



В.А. Гуртов Р.Н. Осауленко

Физика твердого тела для инженеров



ТЕХНОСФЕРА

**ИСПРАВЛЕННОЕ
И ДОПОЛНЕННОЕ
ИЗДАНИЕ**

УДК 538.9

ББК 22.37

Г95

Рецензенты:

Кафедра физики твердого тела Московского инженерно-физического института (государственного университета);

Манькин Э.А., заведующий кафедрой физики твердого тела, доктор физико-математических наук, профессор, заслуженный деятель науки РФ;

Гороховатский Ю.А., доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики Российского государственного педагогического университета;

Немов С.А., доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной физики и оптики твердого тела Санкт-Петербургского государственного политехнического университета

Научный редактор **Л.А. Алешина**, кандидат физико-математических наук, профессор кафедры физики твердого тела Петрозаводского государственного университета

Г95 Гуртов В.А., Осауленко Р.Н.

Физика твердого тела для инженеров: учеб. пособие.

Издание 2-е, доп. – М.: Техносфера, 2012. – 560 с. ISBN 978-5-94836-327-1

Учебное пособие представляет собой систематизированное и доступное изложение курса физики твердого тела, содержащее основные элементы физики конденсированного состояния и ее приложения для описания физических свойств твердых тел и процессов, происходящих в них. В книге подробно затрагиваются вопросы строения кристаллов и аморфных твердых тел, рассматриваются типы межатомных связей и их влияние на структуру веществ. Приводятся основные положения теории колебаний атомов в кристаллической решетке, описаны тепловые, магнитные и диэлектрические свойства конденсированных сред. В учебном пособии отражены необходимые сведения из атомной физики и квантовой механики, и на этой основе — зонная теория твердых тел и электронные процессы в них. Рассматриваются основные положения теории сверхпроводимости и фазовых переходов. Книга написана доступным языком с привлечением математического аппарата в объеме вузовских курсов по математике.

Учебное пособие рассчитано на студентов инженерных факультетов, изучающих физику твердого тела или отдельные ее разделы, а также может быть полезно научным работникам смежных с физикой областей науки, желающим ознакомиться с основными положениями и методами физики твердого тела.

УДК 538.9

ББК 22.37

© Гуртов В.А., Осауленко Р.Н., 2012

© 2012, ЗАО «РИЦ «Техносфера», оригинал-макет, оформление

ISBN 978-5-94836-327-1

Содержание

Предисловие	10
Предисловие ко второму изданию	12
Глава 1	
Принципы строения твердых тел.	
Элементы кристаллографии	13
1.1. Классификация конденсированных сред	13
1.1.1. Кристаллическое состояние и его классификация	16
1.1.2. Аморфное состояние.....	17
1.1.3. Жидкое и газообразное состояния	18
1.2. Кристаллическая решетка	19
1.2.1. Элементарная ячейка. Базис решетки	20
1.2.2. Кристаллографические направления, плоскости и зоны	23
1.2.3. Сингонии кристаллов.....	25
1.2.4. Решетки Бравэ. Ячейка Вигнера–Зейтца.....	26
1.3. Симметрия кристаллов	27
1.3.1. Точечные операции симметрии	28
1.3.2. Пространственные группы симметрии	30
1.4. Обратная решетка.....	32
1.5. Принцип плотной упаковки атомов.....	34
1.6. Примеры простых кристаллических структур.....	37
1.7. Полиморфизм	40
1.8. Жидкие кристаллы	43
1.9. Методы определения структуры твердых тел	46
1.9.1. Дифракционные методы.....	46
1.9.2. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах.....	47
1.9.3. Экспериментальные методы определения структуры кристаллов....	51
1.10. Квазикристаллы	54
1.10.1. Структура квазикристаллов	55
1.10.2. Свойства квазикристаллов.....	59
Задачи	62
Глава 2	
Природа и типы межатомных связей	63
2.1. Химическая связь и валентность	63
2.2. Энергия связи.....	66
2.3. Типы межатомных связей в твердых телах.....	71
2.3.1. Ионная связь	71
2.3.2. Ковалентная связь	75
2.3.3. Металлическая связь	78
2.3.4. Ван-дер-ваальсова связь. Молекулярные кристаллы	79
2.3.5. Водородная связь	80

2.4.	Структура веществ с ненаправленным взаимодействием	81
2.5.	Представление об атомных орбиталях	87
2.6.	Случай направленного взаимодействия. Структура веществ с ковалентными связями	92
2.7.	Роль обменного взаимодействия в образовании кристаллов	94
	Задачи	96

Глава 3

Дефекты и диффузия в твердых телах		98
3.1.	Классификация дефектов	98
3.2.	Точечные дефекты	99
3.2.1.	Дефекты по Френкелю	100
3.2.2.	Дефекты по Шоттки	101
3.2.3.	Термодинамика точечных дефектов	102
3.2.4.	Радиационные дефекты	104
3.2.5.	Центры окраски	106
3.3.	Дислокации	107
3.3.1.	Образование дислокаций в кристалле	110
3.3.2.	Движение дислокаций	112
3.3.3.	Дефекты упаковки	116
3.3.4.	Границы зерен	118
3.3.5.	Влияние дислокаций на свойства твердых тел и методы наблюдения дислокаций	119
3.4.	Механизмы диффузии в твердых телах	123
3.4.1.	Диффузия в кристаллах	125
3.4.2.	Законы Фика	131
3.5.	Твердые электролиты	135
	Задачи	137

