

УДК 621.38+531.9

Л.Н. Королевич, А.В. Борисов, канд. техн. наук, М.К. Родионов, канд. физ.-мат. наук

Феноменология физико-геометрического описания понятия кристаллической решетки

В статье применён физико-геометрический подход к феноменологии понятия кристаллической решётки. Благодаря введению понятия формульного комплекса (ФК) удалось получить несколько важных результатов. В частности, показано, что кристаллическое пространство состоит из эллипсоидов местоположения ФК и пустоты в соотношении почти 1:1. Раскрыт физико-геометрический смысл наиболее важного понятия кристаллофизики и кристаллографии – кристаллической решётки.

A physic geometrical approach to phenomenological aspect of crystal lattice is described in this article. Due to entering a definition of formulae complex (FC), important results are obtained, such as crystal space consists of ellipsoids of FC' location and emptiness in the ratio one-to-one. The definition for crystal lattice is expanded to obtain more physical and geometrical sense.

Ключевые слова: плоская петля, ячейка Бравэ, кристаллическая решётка, формульный комплекс, межузловой аспект кристаллической решётки.

Введение

Одной из наиболее важных проблем МДП–электроники является минимизация заряда поверхностных состояний. В связи с чем актуальной является задача о теоретическом предсказании как плотности поверхностных состояний (N_{ss}), так и заряда на границе раздела двух материалов, в частности на границе полупроводник–диэлектрик. Первое приближение решения данной задачи дано в [1] и, следуя её принципам, данная работа является вторым шагом решения поставленной задачи, а именно, конкретизировать физический смысл понятия кристаллической решётки путём придания ему геометрического смысла или, другими словами, доказать то, что число связей между отдельными составляющими кристаллического вещества – формульными комплексами (ФК) – строго равно *шесть*, т.е. отдельный ФК обладает лишь тремя степенями свободы. Таким образом, цель данной работы – дать физико-геометрическую концепцию понятия кристаллической решётки. Сразу отметим, что в данной

работе использованы, в качестве математического аппарата, аффинно-синтетические методы аналитической геометрии. Классическим примером данных методов служит монография [2].

Базовое положение

В межузельном аспекте рассмотрения понятия кристаллической решетки, рёбра (линии) и узлы трактуются как особые места решетки, а именно, как такие, в которых вероятность нахождения формульных комплексов (ФК) равна нулю [1]. Такая широкая, но строгая, трактовка понятия кристаллической решётки, впрочем, всё же предполагает математическое описание кристаллического вещества посредством ячейки Бравэ, т.е. параллелепипедом. Последнее лишено физического смысла, поскольку реальные физические процессы в твёрдом теле (например, теория фононов, спектроскопия) требуют наличия в твёрдом теле осцилляторов. В силу этого, следует конкретизировать понятие кристаллической решётки. Следуя принципам работы [1], получим, что достигнуть поставленную цель возможно простым, строгим и коротким утверждением: любая кристаллическая ячейка может *непосредственно* рассматриваться как *гармонический осциллятор*. Другими словами, ряды и плоскости кристаллической решётки – это геометрические места предельных положений гармонических осцилляторов вещества (ФК). Следовательно, как плоскость, так и пространство можно выполнить (заполнить) гармоническими осцилляторами при том условии, что ряды и плоскости, получаемой при этом кристаллической решётки, должны иметь смысл мест, где никогда не может быть найден ФК. Резюмируем сказанное на конкретных примерах.

Случай двумерного пространства

Рассмотрим двумерную квадратную кристаллическую решетку, которую представим в виде жесткого механического гармонического осциллятора, с которым мы будем отождествлять ФК. При таком подходе обобщенное колебание осциллятора можно разложить на сумму двух независимых колебаний по двум направлениям кристаллической решетки. Поскольку

каждая из них описывается гармонической функцией и амплитуда колебания не может превысить половины величины параметра решетки (по отношению к амплитуде колебания соседнего осциллятора), то результирующей предельных отклонений осциллятора от положения равновесия – граница отклонения – будет окружность с центром, совпадающим с центром ячейки, и радиусом равным половине параметра решетки.

Обобщим полученный результат на оставшиеся типы плоских кристаллических решеток. Поскольку граница местоположения ФК описывается окружностью вписанной в квадрат, то кристаллическая решетка может быть физически интерпретирована набором окружностей нахождения вещества и промежутков их отсутствия. Тогда параметры плоской кристаллической решетки приобретают смысл сопряженных диаметров сферы, а поскольку сфера является аффинным образом эллипса, то путем аффинных преобразований исходной решетки мы можем получить решения для всех оставшихся типов плоских кристаллических решеток. Таким образом, в общем случае, любая плоская кристаллическая решетка может быть представлена эллипсами местоположения ФК и промежутками их отсутствия. Сама же кристаллическая решетка при этом задается длинами двух сопряженных диаметров эллипса местоположения ФК и углом между ними.

