

УДК 621.38+531.9

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

## Межузловой аспект кристаллической решетки

В статье рассмотрено несколько аспектов кристаллической решётки. Благодаря введению понятия формульного комплекса удалось доказать преимущества межузлового подхода при рассмотрении кристаллической решётки и придать содержательный физический смысл наиболее важному понятию кристаллографии и кристаллофизики – кристаллической решётке.

A few phenomenological aspects of crystal lattice are described in this article. Due to entering a definition of formulae complex, important results are obtained. By this way the advantages of using between-junction aspect as a model for considering crystal lattice are proved. An alternate definition for crystal lattice is given. This definition has more physical sense than classical one.

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

### Введение

Заряд поверхностных состояний играет важную роль в физике МДП–приборов. Предсказание плотности поверхностных состояний ( $N_{ss}$ ), а, следовательно, и заряда на границе раздела двух материалов, в частности, на границе полупроводник–диэлектрик, является чрезвычайно актуальной задачей МДП–электроники [1–3]. Для решения указанной задачи необходимо рассмотреть геометрию связей на границе раздела двух веществ. Это достаточно трудная задача, поскольку, принятое в кристаллографии и кристаллофизике определение кристаллической решетки обладает, несмотря на всю свою общность, одним существенным недостатком, а именно, преобладанием математического смысла над физическим, что, в частности, не позволяет рассматривать конечный кристалл и тем более границу раздела двух кристаллов. В силу отмеченного, первым шагом к решению проблемы о предсказании величины плотности поверхностных состояний на границе двух веществ будет ответ на вопрос о физическом смысле понятия кристаллической решётки.

### Исходные положения и постановка задачи

Понятие *идеального кристалла* базируется на следующих постулатах [4]:

1. Кристалл *бесконечен*, причем не все его точки идентичны.

2. Кристалл *однороден*, т.е. если задана точка в кристаллическом пространстве, то всегда найдется шар радиуса  $R$ , внутри которого при любом его размещении всегда найдется хотя одна точка, гомологичная данной («шар однородности»).

3. Кристалл *дискретен*, т.е. существует, по крайней мере, одна такая его точка, вокруг которой можно описать шар радиуса  $r$ , внутри которого не будет точек гомологичных ей („шар дискретности“).

Следовательно, пространственную решетку можно рассматривать как бесконечную систему узлов – гомологичных точек. В большинстве случаев (см., например, [4, 5]), очевидно, что такое определение кристалла (и кристаллической решётки) характеризуется высоким уровнем абстракции, т.е. обладает лишь математическим смыслом. Однако, довольно часто при рассмотрении понятия кристаллической решетки происходит отождествление её узлов с материальными частицами (молекулами, ионами, атомами) либо с центрами их тяжести или равновесия [4]. Назовём такой подход к приданию физического смысла понятию кристаллической решётки – *узловым аспектом (рассмотрением)*. Такой подход лишь частично придаёт введённому выше определению кристаллической решётки физический смысл. Визуальной реализацией узлового аспекта (классического рассмотрения) выступают в двумерном случае – 5 плоских сеток, а в трёхмерном – 14 решёток Бравэ.

Основным недостатком узлового аспекта есть тот факт, что он позволяет дать представление о симметричной структуре вещества только в том случае, когда кристаллическая плёнка (случай двумерной симметрии) рассматривается как:

- система плоских сеток (двумерный случай), характеризующаяся бесконечной протяжённостью;
- система плоских сеток (трёхмерный случай), не находящихся вблизи и на поверхности кристалла (внутренние сетки);
- или если кристалл (случай трёхмерной симметрии) рассматривается как:
- система ячеек Бравэ, характеризующаяся бесконечной протяжённостью;

– система ячеек Бравэ, не находящихся близи поверхности кристалла.