Глава 4

Механические свойства твердых тел		138
4.1.	Тензоры напряжений и деформаций	140
4.2.	Закон Гука для анизотропных твердых тел и энергия упруго деформированного тела	147
4.3.	Распространение акустических волн в кристаллах	152
4.3.1.	Поверхностные акустические волны	157
4.4.	Пластические свойства кристаллов	162
4.4.1.	Деформация скольжением и двойникованием	162
4.4.2.	Хрупкое разрушение	165
4.5.	Космический лифт	170
	Задачи	172

Глава 5

Динамика кристаллической решетки		175
5.1.	Одномерные колебания однородной струны	175

5.2.	Гармоническое приближение.....	177
5.3.	Колебания одномерной монокристаллической цепочки атомов.....	178
5.3.1.	Зоны Бриллюэна.....	181
5.4.	Колебательный спектр двухатомной одномерной цепочки. Акустическая и оптическая ветви колебаний.....	185
5.4.1.	Дисперсионные кривые для двухатомной одномерной цепочки	189
5.5.	Колебания атомов трехмерной решетки.....	191
5.6.	Упругие волны смещений атомов. Фононы.....	193
5.6.1.	Фононные спектры в кристаллах.....	195
5.7.	Локальные фононные моды.....	197
	Задачи.....	198

Глава 6

Тепловые свойства твердых тел.....		199
6.1.	Теплоемкость твердых тел.....	199
6.1.1.	Закон Дюлонга и Пти.....	200
6.2.	Энергия тепловых колебаний решетки.....	201
6.2.1.	Приближение Эйнштейна.....	205
6.2.2.	Приближение Дебая.....	208
6.3.	Электронная теплоемкость и ее зависимость от температуры.....	213
6.4.	Ангармонизм колебаний атомов и тепловое расширение.....	215
6.5.	Теплопроводность твердых тел.....	221
	Задачи.....	226

Глава 7

Магнитные свойства твердых тел.....		227
7.1.	Классификация магнетиков.....	227
7.2.	Влияние магнитного поля на орбитальное движение электрона. Диамагнетизм.....	230
7.2.1.	Диамагнетизм атомных остовов.....	231
7.3.	Природа парамагнетизма.....	233
7.3.1.	Парамагнетизм электронов проводимости.....	236
7.3.2.	Электронный парамагнитный резонанс.....	238
7.4.	Ферромагнетизм.....	240
7.4.1.	Молекулярное поле Вейсса.....	242
7.4.2.	Энергия обменного взаимодействия.....	245
7.4.3.	Доменная структура ферромагнетиков.....	246
7.4.4.	Антиферромагнетизм. Ферримагнетизм.....	252
7.4.5.	Постоянные магниты.....	255
	Задачи.....	258

Глава 8

Диэлектрические свойства твердых тел.....		260
8.1.	Основные характеристики диэлектриков.....	260
8.2.	Упругая поляризация.....	264

8.2.1.	Электронная упругая поляризация.....	264
8.2.2.	Ионная упругая поляризация	266
8.2.3.	Дипольная упругая поляризация.....	268
8.3.	Тепловая (релаксационная) поляризация	270
8.3.1.	Электронная тепловая поляризация.....	271
8.3.2.	Ионная тепловая поляризация	272
8.3.3.	Дипольная тепловая поляризация.....	275
8.4.	Связь между поляризуемостью и диэлектрической проницаемостью ..	277
8.5.	Электрострикция, пьезоэффект, пирозоэффект.....	279
8.6.	Сегнетоэлектрики	285
8.7.	Электреты	289
	Задачи	292

Глава 9

Основы зонной теории твердого тела

9.1.	Одноэлектронное приближение. Теорема Блоха	294
9.2.	Изменение состояния электронов при сближении атомов	298
9.2.1.	Энергетические зоны.....	299
9.3.	Приближение почти свободных электронов. Модель Кронига–Пенни ..	302
9.4.	Структура энергетических зон	305
9.5.	Движение электрона в периодическом поле кристалла под действием внешнего поля. Эффективная масса электрона	310
9.6.	Примеси и примесные уровни	313
9.6.1.	Водородоподобная модель мелких уровней доноров и акцепторов	315
9.6.2.	Зонная структура неупорядоченных твердых тел	316
	Задачи	319

