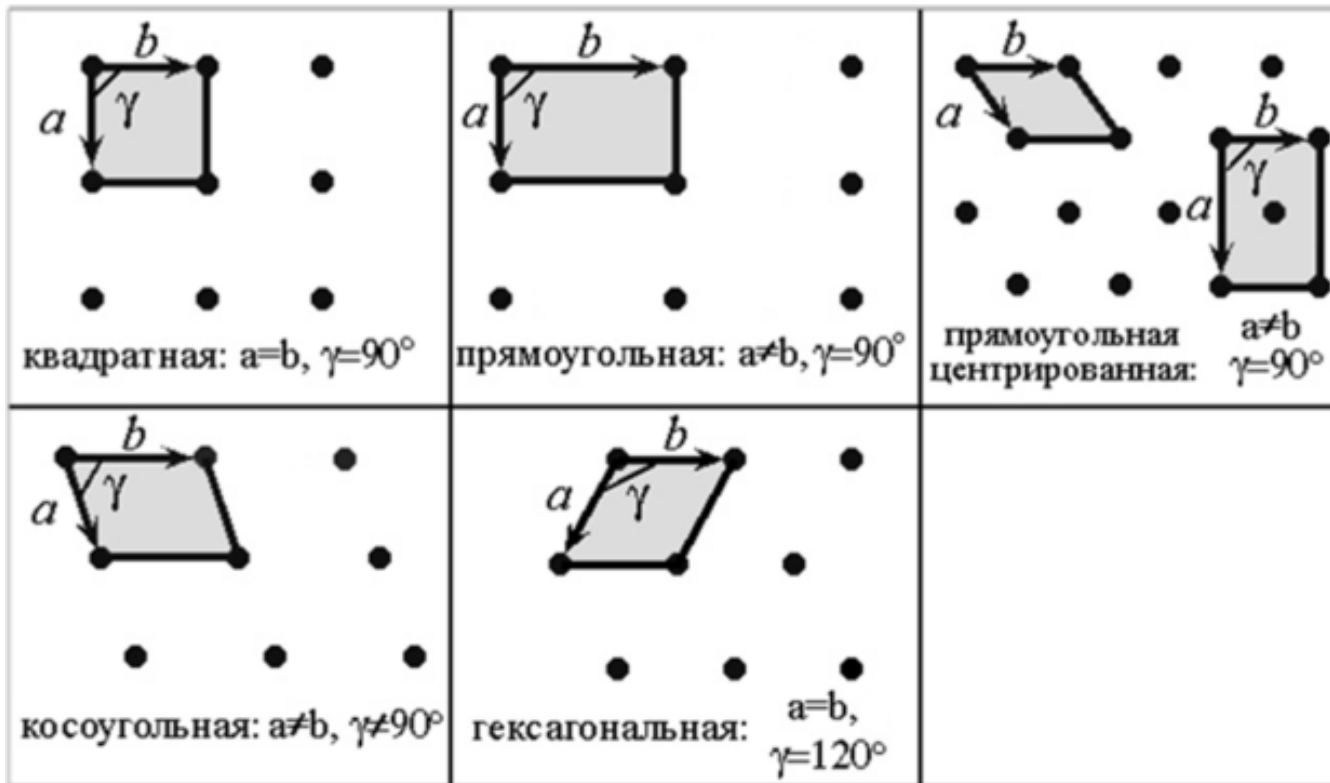
**Идеальный кристалл** – тело, состоящее из атомов, расположенных в пространственной решетке, так что существует три вектора элементарных смещений **a**, **b**, **c** обладающих тем свойством, что атомное расположение имеет одинаковый вид как и при рассмотрении его из некоторой произвольной точки **r**,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

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

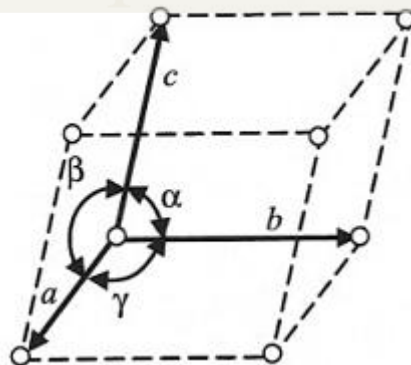


# Решетка Бравэ (2D)

- **Примитивная ячейка** — это любая элементарная ячейка наименьшего объема. Решетка, составленная из примитивных ячеек, называется решёткой Бравэ.

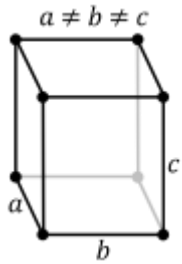


# Классификация решёток по симметрии (Сингонии решёток Бравэ)

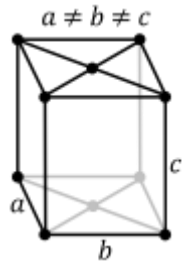


Триклинная	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Моноклинная	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ромбическая или ортогональная	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тетрагональная	$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригональная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

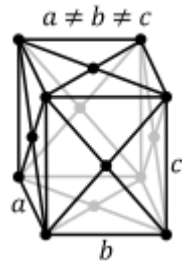
# Типы центрировок решёток Браве



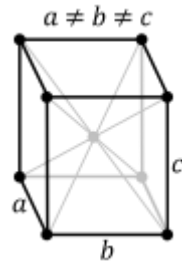
Примитивная



Базоцентрированная



Гранецентрированная






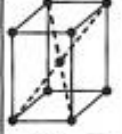
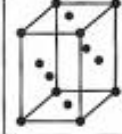

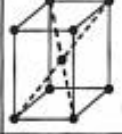




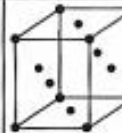


Объёмноцентрированная



Дважды-объёмноцентрированная  
(Ромбоэдрическая)

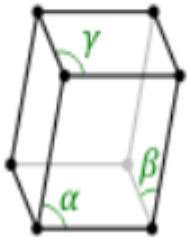
# Типы решёток Бравэ (3D)

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

# Типы решёток Бравэ

Триклинная  
(параллелепипед)

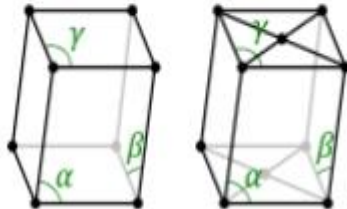
$$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$$



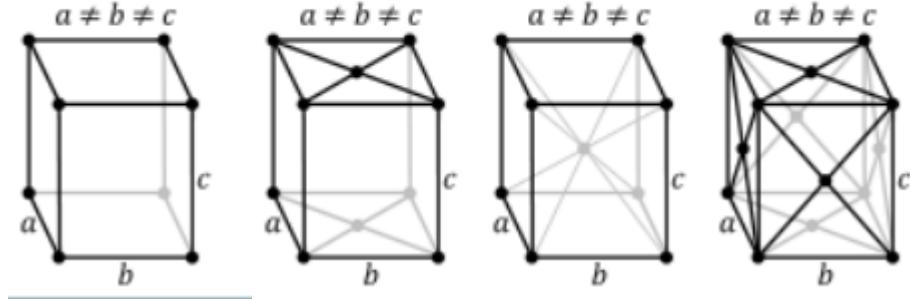
Моноклинная  
(призма с параллелограммом

в основании)

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



Ромбическая (прямоугольный параллелепипед)

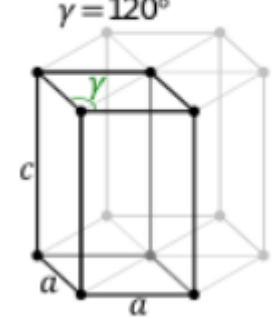
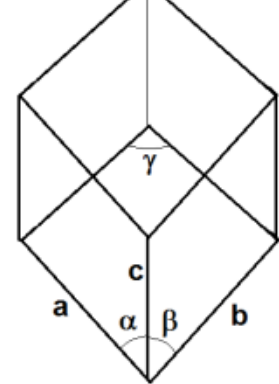


Тригональная  
(ромбоэдрическая)