Случай трёхмерного пространства

Аналогично рассмотрев трехмерный случай кристаллической решетки, а именно, аффинные преобразования кубической кристаллической решетки, ячейка которой представляется в виде трёхмерного жесткого гармонического осциллятора, получим, что любая пространственная кристаллическая решетка может быть представлена эллипсоидами местоположения ФК и областями их отсутствия. Сама же кристаллическая решетка при этом задается длинами трех сопряженных диаметров эллипсоида местоположения ФК и тремя углами между ними. Отметим, что, в общем случае, кристаллические параметры вещества не будут совпадать с главной тройкой сопряженных диаметров эллипсоида местоположения. Более того, из определения области Вороного точки O кристаллической решетки T [3] (та часть пространства V , каждая точка которой к точке O решетки T ближе, чем к любой другой точке решетки T) непосредственно следует что, если за точку O принять центр равновесия ФК кристаллической решетки T , то эллипсоид местоположения ФК в

примитивной ячейке кристаллического пространства V будет областью Вороного. Последнее утверждение значительно расширяет перечень математических методов описания кристаллической решетки. Заканчивая рассмотрение примеров, расширим геометрический смысл кристаллической решетки путём введения математического описания.

Геометрия кристаллического осциллятора

В двумерном случае, зависимость между параметрами эллипсоида местоположения ФК и параметрами решетки раскрывается первой теоремой Аполлония Пергского об эллипсе [2], а именно, площадь параллелограмма, построенного на любых сопряженных радиусах эллипса (параметры кристаллической решетки), равна площади прямоугольника, построенного на полуосях (параметры эллипсоида местоположения ФК). Однако в случае трёхмерного пространства необходимо сформулировать и доказать аналогичную теорему, но уже для эллипсоида общего вида. Последнее можно осуществить так:

Теорема. Объем параллелепипеда, построенного на любой тройке сопряженных радиусов эллипсоида, равен объему параллелепипеда, построенного на полуосях.

Отметим, что сформулированную теорему легко распространить и доказать и на случай n -мерного пространства.

Доказательство. При аффинном преобразовании, переводящем сферу в эллипсоид, параллелепипеды, построенные на тройках сопряженных радиусов эллипсоида, получаются из кубов, построенных на тройках взаимно перпендикулярных радиусов сферы. Но так как объемы кубов равны, а при аффинном преобразовании объемы всех пространственных фигур изменяются в одном и том же отношении, то и все указанные параллелепипеды имеют одинаковые объемы, равные объему любого из них, например, построенному на полуосях, что и требовалось доказать.

Доказанная теорема позволяет конкретизировать физический смысл понятия кристаллической решетки, для чего рассмотрим её следствия:

– в случае плоской кристаллической решетки отношение общей площади ячейки к площади эллипса местоположения ФК есть величина постоянная, равная $\pi/4$, и не зависящая от типа плоской кристаллической сетки.

– в случае пространственной кристаллической решетки отношение общего объема ячейки

к объему эллипсоида местоположения ФК есть величина постоянная, равная $\pi/6$, и не зависящая от типа пространственной кристаллической решетки.

Приведём простейшие математические доказательства указанных следствий. В случае двумерного пространства получим следующее: вся площадь петли плоской кристаллической решетки в общем случае согласно первой теореме Аполлония Пергского равна учетверенному произведению длин полуосей вписанного в нее эллипса местоположения, т.е. $S_{cell} = 4 \cdot ab$. Площадь же эллипса местоположения равна $S_{ellipse} = \pi \cdot ab$. Из этого сразу следует, что

$$\frac{S_{ellipse}}{S_{cell}} = \frac{\pi \cdot ab}{4 \cdot ab} = \frac{\pi}{4}. \quad (1)$$

Рассмотрение трёхмерного случая требует, чтобы объем ячейки пространственной кристаллической решетки в общем случае, в силу доказанной теоремы, был увосьмеренному произведению длин полуосей вписанного в нее эллипсоида местоположения, т.е. $V_{cell} = 8 \cdot abc$. Площадь же эллипсоида местоположения, как известно, равна $V_{ellipsoid} = \frac{4\pi}{3} abc$. Из этого сразу следует, что

$$\frac{V_{ellipsoid}}{V_{cell}} = \frac{4\pi \cdot abc}{3 \cdot 8 \cdot abc} = \frac{\pi}{6}. \quad (2)$$

Анализ полученных соотношений

Выражения (1) и (2) позволяют разбить пространство кристаллической решетки на две независимые друг от друга части, а именно, на пространство средне статистически могущее быть занятым ФК (пространство ФК) и на пространство, которое назовём пространством кристаллической пустоты. Такое рассмотрение кристаллической решетки позволяет утверждать что, идеальное кристаллическое тело заполнено, грубо говоря, лишь наполовину и не зависит от типа (симметрии) решетки. Более того, замена классической ячейки Бравэ её эллипсоидом местоположения вещества приводит к простому и чёткому доказательству того, что в любом кристаллическом теле число связей между отдельными ФК в точности равно шести и не зависит от типа (симметрии) решетки. Последнее следует из того, что единица кристаллической материи (ФК) сосредоточена внутри эллипсоида местоположения, который окружен лишь шестью соседними эллипсоидами местоположения ФК, а, следовательно, число связей приходящихся на один ФК равно шести. Други-

ми словами, каждый отдельный ФК обладает лишь тремя степенями свободы.