Проиллюстрируем указанный недостаток, для чего попытаемся решить задачу о согласовании двух кристаллов на границе их раздела. Для упрощения положим, что оба кристалла обладают равными параметрами кристаллической решётки (случай согласованного эпитаксиального роста плёнки), но различной симметрией. Очевидно, что физически они будут отличаться не типом материальных частиц (молекул, ионов, атомов) в узлах кристаллической решётки, но и количеством узлов. Будем обозначать узлы кристаллической решётки первого вещества – чёрными точками, а второго – белыми. Решение задачи начнём с построения изначальной (бесконтактной) ситуации, т.е. с процесса построения кристаллической решётки для каждого кристалла в отдельности (рис. 1а). Легко видеть, элементарные трансляции для обеих решёток – одни и те же. В силу последнего и в силу закона направленного роста (эпитаксия), решением должно было бы стать простое совмещение данных кристаллических решёток. Однако, такое совмещение узловый аспект и не допускает (рис. 1б).

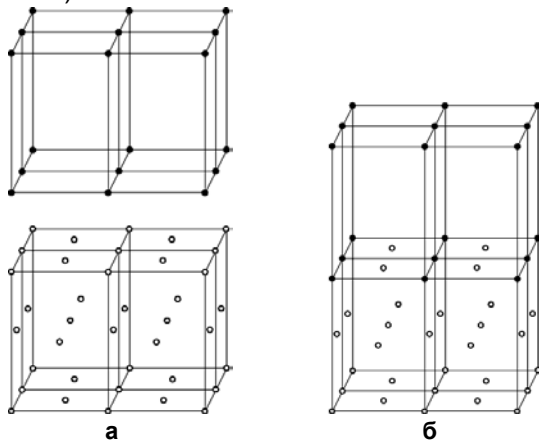


Рис. 1. Граница раздела двух кристаллов (узловой аспект)

Полученное решение лишено физического смысла, поскольку приводит к нарушению симметрии элементарных ячеек на границе раздела двух кристаллов. Следовательно, классическое рассмотрение кристаллической решётки неприменимо к конечно-размерным кристаллам. Данный вывод, впрочем, легко подтверждается исходными математическими постулатами. В силу этого, целью данной работы является построение такого описания кристаллической решётки, которое позволит не только решить задачу о совмещении двух кристаллических решёток, но и будет в полном согласии с исходными математическими постулатами, как, впрочем, и с законами симметрии решёток.

## Фундаментальный физический подход

Для решения поставленной проблемы, прежде всего, необходимо отметить важную деталь в выше приведенных постулатах о понятии кристалла: радиус шара однородности больше радиуса шара дискретности. Из чего сразу и следует, что при рассмотрении той или иной решётки имеется некая вольность при выборе начала отсчета, причём ограничена она сферой с радиусом равным радиусу шара дискретности. Иначе говоря, применяя данное положение к той или иной кристаллической решётке, т.е. просто сменив начало системы отсчета в пределах радиуса шара дискретности, получим новое и математически непротиворечивое описание кристаллической решётки. Иначе говоря, в силу смены системы отсчёта лишь пределах шара дискретности (т.е. при малых малых смещениях) сохраняются симметричные характеристики описания кристалла, поскольку они определяются радиусом шара однородности. Такой подход к приданию физического смысла понятию кристаллической решётки предлагается называть *межузловым (межузельным) аспектом*. Рассмотрим применение данного подхода к кристаллическим решёткам.

## Двумерный случай (кристаллические плёнки)

Как известно [4], существует всего 5 типов плоских сеток: параллелограммическая, прямоугольная, ромбическая, квадратная и тригонально-ромбическая. Рассмотрим каждую из них в межузловом аспекте для чего просто произведём сдвиг начала отсчета решётки на длину половины диагонали примитивного параллелограмма. Описанный сдвиг начала кристаллической решётки для параллелограммической плоской сетки показан на рис. 2, где чёрным цветом обозначены узлы классической решётки, белым – узлы той же решётки, но при межузловом подходе и, наконец, утолщенными линиями указаны, как изначальная примитивная плоская петля (узловой аспект), так и полученная плоская сетка (межузловой аспект).



Рис. 2. Плоские параллелограммические сетки (межузловой аспект)

Очевидно, что описанный сдвиг применим и для оставшихся типов плоских сеток при выполнении условия примитивности петли. Однако ромбическая и тригонально-ромбическая

плоские сетки чаще описываются не примитивными, а элементарными петлями, в силу чего необходимо рассмотреть и эти частные случаи.

