

Физика

Спецкурс

Лекции

Проф. Чернышев А.П.

№	Темы лекций	Часы
1	Кристаллические решетки и структуры	2
2	Колебания кристаллических решеток	2
3	Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах	2
4	Теорема Блоха	2
5	Тензор эффективных масс.	2
6	Стационарное уравнение Шредингера	2
7	Теория квантовых переходов. Нестационарная теория возмущений	2
8	Распределение Больцмана. Положение уровня Ферми	2
9	Применение уравнения Больцмана для расчета конкретных эффектов.	2
10	Прямые разрешенные и прямые запрещенные переходы.	2
11	Особенности поглощения света в не прямозонных материалах	2

№	Темы лекций	Часы
12	Эффекты взаимодействия электрона и дырки при оптических переходах. Понятие об экситоне.	2
13	Теория поглощения света свободными носителями.	2
14	Обзор оптических и электронных свойств неупорядоченных полупроводников.	2
15	Виды дефектов и их влияние на физические свойства кристаллов	2
16	Понятие о кинетическом уравнении. Время релаксации для различных механизмов рассеяния.	2
17	Поглощение света свободными носителями в магнитном поле.	2
18	Распределение Ферми-Дирака. Вычисление положения уровня Ферми.	2

Лабораторные работы

- Четыре
- №40 **ОПРЕДЕЛЕНИЕ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ПОЛУПРОВОДНИКА**
- №42 **ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ФОТОРЕЗИСТОРА**
- №43 **ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ТЕРМОРЕЗИСТОРА**
- №44 **ИЗУЧЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ДИОДА**
- **До следующего занятия (включительно) надо сдать отчет и защитить работу.**

Расчетно-графические работы

- РГР №1 Методические указания к расчетно-графической работе для студентов дневного отделения ЭМФ по теме «Расчет датчика мощности»
- РГР №2 Методические указания к расчетно-графической работе № 2 по теме «Расчет стабилизатора напряжения»
- РГР №1 сдаем до 12 недели включительно.
- РГР №2 сдаем до зачетной недели включительно.

Контрольные вопросы к РГР

- К РГР-1 в лабораторной работе № 41
- К РГР-2 в лабораторной работе № 48.

Рекомендуемая литература

- При подготовке студент изучает теоретический материал и решает подобные задачи:
- Физика твердого тела. Физические основы электроники: методическое руководство к лабораторным работам № 40-44, 48 / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост.: А. Н. Поддымников и др.]. - Новосибирск, 2011. - 65, [3] с. : ил., табл.. - Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000154110
- Физика твердого тела : вопросы для защиты лабораторных работ по физике : методические указания для студентов, выполняющих лабораторный практикум по курсу физики / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост.: А. В. Баранов, В. В. Давыдков, В. В. Христофоров]. - Новосибирск, 2010. - 14, [2] с.. - Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000151215
- Физические основы электроники: сборник задач для 3 курса ЭМФ / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост.: А. М. Погорельский, В. В. Христофоров, С. И. Вашуков]. - Новосибирск, 2008. - 27, [2] с. : ил., табл.. - Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000087346
- З. Р.П. Дикарева. Введение в кристаллофизику. Избранные вопросы: учеб. пособие / Р.П. Дикарева. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006. – 239 с. – («Учебники НГТУ»).

1. Кристаллические решетки и структуры

Лекция №1

8.02.2019

Простейшие структуры

Основное свойство – периодичность. Кристаллические структуры характеризуются регулярным расположением в пространстве единичных атомов или групп атомов, приводящим к дальнему порядку.

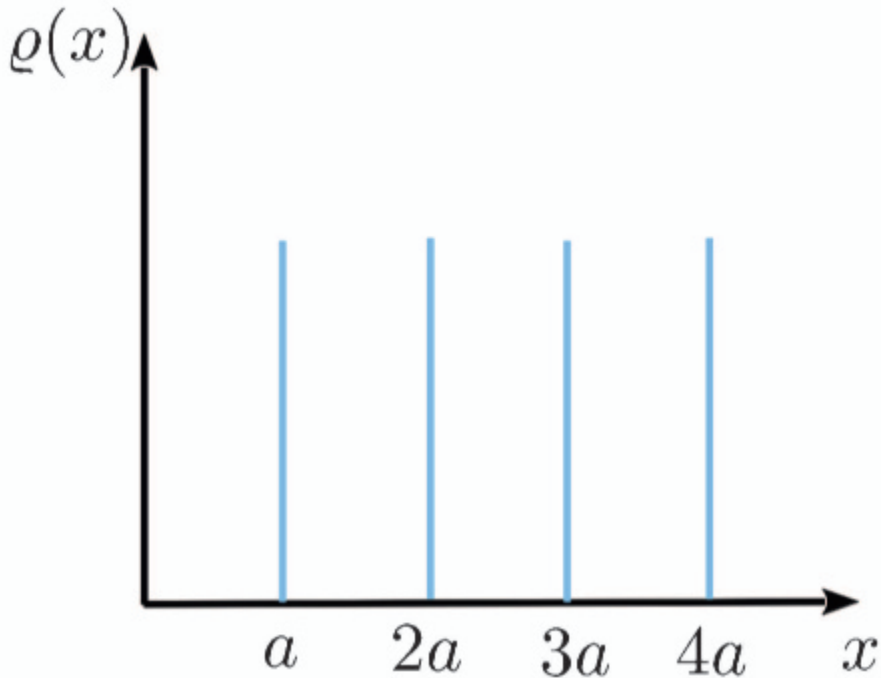
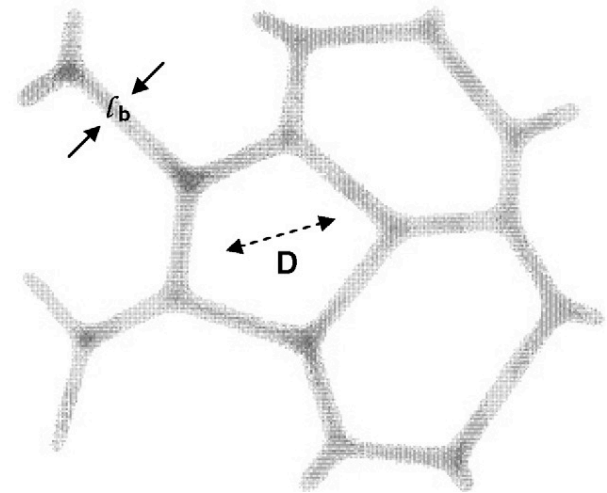
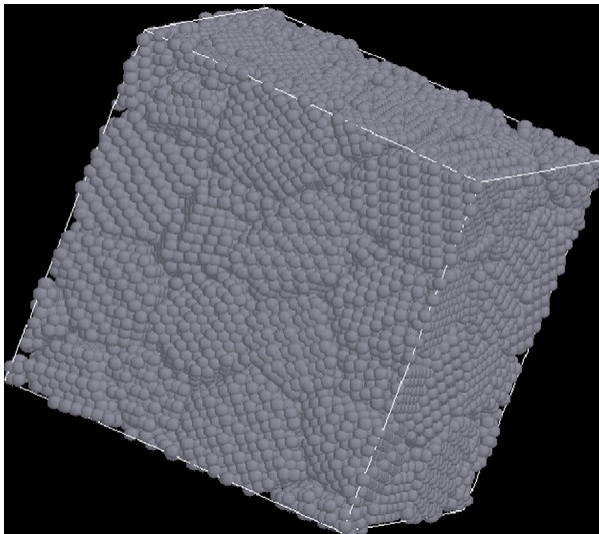


Рис. 1. Функция распределения атомов в одномерной цепи. Период равен a .

Поликристаллическая структура

Поликристаллические структуры составлены из большого количества (ансамбля) частиц, имеющих кристаллическую структуру и конечные размеры, при этом смежные структуры ориентированы в различных направлениях.

Физическое описание зависит от размеров кристаллитов. Имеются два предельных случая: бесконечный кристалл и наноструктура.



Нано-объекты (наночастицы, нановолокна и др.)

Нано-объекты с характерным размером $3 \text{ нм} < d < 100 \text{ нм}$

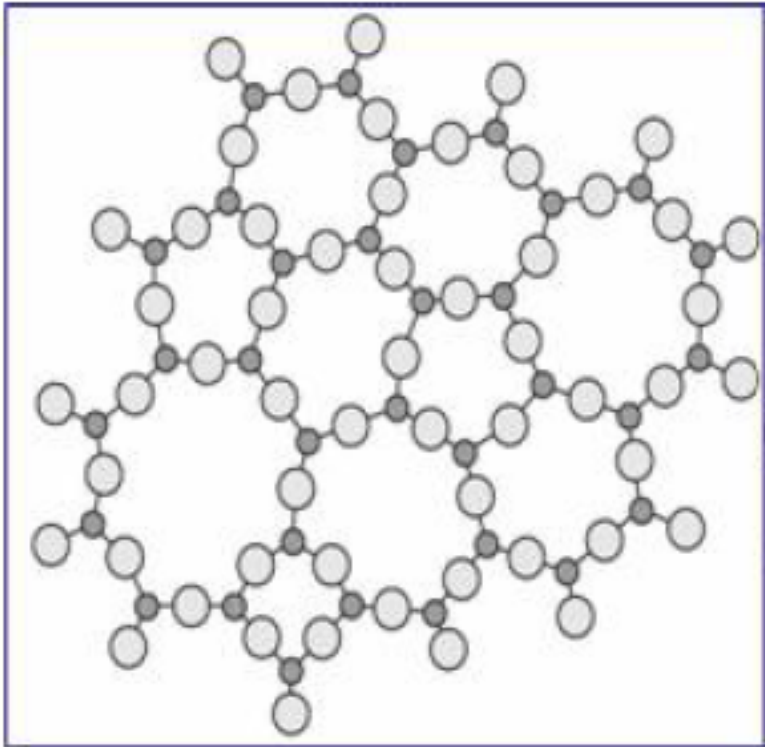
Ультрамалые нано-объекты $d \approx 1-3 \text{ нм}$

Нано-объекты (кластеры) с характерным размером $d < 1 \text{ нм}$



Аморфная структура

Аморфные структуры обладают только ближним порядком, т.е. положения атомов или молекул упорядочены только в окрестности атома или молекулы.



Стеклообразные материалы являются примером аморфных веществ. Многие вещества могут быть переведены в стеклообразное состояние путем быстрого охлаждения расплава ниже температуры стеклования.