Глава 10

Электрические свойства твердых тел

10.1.	Плотность квантовых состояний в разрешенных зонах. Классический 3D-электронный газ	320
10.2.	Случай 2D-, 1D- и нульмерного электронного газа	322
10.2.1.	Плотность состояний в двумерной подзоне	323
10.2.2.	Плотность состояний в одномерном и нульмерном случаях	325
10.3.	Функции распределения электронов по энергиям	326
10.3.1.	Квантовая статистика Ферми–Дирака	326
10.3.2.	Классическая статистика Максвелла–Больцмана	327
10.4.	Концентрация носителей заряда для невырожденного и вырожденного электронного газа.....	327
10.4.1.	Концентрация электронов и дырок в собственном полупроводнике... 328	
10.4.2.	Концентрация электронов и дырок в примесном полупроводнике..... 329	
10.4.3.	Концентрация электронов и дырок в разрешенных зонах для случая вырождения	330
10.5.	Энергия Ферми. Критерий вырождения электронного газа.....	331
10.6.	Проводимость металлов	334

10.6.1. Типичные свойства металлов	335
10.6.2. Свободные электроны и положительные атомные остатки (ионы) ...	336
10.6.3. Хаотическое и упорядоченное движение электронов	336
10.7. Классическая теория свободных электронов Друде–Лоренца	337
10.8. Кинетическое уравнение Больцмана	340
10.9. Дифференциальный закон Ома для невырожденного электронного газа.....	342
10.10. Подвижность свободных носителей заряда при различных механиз- мах рассеяния.....	343
10.11. Проводимость в полупроводниках	346
Задачи	347

Глава 11

Оптические свойства твердых тел	348
11.1. Взаимодействие электромагнитного излучения с твердым телом	348
11.2. Оптические характеристики металлов, диэлектриков и полупровод- ников.....	349
11.3. Генерация и рекомбинация в полупроводниках и диэлектриках	352
11.3.1. Излучательная рекомбинация в прямозонных и непрямозонных полупроводниках.....	355
11.3.2. Безызлучательная рекомбинация с участием глубоких примесей.....	358
11.3.3. Экситоны Френкеля и Ванье–Мотта	359
11.4. Уравнение непрерывности	364
11.5. Электрон-фононные взаимодействия. Полярон Фрелиха	365
Задачи	366

Глава 12

Сверхпроводимость	367
12.1. Эффект Мейснера. Сверхпроводники первого и второго рода	368
12.2. Изотопический эффект	372
12.3. Элементы зонной теории сверхпроводимости Бардина–Купера– Шриффера. Куперовские пары.....	374
12.4. Эффекты Джозефсона	379
12.5. Высокотемпературная сверхпроводимость.....	381
12.6. Применение сверхпроводников	387
Задачи	389

Глава 13

Равновесие фаз и фазовые переходы	390
13.1. Термодинамические потенциалы	393
13.1.1. Условия фазового равновесия.....	395
13.2. Классификация фазовых переходов.....	400
13.3. Фазовые переходы в твердом состоянии.....	403
13.3.1. Кристаллизация. Теория образования зародышей	411
13.3.2. Роль межфазной границы при фазовых превращениях	415

- 13.4. Стабильность фаз 418
 13.5. Фазовые переходы металл – диэлектрик 419

Глава 14

Поверхностные и контактные явления в твердых телах 424

- 14.1. Термоэлектронная эмиссия с поверхности твердых тел 424
 14.1.1. Ток термоэлектронной эмиссии в равновесных условиях 424
 14.1.2. Термодинамическая работа выхода в полупроводниках p - и n -типов 426
 14.1.3. Твердотельные приборы с электронно-дырочными переходами 427
 14.1.4. Ток термоэлектронной эмиссии при наличии внешнего поля. Твердотельные катоды 436
 14.2. Автоэлектронная эмиссия. Туннельные микроскопы 440
 14.2.1. Туннельная инжекция через треугольный барьер 440
 14.2.2. Коэффициент прозрачности для туннелирования через треугольный барьер 441
 14.2.3. Учет закона дисперсии $E(k)$ при туннелировании через потенциальный барьер 443
 14.2.4. Ток туннельной инжекции через треугольный барьер 444
 14.2.5. Ток туннельной инжекции через трапецидальный барьер 445
 14.2.6. Туннельный микроскоп 446
 14.3. Область пространственного заряда на поверхности. Твердотельные полевые приборы 448
 14.3.1. Эффект поля 448
 14.3.2. Область пространственного заряда (ОПЗ) в равновесных условиях 450
 14.3.3. Заряд в области пространственного заряда 453
 14.3.4. Типы и устройство полевых транзисторов 456
 14.3.5. Принцип работы МДП-транзистора 457
 14.3.6. Дискретные МДП-фотоприемники 458
 14.3.7. Матрицы фотоприемников с зарядовой связью (ФПЗС) 460
 Задачи 463

Глава 15

Аморфные материалы: структура, дефекты, свойства 464

- 15.1. Характеристики структуры аморфных материалов 464
 15.2. Дефекты в аморфных материалах 469
 15.2.1. Собственные точечные дефекты в аморфных материалах 470
 15.2.2. Собственные сеточные дефекты в аморфных материалах 472
 15.2.3. Примесные точечные дефекты в аморфных материалах 475
 15.2.4. Собственные объемные плоские и линейные дефекты в аморфных материалах 476
 15.3. Свойства некоторых аморфных материалов 479