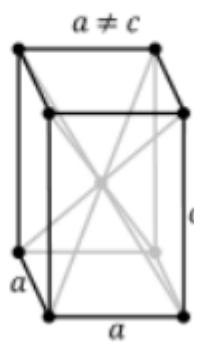
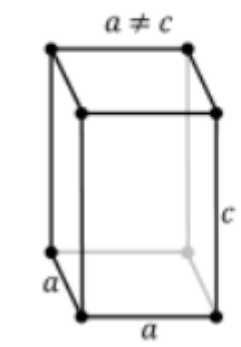
Гексагональная  
(шестигранная

призма)

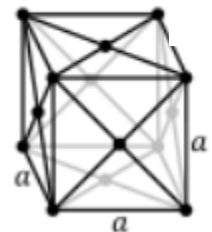
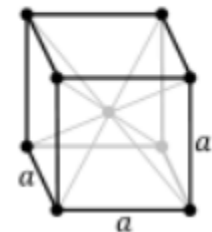
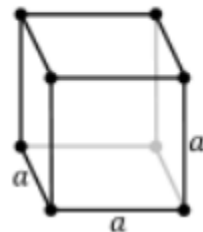
$$a=b \neq c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



Тетрагональная  
(прямоугольный параллелепипед  
с квадратом в основании)

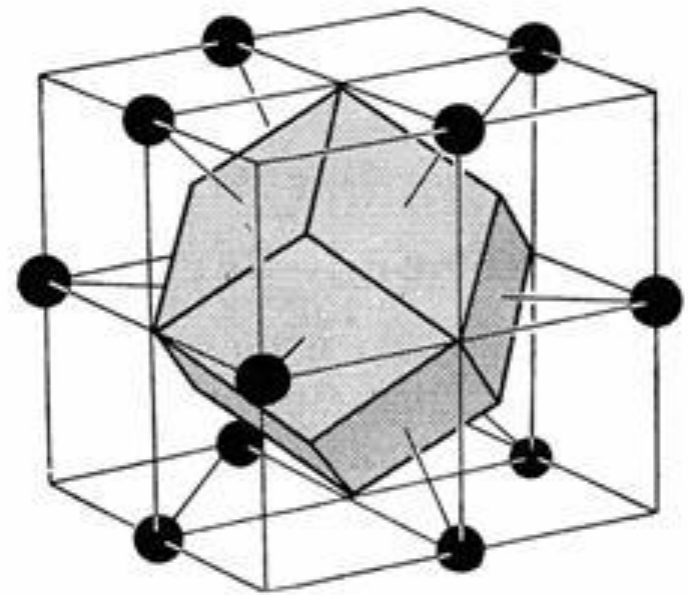
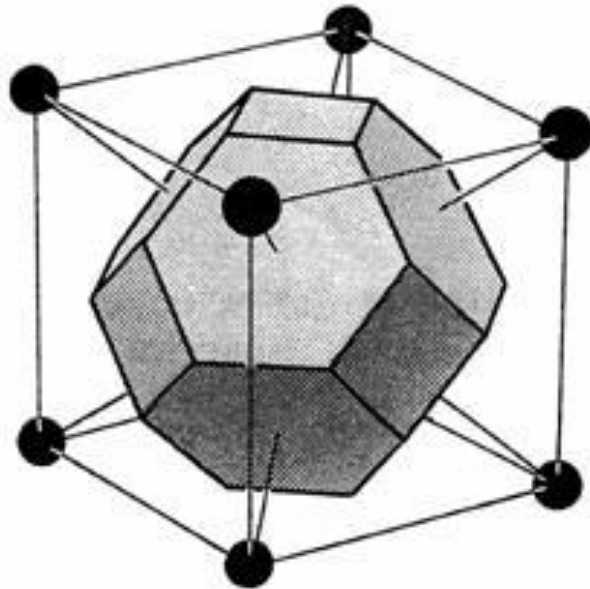


Кубическая (куб)



# Примитивная ячейка (Ячейка Вигнера-Зейтца)

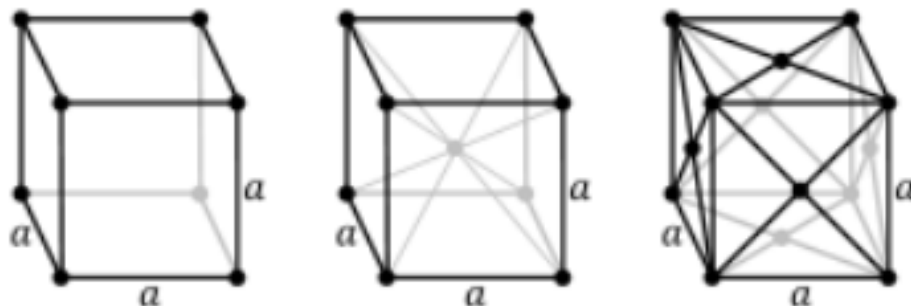
- **Примитивная ячейка** — это любая элементарная ячейка наименьшего объема.



# Характеристики кубических решеток

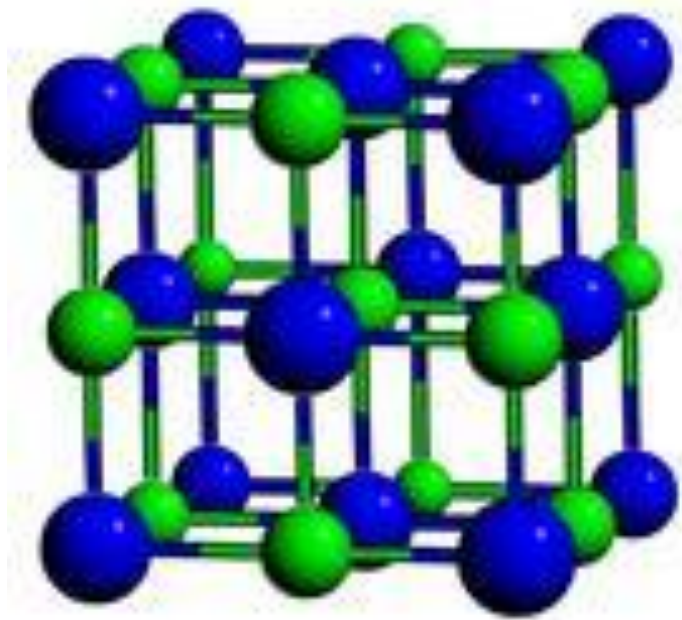
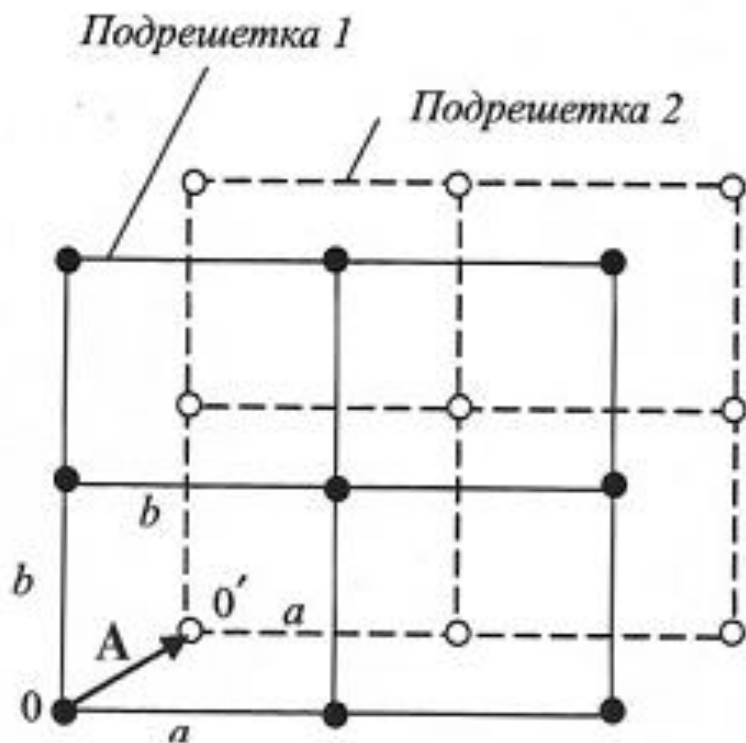
- Параметр решетки
- **Координационное число** — число ближайших соседей.
- Матричное представление трансляции

