

УДК 531.7+621.38

Л.Н. Королевич, А.В. Борисов, канд.тех.наук, А.В. Шевлякова

Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»,
ул. Политехническая, 16, корпус 12, г. Киев, 03056, Украина.

Физическая модель межузлового аспекта пространственной кристаллической решетки

В работе рассматривается проблематика физической инвариантности межузлового аспекта кристаллической решётки и его обобщение на все пространственные фёдоровские группы. Доказана физическая тождественность межузлового и узлового аспектов кристаллической решётки. Показана применимость межузлового аспекта к решению задачи о плотности поверхностных состояний. Библиография, рис. 23.

Ключевые слова: межузловой аспект; кристаллическая решетка; Правильная система точек; группы Федорова; решетка Браве; кристаллофизика; наноэлектроника.

Введение

Для решения теоретической задачи нахождения численного значения плотности поверхностных состояний на границе раздела полупроводник-диэлектрик, как показано в [5], может быть использована концепция межузлового аспекта кристаллической решетки, феноменологическое описание которого дано в [4]. Последний подход, в отличие от классического представления кристаллической решетки (узловой аспект), позволяет построить физико-математические модели ограниченного кристаллического континуума, в частности, границ раздела кристалл-вакуум, двух кристаллических веществ и др.. Тем не менее, для применения этой концепции требуется построение строгой физико-математической теории межузлового аспекта кристаллической решетки, а именно, доказательства тождества (как математического, так и физического) этого и классического представлений. Так в работе [3] показано, что, с точки зрения математического описания кристаллической решетки, межузловой и узловой аспекты равноценны. Однако, остался открытым вопрос о тождественности описания физических свойств кристалла в обоих аспектах. Рассмотрим последнее более подробно.

Проблематика описания физических свойств кристалла в межузловом аспекте кристаллической решётки.

Феноменологичность межузлового аспекта кристаллической решётки в одно и тоже время является как достоинством, так и недостатком такой интерпретации кристаллической решетки [4]. Последнее обусловлено тем, что рассматриваемые сдвиги начала координат отсчёта ячейки приводят к установлению нового начала отсчёта внутри изначально рассматриваемой кристаллической ячейки. Из этого сразу следует, что предполагается неизменность физических свойств как прежней точки отсчёта, так и нововведённой, т.е., это требование является основой для построения физически непротиворечивой теории кристаллической решётки. Иначе говоря, выше сформулированная задача сводится к доказательству того, что математический перенос начала системы отсчёта в классическом (узловом) аспекте пространственной кристаллической решётки в точки, указанные в работе [4], не изменяет физических свойств плоскостей и рёбер новой – межузловой ячейки.

Поставленную задачу можно решить в рамках концепции правильной системы точек (ПСТ) [3,4], а именно, на основании того факта, что ПСТ общего положения, будучи геометрическим объектом, описывает не только действие элементов пространственной симметрии в целом, но и физические свойства узла кристаллической ячейки. Рассмотрим сказанное на самом общем случае – на фёдоровской группе P1, которой соответствует решётка Браве типа P – триклинная примитивная решётка.

Примитивная решётка P1

ПСТ кристаллической решётки фёдоровского класса P1 состоит из 1 точки, кристаллографических координатах которой (x, y, z) [1], чего явно недостаточно для наглядного описания полной симметрии узла такой решётки. Последнее легко восполнить дополнительным построением необходимого числа иных ПСТ, в частности таких, которые повторяют общую асимметричность указанной ячейки. Так из требования сдвига начала координат на половину длины объёмной диагонали ячейки [4] следует нали-

чие 8 таких возможных сдвигов (по 2 сдвига для каждой из четырех объемных диагоналей). В силу последнего построим 8 различных ПСТ так, чтобы каждая точка отдельно взятой ПСТ находилась на объемной диагонали исходной ячейки и при этом расстояние между точками из различных ПСТ было пропорционально длине сторон соответственного ребра исходной ячейки. Очевидно, что в таком случае, указанный набор ПСТ будет окружать каждый узел исходной решётки так, что центр тяжести такого набора ПСТ будет точным местоположением узла исходной решётки (рис. 1). Следует отметить то, что каждая точка в указанном наборе ПСТ не является физически тождественной любой другой точке из введённого набора точек. Более того, такая трактовка лишней раз подчёркивает асимметричность рассматриваемой фёдоровской группы, т.е. полное отсутствие элементов симметрии.