Приложение А 483

- Работа выхода из металлов (эВ) 483
 Свойства диэлектриков 483

Универсальные физические постоянные.....	483
Полезные соотношения.....	483
Физические параметры важнейших полупроводников	484
Приложение Б	485
Приложение В	487
Нобелевские премии за работы по физике и химии твердого тела	487
Приложение Г	502
Графен	502
Г.1. Атомная структура графена.....	503
Г.2. Электрические свойства графена	505
Г.3. Применение графена	511
Решение задач	513
Список рекомендованной литературы	545
Основные обозначения	552
Предметный указатель	555
Об авторах	559

ГЛАВА I

ПРИНЦИПЫ СТРОЕНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ. ЭЛЕМЕНТЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

I.1. Классификация конденсированных сред

Из агрегатных состояний вещества два — жидкое и твердое — называются конденсированными. В обоих состояниях тела представляют собой совокупности сильно взаимодействующих частиц (атомов, электронов, ядер и т. д.). Расстояния между частицами в этих телах устанавливаются так, чтобы силы притяжения и отталкивания были уравновешены. Поэтому конденсированные системы оказывают большое сопротивление изменению объема. Те из них, которые кроме этого оказывают сильное сопротивление изменению формы, называют твердыми системами, или твердыми телами. Жидкости легко меняют форму, но не объем. На границе между жидкими и твердыми телами находятся аморфные материалы, которые сохраняют форму длительное, но не бесконечно долгое время.

Более детальная классификация конденсированных сред может быть проведена на основе представлений о характере взаимного расположения составляющих их частиц. Для выяснения структурных закономерностей, возникающих при конденсации системы частиц, предложена модель, основывающаяся на представлении о системе, состоящей из абсолютно несжимаемых и не притягивающихся друг к другу шаров [55].

Пусть модельная система состоит из совокупности N несжимаемых шаров радиуса R . Потенциал взаимодействия таких шаров $U(r)$ (r — расстояние между центрами шаров) будет иметь вид бесконечно высокой ступени (рис. 1.1).

В области I ($0 \leq r \leq 2R$) величина потенциала взаимодействия стремится к бесконечности $U_I \rightarrow \infty$, в области II ($r > 2R$) $U_{II} = 0$. Это значит, что взаимодействие шаров сводится только к бесконечным силам отталкивания, возникающим при соприкосновении шаров. Разместим N несжимаемых шаров хаотически в объеме V и рассмотрим структуру системы в зависимости от некоторого параметра $p = V/v$, обратно пропорционального концентрации частиц. Здесь $v = Nv_0 = \frac{4}{3}\pi R^3 N$ — суммарный объем всех шаров, а v_0 — объем одного шара. Большим значениям параметра p ($p \rightarrow \infty$) формально отвечает разбавленный

раствор частиц в пустоте, среднее расстояние между частицами в этом случае больше их диаметра. Это состояние можно сравнить с моделью идеального газа.

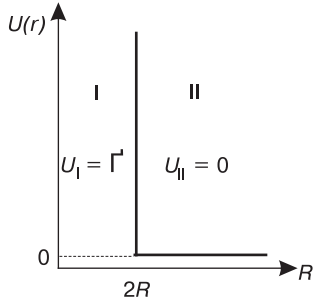


Рис. 1.1. Потенциальная энергия двух несжимаемых, непритягивающихся шаров радиуса R

Будем увеличивать число шаров либо уменьшать объем системы до тех пор, пока частицы не начнут соприкасаться друг с другом. В этом случае среднее расстояние между ними станет $r_{cp} = 2R$, и силы отталкивания остановят процесс сжатия. При малых значениях p получим разбавленный раствор пустоты в *конденсате* частиц. Следовательно, конденсированное состояние можно охарактеризовать непрерывной сеткой контактных или, иначе говоря, *координационных* связей, проходящих через весь объем системы. Этому состоянию соответствуют значения $p \sim 1 \div 3$ в зависимости от формы частиц и *координационного числа* n , равного числу ближайших соседей, окружающих данную частицу системы. В нашей модели такими частицами являются шары, соприкасающиеся с каким-либо данным шаром.

Представление о характере «структуры» газа и конденсированной системы можно получить на примере двумерных диаграмм (рис. 1.2), построенных для частиц круглой и квадратной формы. «Структура» газа (если в случае газа вообще можно говорить о какой-либо структуре) (рис. 1.2, а) неупорядоченная, в ней отсутствуют соприкасающиеся частицы. Значения параметра p здесь велики, а координационное число $n = 0$. Если в газе образуются молекулы или временные группы частиц, то можно говорить о внутримолекулярных координационных числах (например, в молекулах водяного пара они равны соответственно 1 и 2 для атомов водорода и кислорода). При этом межмолекулярное координационное число по-прежнему остается равным нулю.