Пластические материалы (полиэтилен) - это полимерные материалы, структурные единицы которых представляют собой длинные цепи, состоящие из тысяч атомов (молекул). Они частично находятся в кристаллическом состоянии (80%), а частично - образуют аморфные структуры (20%).

Дельта-функция Дирака

- Дельта-функция удовлетворяет следующим условиям:

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty, & x = 0, \\ 0, & x \neq 0; \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a).$$

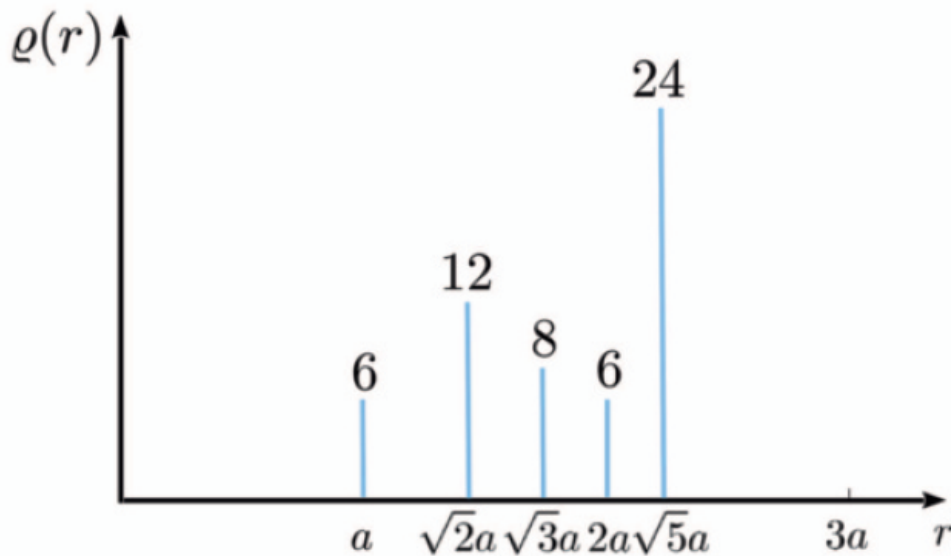
Функция распределения в 1D

Аналитическое и графическое представление понятия степени упорядочения обеспечивается так называемой функцией распределения $\rho(r)$, дающей число атомов в единице объема в зависимости от расстояния r от данного эталонного атома. Для одномерного случая имеем функцию распределения в виде

$$\rho(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na),$$

это сумма $\delta(x)$ функций Дирака, сосредоточенных на узлах решетки. Это в общих чертах на рис. 1: в 1D количество первых, вторых и так далее соседей одинаковое, и, следовательно, высота пиков тоже одинаковая.

Функция распределения в 3D



$$dN = \frac{4\pi(Na)^2}{a^3} dr$$

$$\frac{dN}{dr} = \frac{4\pi N^2}{a}$$

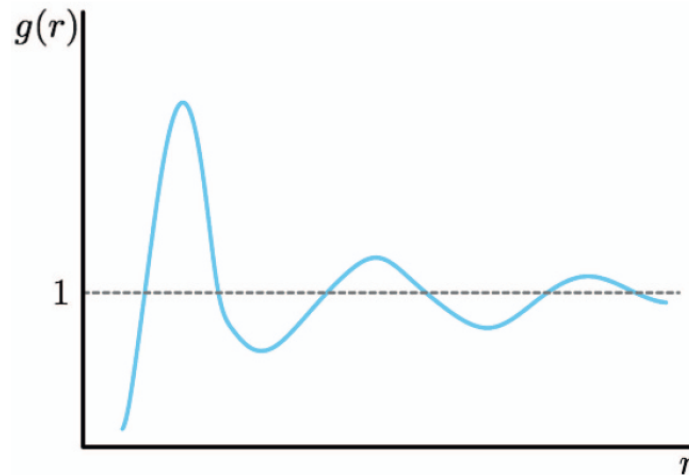
Это не так в трех измерениях: на рис. показана $\rho(r)$ для случая, когда атомы расположены в вершинах смежных кубов, которыми заполнено все пространства. На самом деле, количество соседей в сферической оболочке радиуса $N \cdot a$ на ширину dr определяется выражением выше.

Радиальная парная корреляционная функция $g(r)$

Вероятность нахождения частицы на расстоянии r от другой выбранной частицы, с которой совмещено начало координат $r = 0$, представлена так называемой радиальной парной корреляционной функцией $g(r)$. Это действительно значимая функция, так как вероятность зависит от корреляций между частицами. В однородной системе с плотностью n , $ng(r)$ можно рассматривать как локальную плотность. С другой стороны,

$$ng(r)4\pi r^2 dr$$

- число частиц в оболочке толщиной dr и помещенной на расстоянии r от начала координат.



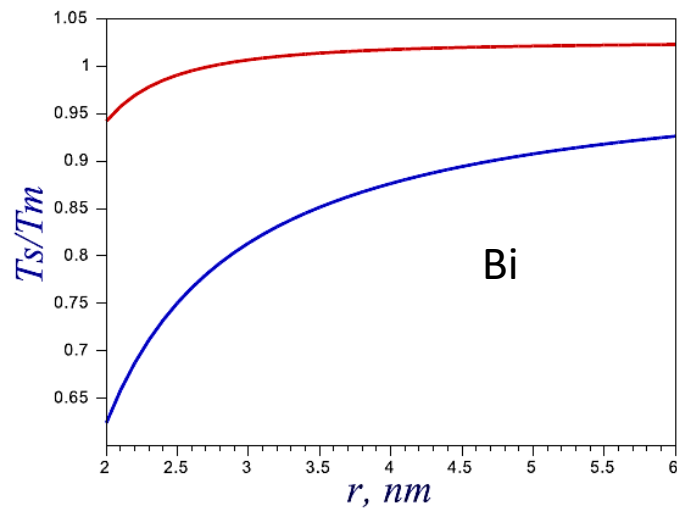
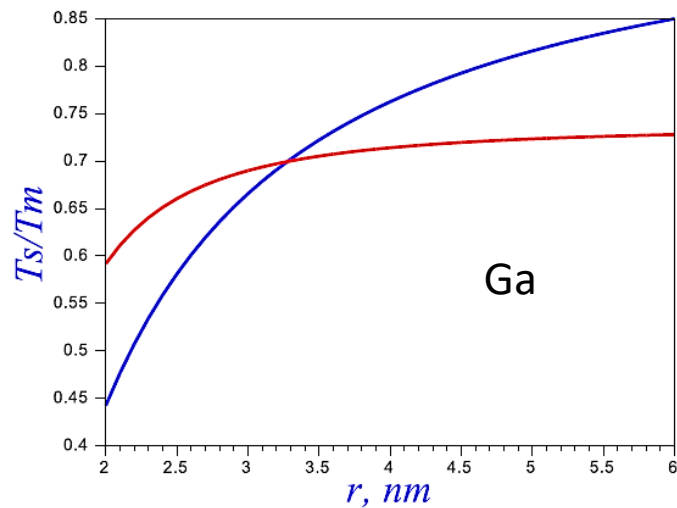
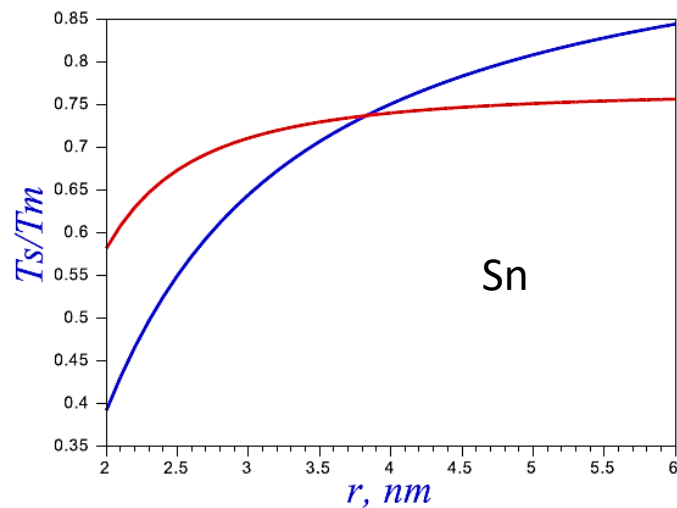
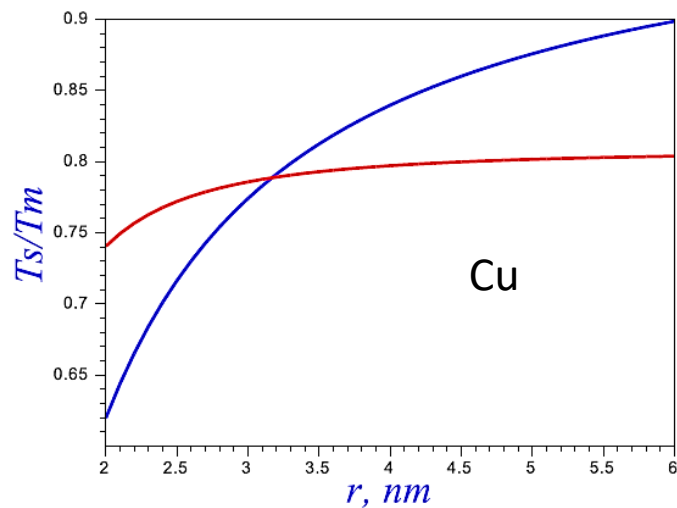
Бесконечные кристаллы, монокристаллы и наноструктуры

Имеет ли материал после затвердевания кристаллическую или поликристаллическую структуру, или другую аморфную структуру, определяется дополнительными условиями: давлением, температурой, содержанием примеси, и так далее. В то время как поликристаллические, так и аморфные материалы чаще всего являются результатом самопроизвольного формирования, рост монокристалла почти всегда является очень трудоемкой задачей, требующей эффективного и точного контроля над вышеуказанными параметрами. Прогресс в этих направлениях привел к революционной возможности проектирования так называемых наноструктур.

Кристаллическая наноструктура - это один крошечный кристалл, размер которого может варьироваться в интервале 3 – 100 Å, т.е. от размера одной единственной молекулы до размера нанокристалла. В нанокристалле начинает проявляться дальний порядок в расположении элементов кристаллической структуры.

Физика, описывающая эти структуры, достаточно сложна, так как она включает в себя размерные эффекты.