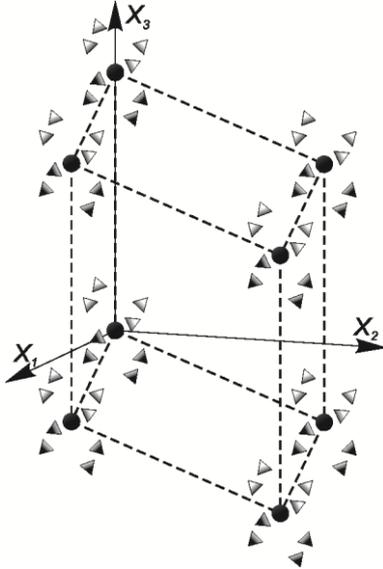


Рис. 1. Исходный набор ПСТ пространственной группы P1

Применяя к указанному набору ПСТ правило сдвига на половину длины объемной диагонали исходной ячейки получим набор ПСТ, обладающий рядом новых свойств (рис. 2). Полученный набор ПСТ сосредоточится вокруг геометрического центра тяжести исходной триклинной ячейки. В силу того, что ПСТ является системой точек окружающую узел ячейки, следует считать изначальный геометрический центр тяжести исходной ячейки – точкой с симметрией тождественной симметрии исходных узлов. Эту точку будем называть узлом тождественной симметрии. Таким образом, в случае перехода от узлового аспекта к межузловому аспекту решётки типа P1 получаем, что начало отсчёта координатной системы узлового аспек-

та переносится в геометрический центр исходной ячейки – узел тождественной симметрии. Последнее равнозначно утверждению, что решётка переходит сама в себя и, следовательно, при этом сохраняется форма описания физических свойств кристалла.

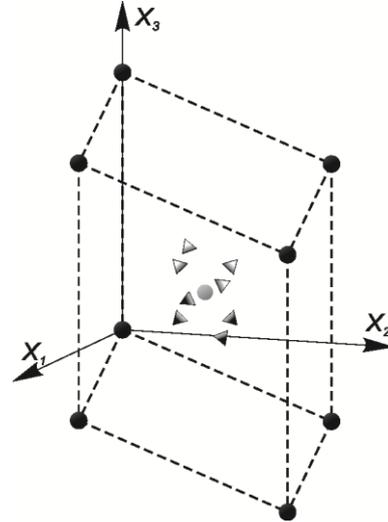


Рис. 2. Набор ПСТ тождественной симметрии пространственной группы P1

Совмещая набор ПСТ исходной узловой решётки (рис. 1) с набором ПСТ тождественной симметрии (рис. 2) получим расширенный набор ПСТ триклинной решётки P1 (рис. 3) и, как следствие, расширенный набор точек тождественной симметрии, представляющий собой совмещение вариаций описания кристаллической решётки. Очевидно, что полученные вариации решётки P1 (рис. 4) в точности соответствуют классическому (узловому) и межузловому аспектам пространственной решётки P1.