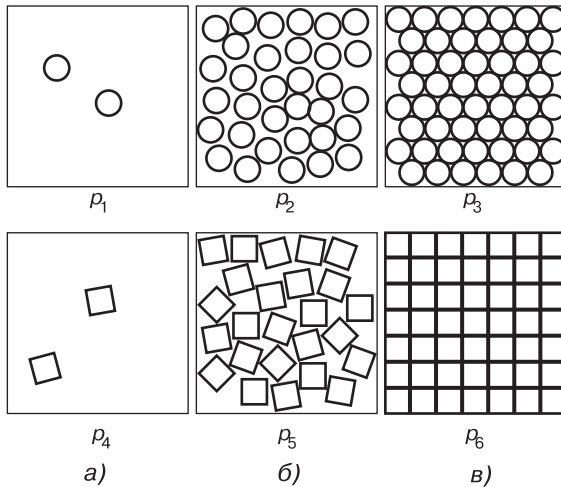


Рис. 1.2. Двумерные диаграммы систем круглых и квадратных частиц ($p_1 > p_2 > p_3$; $p_4 > p_5 > p_6$; p_6 имеет минимальное значение, равное 1)

Конденсированная система может находиться в двух принципиально разных структурных состояниях: неупорядоченном («жидкость» и «аморфное тело», рис. 1.2, б) и упорядоченном («кристалл», рис. 1.2, в). В неупорядоченной структуре координационное число от частицы к частице флуктуирует около среднего значения $n = n_{cp} \pm \Delta n$. Упорядоченная структура характеризуется *законом периодичности*. Его смысл в том, что одинаковые или структурно эквивалентные частицы имеют равные координационные числа $n_i = \text{const}$, где i — номер семейства структурно эквивалентных частиц. Этот закон нарушается только на границе системы.

Моделью трехмерной неупорядоченной системы может служить сыпучее тело (шарики, крупа, песок и т. д.), насыпанное в сосуд и уплотняемое силой тяжести. При легких встряхиваниях сосуда объем пустот уменьшается и плотность системы несколько возрастает. По аналогичной причине (т. е. уменьшение объема пустот) уменьшается объем большинства жидкостей при кристаллизации и возрастает координационное число. Увеличение объема, наблюдаемое при кристаллизации некоторых жидкостей (например воды), связано с уменьшением координационного числа при переходе жидкость–кристалл. Оно объясняется образованием в кристалле направленных связей.

Структурный переход от газа к жидкости можно осуществить непрерывно, путем одновременного сжатия по всему объему газа. При достаточно большом уплотнении любой системы несжимаемых частиц в ней возникает особенность, обусловленная закономерностью в расположении ближайших соседей. Центры таких частиц будут отстоять друг от друга на расстояниях, приблизительно равных диаметру частиц. Эта структурная закономерность, или *корреляция*, носит название *ближнего порядка*. Корреляция в расположении первых соседей вызовет корреляцию в расположении вторых и ряда следующих соседей. Однако некоторый разброс в относительном расположении частиц $\Delta r/r$ с увеличением расстояния между ними уменьшает степень корреляции при удалении от какой-либо частицы системы, принятой в качестве исходной. Радиус области ближнего порядка, или *радиус корреляции*, определяет степень неупорядоченности структуры. В жидкостях и аморфных телах этот радиус обычно составляет несколько межатомных расстояний.

Ближний порядок является отличительным признаком конденсированной системы и отсутствует в разреженном газе. В газе, сжатом до плотности жидкости или стекла, даже при температурах выше критической возникает ближний порядок. Ближний порядок есть следствие несжимаемости частиц, т. е. геометрии, обусловленной силами отталкивания. Характеристикой неупорядоченной структуры является *функция распределения частиц*, которую мы рассмотрим ниже в применении к аморфным телам.

Упорядоченная система, соответствующая некоторому закону периодичности, обладает строгой корреляцией в расположении как близких, так и сколь угодно удаленных друг от друга частиц. Это свойство системы частиц называется *дальним порядком*. Конденсированная система с дальним порядком представляет собой идеальный кристалл. В системе координат, связанной с кристаллической структурой, можно точно указать координаты всех ее узловых точек, положение которых определяет положение элементов структуры (атомов, молекул, групп атомов).

Вероятность распределения узлов периодической структуры описывается δ -функцией, которая равна нулю во всем объеме ($\delta = 0$), кроме узловых точек, в которых $\delta = 1$. Если провести через какой-либо элемент структуры радиус-вектор, блуждающий, как луч прожектора, и зафиксировать его положение в тот момент, когда он встретит другой узел, то, продолжив его в пространстве, получим прямую с периодически расположенными узлами. Плотность вероятности вдоль узловой прямой можно изобразить периодической «гребенкой» из бесконечно тонких зубцов с высотой $\delta = 1$. Длина периода будет зависеть от направления узловой прямой в структуре [55].