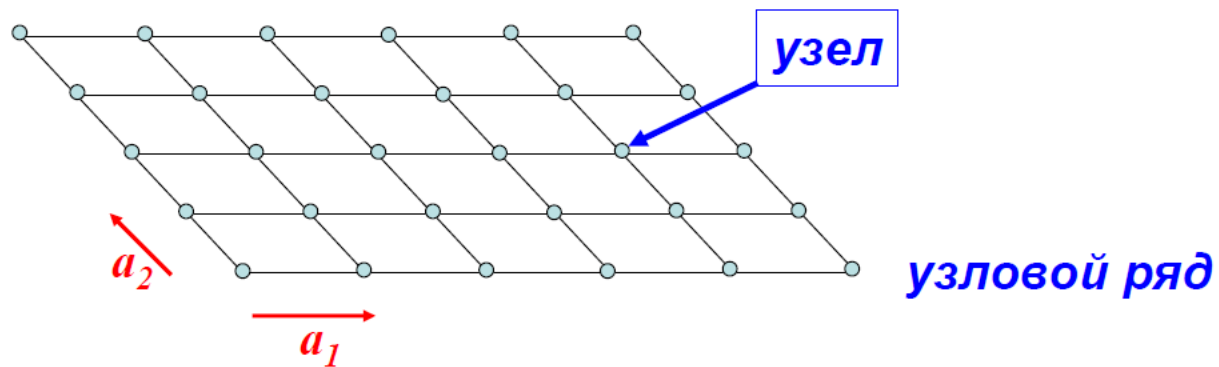
18. Зависимости $T_m(r)$ и $T_{sm}(r)$ для Cu, Sn, Ga и Bi



Кристаллические и нанокристаллические системы

Решетка Браве - бесконечный набор геометрических точек, размещенных в пространстве упорядоченно и периодически. Эти точки называются узлами решетки. Они обладают следующим свойством: при рассмотрении из любого узла решетки геометрические свойства материала (положение узлов, ориентация и типы атомов) одинаковы.

Бесконечная правильная система точек, связанных трансляциями, называется **решеткой**



Решетка Браве с базисом

Базис – это основная структурная единица, состоящая из одного или большего количества атомов (молекул, ионов и т.п.). Химический состав базиса бывает разный. Это может быть один атом как, например, в кристаллах золота и щелочных металлов, до десятков, сотен и даже тысяч атомов в кристаллических неорганических или органических веществах. Количество атомов в базисе доходит до сотен тысяч атомов в белковых кристаллах таких, как ДНК.

Схема построения решетки Браве

1. Шаг. Пусть произвольный узел \mathbf{O} будет узлом отсчёта или началом координат. Выберем второй узел из ближайшего окружения узла отсчёта и проведём к нему вектор \mathbf{a}_1 из начала координат. Очевидно из определения решетки Браве, что есть и другие узлы, лежащие на линии проходящей через вектор \mathbf{a}_1 . Положения этих узлов определяются вектором $n_1 \mathbf{a}_1$. Здесь n_1 – целое число (положительное, отрицательное или равное нулю).

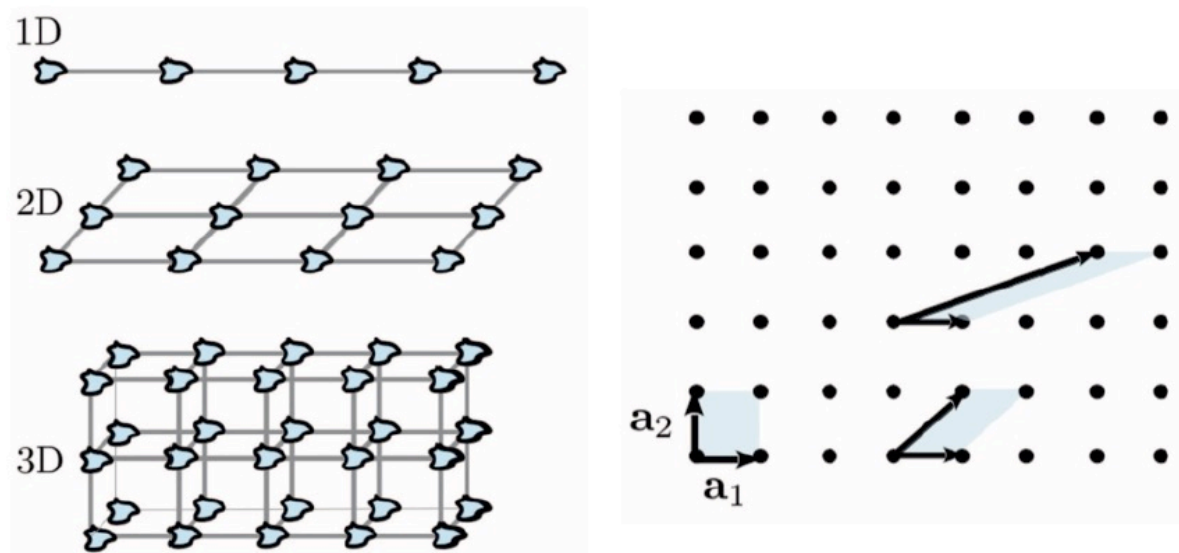
$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1$$

2. Шаг. Снова рассмотрим соседей узла отсчёта. И соединим вектором \mathbf{a}_2 с узлом отсчёта. Теперь

3. Шаг.
$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

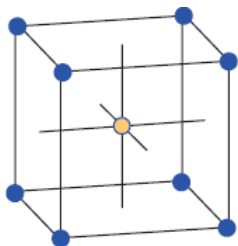
Примеры решеток Браве с базисом. Выбор примитивной решётки



Левая часть сверху вниз: схемы кристаллов в одном (1D), двух (2D) и трёх (3D) измерениях. Базовая структурная единица (базис) повторяется в каждом узле решетки Браве. Справа: неоднозначность выбора примитивной ячейки. Три способа выбора примитивной ячейки для квадратной решетки в 2D.

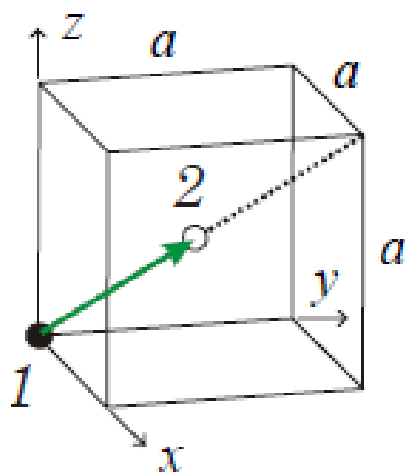
- Существует принципиальное различие между примитивной и элементарной ячейкой при рассмотрении структуры кристалла. Примитивной ячейкой называется минимальный воображаемый объём кристалла, параллельные переносы (трансляции) которого в трёх измерениях позволяют построить трёхмерную кристаллическую решётку в целом. Элементарной примитивная ячейка может называться только в том случае, когда она обладает теми же элементами симметрии, что и конечный объём. Таким образом при моделировании кристаллических структур оказывается удобнее использовать именно элементарную ячейку, так как она воспроизводит не только структуру, но в конечном счете и свойства кристалла.

Структуру идеального бесконечного кристалла можно описать, задавая решетку Браве \mathbf{R}_n и базис - совокупность векторов \mathbf{r}_s , характеризующих расположение атомов внутри элементарной ячейки (индекс s нумерует атомы в элементарной ячейке). В случае, когда кристалл образован анизотропными молекулами, в базис, помимо радиус-векторов молекул \mathbf{r}_s , должны быть включены параметры, определяющие ориентацию молекул.



Структура хлорида цезия: простая кубическая решетка с двухточечным базисом из ионов цезия Cs^+ и хлора Cl^- .

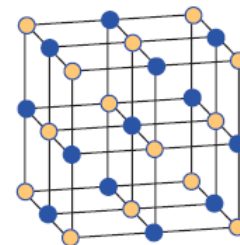
базис :



$$\mathbf{r}_1 = 0$$

$$\mathbf{r}_2 = \frac{a}{2} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$$

$\mathbf{e}_{x, y, z}$ - единичные орты



Структура хлорида натрия: гранецентрированная кубическая решетка с двухточечным базисом из ионов натрия Na^+ и хлора Cl^- .

Свойства примитивной ячейки

Свойства РБ: 1) Трансляция на вектор \mathbf{R} не меняет решетку Браве.

2) Объём примитивной ячейки

$$V_c = ([\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2], \mathbf{a}_3) = \mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]$$

В простейшем случае примитивная ячейка представляет собой в 1D – сегмент, в 2D – квадрат, в 3D – куб.

3) Примитивными ячейками пространство заполняется целиком, без пустот и зазоров.

Любой реальный кристалл может быть идентифицирован по примитивной ячейке и базису, т.е. по **атомному составу** и **расположению атомов** в примитивной ячейке.

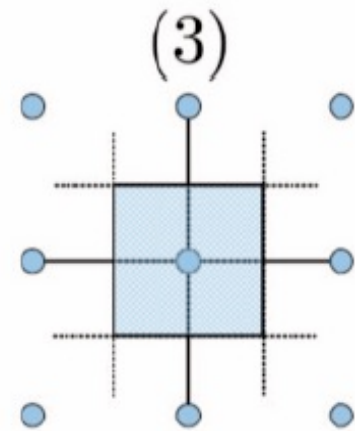
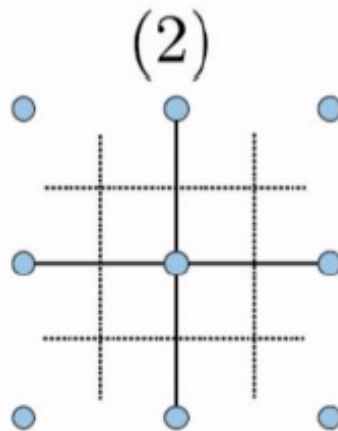
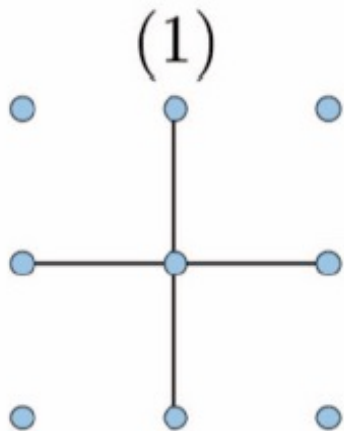
Ячейка Вигнера-Зейтца

Метод построения

1 шаг. Выбираем произвольный узел решётки Браве и соединяем отрезками со всеми ближайшими соседними узлами.