Кубическая (куб)



# Решётка с базисом

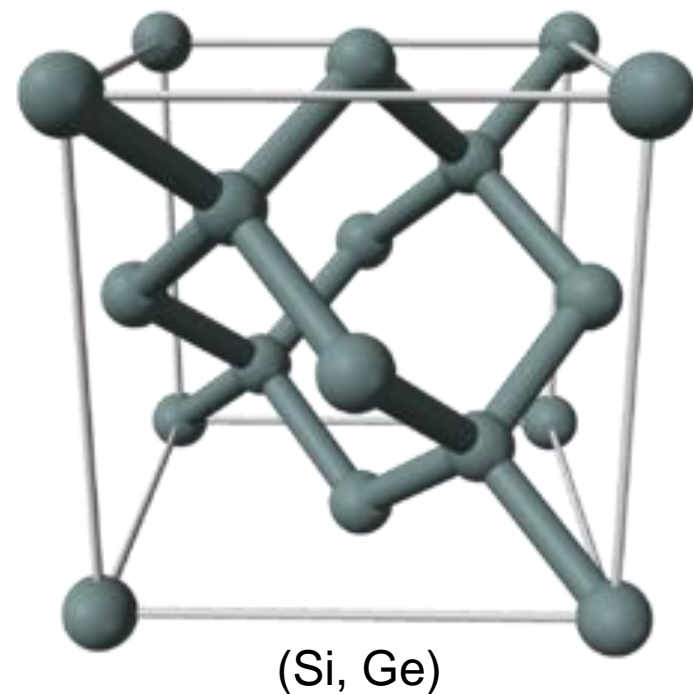
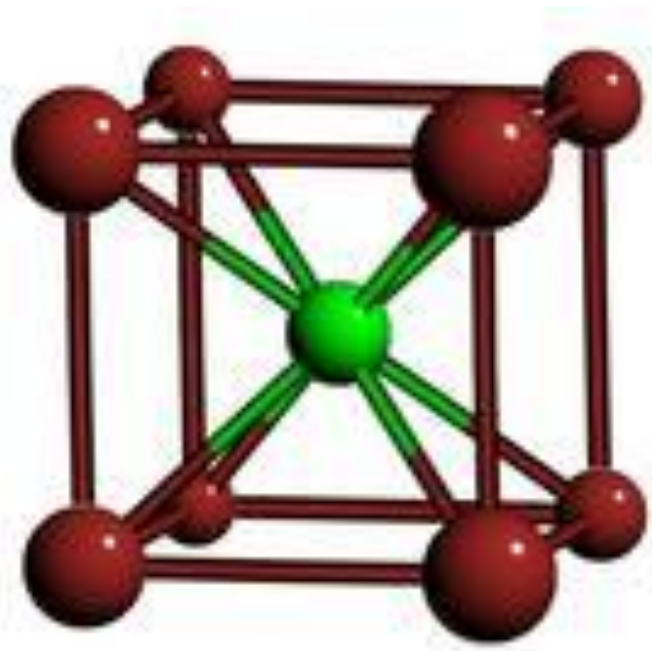
Решетку общего типа называют решеткой с базисом. Ее можно построить с помощью тех же трансляций, что и каждую из составляющих решеток Бравэ, только при этом надо транслировать не один узел, а несколько узлов - базис