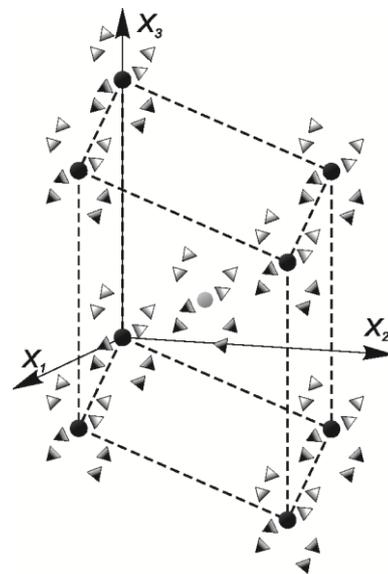


Рис. 3. Расширенный набор ПСТ пространственной группы P1

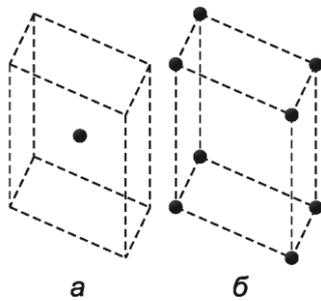


Рис. 4. Вариации представления пространственной группы P1

Обобщение результатов на все фёдоровские группы

Обобщим полученный результат на все фёдоровские группы симметрии кристаллов на основании того, что любая более симметричная группа обязана включать в себя менее симметричную группу. Так как любая элементарная ячейка может быть описана в терминах примитивной ячейки, следует, что группа P1 входит во все фёдоровские группы. Таким образом, полученные в п.3 результаты применимы ко всем фёдоровским группам.

В качестве фактического подтверждения вышеизложенного рассмотрим кристаллическую решётку пространственной группы P222, у которой, в отличие от группы P1, набор ПСТ состоит уже из четырёх точек, кристаллографические координаты которых: (x, y, z) , (\bar{x}, \bar{y}, z) , (\bar{x}, y, \bar{z}) , (x, y, \bar{z}) [1]. Поскольку исходный набор ПСТ окружает каждый узел исходной ячейки геометрическим тетраэдром (обозначен серыми звёздочками на рис. 5), дополним его построением сопряженного набора ПСТ так, чтобы он окружал узел исходной ячейки в виде отражённого тетраэдра, причём геометрически равного исходному (обозначен серыми шарами на рис. 5).

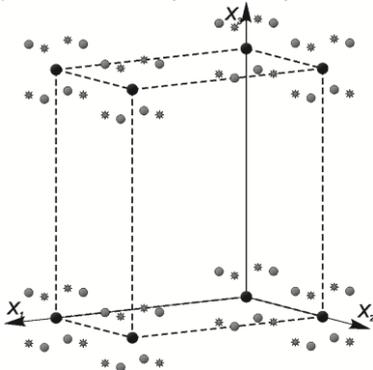


Рис. 5. Исходный набор ПСТ пространственной группы P222

Применяя к данному набору ПСТ правило сдвига на половину длины объёмной диагонали исходной ячейки, получим набор ПСТ тождественной симметрии (рис. 6). Далее, совмещая исходный набор ПСТ и набор ПСТ тождественной симметрии, получим расширенный набор ПСТ пространственной группы P222 (рис. 7). Последний, как и в случае группы P1, приводит всего лишь к двум вариациям описания кристаллической решётки (рис. 8). Сравнивая рис. 4 и рис. 8, убеждаемся в идентичности полученных результатов, а именно, в наличии всего двух возможных вариаций описания кристаллической решётки.

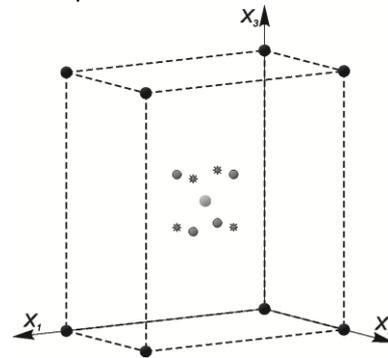


Рис. 6. Набор ПСТ тождественной симметрии пространственной группы P222

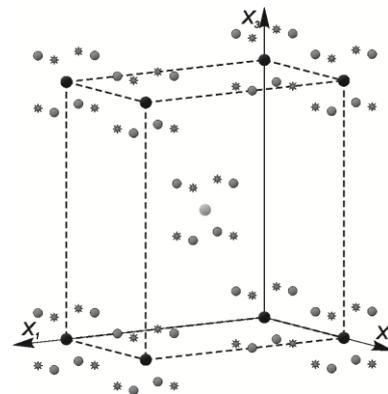


Рис. 7. Расширенный набор ПСТ пространственной группы P222

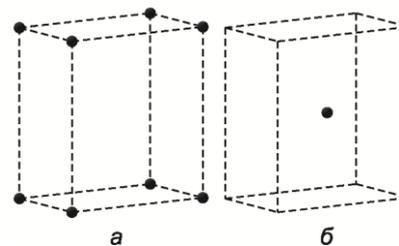


Рис. 8. Вариации представления пространственной группы P222

Фёдоровские группы с ячейками отличными от ячейки типа Р

Прежде всего, покажем тождественность классического и межузлового аспектов кристаллической решётки для пространственных групп, которые описываются ромбоэдрической (тип R) и гексагональной (тип H) ячейками.

