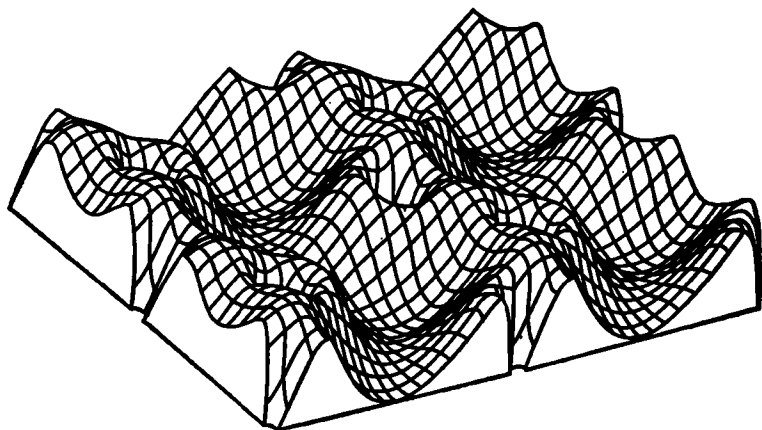


близко расположенные атомы. На фиг. 6 представлено распределение плотности валентных электронов в кремнии. Эти локальные максимумы плотности образуют так называемые ковалентные связи в кристаллах подобного типа. В полуметаллах, как и в металлах, электроны распределены по кристаллу довольно равномерно. Значение описанных только что различий в распределении электронной



Ф и г. 6. Распределение плотности валентных электронов в плоскости (110) кристалла кремния.

Диаграмма взята из книги [1].

плотности, равно как и значение структурных отличий, довольно часто переоценивают. Хотя кажется, что распределение зарядов в разных типах твердых тел принципиально отличается, в действительности во всех случаях оно достаточно хорошо аппроксимируется суммарным распределением зарядов электронов свободных атомов.

Зная лишь структуру твердого кристалла, можно уже довольно много сказать и о его свойствах. Поэтому мы начнем изложение некоторых методов описания структуры кристаллов. При этом будут введены часто встречающиеся в физике твердого тела понятия и термины, многие из которых оказываются полезными и при изучении систем с гораздо более сложной структурой.

§ 2. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

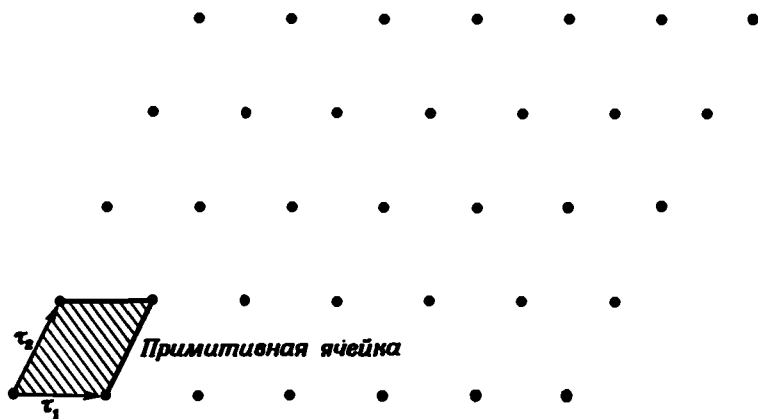
Характерное свойство всех описанных выше структур — их *инвариантность относительно трансляций* (трансляционная инва-

риантность). Это означает, что существует большое число трансляций

$$\mathbf{T} = n_1\boldsymbol{\tau}_1 + n_2\boldsymbol{\tau}_2 + n_3\boldsymbol{\tau}_3, \quad (1.1)$$

после действия которых идеальный кристалл остается неизменным. Разумеется, границы при трансляции смещаются, но нас интересует лишь внутренняя часть кристалла. Числа n_i — целые, причем при любом выборе целых чисел n_i кристалл инвариантен относительно трансляции (1.1).