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

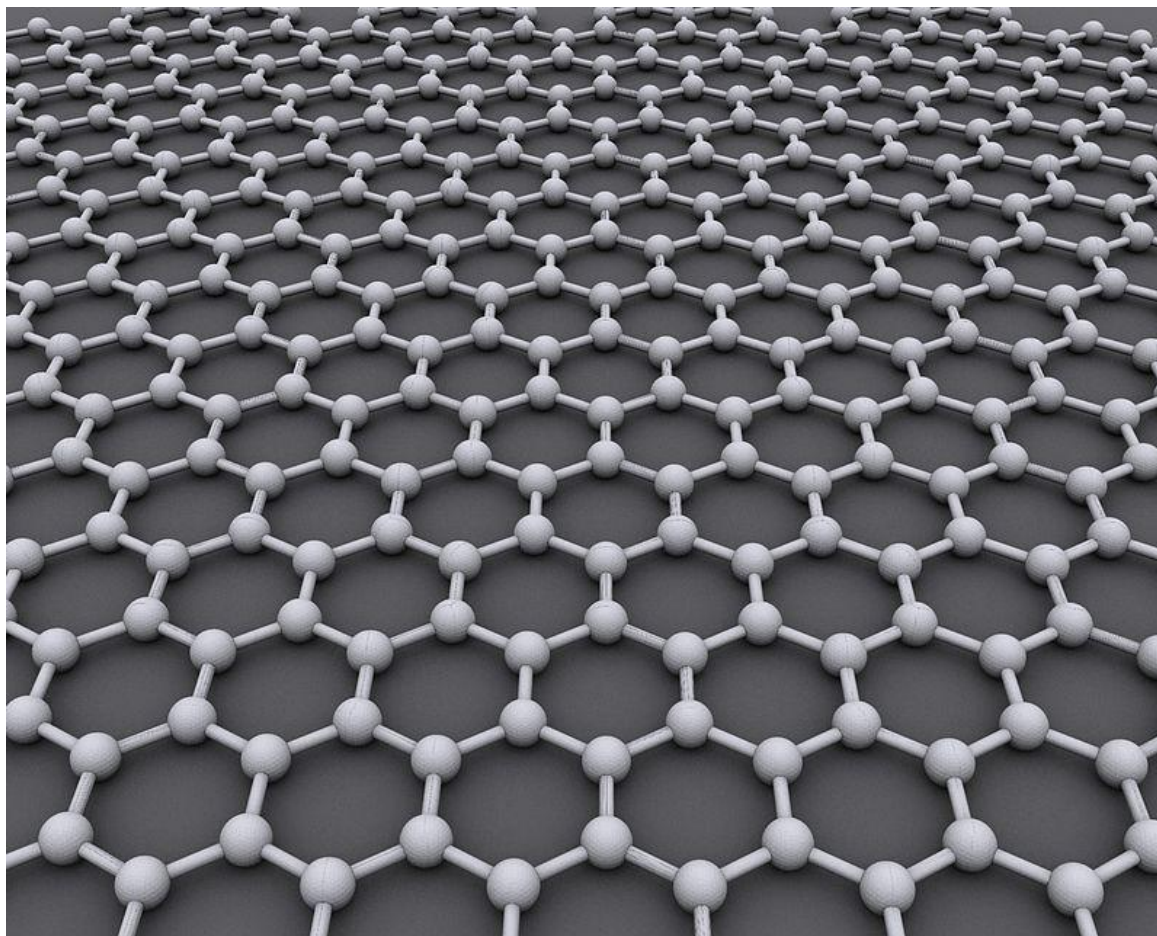
# Решётка с базисом

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

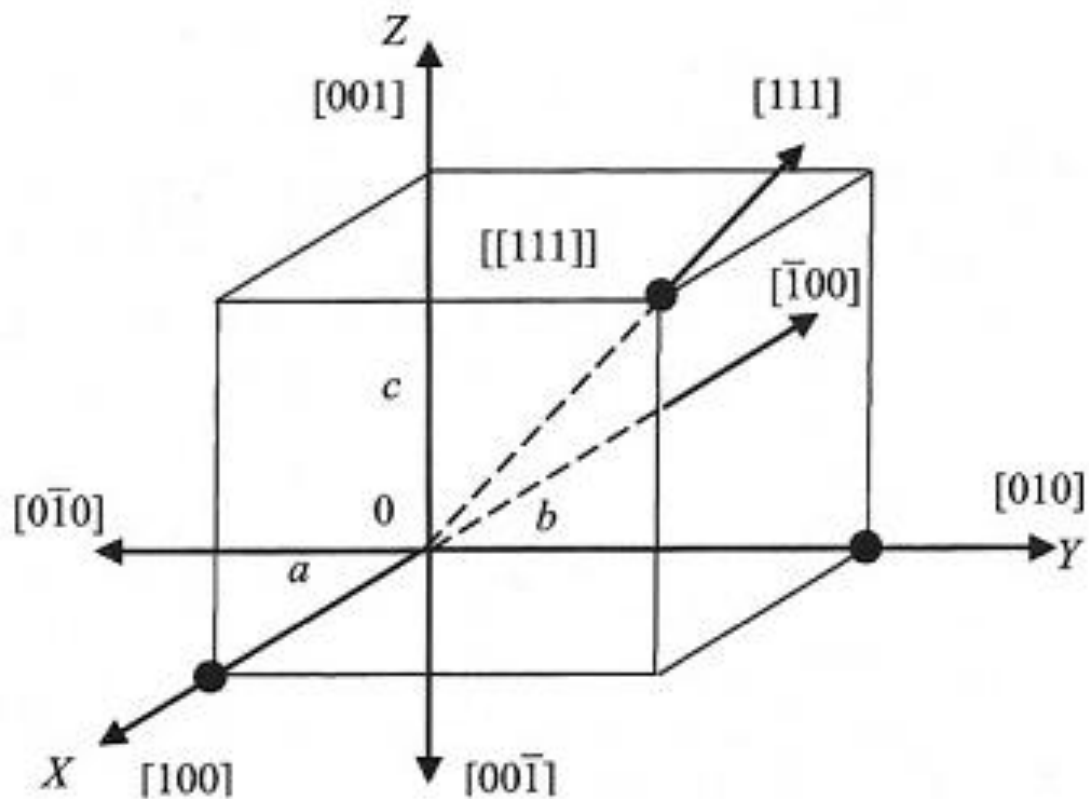


(CsCl, CsBr, CsI, RbCl, AlCo, AgZn, BeCu, MgCe, RuAl, SrTi)

# Графен

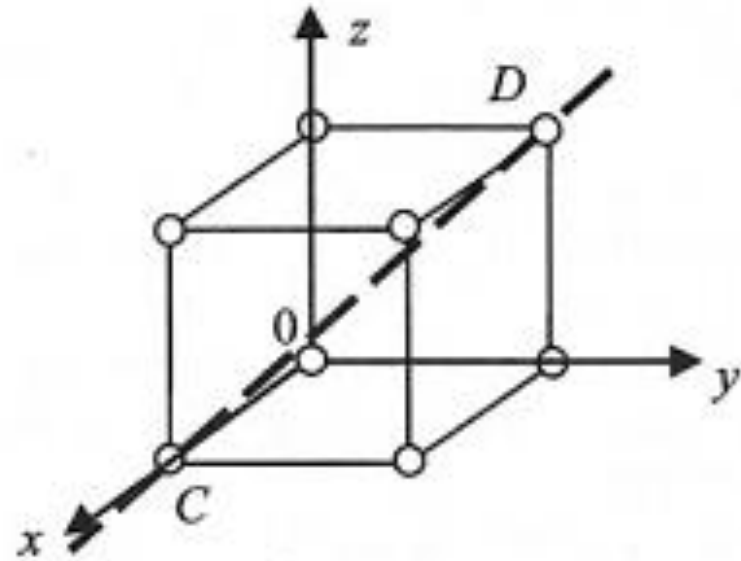
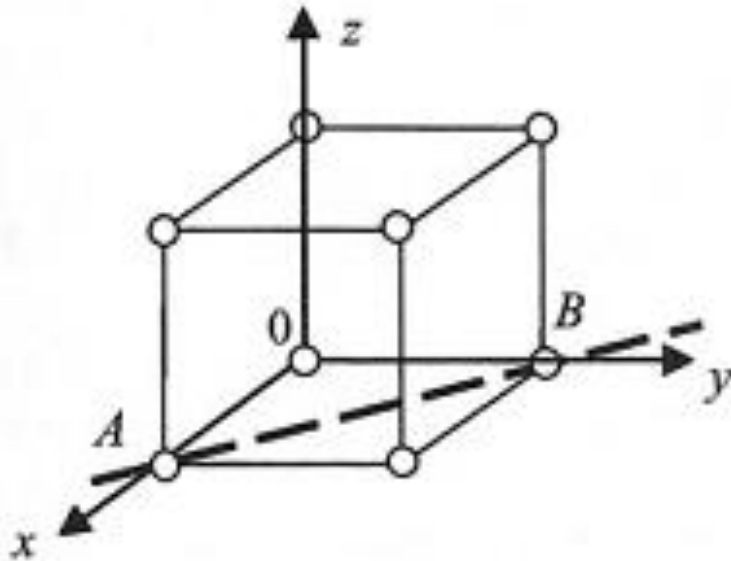


# Обозначение узлов, направлений в кристалле Индексы Миллера



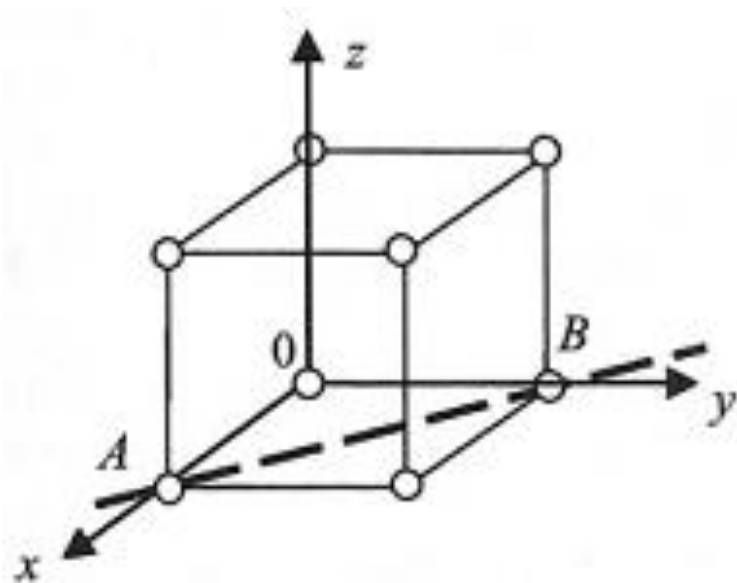
# Обозначение узлов, направлений в кристалле Индексы Миллера

[???