Выводы

Введённая физико-геометрическая концепция кристаллической решетки позволяет утверждать, что:

1) выражение (2) является доказательством возможности наличия в твёрдом теле дефектов внедрения, более того, последнее не зависит от типа кристаллической решетки;

2) в силу того, что ФК является электро-нейтральной единицей вещества, получаем, что любой ФК исходного вещества, может быть подменён ФК иного вещества при условии сходства объёмов их эллипсоидов местоположения. Таким образом, данная теория предсказывает наличие дефектов замещения в твёрдом теле. Кстати, в полупроводниковой электронике – это положение не является критическим дефектом, поскольку обуславливает существование полупроводников как n-, так и p-типа;

3) вышеприведенные пункты 2 и 3 приводят к утверждению: ФК, прежде всего, обобщённый физический элемент вещества, истинная структура которого, (а именно, реальные физические связи между отдельными составляющими ФК) является предметом интересов кристаллохимии, в силу чего физико-математические описания ФК допускают упрощения, например, связи между отдельными ФК полагаются механическими в не зависимости от кристаллохимического типа кристалла (ионный, валентный, молекулярный и т.д.);

4) в силу предыдущего пункта необходимо ввести разграничение связей между составляющими элементами ФК (т.е. внутренние связи) и связей между отдельными ФК (т.е. внешние связи). Также следует отметить, что величины сил внутренних связей не обязательно должна быть равны силам внешних связей. Отмеченное, в силу своей феноменологичности, позволяет предсказать и объяснить поведение твёрдого тела при нагреве, а именно, в случае, когда сила внутренних связей равна или меньше силы внешних связей твёрдое тело должно при нагревании и плавлении увеличивать свой объём, что обусловлено, как ростом амплитуды колебаний каждого отдельного ФК, так и законом о равномерном распределении энергии по степеням свободы (стремление каждого отдельно взятого ФК находится в сфере местоположения) – большинство элементов и их соединений. В противном случае (предполагается, что сила внутренних связей больше силы внешних связей) твёрдое тело должно при нагревании и

плавлении уменьшать свой объём, что обусловлено, провалом цельных ФК в места кристаллической пустоты – классические примеры: вода, галлий, жидкие кристаллы;

5) исходя из основополагающих принципов данной теории и её результатов можно утверждать, что в любом кристаллическом твёрдом теле должны существовать особые плоскости – плоскости минимальной и максимальной энергии связей между ФК (в силу того, что сам ФК – описывает эллипсоид), т.е. данная теория а priori предсказывает плоскости максимальной (плоскости спайности) и минимальной концентрации ФК. Последнее утверждение легко поясняется примерами, так кристалл поваренной соли легко расщепляется по плоскостям (100), и, практически, никогда по плоскостям (111), поскольку в первом случае достигается максимальная плотность ФК, тогда как во втором случае – минимальная плотность ФК, но максимальная плотность ионов натрия, т.е. составной части ФК;

6) важным следствием для твердотельной МДП-электроники является тот факт, что разница в усреднённых показателях описания вещества независимо от того, кристалл ли это или аморфное тело несущественна. Более того, данное положение позволяет применение макро-показателей (например, плотность, показатель преломления и т.д.) к исследованию микро- и нано-структур. Данное следствие легко пояснить на примере фазового перехода кристалл-жидкость или, другими словами, на примере фазового перехода от кристаллического тела к аморфному. Поскольку при таком переходе объём вещества изменяется лишь на доли процента и всегда сохраняется абсолютное число исходных частиц вещества, то и число частиц приходящихся на единицу площади поверхности будет изменяться незначительно.

Учитывая же закон о равномерном распределении энергии по степеням свободы получим, что усредненное число связей на единицу поверхности, как жидкости, так и кристалла равно числу частиц на ту же единицу поверхности. Следовательно, возможно применение усреднённых кристаллических макро-показателей к описанию аморфной фазы того же вещества. Что же касается, микро- и нано-структур, то следует ожидать, что каждый отдельный ФК такой структуры будет стремиться сохранить как симметрию, так и физические свойства бесконечного кристалла, например, плотность.

Также необходимо отметить, что последнее следствие непосредственно позволяет дать качественную оценку плотности поверхностных состояний на границе раздела двух веществ, что, безусловно, немаловажно в таких случаях как замена подзатворного диэлектрика (а, следовательно, и его выбор) с целью улучшения характеристик МДП-приборов.

Литература

1. Королевич Л.Н., Борисов А.В., Родионов М.К. Межузловой аспект кристаллической решетки // Электроника и связь. Тематический выпуск «Электроника и нанотехнологии». – 2011. – №4(63). – С. 32-38
2. Делоне Б.Н., Райков Д.А. Аналитическая геометрия. В двух томах. – М.-Л.: ГИТТЛ, 1948-1949.
3. Делоне Б., Александров А., Падуров Н. Математические основы структурного анализа кристаллов и определение основного параллелепипеда при помощи рентгеновских лучей. – Л.-М.: ОНТИ, 1934. – 328 с.