1.1.1. Кристаллическое состояние и его классификация

В окружающем нас мире имеется огромное число веществ в кристаллическом состоянии, которым присущи многие весьма разнообразные свойства, определяемые как различным внутренним строением, так и природой атомов, входящих в их состав. Вообще кристаллическое состояние можно определить как такое состояние вещества, в котором составляющие его атомы, молекулы либо группы атомов (в дальнейшем будем называть их частицами) расположены строго периодически, образуя геометрически закономерную кристаллическую структуру. Однако, несмотря на общность такого представления, кристаллические тела в реальности могут иметь различные виды [59].

а) Идеальные монокристаллы

Как и любая идеализация, идеальные монокристаллы представляют собой некую модель, с помощью которой легко представить атомное строение кристаллического твердого тела. В рамках этой модели имеет место *трансляционная симметрия* в расположении частиц. Определим кристалл как тело, состоящее из частиц, расположенных в пространственной решетке так, что можно ввести три некопланарных вектора элементарных трансляций (перемещений) \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} . Перемещающая кристалл как целое параллельно самому себе на вектор $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, где m , n и p — произвольные целые числа, мы можем тем самым построить всю кристаллическую решетку. Таким образом, идеальный монокристалл обладает свойством инвариантности относительно смещения: $f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$, где \vec{r} — вектор, связывающий начало координат (принятое в произвольной частице) с любой другой частицей. Трансляционная симметрия в идеальном монокристалле эквивалентна существованию дальнего порядка в расположении частиц.

б) Монокристаллы с дефектами

Дефекты — это нарушения идеального дальнего порядка. По своему характеру они подразделяются на точечные, линейные, плоские и объемные.

Число дефектов в кристалле может быть как очень мало, так и сравнимо с числом атомов в нем. Например, в сплавах металлов такие дефекты вызваны введением в расплав основного металла различных компонентов. В зависимости от концентрации дефектов в кристаллическом материале свойства его могут кардинально меняться. В этом случае можно говорить о сохранении дальнего порядка лишь в среднем.

в) Поликристаллы

Это наиболее распространенное в природе состояние вещества. Поликристаллы состоят из большого числа различным образом ориентированных малых кристаллов (*кристаллитов*), представляющих собой идеальные монокристаллы или монокристаллы с дефектами. В них дальний порядок сохраняется только в пределах одного кристаллита.

г) Двумерные квазиплоские системы

К таким телам относятся пленки или поверхностные слои, возникающие по тем или иным причинам на поверхности твердых тел. Трансляционная симметрия в них имеет место лишь параллельно поверхности слоя. Особые свойства пленок обусловлены различием сил, действующих на их внешнюю и внутреннюю поверхности.

д) Квазикристаллы

Их существование обнаружено в 1984 году в сплаве алюминия (Al) и марганца (Mn), полученном быстрым (1000 К в 1 мс) охлаждением расплава. Структурные единицы в них представляют собой *кластеры*, существующие в виде икосаэдров из атомов Al, «вставленных» во вдвое большие икосаэдры из атомов Mn. Кластеры располагаются в пространстве квазипериодически.

е) Фуллерены

Впервые фуллерен был смоделирован группой ученых из США в 1985 году, а затем получен теми же учеными экспериментально испарением графита при высоких (~ 1000 °C) температурах. Фуллерен представляет собой семейство шарообразных замкнутых полых молекул углерода разных размеров. Разные фуллерены отличаются числом атомов углерода в молекуле. Их общая химическая формула C_n , где n — количество атомов углерода, образующих данную молекулу фуллерена. На сегодня известны фуллерены C_{32} , C_{44} , ..., C_{60} , C_{70} , C_{80} , C_{92} , ..., C_{240} , C_{550} , ...

ж) Жидкие кристаллы

Жидкие кристаллы представляют собой промежуточные фазы, находящиеся в жидком состоянии, которые характеризуются только ближним порядком в расположении частиц и одновременно обладают анизотропией (зависимостью свойств от направления), характерной для кристаллов. Жидкие кристаллы существуют в определенном температурном интервале, ниже которого кристаллизуются во вполне упорядоченный кристалл, а выше — «плавятся» в изотропную жидкость. Они являются молекулярными веществами и обладают структурной упорядоченностью, промежуточной между кристаллической и жидкостной.

1.1.2. Аморфное состояние

В аморфных твердых телах отсутствует трансляционный дальний порядок. Расстояния между соседними атомами близки к средним значениям, поэтому считается, что в аморфных телах реализуется ближний порядок в расположении атомов. Конфигурация ближайшего окружения, как правило, соответствует таковой в одной из кристаллических фаз данного соединения. С ростом расстояния

от атома, выбранного за начальный, взаимная корреляция в их расположении все больше нарушается. Относительный порядок в аморфном твердом теле обычно сохраняется только в пределах $3 \div 5$ межатомных расстояний. Поэтому аморфные тела в основном *изотропны*, т. е. их свойства одинаковы по всем направлениям внутри тела, в отличие от кристаллов, проявляющих свойство *анизотропии* [11, 37, 68].