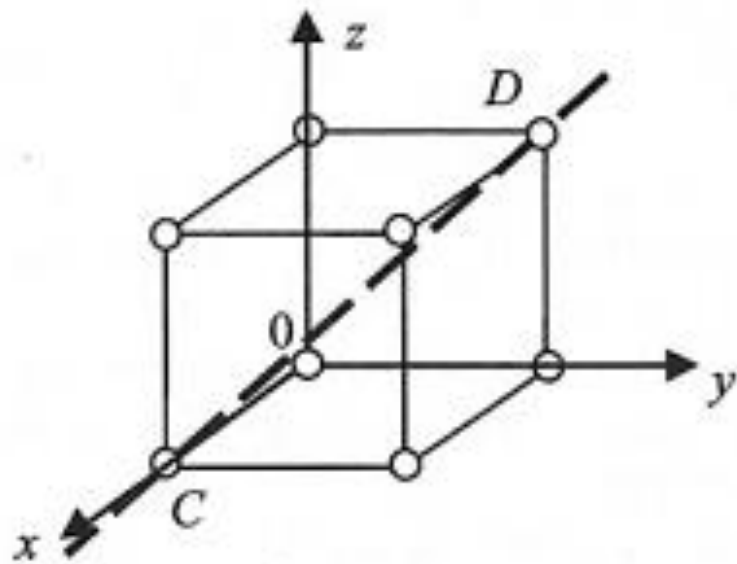


# Обозначение узлов, направлений в кристалле Индексы Миллера

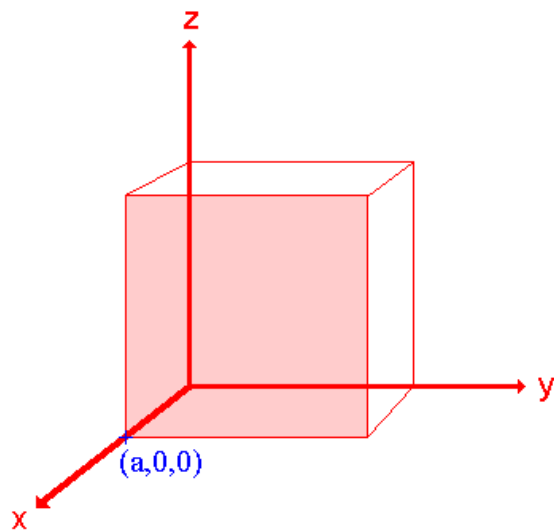
$[-110]$



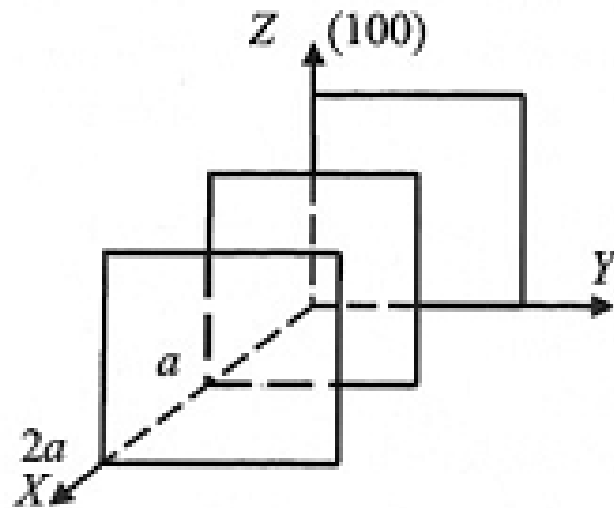
$[-111]$



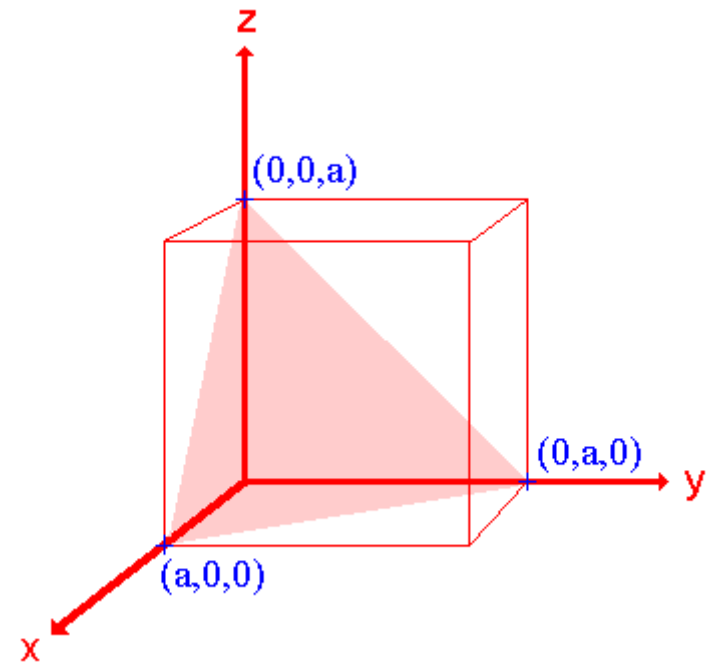
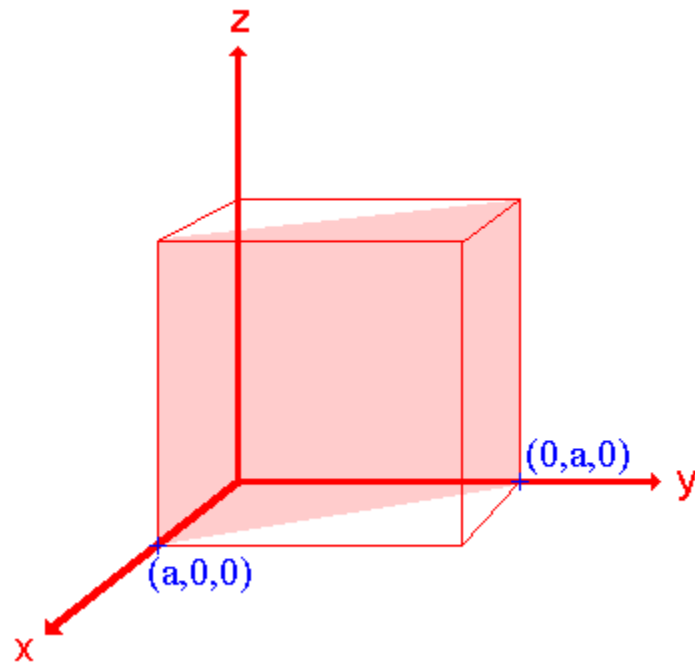
# Обозначение плоскостей Индексы Миллера



Осевые единицы:  $a, \infty, \infty$   
Обратные единицы:  $a/a, a/\infty, a/\infty$   
 $= 1, 0, 0$   
Индексы Миллера:  $(1\ 0\ 0)$