В силу того, что ромбоэдрическая ячейка является примитивной ячейкой (как и ячейка пространственной группы P1) сразу следует, что полученные выше результаты тождественности классического и межузлового аспекта для ячейки пространственной группы P1 являются верными для всех ячеек типа R.

Случай гексагональной ячейки, которая является простой комбинацией трех примитивных ячеек [2], требует рассмотрения не всей ячейки целиком, а только ее трети. Из того, что треть элементарной гексагональной ячейки представляет собой примитивный параллелепипед (как и ячейка пространственной группы P1), сразу следует, что этот случай сводится к случаю ячейки пространственной группы P1.

Федоровские группы с базоцентрированной ячейкой (типа A, B, C) рассмотрим на примере группы с наименьшей симметрией (C2). ПСТ этой группы по отношению к отдельно взятому исходному узлу состоит из двух точек, кристаллографические координаты которых: (x, y, z) , $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ [1] (на рис. 9 - темно-серые звездочки), чего явно недостаточно для наглядного описания полной симметрии узла такой решётки. Дополним исходную ПСТ построением сопряженных наборов ПСТ так, чтобы узел исходной ячейки был окружен точками в виде параллелепипеда подобного параллелепипеду исходной элементарной ячейки (на рис. 9 точки сопряженных наборов ПСТ - светло-серые звездочки и шестиугольники).

Применяя к данному набору ПСТ правило сдвига по диагонали центрированной грани на четверть ее длины и, затем, по ее нормали на половину параметра решётки этого направления [4] исходной ячейки получим набор ПСТ тождественной симметрии (рис. 10). Для восстановления полной симметрии полученного набора ПСТ (аналогично исходному набору ПСТ) требуется построение набора ПСТ сопряженного ему в результате чего получим дополненный набор ПСТ тождественной симметрии (рис. 11). Совмещая последний и исходный наборы ПСТ, и производя тот же сдвиг (по диагонали центрированной грани на четверть ее длины и, затем, по ее нормали на половину па-

раметра решётки этого направления), получим расширенный набор ПСТ (рис. 12), из которого следует, что пространственную группу C2 можно описать в четырех равноправных аспектах (рис. 13). Интересно отметить факт исчезновения половины точек в полученном наборе ПСТ по сравнению с исходным, что можно трактовать как двукратное вырождение исходного набора ПСТ.

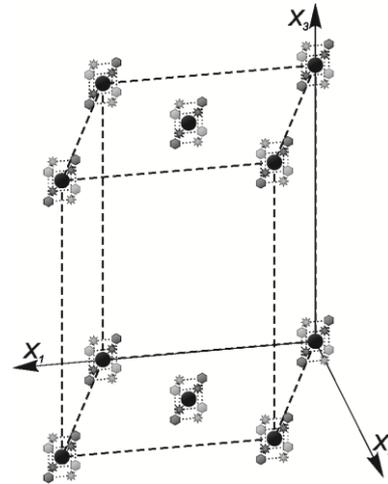


Рис. 9. Исходный набор ПСТ пространственной группы C2

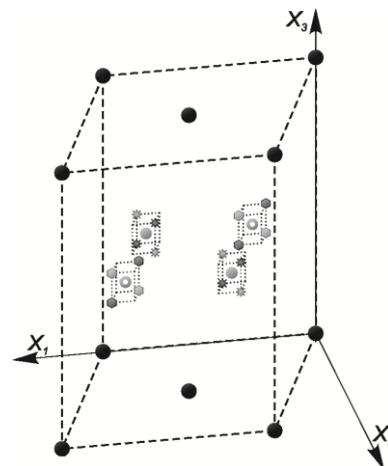


Рис. 10. Набор ПСТ тождественной симметрии пространственной группы C2

Для доказательства тождественности классического и межузлового аспектов кристаллической решётки, соответствующей пространственным группам, которые описываются объёмно- (тип I) или гранецентрированной (тип F) ячейками, учтём тот факт, что они могут быть представлены соответственными примитивными ячейками [2] и, следовательно, доказательство будет неотличимо от случая пространственной группы P1. Тем не менее, такой подход не позволяет доказать тождественность аспектов для элементарной ячейки. В силу последнего рас-

смотрим эти ячейки по отдельности для случая фёдоровских групп наименьшей симметрии, т.е. результат такого подхода будет общим для всех групп с более высокой симметрией.