Исходная ромбическая плоская сетка и соответственно её примитивная (одной петле принадлежит один узел) и элементарная (одной петле принадлежат 2 узла) петли показана на рис. 3а. Межузловой аспект этой сетки применительно к случаю примитивной петли приведен на рис. 3б (согласно вышеприведенным правилам сдвига изначальной системы отсчёта). Однако, в случае элементарной петли ситуация изменяется, а именно правила сдвига начала отсчёта примитивной петли становятся неприменимыми. Последнее приводит к формулировке новых правил сдвига: в случае рассмотрения элементарной петли ромбической плоской сетки сдвиг начала решётки необходимо производить уже не на половину диагонали, а лишь на её четверть. Результат описанного сдвига элементарной петли приведен на рис. 3в.

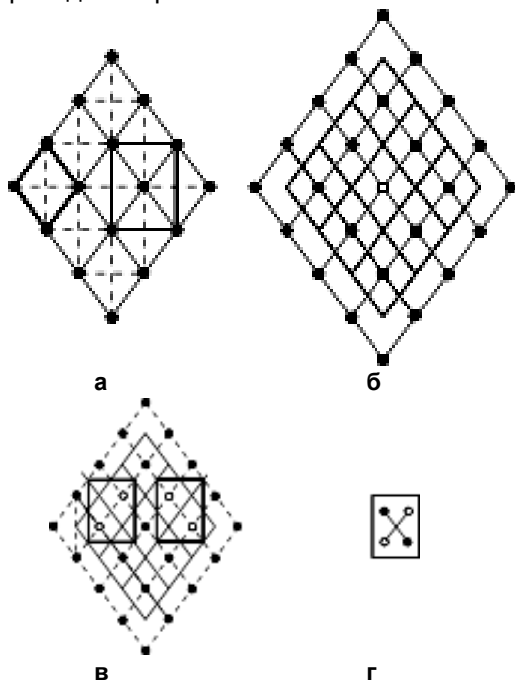


Рис. 3. Плоские ромбические сетки в узловом и межузловом аспектах

Характерной особенностью построения ромбической плоской сетки в межузловом аспекте является тот факт, что начальный узловой аспект позволяет получить в общем случае 2 варианта межузловой визуализации (см. рис. 3г): левый (белые узлы) и правый (серые узлы). Отметим, что последнее несколько не противоречит, а наоборот подтверждает исходные положения межузлового подхода, а именно вольность в выборе смещения начала отсчёта кристаллической решётки. Этот факт, будет проявляться и в дальнейшем, причём только при рассмотрении элементарных петель (ячеек).

Приступим к рассмотрению тригонально-ромбической кристаллической плоской сетки, для чего сразу отметим её характерную особенность, а именно тот факт, что данная сетка является частным случаем ромбической сетки при условии, что в ней угол между рёбрами примитивного ромба равен  $\pi/3$  или  $2\pi/3$ . Последнее обстоятельство позволяет описывать эту сетку не только при помощи примитивного ромба и элементарного прямоугольника, но и посредством элементарного шестиугольника (см. рис. 4а), что позволяет изменить правила сдвига изначальной элементарной плоской сетки. А именно, в силу симметричных особенностей, к данной петле применима трансляция начала отсчёта вдоль большой диагонали ромба на  $1/3$  её длины. Следовательно, число возможных сдвигов будет равно двум, а именно: левый (сдвиг влево, рис. 4б) и правый (сдвиг вправо, рис. 4в). Так же как и в случае ромбической сетки, в конечном итоге, получим два варианта визуализации тригонально-ромбической петли при межузловом подходе (см. рис. 4г).

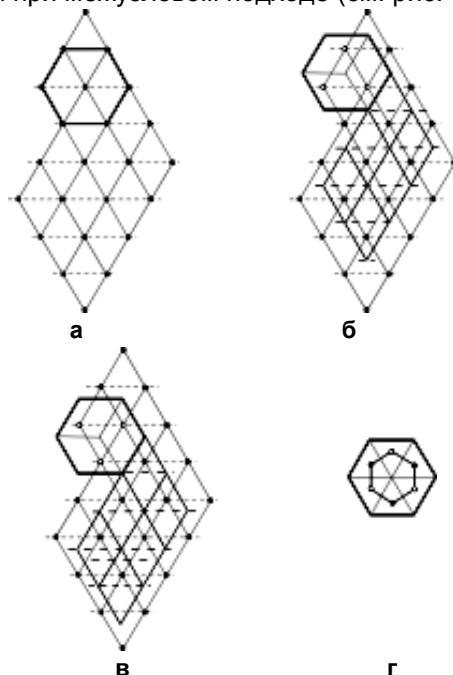


Рис. 4. Плоские тригонально-ромбические сетки в узловом и межузловом аспектах

Итак, несмотря на схожесть представления плоских сеток как в узловом так и в межузловом аспектах, последний обладает рядом преимуществ:

1. В межузловом аспекте один узел, как точка соединения рёбер, принадлежит одной петле, а не четырем (узловой аспект), поэтому его можно отождествить с центром тяжести минимального количества вещества, приходящегося на одну петлю (атом, молекула и т.д.). Такой подход позволяет ввести новое понятие, кото-

рое мы будем называть формульным комплексом (ФК). Итак, ФК – это минимальное количество вещества, приходящееся на один узел при узловом рассмотрении плоских сеток или, иначе говоря, минимальное количество вещества, содержащееся в одной петле плоской сетки (параллелограмме) при межузловом рассмотрении плоских сеток. В дополнение к вышесказанному, требование введения этого понятия, как комплекса, т.е. сложного образования, обусловлено тем фактом, что одна петля (т.е. один ФК), в общем случае, может содержать несколько атомов, ионов, молекул, их комбинаций и т.д. и т.п..

2. Ребра, как линии соединения узлов плоской сетки (в межузельном подходе) приобретают физический смысл, который можно выразить так: ребро (линия) плоской сетки характеризуется тем, что вероятность нахождения ФК на ней равна нулю. Иначе, ребра плоской сетки – это граница раздела ФК.

3. В связи с п.2. плоская сетка может рассматриваться как совокупность электрически нейтральных по границе примитивных петель. Или иначе, каждая примитивная петля представляет собой электрически нейтральный ФК-монослой вещества. В случае же элементарной петли, последняя также будет электрически нейтральна, но будет содержать большее количество ФК (в рассмотренных выше примерах – в два раза больше).

### Трёхмерный случай (решётки Бравэ)

Описывая трёхмерный случай необходимо указать на тот факт, что рассмотрение это случая, по сути, ничем не отличается от двумерного. Единственной, казалось бы, сложностью выступает необходимость рассмотрения всех 14 решёток Бравэ, однако это не так, поскольку все решётки Бравэ могут быть сведены к таким обобщенным типам как примитивная ( $P$ ), ромбоэдрическая ( $R$ ), гексагональная ( $H$ ), базоцентрированная ( $B$ ), объёмноцентрированная ( $I$ ) и гранецентрированная ( $F$ ) кристаллические решётки. В силу этого, нужно рассмотреть лишь перечисленные типы пространственных кристаллических решёток.

Итак, в случае примитивной решётки необходимо произвести сдвиг начала отсчета решётки на длину половины объёмной диагонали примитивного параллелепипеда. Описанный сдвиг начала кристаллической решётки для триклинной (наиболее общей) кристаллической решётки показан на рис. 5, где чёрным цветом обозначены узлы классической решётки, белым – узлы той же решётки, но при межузловом под-

ходе и, наконец, сплошными линиями указаны, как изначальная примитивная решётка (узловой аспект), так и полученная (межузловой аспект). Более того, на рис. 5 и последующих (рис. 6-10) соблюдена следующая концепция: вначале приводится исходный (классический) межузловой подход (обозначается буквой “а”), затем отображается кристаллическая решётка в классическом виде (узловой подход) с внедрением в неё ячейки межузловой аспект (обозначается буквой “б”), далее – иллюстрация связи между узловым и межузловым подходами (обозначается буквой “в”), и, наконец, приводится конечный вид рассматриваемой решётки в случае межузельного аспекта (обозначается буквой “г”). Легко видеть, что полученный результат обладает теми же математическими и симметричными свойствами, что и изначальный (классический), но при этом содержит внутри себя только один узел, а не восемь.