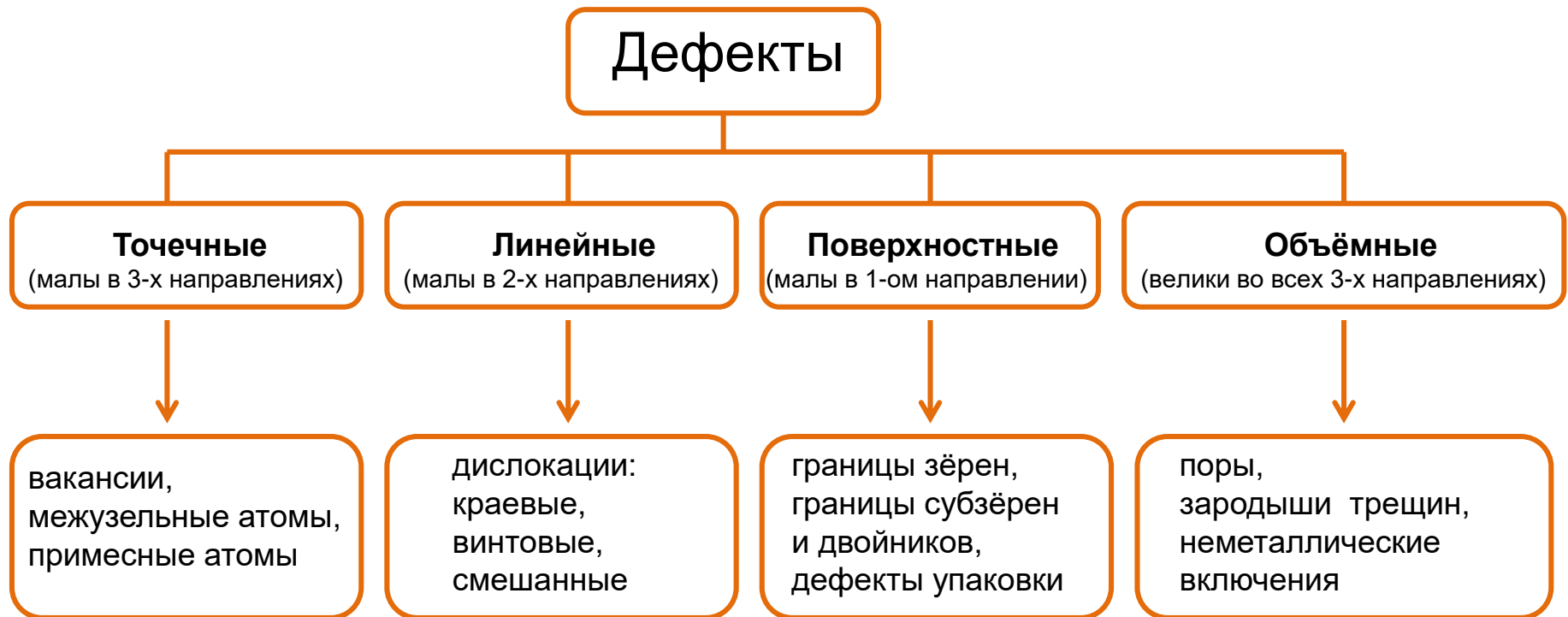


# Обозначение плоскостей Индексы Миллера



# 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*

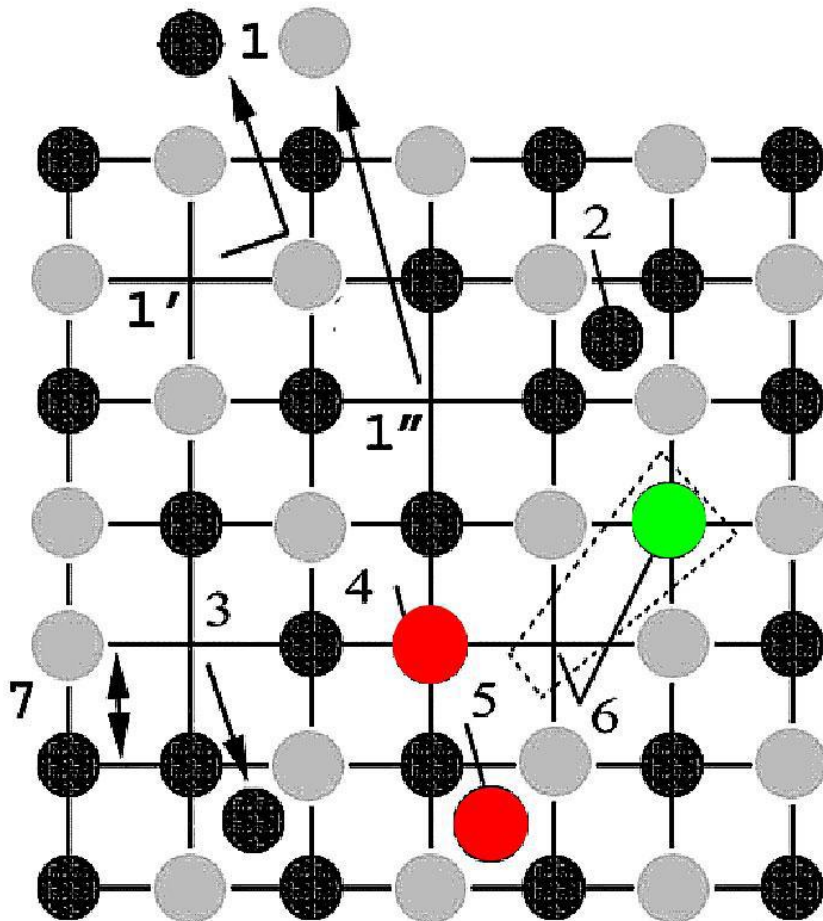
- тепловых,
- механических,
- электрических воздействий;

## *при облучении*

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

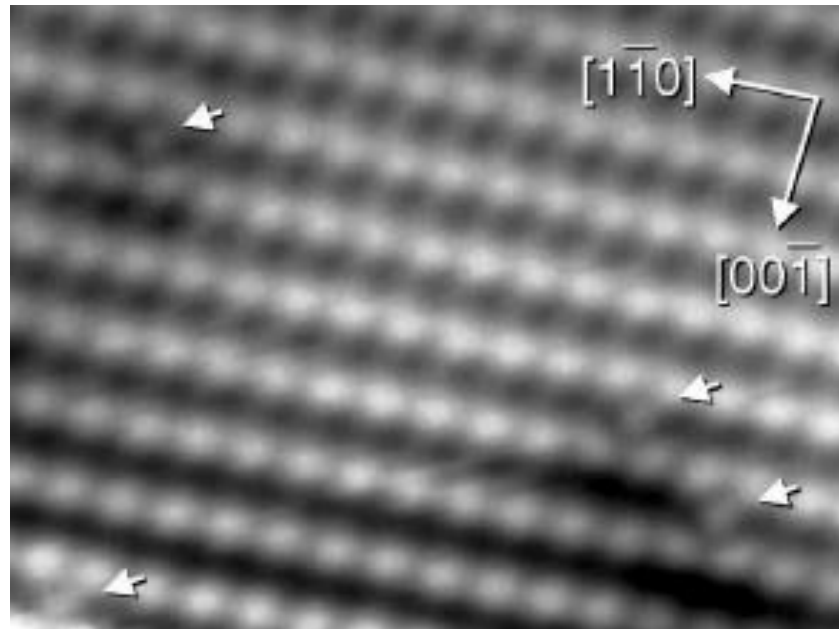
# Точечные дефекты

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



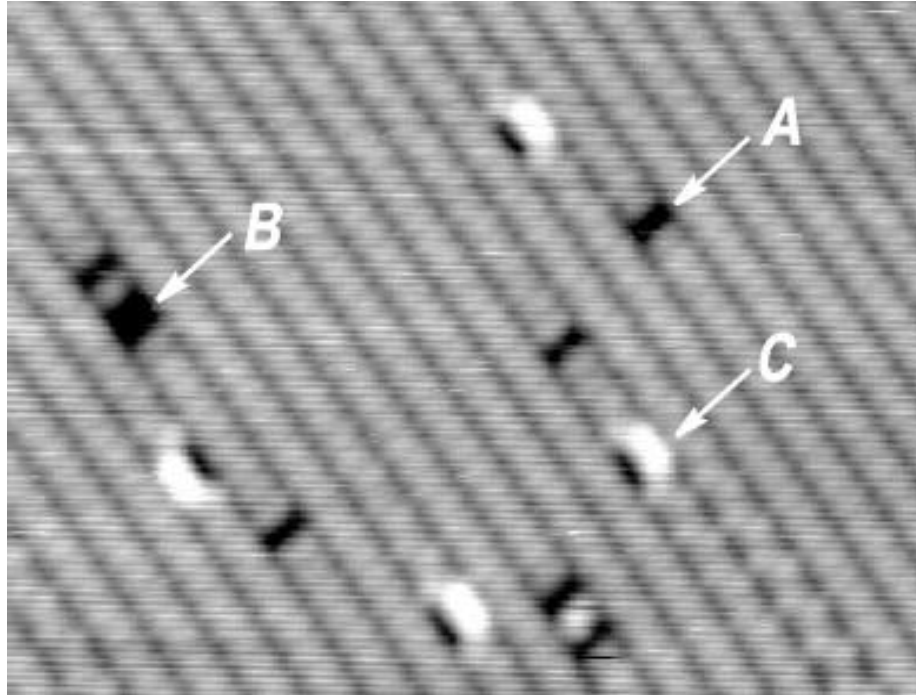
1 – дефект по Шоттки,  
1', 1'' – вакансии,  
2 – собственный  
междоузельный атом,  
3 – дефект по Френкелю,  
4 – дефект замещения,  
5 – дефект внедрения,  
6 – гетеровалентное  
замещение,  
7 – антиструктурные  
дефекты

# 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

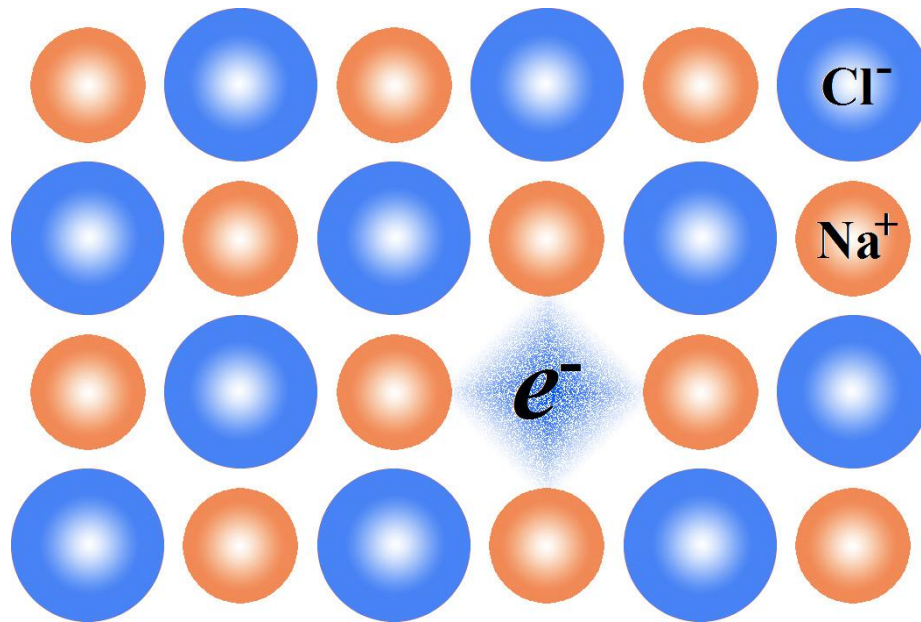


Изображение СТМ ( $150 \times 110 \text{ \AA}^2$ ) заполненных состояний от участка поверхности Si(100)2x1 с димерными вакансиями. Дефекты обозначены как дефекты типа *A*, типа *B* и типа *C*.