Чтобы получить наиболее полное описание трансляционной инвариантности, выберем наименьшие векторы $\boldsymbol{\tau}_i$ (не лежащие в одной плоскости), для которых кристалл все еще инвариантен при трансляции (1.1). Эти векторы называются *примитивными векторами (трансляциями) решетки*. Определение примитивных векторов проиллюстрировано на фиг. 7 на примере двумерной решетки. Мы поместили начало примитивных векторов в один из узлов решетки. Совокупность точек, изображенная на фиг. 7

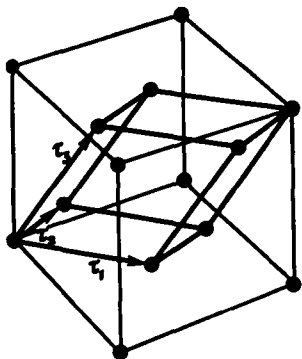


Ф и г. 7. Примитивные трансляции $\boldsymbol{\tau}_1$ и $\boldsymbol{\tau}_2$ и примитивная ячейка простой двумерной решетки.

и заданная формулой (1.1), называется *решеткой Бравэ*. Параллелепипед, построенный на векторах $\boldsymbol{\tau}_1$, $\boldsymbol{\tau}_2$, $\boldsymbol{\tau}_3$, называется *примитивной ячейкой*. Кристалл, очевидно, состоит из тождественных примитивных ячеек.

Заметим, что в кубической гранецентрированной решетке можно в качестве трансляций взять ребра кубической ячейки. Эти трансляции не являются, однако, примитивными векторами решетки, поскольку трансляции, представляющие собой векторы, соединяющие какую-либо вершину куба с центрами пересекающихся в этой вершине граней, имеют меньшую длину. Построив примитивную ячейку на этих векторах, мы получим параллелепипед, объем

которого равен объему, приходящемуся на один ион, иными словами, примитивная ячейка содержит всего один атом (фиг. 8). Объем кубической ячейки в 4 раза больше, и ее нельзя считать примитивной ячейкой. Полная трансляционная симметрия кристалла определяется набором примитивных векторов решетки. Учитывая лишь



Фиг. 8. Единичный куб и примитивная ячейка в гранецентрированном кубическом кристалле.

трансляции большей ячейки, мы теряем часть информации о симметрии решетки.

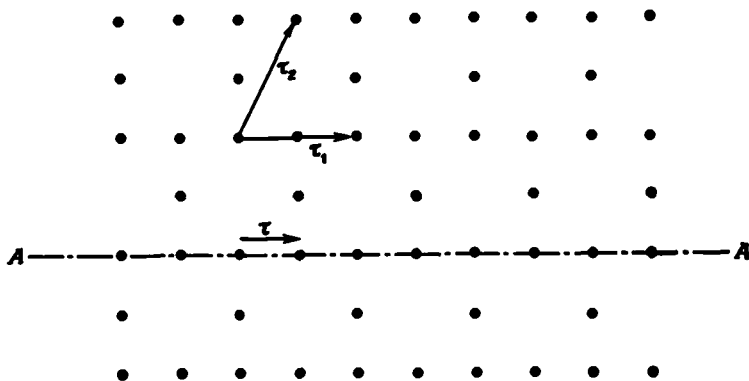
На основании трансляционной инвариантности мы можем определить структуру кристалла, зная структуру лишь одной примитивной ячейки.

Заметим, что в каждой точке решетки Бравэ обязательно находится атом, но, кроме того, внутри примитивной ячейки могут быть и другие атомы. В частности, в сурьмянистом индии можно поместить в точки решетки Бравэ ионы индия и при этом в каждой ячейке будут еще находиться ионы сурьмы. В случае структуры алмаза, например, для кристалла кремния в каждой точке решетки Бравэ расположен атом кремния и в каждой ячейке есть еще один атом кремния. При этом не всякий перенос кристалла, определяемый вектором трансляции, соединяющим два атома кремния, оставляет кристалл инвариантным.