Одна из форм существования некристаллических аморфных твердых тел — стеклообразное состояние. Среди всех других видов некристаллических твердых тел стеклообразные вещества отличаются тем, что они получаются при переохлаждении жидкости (оксидного расплава, водного раствора солей, полимера в текучем состоянии, жидкого металлического расплава и т. д.). Процессы охлаждения осуществляются с такой скоростью, что кристаллизация не успевает произойти до перехода вещества в твердое состояние. В этом случае подвижность составляющих жидкость частиц становится столь малой, что скорость процесса кристаллизации стремится к нулю и вещество может сохраняться в твердом аморфном состоянии сколь угодно длительное время.

1.1.3. Жидкое и газообразное состояния

Жидкое состояние вещества является промежуточным между твердым и газообразными состояниями. Отличаясь от твердого тела и газа, жидкость имеет черты сходства с каждым из этих состояний [98, 99].

Жидкость, как и газ, принимает форму сосуда, в котором она находится. Молекулы жидкости и газа совершают хаотические перемещения, сталкиваясь друг с другом. Однако, наряду с этим, имеются существенные качественные различия этих двух состояний.

Расстояние между молекулами газа при невысоких давлениях много больше радиусов самих молекул, т. е. практически весь объем, занятый газом, остается свободным. В жидкости же большая часть объема занята молекулами, так что свободный объем много меньше объема, занятого молекулами.

Средняя кинетическая энергия частиц газа определяется абсолютной температурой T и равна $\frac{3}{2}k_B T$, где k_B — постоянная Больцмана. Эта энергия больше потенциальной энергии их взаимодействия U . Напротив, в жидкости потенциальная энергия взаимодействия молекул больше средней кинетической энергии их движения.

В газе частицы сталкиваются при их поступательном движении, причем частота столкновений зависит от массы частиц, их размеров и температуры. В жидкости каждая частица совершает колебательное движение в ограниченной области пространства, которую создают окружающие ее молекулы, амплитуда этих колебаний зависит от свободного объема.

Диффузия частиц в газе происходит в результате их поступательного движения, а в жидкости она совершается в результате перескока частицы из одной свободной области в другую, поэтому коэффициенты диффузии газов во много раз превосходят коэффициенты диффузии жидкостей.

Кроме того, жидкое состояние по ряду важных показателей близко к твердому. Это проявляется, в частности, в том, что межмолекулярные расстояния

в жидкости близки к таковым в твердом теле, т. к. при плавлении последнего объем вещества изменяется незначительно (обычно он увеличивается не более чем на 10 %). Различие в энергиях межмолекулярного взаимодействия в жидкости и в твердом теле также невелико. Это следует из того факта, что теплота плавления $\Delta Q_{пл}$ много меньше теплоты испарения $\Delta Q_{исп}$. Например, для воды $\Delta Q_{пл} = 6$ кДж/моль, а $\Delta Q_{исп} = 45$ кДж/моль; для бензола $\Delta Q_{пл} = 11$ кДж/моль, а $\Delta Q_{исп} = 48$ кДж/моль [144, 148].

Теплоемкость вещества при плавлении меняется очень слабо, т. е. ее показатели близки для обоих состояний. Отсюда следует, что характер теплового движения частиц в жидкости в некоторой степени схож с таковым в твердом теле. Жидкость, как и твердое тело, выдерживает без разрыва большие растягивающие усилия.

Различие между жидкостью и твердым телом заключается в текучести: твердое тело сохраняет свою форму, жидкость даже под влиянием небольшого усилия легко ее меняет. Эти свойства вытекают из таких особенностей строения жидкости, как сильное межмолекулярное взаимодействие, ближний порядок в расположении молекул и способность молекул сравнительно легко менять свое положение.

При нагревании жидкости от температуры замерзания до температуры кипения ее свойства плавно меняются, с нагреванием постепенно усиливаются черты сходства жидкости с газом.

1.2. Кристаллическая решетка

Особенность строения кристаллических веществ состоит в наличии периодичности в расположении образующих их частиц. Она обусловлена действием многих сил или процессов, возникающих при взаимодействии частиц. Абстрактным геометрическим построением, позволяющим выяснить законы симметрии структуры кристалла, является *пространственная решетка*. Она строится как трехмерная периодическая сетка, соединяющая идентичные точки кристалла, называемые *узлами решетки* [83]. Следует отметить, что в узлах пространственной решетки может и не быть никаких частиц.

Следует разграничивать понятия кристаллической структуры и пространственной решетки. Кристалл — это совокупность атомов или молекул, определенным образом расположенных в пространстве. Кристаллические структуры изображаются моделями, в которых показано расположение каждого атома относительно его соседей. В кристалле имеется эталон или мотив, путем повторения которого создается целый кристалл. Пространственная решетка же показывает, как распределяются мотивы в пространстве и в общем случае, когда мотив составляет группа атомов или молекул, пространственная решетка отлична от реальной структуры кристалла. Поэтому узел решетки может отличаться от места, занимаемого атомом в кристалле.

Если выбрать произвольный узел 0 и связать его с ближайшими идентичными соседними узлами некопланарными векторами \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} (рис. 1.3), то на их основе можно заполнить все пространство кристалла узлами, а связывающие их линии образуют периодическую сетку.