# Центры окраски

**Цэнтры окраски** — 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.

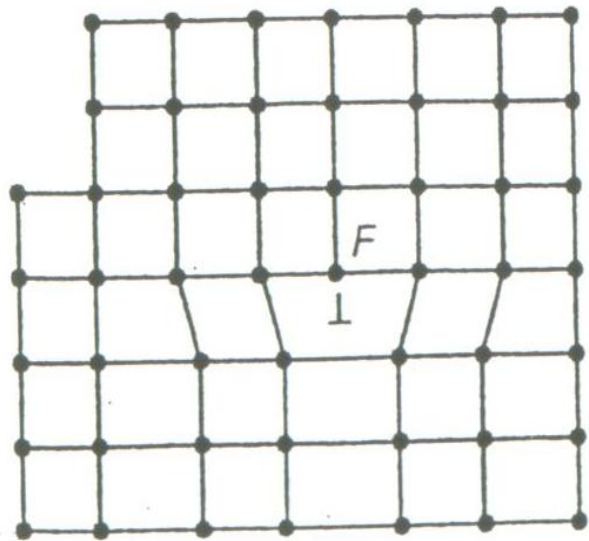
**(F центр)**



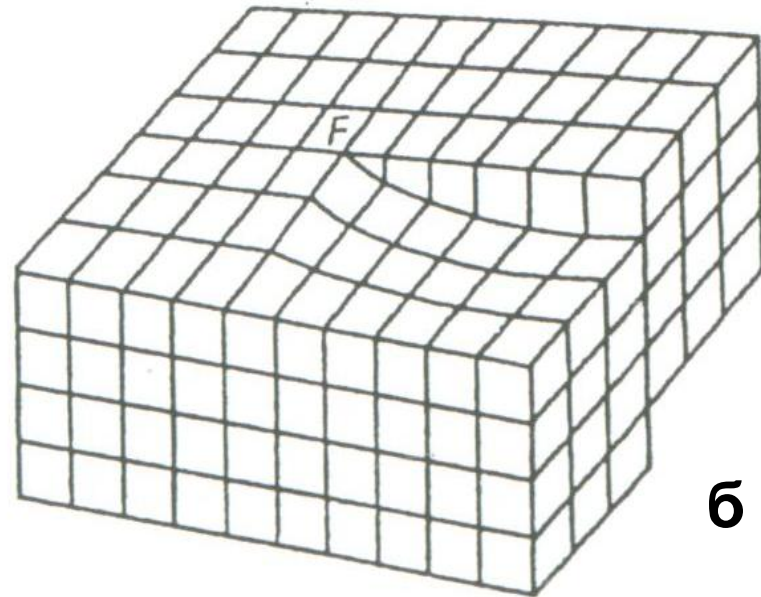
Центры окраски обнаруживаются во многих неорганических кристаллах и стёклах, а также в природных минералах; с ними связана окраска многих драгоценных камней и самоцветов.

# Дислокации

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



а



б

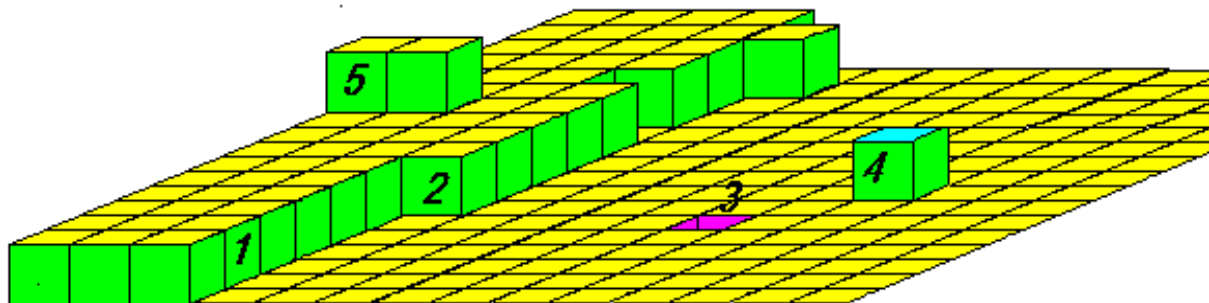
Схема образования краевой (а) и винтовой (б) дислокации

# 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

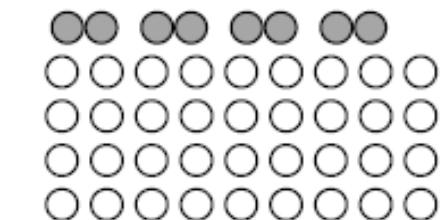
**Схематическая иллюстрация  
возможных типов  
реконструкций:**

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

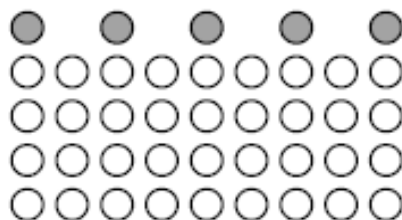
**б** и **г** представляют неконсервативные реконструкции, то есть случаи, когда концентрация поверхностных атомов изменяется.