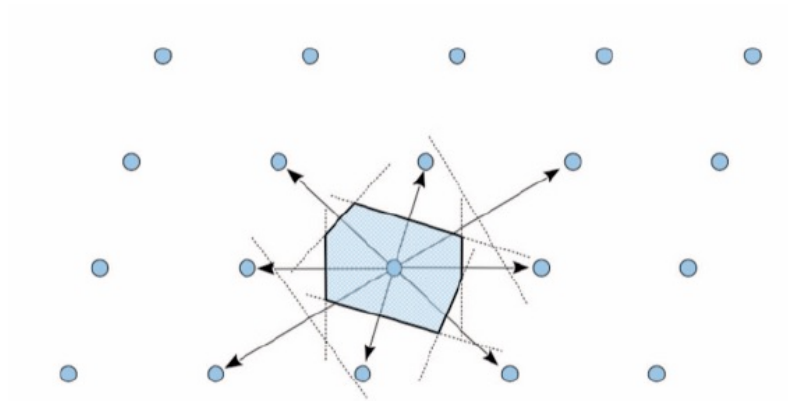
2. шаг. Через середины этих отрезков проводим перпендикулярные отрезкам плоскости.

3. Ограниченная плоскостями область наименьшего объёма является ячейкой В-З.



Дополнительные примеры

2D



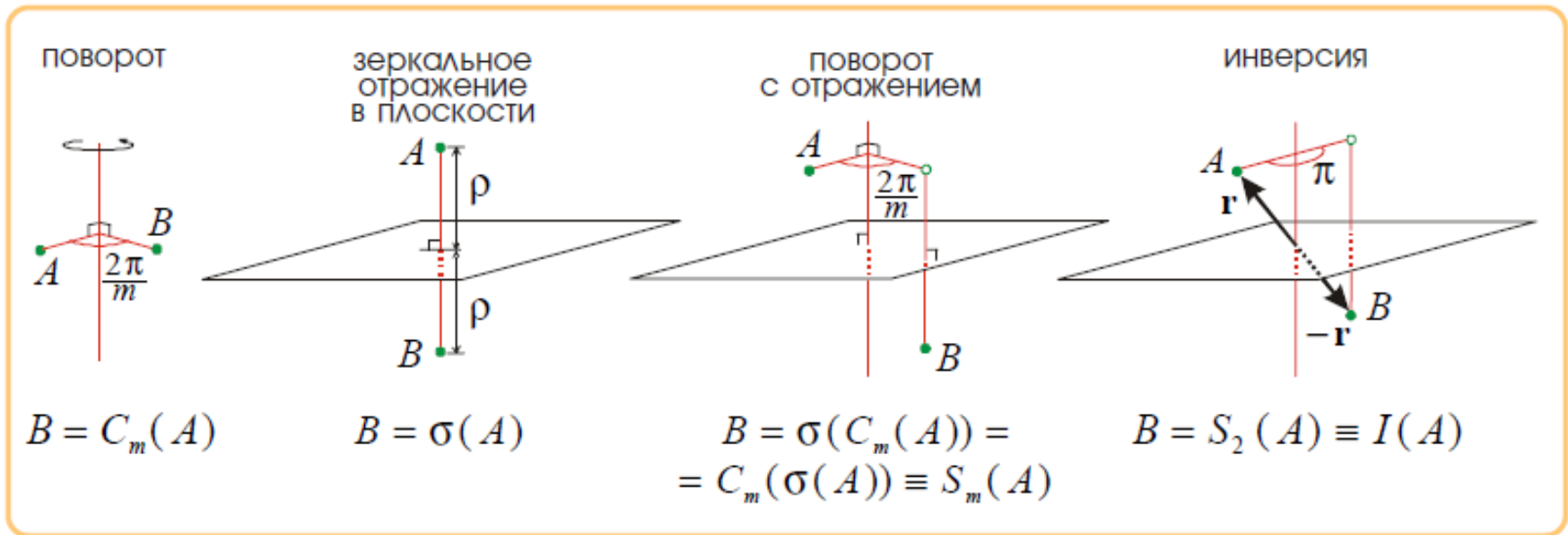
3D

Симметрия кристаллической решетки

Физические свойства вещества тесно связаны со степенью симметричности кристаллической решетки.

Например, кристаллы Si имеют более высокую степень пространственной симметрии, чем кварц SiO₂. Зато кварц является пьезоэлектриком.

Ячейка Вигнера-Зейтца и симметрия



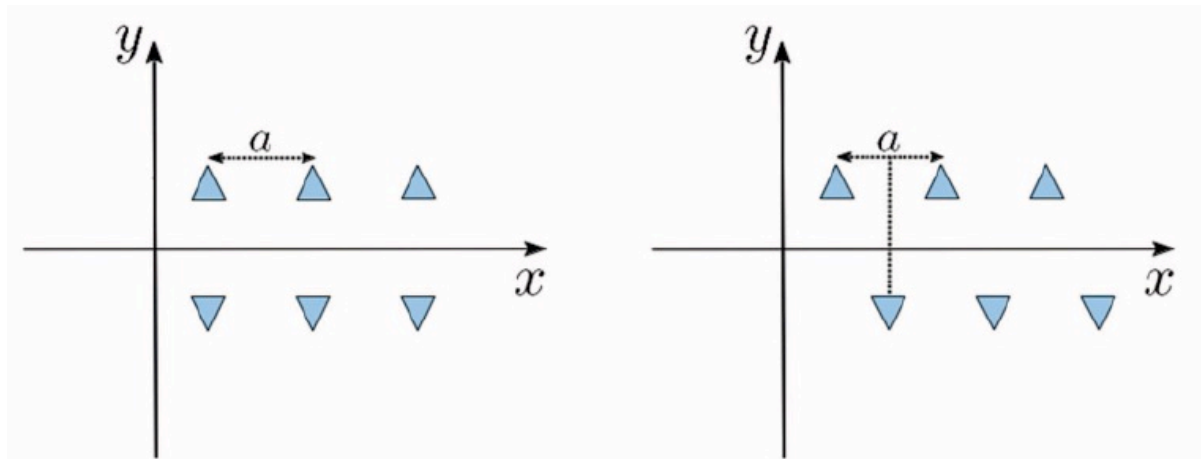
Точечными называются преобразования, оставляющие неподвижной хотя бы одну точку решетки Браве

Определение

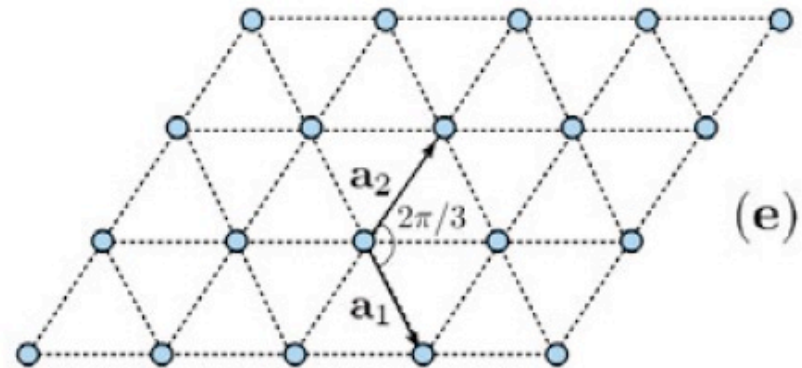
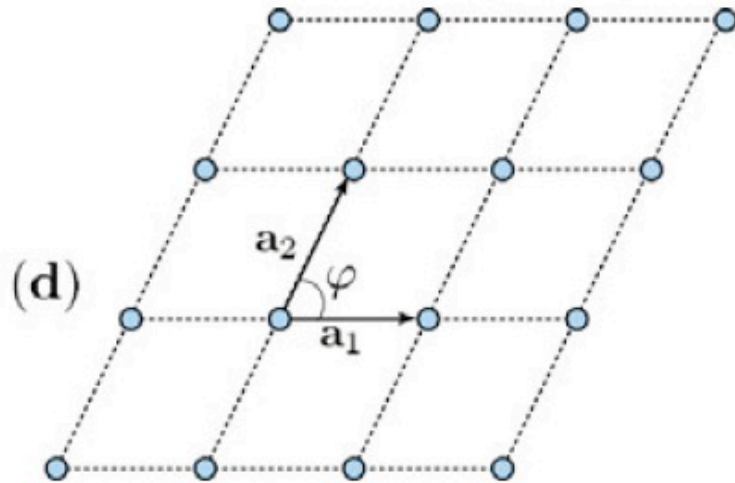
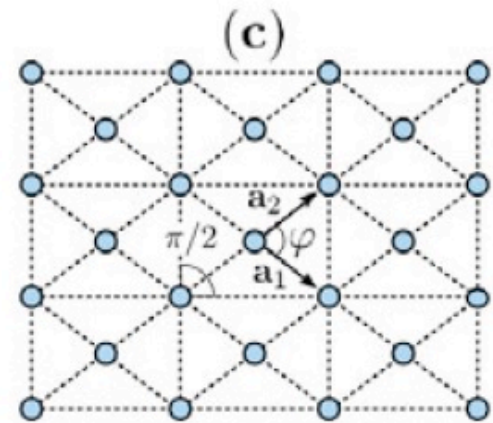
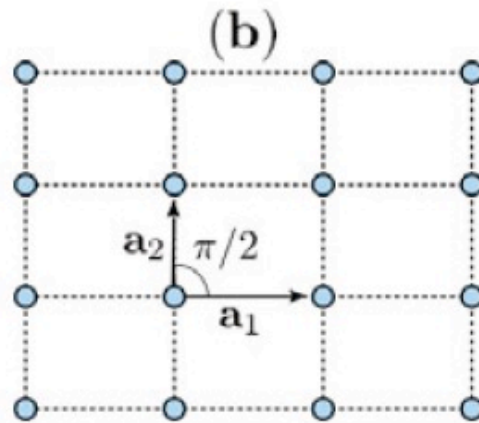
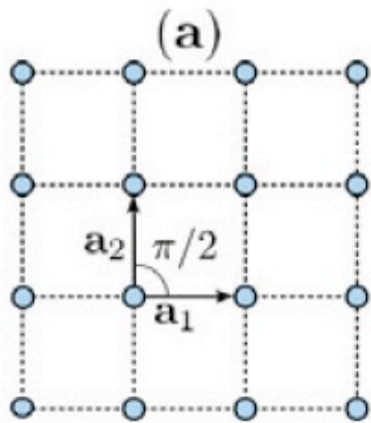
Набор преобразований симметрии, который переводит решетку саму в себя, причем узел решетки остается неподвижным, называется точечной группой симметрии.