Помимо трансляций существуют еще и другие *операции симметрии*, которые переводят кристалл в себя. Инверсия решетки Бравэ относительно любого узла оставляет ее инвариантной и может преобразовывать кристалл в себя. Всевозможные вращения, отражения или зеркальные повороты также могут переводить кристалл в себя. Совокупность всех операций — вращений, отражений, трансляций, зеркальных поворотов и их комбинаций — называется *пространственной группой* кристалла. Пространственная группа содержит все операции симметрии, которые переводят кристалл в себя.

Если из пространственной группы выбросить трансляции, то оставшаяся совокупность вращений, отражений и зеркальных пово-

ротов образует точечную группу. В ряде кристаллов некоторые из операций точечной группы не оставляют атомы в том же положении. Пример такого преобразования в случае двумерной решетки приведен на фиг. 9. Преобразование, сводящееся к комбинации операции отражения в некоторой плоскости и «неполной трансляции решетки» (т. е. перенос на расстояние, меньшее примитивной трансляции) в плоскости отражения, называется *симметрией зеркального скольжения* в плоскости, а плоскость называется плоскостью зеркального скольжения. Часто встречается также *винтовая* (или аксиально-винтовая) симметрия, которая представляет собой



Ф и г. 9. Двумерная решетка, обладающая симметрией зеркального скольжения.

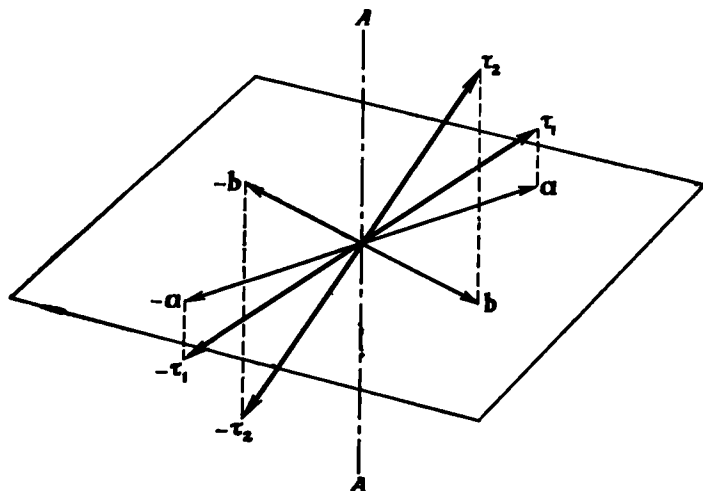
Указаны примитивные трансляции решетки τ_1 и τ_2 ; на одну примитивную ячейку приходится три атома. Решетка не симметрична при отражении относительно линии AA , однако если объединить отражение с неполной трансляцией решетки τ , то получится операция симметрии. Линия AA в этой решетке соответствует плоскости зеркального скольжения. Симметрия зеркального скольжения содержится в пространственной группе, в соответствующую точечную группу входит простое отражение.

комбинацию некоторого вращения и неполной трансляции решетки вдоль оси вращения.

Как будет показано ниже, операции симметрии кристалла образуют *группу* (в математическом смысле). Благодаря требованию трансляционной симметрии выбор точечных групп для кристалла резко ограничен по сравнению с группами, возможными для отдельных молекул. Так, например, можно показать, что кристалл может обладать симметрией относительно вращений лишь на углы 60° , 90° и кратные им.