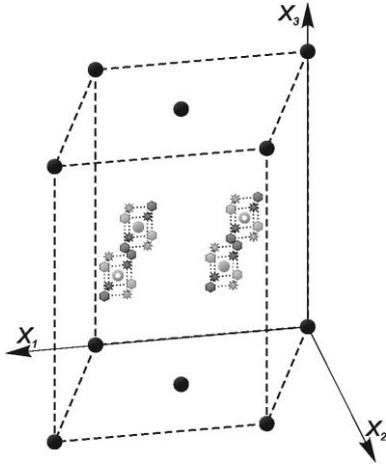


Рис. 11. Дополненный набор ПСТ тождественной симметрии пространственной группы C2

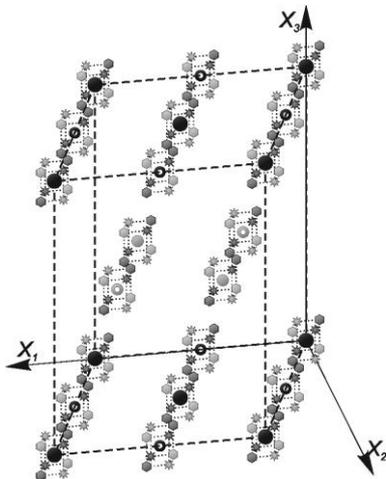


Рис. 12. Расширенный набор ПСТ пространственной группы C2

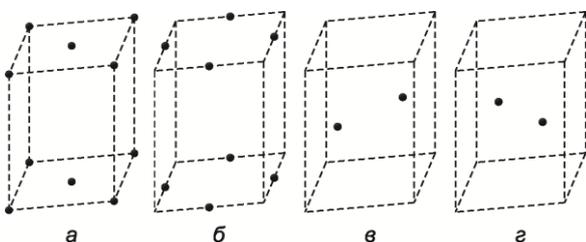


Рис. 13. Вариации представления пространственной группы C2

Гранецентрированные фёдоровские группы

Гранецентрированной фёдоровской группой минимальной симметрии является группа F222. Набор ПСТ этой группы по отношению к отдельно взятому исходному узлу состоит из че-

тырёх точек, кристаллографические координаты которых: (x, y, z) , (\bar{x}, \bar{y}, z) , (\bar{x}, y, \bar{z}) , (x, y, \bar{z}) , [1] и окружает каждый узел исходной ячейки геометрическим тетраэдром (обозначен серыми шарами на рис. 14), дополним его построением сопряженного набора ПСТ так, чтобы он окружал узел исходной ячейки в виде отражённого тетраэдра, причём геометрически равного исходному (обозначен серыми звёздочками на рис. 14).

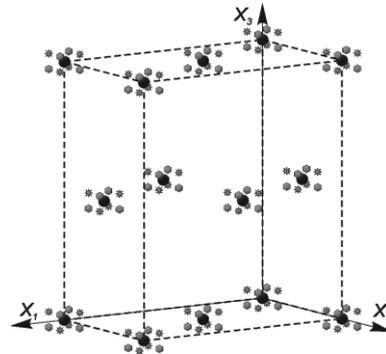


Рис. 14. Исходный набор ПСТ пространственной группы F222

Применяя к данному набору ПСТ правило сдвига на четверть длины объёмной диагонали исходной ячейки получим набор ПСТ тождественной симметрии (рис. 15). Особенностью этого набора ПСТ является факт исчезновения половины точек исходного набора, т.е. наблюдается двукратное вырождение исходного набора ПСТ. Тем не менее, как и в исходном наборе ПСТ, полученный набор ПСТ окружает точку тождественной симметрии, что, в свою очередь, требует введения сопряженного набора ПСТ (рис. 16). Совмещая последний вариант с исходным и производя аналогичное правило сдвига на четверть длины объёмной диагонали указанной ячейки получим расширенный набор ПСТ (рис. 17).