Пространственная группа решетки Браве

Множество операций симметрии, принадлежащих точечной группе симметрии решетки, вместе с трансляционными симметриями определяет пространственную группу решетки Браве.



Решетки Браве в 2D



Свойства РБ в 2D

P1. Квадратная: $|a_1| = |a_2|$. a_1, a_2 расположены под углом $\phi = \pi/2$.

P2. Примитивная прямоугольная: $|a_1| \neq |a_2|$, and $\phi = \pi/2$.

P3. Центрированная прямоугольная: также, как в случае P2, только есть дополнительный узел в центре прямоугольника.

Заметим, что это ячейка с двумя узлами решетки, расположенными в центре и вершине прямоугольника. Ячейка, включающая более одного узла решетки и предназначенная для всех симметрий данной решетки, называется элементарной ячейкой. В частности, здесь элементарная ячейка на самом деле не является примитивной. Вместо этого последняя может быть представлена путём выбора начала координат ячейки в центре прямоугольника и выбором a_1 и a_2 в качестве векторов, соединяющих центр с двумя вершинами одного и того же прямоугольника. В этом представлении, $|a_1| = |a_2|$ и $\phi \neq \pi/2$.

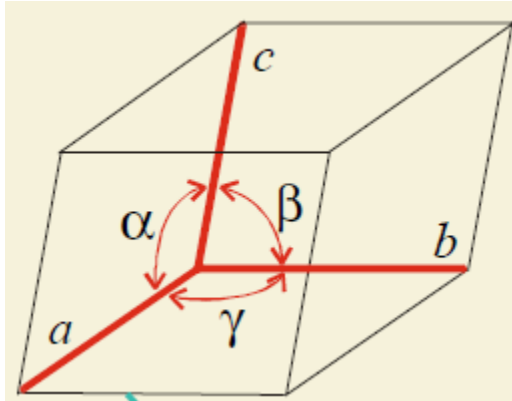
P4. косоугольная: $|a_1| = |a_2|$ и $\phi \neq \pi/2$.

P5. Гексагональная: $|a_1| = |a_2|$ and $\phi = 2\pi/3$.

Решётки Браве в 3D

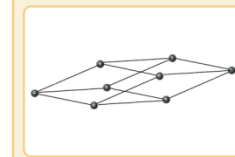
14 решеток Браве, которые могут быть выбраны в трех измерениях, можно разделить на семь подгрупп (сингоний) в соответствии с типом симметрии точечной группы. Это: кубическая, тетрагональная, орторомбическая, моноклинная, триклинная, тригональная и гексагональная сингонии.

7 кристаллических систем (сингоний),
14 решеток Браве



тригональная

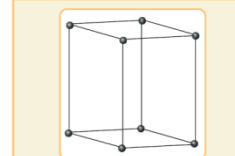
$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



простая

гексагональная

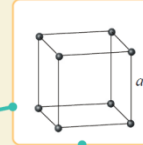
$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$



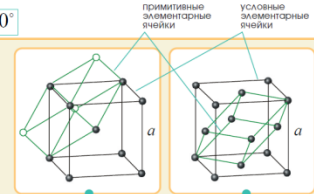
простая

кубическая

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



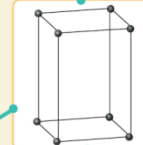
простая



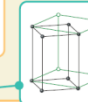
a - простояные решетки

тетрагональная

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



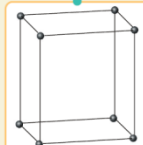
простая



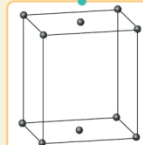
объемноцентрированная

ромбическая

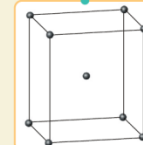
$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



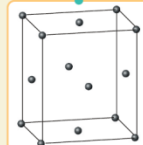
простая



базоцентрированная



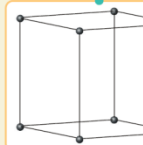
объемноцентрированная



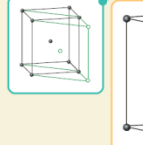
граноцентрированная

моноклинная

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



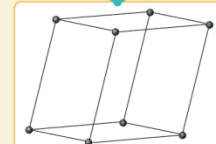
простая



базоцентрированная

триклинная

$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$

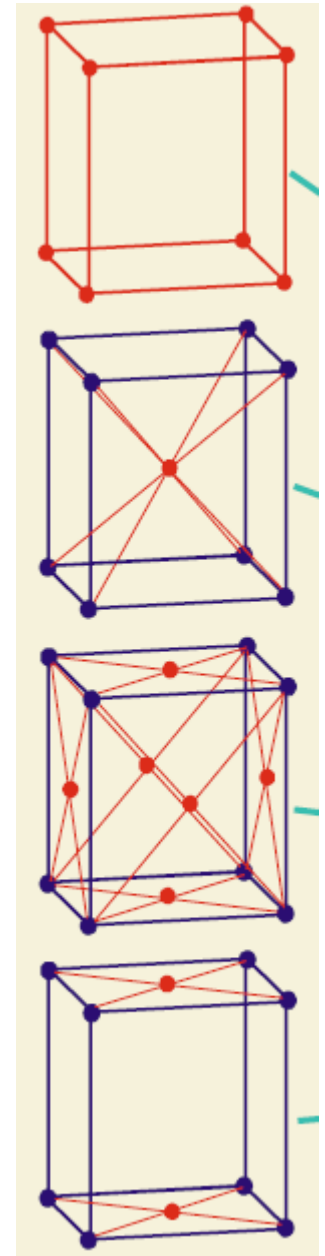


простая

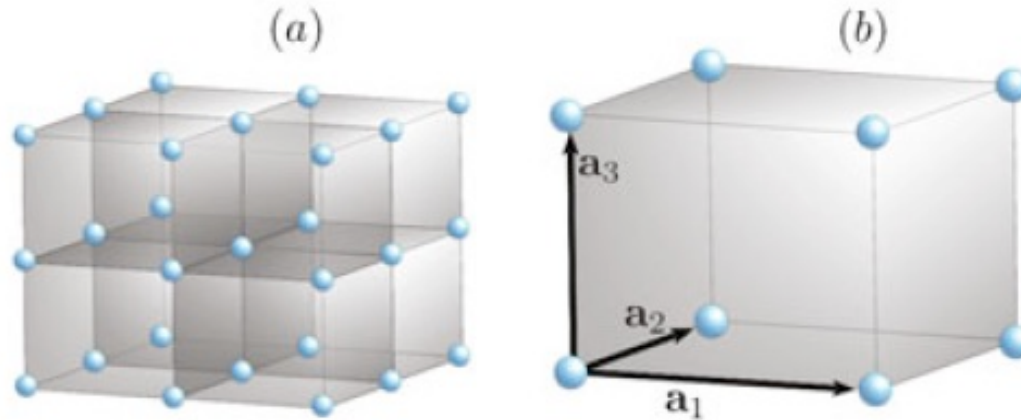
Выбор элементарных ячеек, показанных на рисунках, поясняет характер превращения одного типа решетки в другой при понижении симметрии

Кубическая сингония

Количество преобразований точечной группы симметрии-(это те, которые оставляют куб неизменным) равно 48. В кубической системе классифицируются четыре различных решетки Браве: простая кубическая, кубическая объемноцентрированная, кубическая гранецентрированная и кубическая базоцентрированная. Все они описаны ниже, так как большое разнообразие материалов имеет эти структуры.



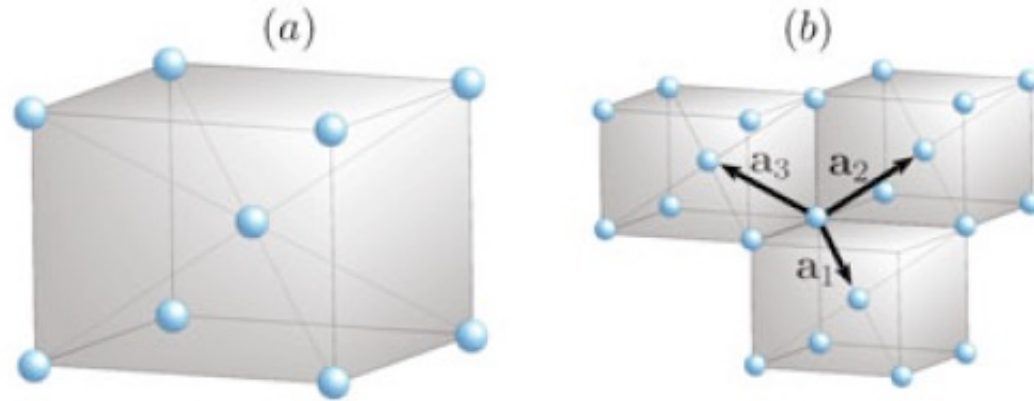
Простая кубическая



Решетки Браве в 3D. Кубическая система. Изображена простая кубическая решетка. а) конечная часть решетки. (б) примитивная ячейка

Объем примитивной ячейки равен $V_c = a^3$. Количество первых соседей-шесть, расположены в $(\pm a, 0, 0)$, $(0, \pm a, 0)$ и $(0, 0, \pm a)$ по отношению к точке отсчета. Число вторых соседей 12, расположенного в $(\pm a, \pm a, 0)$, $(0, \pm a, \pm a)$ и $(\pm a, 0, \pm a)$. Третьи соседи (третья координационная сфера) на 8 позициях $(\pm a, \pm a, \pm a)$.