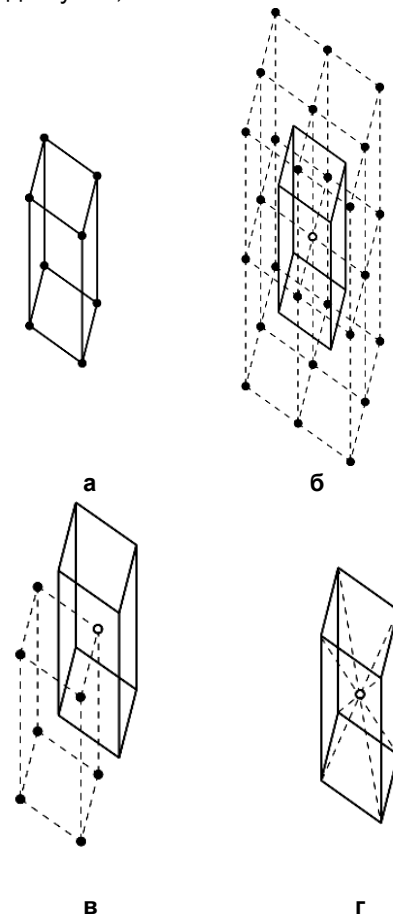


Рис. 5. Связь между узловым и межузловым аспектами для ячейки типа  $P$

Поскольку ромбоэдрическая решётка, по сути, является лишь частным случаем примитивной [5], то и межузельный аспект этой решётки будет аналогичен рассмотренному выше случаю примитивной решётки.

Гексагональная решётка также, как и её двумерный вариант (тригонально-ромбическая

плоская сетка) может быть представлена при межузловом рассмотрении двумя возможными вариантами, причём причина появления двух вариантов, суть та же (сдвиг в плоскости элементарного шестиугольника). Единственным и необходимым отличием трёхмерного случая от двумерного является требование вертикального сдвига на половину длины главной оси гексагональной решётки. Визуализация сказанного приведена на рис. 6.

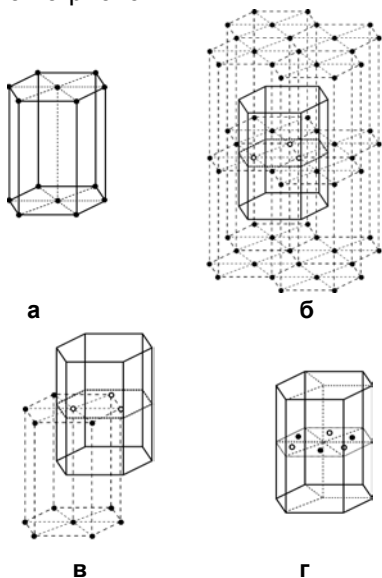


Рис. 6. Связь между узловым и межузловым аспектами для ячейки типа *H*

Рассмотрим последовательно оставшиеся элементарные пространственные кристаллические решётки, а именно, решётки типа *B*, *I* и *F*. Итак, базоцентрированную решётку (*B*) в межузловом аспекте можно представить так, как это сделано на рис. 7. Особенностью межузловой реализации является наличие двух узлов внутри ячейки, причём возможны как левые, так и правые комбинации.

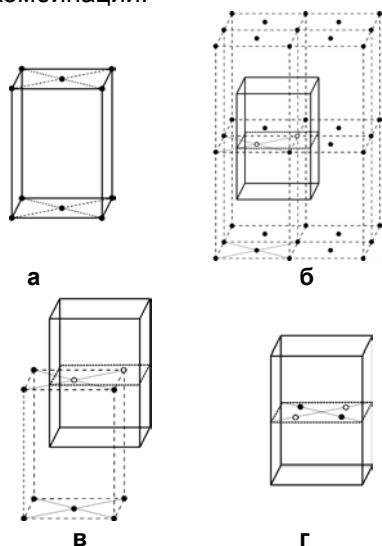


Рис. 7. Связь между узловым и межузловым аспектами для ячейки типа *B*

Внутрицентрированная решётка (решётка типа *I*) представлена на рис. 8. Её главной особенностью является не просто наличие двух узлов внутри ячейки (в сравнении с базоцентрированной решёткой), а возможность её представления в виде уже не в двух, а в четырёх вариантах – в виде параллелепипеда с двумя узлами на одной из его объёмных диагоналей.