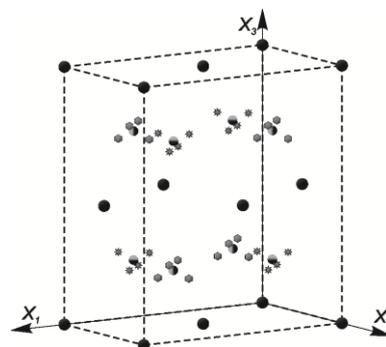


Рис. 15. Набор ПСТ тождественной симметрии пространственной группы F222

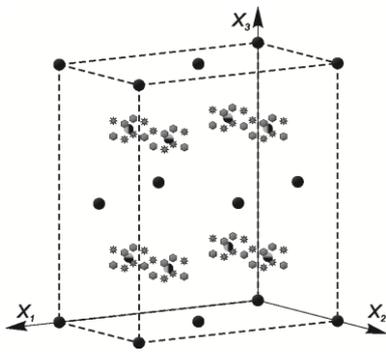


Рис. 16. Дополненный набор ПСТ тождественной симметрии пространственной группы F222

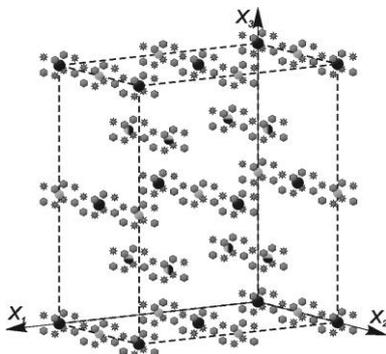


Рис. 17. Расширенный набор ПСТ пространственной группы F222

Анализ расширенного набора ПСТ (рис. 17) позволяет утверждать, что пространственную группу F222 можно описать в четырёх равноправных аспектах (рис. 18).

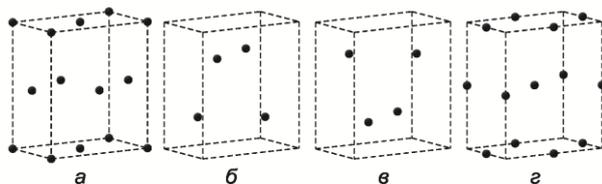


Рис. 18. Вариации представления пространственной группы F222

Объёмноцентрированные фёдоровские группы

Объёмно-центрированной фёдоровской группой минимальной симметрии является группа I222. Набор ПСТ этой группы по отношению к отдельно взятому исходному узлу состоит из четырёх точек, кристаллографические координаты которых: (x, y, z) , (\bar{x}, \bar{y}, z) , (\bar{x}, y, \bar{z}) , (x, \bar{y}, \bar{z}) , [1] и окружает каждый узел исходной ячейки геометрическим тетраэдром (обозначен

серыми звёздочками на рис. 19), дополним его построением сопряженного набора ПСТ так, чтобы он окружал узел исходной ячейки в виде отражённого тетраэдра, причём геометрически равного исходному (обозначен серыми шарами на рис. 19).

Применяя к данному набору ПСТ правило сдвига на четверть длины объёмной диагонали исходной ячейки получим набор ПСТ тождественной симметрии (рис. 20). Особенностью этого набора ПСТ является факт исчезновения трёх четвертей точек исходного набора, т.е. наблюдается четырёхкратное вырождение исходного набора ПСТ. Тем не менее, как и в исходном наборе ПСТ, полученный набор ПСТ окружает точку тождественной симметрии геометрическим тетраэдром, что, в свою очередь, требует введения сопряженного набора ПСТ (рис. 20). Совмещая последний вариант с исходным и производя аналогичное правило сдвига на четверть длины объёмной диагонали указанной ячейки получим расширенный набор ПСТ (рис. 22). Из последнего сразу следует, что пространственную группу I222 можно описать в восьми равноправных аспектах (рис. 23).