Объёмно-центрированная кубическая



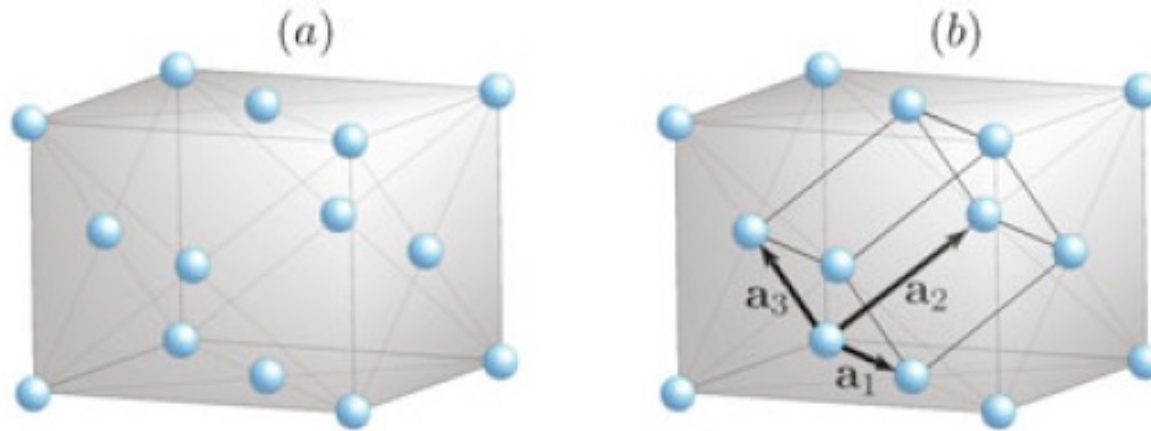
$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} - \hat{z}) \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \quad ; \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(-\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}).$$

Объем ячейки $V_c = a^3/2$. Из этого результата видно, что элементарная ячейка с объемом a^3 действительно содержит два объема примитивной ячейки.

Изображена кубическая решетка по центру тела. (a) элементарная ячейка. b) возможный выбор векторов \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 в примитивной ячейке

Решетка имеет 8 первых соседей, расположенных в $(\pm a/2, \pm a/2, \pm a/2)$, 6 вторых соседей в $(\pm a, 0, 0)$, $(0, \pm a, 0)$ и $(0, 0, \pm a)$, и 12 третьих соседей в $(\pm a, \pm a, 0)$, $(\pm a, 0, \pm a)$, и $(0, \pm a, \pm a)$.

Гранецентрированная кубическая



$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y}) \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \quad ; \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{z} - \hat{x}).$$

(a) элементарная ячейка. b) возможный выбор векторов \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 в примитивной ячейке

Объем равен $V_c = a^3 / 4$, что показывает, что обычная ячейка соответствует четырем примитивным ячейкам. Решетка имеет 12 первых соседей в точках $(\pm a/2, \pm a/2, 0)$, $(\pm a/2, 0, \pm a/2)$, и $(0, \pm a/2, \pm a/2)$, 6 вторых соседей в $(\pm a, 0, 0)$, $(0, \pm a, 0)$ и $(0, 0, \pm a)$, и 24 третьих соседей в $(\pm a, \pm a/2, \pm a/2)$, $(\pm a/2, \pm a, \pm a/2)$ и $(\pm a/2, \pm a/2, \pm a)$.

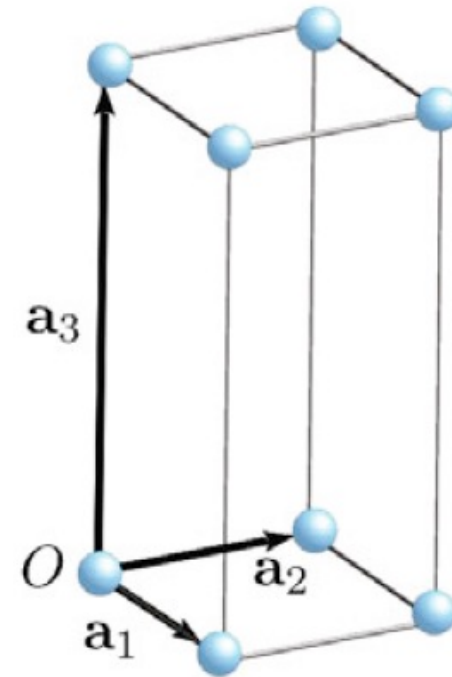
Тетрагональная система

Тетрагональная решетка образуется путем превращения куба в параллелепипед с квадратным основанием. Две различные решетки Браве классифицируются в тетрагональной сингонии: простая и объемно-центрированная тетрагональная решетки.

Простая тетрагональная решётка Браве

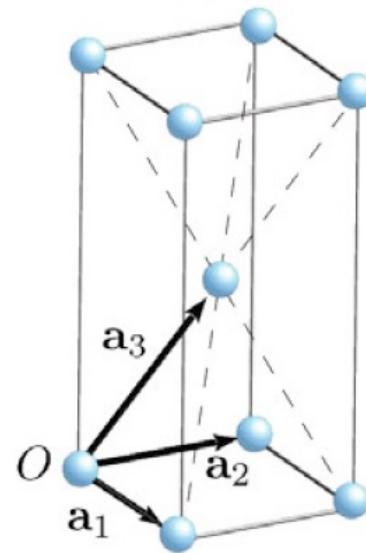
Объем решётки: $V_c = a^2c$.

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{X}} \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{Y}} \quad ; \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{\mathbf{Z}}.$$



Объёмно-центрированная тетрагональная

Объём ячейки равен $V_c = a^2c/2$.



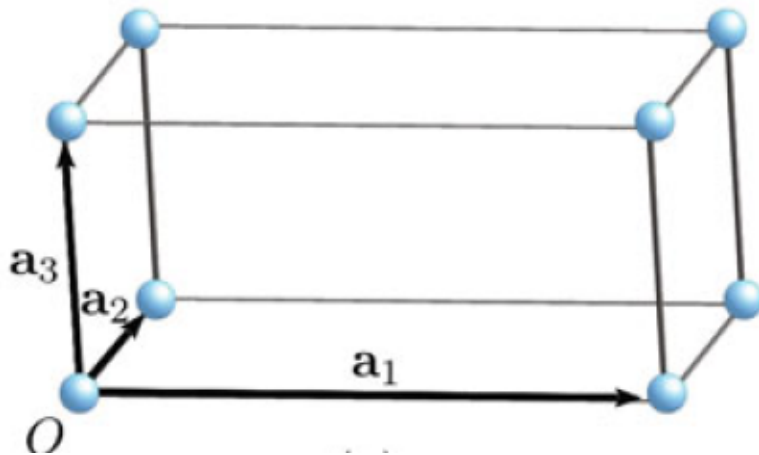
$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{x}} \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}) + \frac{c}{2}\hat{\mathbf{z}}.$$

Орторомбическая система

Орторомбическая система образуется из тетрагональной сингонии, путем отмены требования того, чтобы основание имело квадратную форму. Четыре разные решетки Браве относятся к орторомбической системе: простая, базоцентрированная, объёмно-центрированная и гранецентрированная орторомбические решетки.

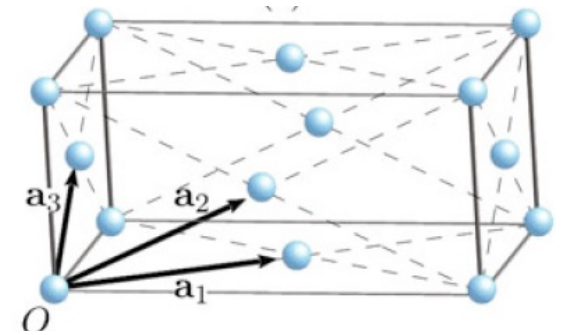
Простая орторомбическая решётка Браве

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{x}} \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = b\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{\mathbf{z}}.$$

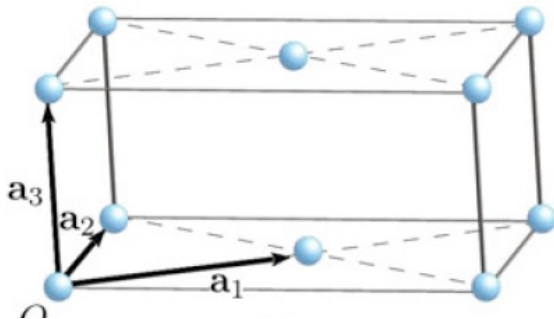


Орторомбическая система (продолжение)

Базоцентрированная орторомбическая и
гранецентрированная орторомбическая

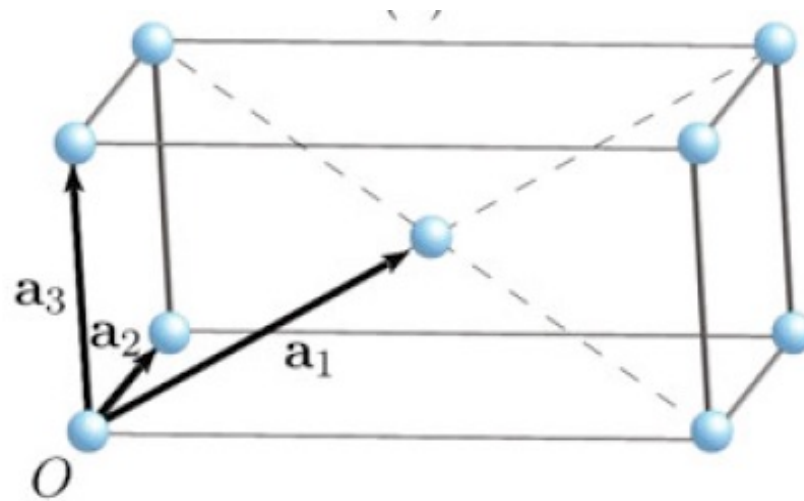


$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{b}{2}\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{c}{2}\hat{\mathbf{z}} \quad ; \quad \mathbf{a}_3 = \frac{b}{2}\hat{\mathbf{y}} + \frac{c}{2}\hat{\mathbf{z}}.$$



$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{b}{2}\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = b\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{\mathbf{z}}.$$

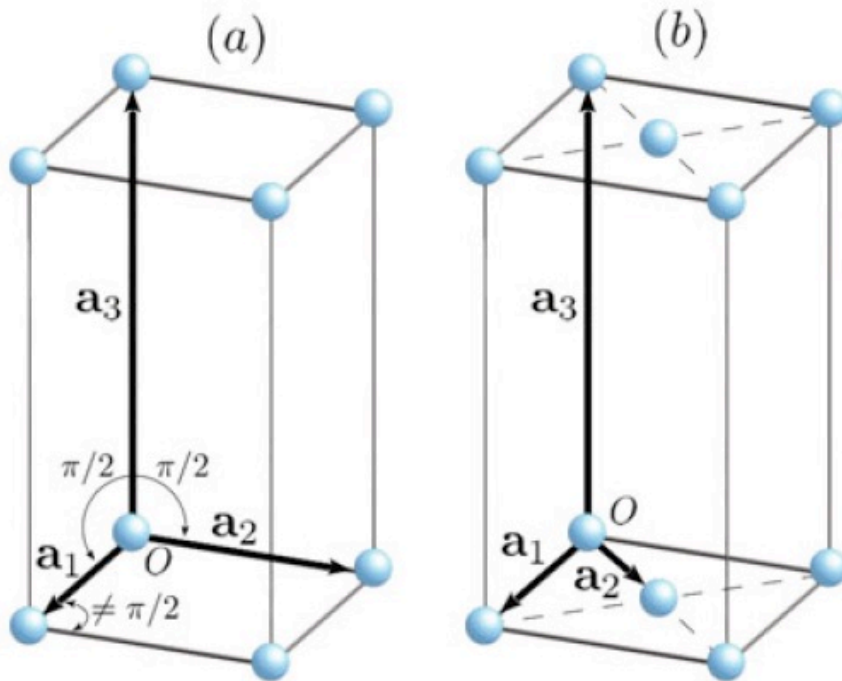
Объёмно-центрированная орторомбическая



$$\mathbf{a}_1 = \frac{a\hat{\mathbf{x}}}{2} + \frac{b\hat{\mathbf{y}}}{2} + \frac{c\hat{\mathbf{z}}}{2}, \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{a}_3 = b\hat{\mathbf{y}}$$