только  
верхний слой

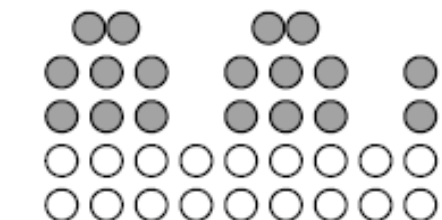
несколько  
слоев



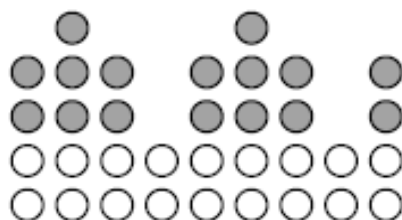
а



б

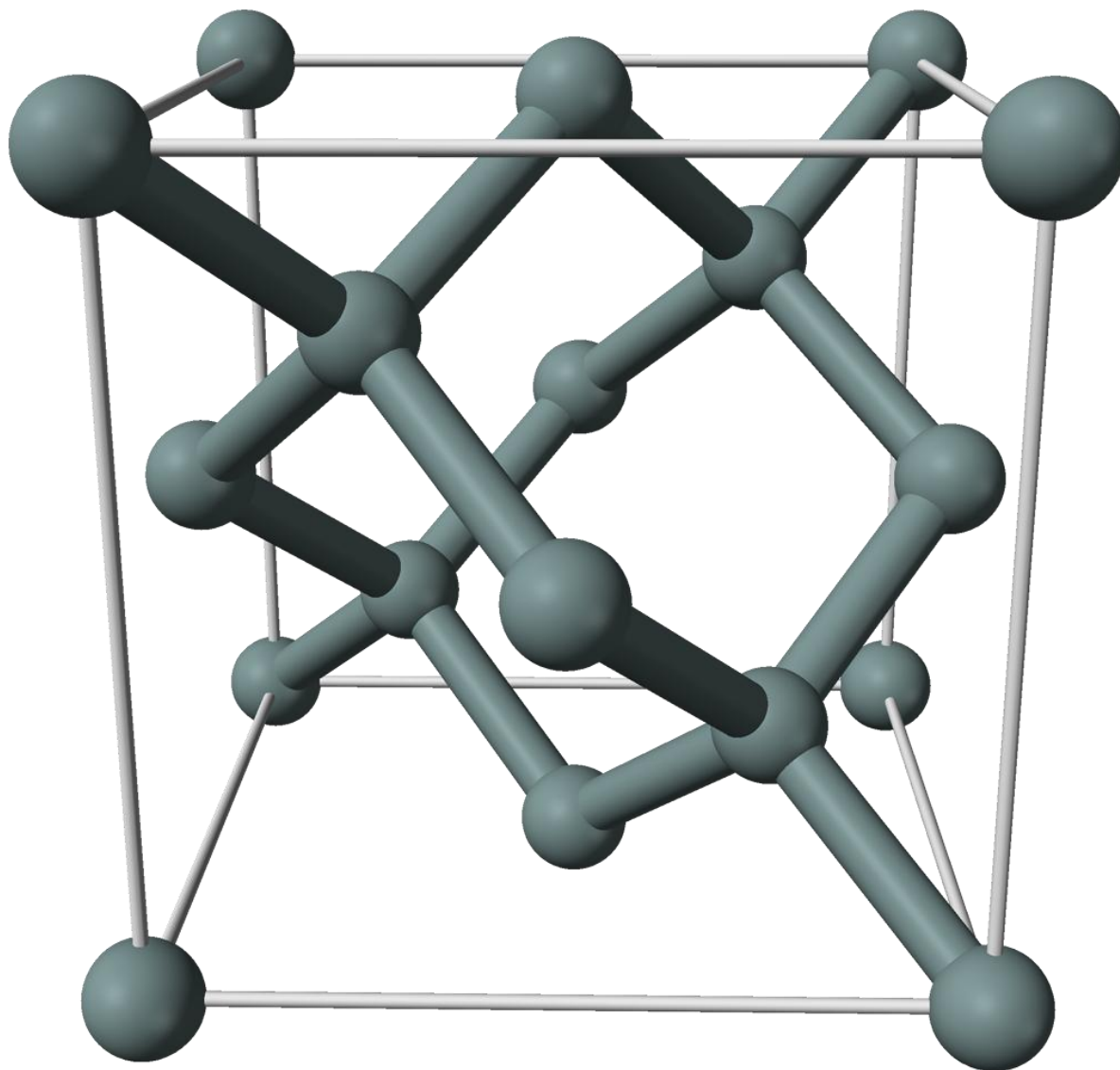


в

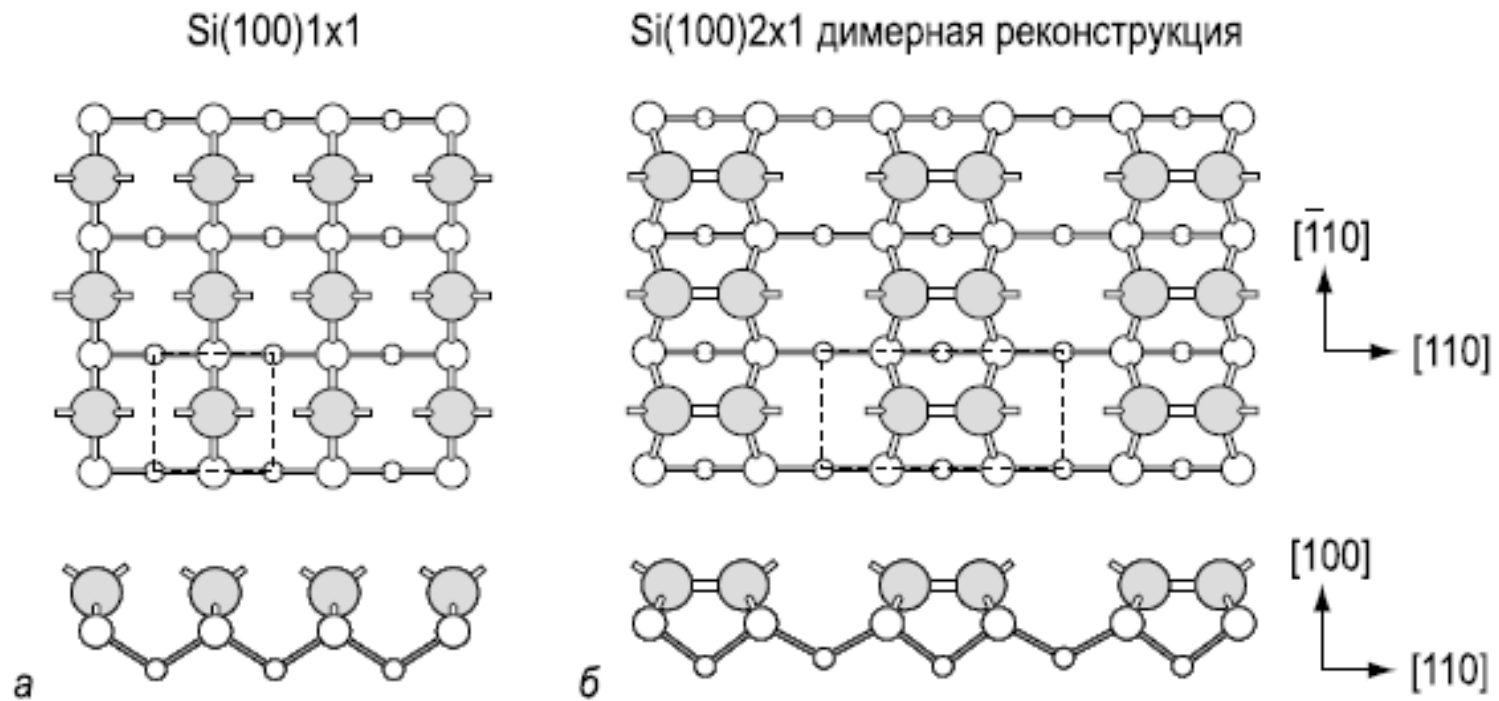


г

# 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

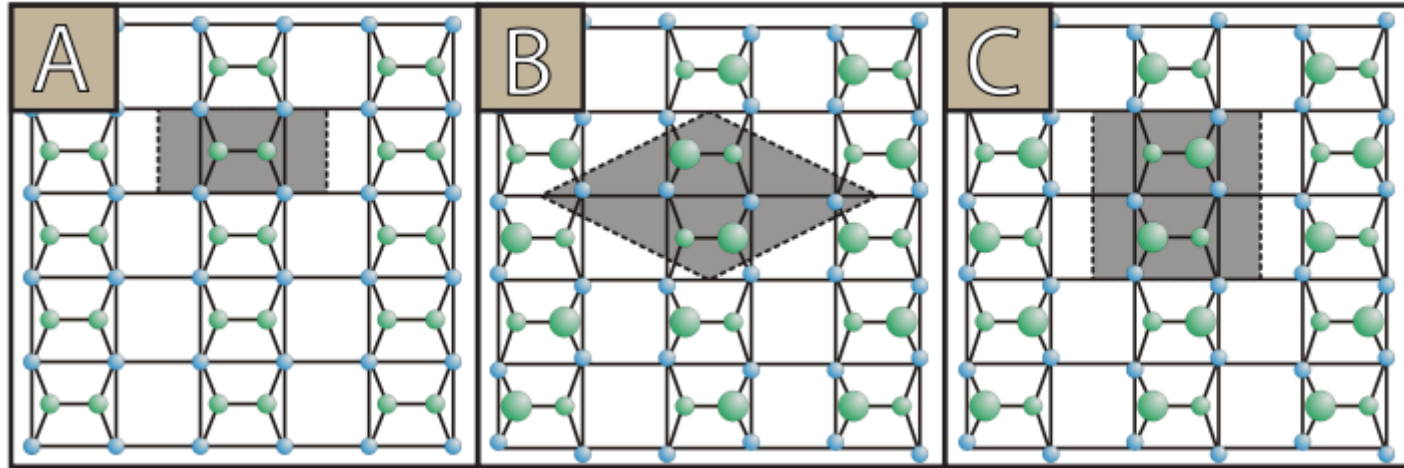


Figure 1.1: Ball and stick model of the different reconstructions that can be found on the Ge(001) surface. (A) the (2×1) reconstruction with symmetric dimers. (B) and (C) asymmetric buckled dimers form the c(4×2) and p(2×2) reconstructions respectively.

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)