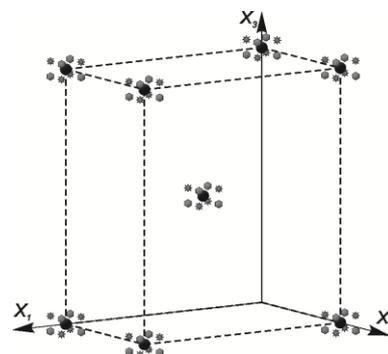


Рис. 19. Исходный набор ПСТ пространственной группы I222

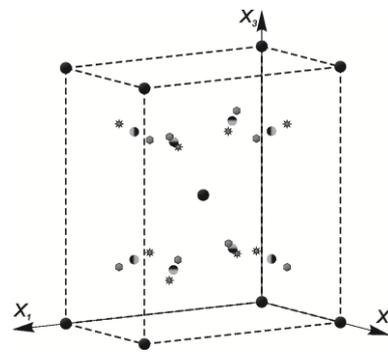


Рис. 20. Набор ПСТ тождественной симметрии пространственной группы I222

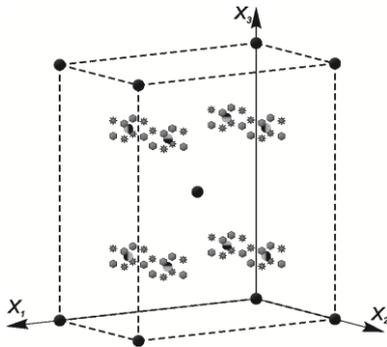


Рис. 21. Дополненный набор ПСТ тождественной симметрии пространственной группы I222

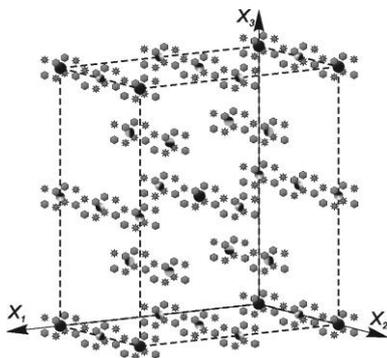


Рис. 22. Расширенный набор ПСТ пространственной группы I222

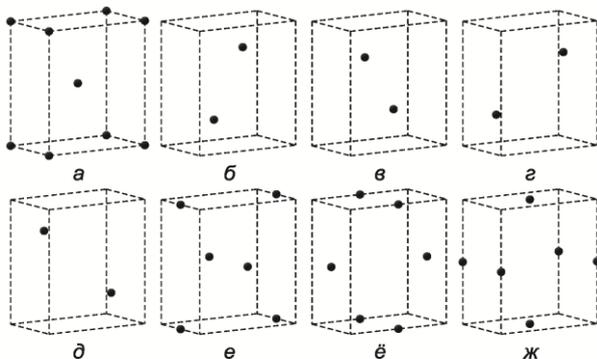


Рис. 23. Вариации представления пространственной группы I222

Сравнение объёмно- и гранецентрированных фёдоровские группы

Особый интерес вызывает схожесть описания, в терминах расширенных ПСТ, ячеек типа F222 (рис. 12) и типа I222 (рис. 17). Сопоставляя полученные для данных решёток результаты, можно утверждать, что решётки идентичны и отличаются лишь степенью вырожденности расширенного набора ПСТ. Так, нетрудно видеть схожесть результатов в представлении

расширенного набора ПСТ для объёмно- и для гранецентрированных ячеек, причём схожесть состоит в практически идентичном расположении точек тождественной симметрии. Главное отличие этих ячеек состоит лишь в степени вырожденности обобщенного набора ПСТ, а именно, этот набор расщепляется на 4 случая для гранецентрированной ячейки и на 8 случаев для объёмноцентрированной. Другими словами, представление объёмноцентрированной ячейки возможно в терминах гранецентрированной ячейки и наоборот.

Выводы

В межузловом аспекте кристаллической решётки сохраняется инвариантность физического описания, т.е. при переходе от классического узлового аспекта к межузловому кристаллическая решётка переходит сама в себя.