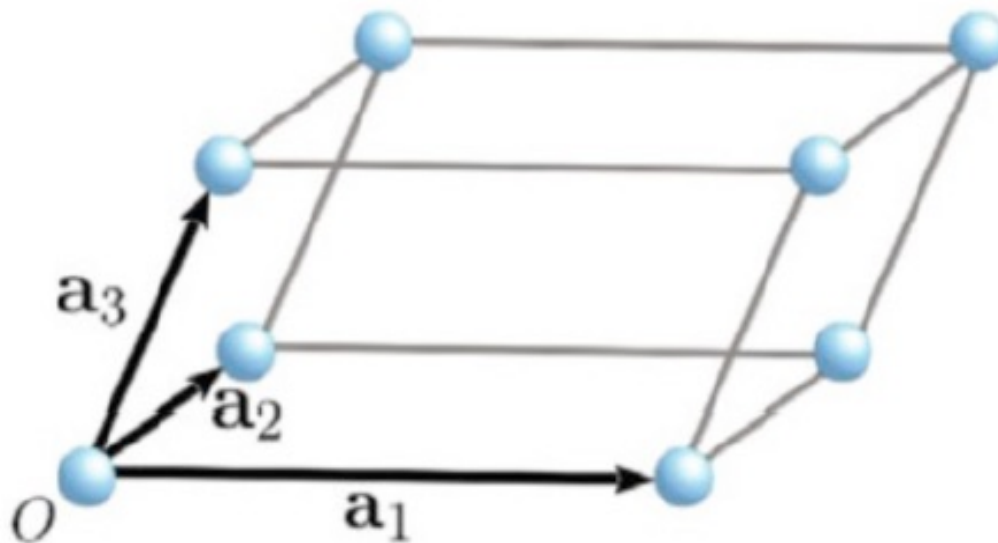
Моноклиная система

Моноклиная система образуется из орторомбической сингонии, путем замены основания на ромб. Две различные решетки Браве классифицируются в моноклиной системе, простой и базоцентрированной.



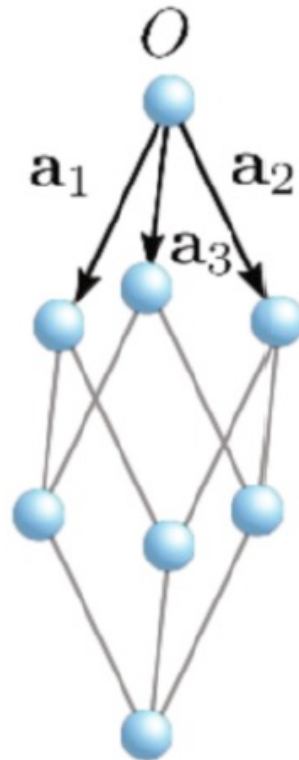
Триклинная система

Триклинная система происходит от моноклинной, после введения косоугольного вектора \mathbf{a}_3 относительно направления ортогональной плоскости, содержащей \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 .



Тригональная система

Тригональная система образуется из простой кубической решетки, путем деформации куба вдоль его диагонали: все грани являются ромбами, и каждая вершина состоит из трех углов, каждый из которых образует один и тот же угол.



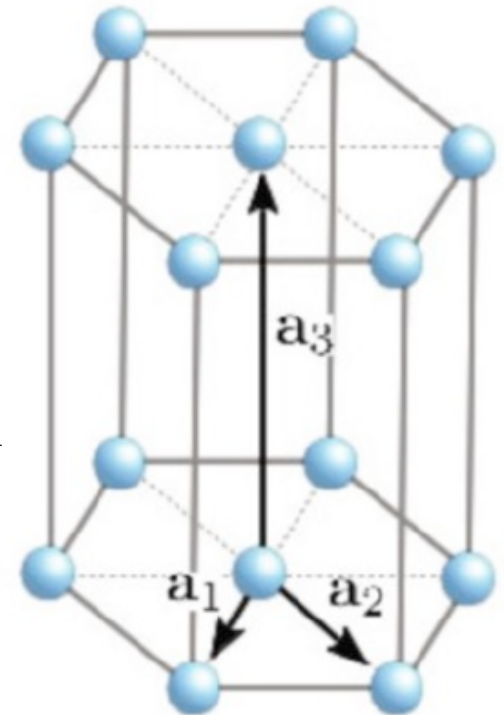
Гексагональная система

Гексагональная система получается путем наложения гексагональных решеточных плоскостей одна над другой, на расстоянии c . Наложение выполнено так, что соответствующие узлы решетки в смежных плоскостях будут соединены линиями перпендикулярными к плоскостям, как показано на рисунке

$$\mathbf{a}_1 = -\frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{\mathbf{z}},$$

где a -размер стороны шестигранника. Объем ячейки равен $V_c = \sqrt{3}a^2c / 2$.

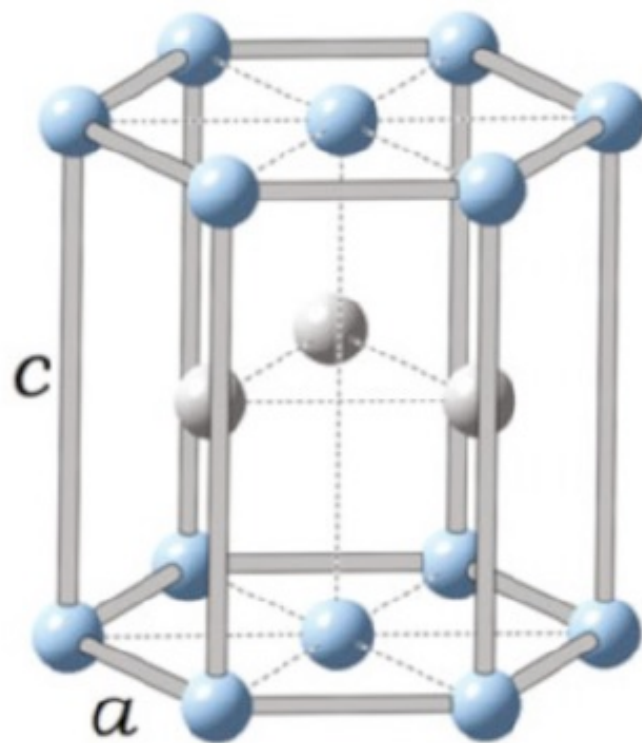
Оказывается, что $c > a$ во всех материалах, связанных с гексагональной решеткой, и, таким образом, число ближайших соседей равно 6.



Гексагональная плотно-упакованная решетка

Второй тип гексагональной решетки встречается в реальных материалах. Это так называемая гексагональная плотно упакованная решетка г.п.у. В этой структуре дополнительная плоскость решетки лежит между двумя смежными плоскостями решетки простой шестиугольной структуры и расположена на среднем расстоянии $c/2$ между ними. Дополнительная плоскость решетки устроена так, что перпендикулярная линия, соединяющая два участка решетки, принадлежащих двум исходным плоскостям, попадает в барицентр средней плоскости, как показано на рисунке. Относительная ориентация точек в средней решетке отличается от ориентации лежащей в основании плоскости. Таким образом, г.п.у. решётка сама по себе не будет решеткой Браве. Однако её можно описать как решетку Браве с базовыми векторами, причем последние имеют координаты $(0,0,0)$ и $(a/2, a/(2\sqrt{3}), c/2)$ от начала координат. Связь между значениями a и c может быть получена из простых геометрических соображений, в приближении, когда атомы ведут себя как жесткие сферы соприкасающиеся друг с другом. Для гексагональной плотноупакованной структуры таким образом получаем $c/a = 8/3 = 1.63299$.

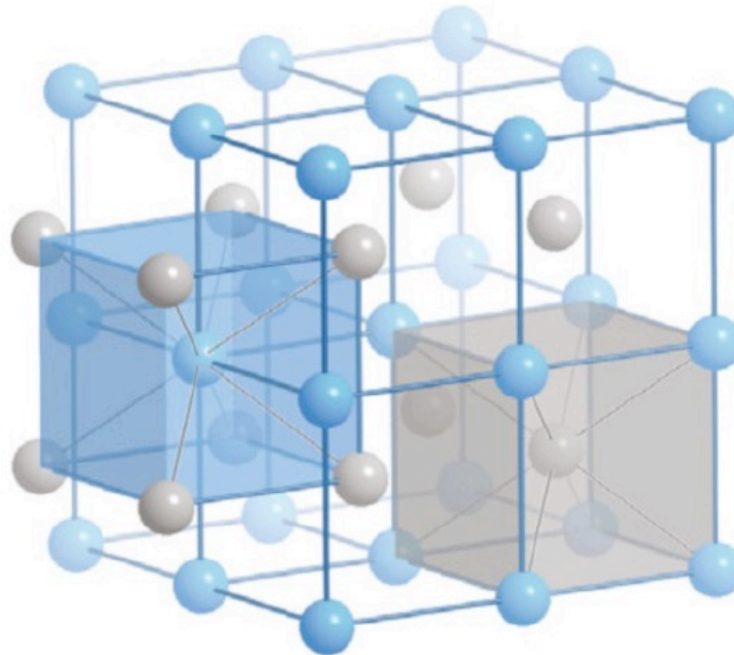
Г.п.у. решётка



Кристаллическая структура химических соединений

Примеры здесь ограничены тремя значимыми и часто встречающимися типами структур, в которые кристаллизуются соединения двух элементов.