Построим плоскость, перпендикулярную оси рассматриваемого вращения, и из точки их пересечения отложим в этой плоскости проекции трансляций, переводящих решетку в себя. Среди этих проекций выберем те, которые имеют *наименьшую длину*; они обра-

зуют «звезду», изображенную на фиг. 10. Заметим, что для каждой трансляции решетки существует и ей обратная; поэтому вместе с каждой проекцией в звезду входит противоположно направленная проекция. Допустим теперь, что вращение (против часовой стрелки) на некий угол θ переводит кристалл в себя. Тогда проекция a при таком вращении перейдет в проекцию b , которая также обязана быть проекцией какой-либо трансляции решетки, поскольку по предположению кристалл, а значит, и трансляции решетки инвариантны относительно рассматриваемого вращения. Вектор разности между b и a в свою очередь должен быть проекцией некоторой



Ф и г. 10. Векторы a , b , $-a$, $-b$, имеющие одинаковую длину и лежащие в плоскости, перпендикулярной оси вращения AA' .

Эти векторы являются проекциями трансляций решетки τ_1 , τ_2 , $-\tau_1$, $-\tau_2$ на указанную плоскость, причем кратчайшими среди отличных от нуля проекций трансляций решетки.

трансляции решетки, так как разность между любыми двумя трансляциями также есть трансляция решетки. Далее, вектор, соответствующий этой разности, не может быть меньше вектора b (или a), так как a и b принадлежат к числу проекций наименьшей длины. Мы заключаем поэтому, что угол θ должен быть больше или равен 60° .

Если вращение на угол θ переводит кристалл в себя, то, повторяя эту операцию несколько раз, мы также будем переводить кристалл в себя. Поэтому звезда может состоять из проекций, образующих друг с другом равные углы не менее 60° . Отсюда следует, что звезду образуют одна, две, три, четыре, пять или шесть проекций, однако звезды с одной, тремя или пятью проекциями можно отбросить, так как противоположно направленные проекции в них не входят.

Таким образом, звезда может содержать две, четыре или шесть проекций, откуда вытекает, что возможны вращения лишь на углы 60° , 90° и кратные им. Симметрия третьего порядка (вращение на 120°) может встречаться без симметрии шестого порядка (вращение на 60°). Пусть, например, проекции трансляций τ_1 , τ_2 и τ_3 , расположенных над плоскостью (фиг. 10), составляют углы 120° ; тогда трансляции $-\tau_1$, $-\tau_2$ и $-\tau_3$ расположены ниже плоскости и их проекции вместе с предыдущими образуют полную шестиконечную звезду. Вращение на 60° , очевидно, не переводит векторы трансляций друг в друга — для этого необходимо вращение на 120° . Симметрия третьего порядка такого типа реализуется для вращений вокруг оси [111] в кубических кристаллах. Как показано выше, симметрией вращения пятого порядка кристалл обладать не может.

Подобные ограничения понижают число возможных точечных групп симметрии кристаллов до 32. Какой бы кристалл мы ни взяли, допускаемая им точечная группа совпадает с одной из этих групп. Более подробная классификация кристаллов станет возможной, если мы воспользуемся более широким набором операций симметрии, образующих пространственную группу кристалла. Существует всего 230 пространственных групп. Классификацией кристаллов по их свойствам симметрии занимается один из разделов кристаллографии.

Зная симметрию кристалла, можно довольно хорошо предсказать поведение кристалла. Мы можем извлечь такую информацию систематическим путем, используя математические методы теории групп, элементы которой мы изложим в виде, удобном для этой цели. Поскольку теория групп сама по себе составляет весьма обширный предмет, мы предпочтем начать с использования следствий симметрии и затем покажем, как при этом естественно возникают понятия теории групп. Для начала мы изучим физические тензоры, связанные с кристаллами.

§ 3. ФИЗИЧЕСКИЕ ТЕНЗОРЫ

Здесь мы приведем краткую сводку результатов, подробное изложение которых можно найти в книге Ная [2].

Многие макроскопические свойства кристаллов можно описать с помощью тензоров. К числу таких свойств относится, например, электропроводность, которая связывает вектор напряженности электрического поля с вектором плотности тока. В случае изотропного вещества (такого, как металл, т. е. состоящего из многих зерен) электропроводность задается скаляром, или, что то же самое, произведением скаляра на единичный тензор. Для более сложных систем величина тока все еще пропорциональна величине приложенного