Различие между узловым и межузловым аспектом кристаллической решётки состоит лишь в форме описания решётки, что никак не отражается на форме описания физических свойств того или иного кристалла.

Объёмно- и гранецентрированные решётки являются по сути сами собой и могут переходить друг в друга, поскольку различие между ними лишь в степени вырожденности расширенного набора ПСТ.

Все 230 фёдоровских групп могут быть представлены как в узловом так и в межузловом аспектах.

Список использованных источников

1. *Hahn Th.* (Eds.) International tables for crystallography, Space-group symmetry / Th. Hahn. – Springer, 2005. – 932 с. – (The international union of crystallography). – (International tables for crystallography; vol.A).
2. *Бокий Г. Б.* Кристаллохимия / Г. Б. Бокий. – М.: Издательство Московского университета, 1960. – 357 с.
3. *Борисов А. В.* Математическая модель межузлового аспекта пространственной кристаллической решётки / Борисов А. В., Королевич Л. Н., Шевлякова А. В. // Электроника и связь. – 2016 – №5(88) – С. 6-14
4. *Королевич Л.Н.* Межузловой аспект кристаллической решетки / Л.Н. Королевич, А.В. Борисов, М.К. Родионов // Электроника и связь. Тематический выпуск "Электроника и нанотехнологии". – 2011 – №3(62) – С. 32-38.

5. Королевич Л.Н. Феноменология физико-математического описания понятия кристаллической решетки / Л.Н. Королевич, А.В. Борисов, М.К. Родионов // Электроника и связь. Тематический выпуск "Электроника и нанотехнологии". – 2011 – №4(63) – С. 62-65.

Поступила в редакцию 18 мая 2016 г.

УДК 531.7+621.38

Л.М. Королевич, О.В. Борисов, канд. техн. наук, **Г.В. Шевлякова**

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»,
вул. Політехнічна, 16, корпус 12, м. Київ, 03056, Україна.

Фізична модель міжвузлового аспекту просторової кристалічної решітки

В роботі розглядається проблематика фізичної інваріантності міжвузлового аспекту кристалічної решітки та його поширення на всі просторові групи Федорова. Доведена фізична тождність міжвузлового та вузлового аспектів кристалічної решітки. Показана можливість застосування міжвузлового аспекту до вирішення задачі про щільність поверхневих станів. Бібл. 5, рис. 23.

Ключові слова: міжвузловий аспект; кристалічна решітка; Правильна система точок; групи Федорова; решітка Браве; кристалофізика; наноелектроніка.

UDC 531.7+621.38

L. Korolevych, O. Borysov, Ph.D., **H. Shevlyakova**

National Technical University of Ukraine "Kyiv Polytechnic Institute",
st. Politekhnichna, 16, Kyiv, 03056, Ukraine.

Physical model of intersites aspect of space crystal lattice

The paper deals with the problems of physical invariance of intersites aspect of the crystal lattice and its generalization to all space Fedorov groups. Proved the physical identity of intersites and the sites aspects of the crystal lattice. Is shown that the applicability of intersites aspect to solution of the problem of density of surface states. Reference 5, figures 23.

Keywords: intersites aspect; crystal lattice; Points; Fedorov groups; Bravais cells; crystallophysics; nanoelectronics.

References

1. Hahn, Th. (Ed.). (2005) International tables for crystallography, Space-group symmetry (5th ed., Vol. A). Netherlands:Springer.
2. Bokii, H. B. (1960). Crystallochemistry. Moscow: Publisher of Moscow University. (Rus.)
3. Borysov, O. V., Korolevych, L. M., & Shevlyakova, H. V. (2016). Mathematical model of intersites aspect of space crystal lattice. Electronics and Communication(5(88)), 6-14 (Rus.)
4. Korolevych, L. M., Borysov, O. V., & Rodionov, M. K. (2011). Intersites aspect of the crystal lattice. Electronics and Communication (3(62)), 32-38. (Rus.)
5. Korolevych, L. M., Borysov, O. V., & Rodionov, M. K. (2011). Phenomenology of physical and mathematical description of the concept of the crystal lattice. Electronics and Communications (4(63)), 62-65. (Rus.)