Структура **CsCl**. Часто встречающаяся структура, в которую выкристаллизовываются ионные соли щелочных элементов. Очевидно, что каждый ион одного вида окружен восемью ионами другого вида.



Compound	a (Å) ^a		Compound	a (Å) ^a
CsBr	4.286		TlCl	3.834
CsI	4.567		TlBr	3.97
RbCl	3.74		TlI	4.198
ThTe	3.827			

^a Experimental values

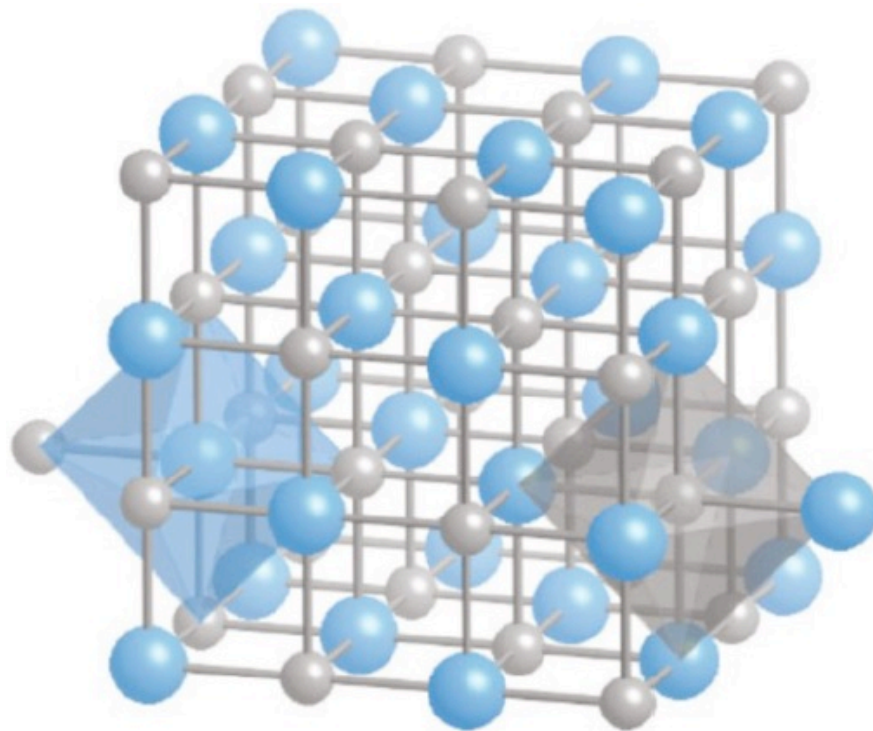
Таким образом, структуру CsCl можно охарактеризовать как простую кубическую решетку с базисом из двух атомов. Два атома базиса, один Cs и второй Cl, находятся на $(0,0,0)$ и $(a/2,a/2,a/2)$. Параметр решетки CsCl $a = 4.123 \text{ \AA}$.

Простые геометрические соображения помогают классифицировать пары ионов, которые могут кристаллизоваться в структуру CsCl в соответствии с размером их ионных радиусов R_1 и R_2 , скажем, Cs (меньший радиус) и Cl (большой радиус). Рисунок сразу показывает, что возможные значения для R_1 и R_2 ограничены условиями $R_1 + R_2 = \sqrt{3}a / 2$ и $2R_2 \leq a$. В результате получается $R_2 / R_1 \leq 1 / (\sqrt{3}-1)$.

Структура NaCl.

Другие соли щелочных металлов кристаллизуются в структуру, именуемую структурой хлорида натрия

Структуру **NaCl** можно описать как гранецентрированную кубическую решетку с базисом из двух атомов.



Два атома базиса в примитивной ячейке, один Na и один Cl, находятся в (0,0,0) и (a/2,0,0). В обычной ячейке, ионы Na находятся в (0,0,0), (a/2,a/2,0), (0,a/2,a/2) и (a/2,0 a/2), а ионы Cl находятся в (a/2,0,0), (0,a/2,0), (0,0,a/2) и (a/2,a/2,a/2).

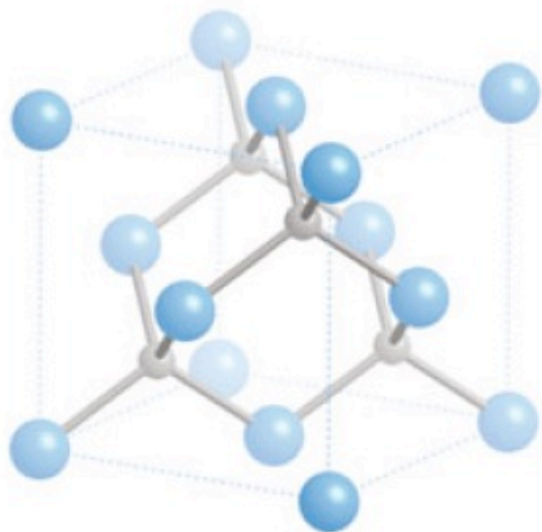
Геометрические соображения, сходные с рассмотренными для CsCl, приводят к выводу, что ионные радиусы ионных соединений, кристаллизующихся в эту структуру, должны удовлетворять условиям $R_1+R_2 = a/2$ и $2R_2 \leq \sqrt{2}a/2$, то есть $R_2/R_1 \leq 1/(\sqrt{2}-1)$.

Compound	a (Å) ^a	Compound	a (Å) ^a	Compound	a (Å) ^a
LiH	4.085	AgCl	5.547	RbH	6.037
LiF	4.027	AgBr	5.775	RbF	5.64
LiCl	5.120	MgO	4.211	RbCl	6.58
LiBr	5.501	CaO	4.81	RbBr	6.85
LiI	6.000	CdO	4.695	RbI	7.342
KH	5.70	NaH	4.88	MnO	4.445
KF	5.347	NaF	4.620	FeO	4.31
KCl	6.293	NaCl	5.63	NiO	4.168
KBr	6.60	NaBr	5.973	TiO	4.177
AgF	4.92	NaI	6.473	MnS	5.224

^a Experimental values

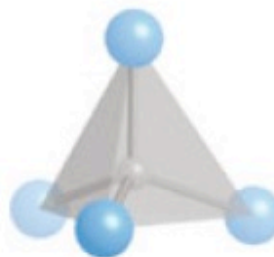
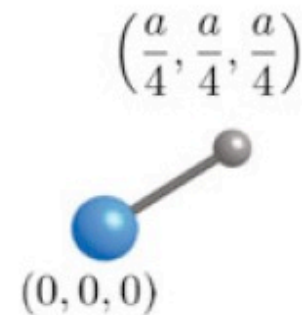
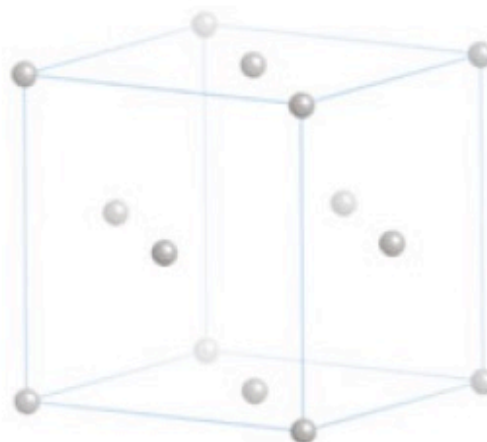
ZnS. Структура цинковой обманки

conventional unit cell

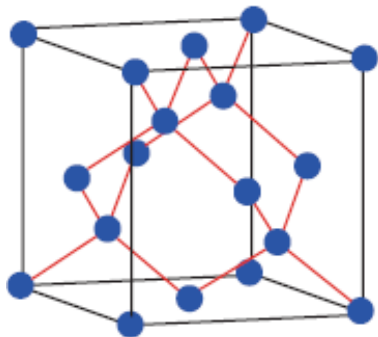


Элементарная ячейка

fcc Bravais lattice + 2 atom basis

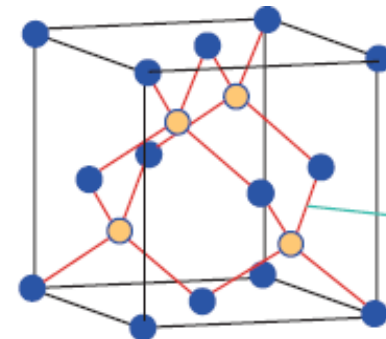
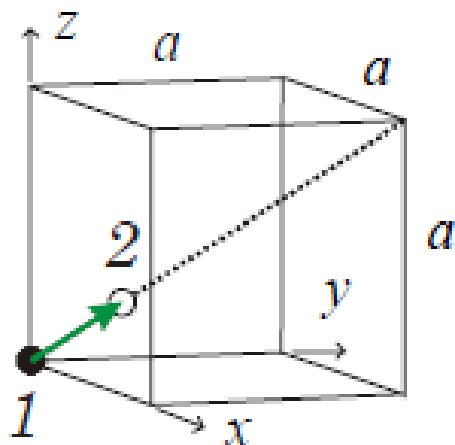


coordination
number = 4



Алмаз

базис :



Цинковая
обманка

$$\mathbf{r}_1 = 0$$

$$\mathbf{r}_2 = \frac{a}{4} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$$

$\mathbf{e}_{x, y, z}$ —
единичные орты

Структура сульфида цинка (цинковой обманки): гранецентрированная кубическая решетка с двухточечным базисом из ионов цинка Zn^{2+} и серы S^{2-} .

Такое же геометрическое рассмотрение, как и для CsCl и NaCl структур, приводит к условиям $R_1 + R_2 = \sqrt{3}a/4$ и $2R_2 \leq \sqrt{2}a/2$, или

$$R_2/R_1 \leq 1 / \left[(3/2)^{\frac{1}{2}} - 1 \right]$$

Радиусы ионов должны удовлетворять этим условиям, чтобы химическое соединение имело вероятность кристаллизоваться в структуру ZnS.

Compound	a (Å) ^a	Compound	a (Å) ^a
BN	3.615	AlP	5.451
BP	4.538	AlAs	5.62
BAs	4.777	AlSb	6.1347
GaP	5.4505	InP	5.8687
GaAs	5.6537	InAs	6.036
GaSb	6.118	InSb	6.4782
CdS	5.818	HgS	5.8517
CdTe	6.480	HgTe	6.429
CuF	4.255	ZnS	5.4093
CuCl	5.4057	ZnSe	5.6676
CuBr	5.6905	ZnTe	6.089
CuI	6.0427		

^a Experimental values