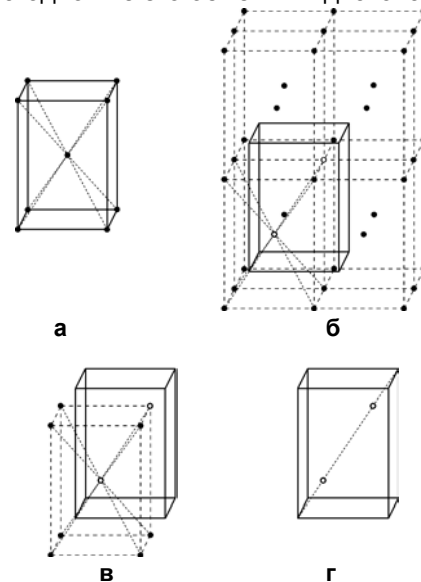


Рис. 8. Связь между узловым и межузловым аспектами для ячейки типа *I*

И, наконец, гранецентрированная решётка (решётка типа *F*) представлена на рис. 9. Её главной особенностью при межузловом рассмотрении является необходимость наличия внутри ячейки материального тетраэдра общего вида.

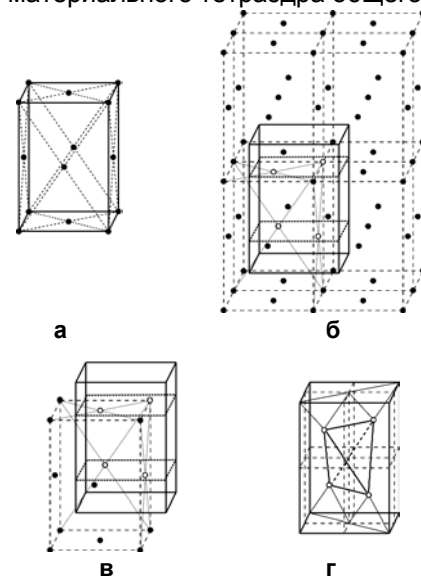


Рис. 9. Связь между узловым и межузловым аспектами для ячейки типа *F*

Итак, несмотря как на схожесть, так и на несхожесть представления пространственных решёток как в узловом так и в межузловом аспектах, отметим ряд преимуществ последнего, для чего вначале обобщим понятие формульного

комплекса. Итак,  $\Phi K$  – это минимальное количество вещества, приходящееся на один узел при узловом рассмотрении кристаллической решётки или, иначе говоря, минимальное количество вещества, содержащееся в одном параллелепипеде кристаллической решётки при межузловом рассмотрении кристаллической решётки.

Рассмотрим результаты анализа ячеек Бравэ в межузловом аспекте.

1. В случае примитивной ячейки ( $P$ ) одной ячейке принадлежит одна точка соединения рёбер при узловом подходе ("узел"). В случаях базентрированной (редко бокоцентрированной, или более редко гранецентрированной —  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ) и объёмноцентрированной (редко просто центрированной —  $I$ ) ячеек одной ячейке принадлежат два "узла". Наконец, в случае гранецентрированной (редко всестороннецентрированной —  $F$ ) ячейки — четыре "узла". Итак, если отождествить узлы ячеек с центрами тяжести соответствующих  $\Phi K$ , то в примитивной ячейке будет содержаться один  $\Phi K$ , в базо- и объёмноцентрированной ячейке — два  $\Phi K$ , и, наконец, в гранецентрированной ячейке — четыре  $\Phi K$ .

2. Плоскости и ребра ячеек Бравэ в "межузловом" аспекте приобретают физический смысл: *вероятность нахождения  $\Phi K$  на плоскости или ребре ячейки Бравэ равна нулю, или, иначе, плоскости и ребра ячеек Бравэ являются границей раздела конкретных  $\Phi K$ .*

3. Как следствие п.2: ячейка Бравэ может рассматриваться как совокупность  $\Phi K$  (одной, двух или четырех), обладающая свойством электрической нейтральности, что эквивалентно тому, что каждая ячейка Бравэ представляет собой элементарный "кирпич" вещества.

4. Как следствие п.2: "межузельное" рассмотрение обязательно к выполнению условия электронейтральности. Из чего сразу следует, что элементарные ячейки Бравэ состоят из ориентированных особым образом примитивных ячеек Бравэ.

Учёт всего вышеизложенного, позволяет дать следующее феноменологическое определение пространственной решетки (что и является решением поставленной авторами задачи):

Пространственная кристаллическая решетка образуется в результате бесконечного повторения узла тремя некопланарными трансляциями, причем узлы, ряды и плоскости решетки представляют собой такие места решетки, в которых вероятность нахождения формульных комплексов ( $\Phi K$ ) равна нулю.

Отметим, что такое определение обладает не размытым, но строгим физическим смыслом,

поскольку при трактовке таких понятий, как узел, ребро и плоскость пространственной решетки в случае "межузельного" аспекта, используется новая сущность понятия кристаллической решетки, а именно, таких мест идеального кристалла, где не может быть найдена единица его строения —  $\Phi K$ .

### Простое решение задачи о согласовании двух кристаллов на границе их раздела

Введение понятия  $\Phi K$  и межузловой аспект рассмотрения кристаллических решёток, позволяет дать простое и наглядное решение задачи о непротиворечивой визуализации границы раздела двух кристаллических веществ. Итак, полагая исходные данные неизменными (см. выше) для начала изобразим две кристаллические решётки по отдельности (рис. 10а). Легко видеть, что, так же как и в случае классического подхода (см. выше, рис. 1), оба кристалла описываются одной и той же решёткой Бравэ и математически — идентичны.

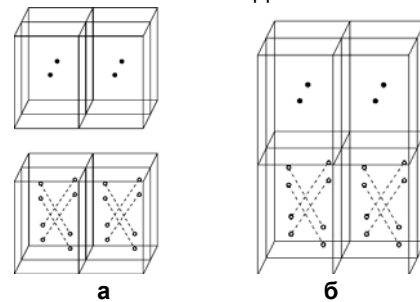


Рис. 10. Граница раздела двух кристаллов (межузловой аспект)

Логичное решение данной задачи, в силу закона направленного роста (эпитаксия), состоит в простом совмещении исходных кристаллических решёток. И это совмещение, как отмечено выше, узловый аспект и не допускает. Однако в случае межузельного подхода мы получим это простое решение, которое приведено на рис. 10б. Следовательно, поставленная цель — достигнута, а именно, найдено такое решение задачи, которое находится в полном согласии не только с математическими и симметричными законами, но и обладает физическим смыслом. Иначе говоря, *межузельный аспект*, по крайней мере в первом приближении, применим к конечно-размерным кристаллам, что делает его более весомым по сравнению с классическим подходом в силу того, что последний к таким кристаллам не применим.

### Выводы

Физический феноменологический подход рассмотрения понятия кристаллической решётки позволяет утверждать, что:

- возможно бесконечное число непротиворечивых методов описания кристаллической решётки, хотя наиболее важными из них будут только два – узловой аспект (классическое рассмотрение) и межузловой аспект (рассмотрение авторов);
- приведенное рассмотрение, т.е. межузловой аспект, по сравнению с классическим подходом позволяет придать строгий физический смысл понятию “кристаллическая решётка”, который, к тому же, не только не понижает уровень её математической абстракции, но и является решением поставленной авторами данной статьи задачи;
- в отличие от классического рассмотрения кристаллической решётки (узловой аспект), межузловой аспект применим к конечно-размерным кристаллам.

#### Литература

1. *Литовченко В.Г., Горбань А.П.* Основы физики микроэлектронных систем металл–диэлектрик–полупроводник. – К.: Наук. думка. – 1978. – 316 с.
2. *Красников Г.Я., Зайцев Н.А.* Система кремний – диоксид кремния субмикронных СБИС. – М.: Техносфера. – 2003. – 384 с.
3. *Nanoelectronics and Information Technology: Advanced Electronic Materials and Novel Devices.* Editor R. Waser. – Weinheim: Wiley-VCH GmbH & Co, KGaA. – 2003. – 1002 с.
4. *Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П.* Основы кристаллофизики. – М.: Наука, 1975. – 680 с.
5. *Бокий Г.Б.* Кристаллохимия. Изд. 2-ое. – М.: Издательство МГУ, 1960. – 358 с.

*Национальный технический университет Украины  
«Киевский политехнический институт»*