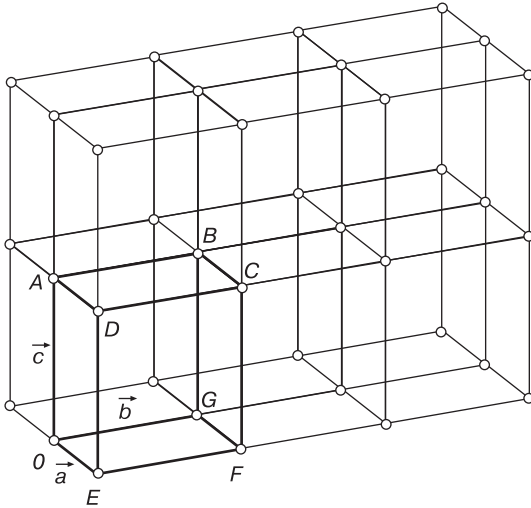


Рис. 1.3. Пространственная решетка. Кругами обозначены узлы — идентичные точки

Векторы \vec{R} , соединяющие начало координат, выбранное в произвольном узле решетки, с любым ее узлом, называются *векторами трансляций*. Как уже было сказано выше, любой такой вектор можно записать в виде $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, где m, n, p — целые числа, которые называют *индексами узлов пространственной решетки*. Обозначение узлов решетки — $[[mnp]]$. Если трансляция по какой-либо оси для данного узла совершается против направления этой оси, то соответствующий индекс отрицателен и записывается с чертой над ним. На рис. 1.4 показаны индексы нескольких узлов в косоугольной плоской сетке (индекс по третьей оси равен нулю) [75].

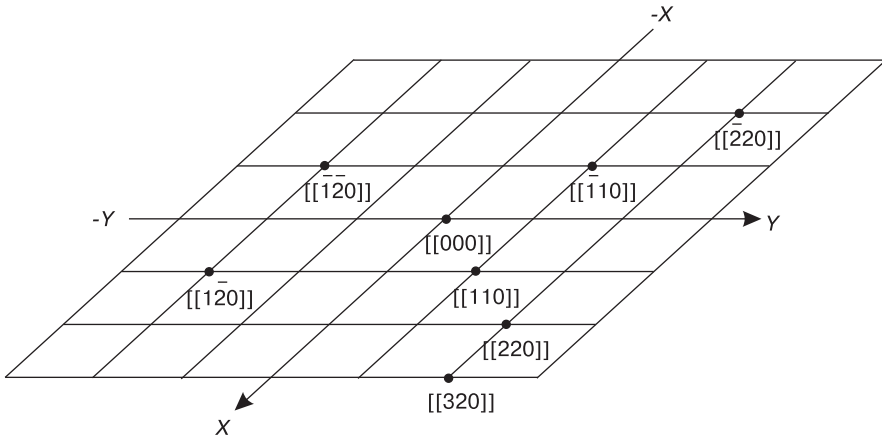


Рис. 1.4. Символы некоторых узлов в косоугольной плоской сетке

1.2.1. Элементарная ячейка. Базис решетки

Одним из основных представлений, связанных со структурой кристаллов, является понятие об *элементарной ячейке*. В общем случае элементарную ячейку

можно представить как минимальный объем кристалла, параллельные переносы (трансляции) которого в трех измерениях позволяют построить всю кристаллическую решетку. В качестве элементарной ячейки можно, например, рассматривать параллелепипед $ABCDEF$, показанный на рис. 1.3.

Закономерности строения элементарных ячеек, в частности степень их симметричности, определяют многие свойства кристалла, в первую очередь электрические, магнитные и механические. Элементарная ячейка может содержать как один, так и несколько сортов атомов. Так, у многих металлов, например железа, хрома, меди, серебра, она состоит из одного сорта атома. В тех случаях, когда кристалл состоит из нескольких химических элементов, например натрия и хлора, элементарная ячейка будет содержать два сорта атома: натрий и хлор. Широко распространены кристаллы с элементарной ячейкой, состоящей из нескольких сцепленных друг с другом молекулярных групп, например кристаллы льда или же многих магнитных материалов. Существуют кристаллы, например белковые, элементарная ячейка которых состоит из молекул, содержащих несколько тысяч атомов.

Один из способов построения пространственной решетки состоит в трансляции (размножении) элементарной ячейки, имеющей вид элементарного параллелепипеда, построенного на трех некопланарных векторах \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , называемых *векторами основных трансляций* (рис. 1.5). За начало этих векторов можно принять любой узел пространственной решетки. Модули векторов $|\vec{a}|$, $|\vec{b}|$, $|\vec{c}|$ называются *периодами элементарной ячейки*, а углы между ними α , β , γ — *углами элементарной ячейки*. Если весь параллелепипед построен на основных трансляциях \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , то элементарная ячейка называется *примитивной* (обозначается буквой P). Примитивная элементарная ячейка не имеет дополнительных узлов ни внутри себя, ни на поверхности.

Каждый узел, находящийся в вершине элементарной ячейки, принадлежит еще восьми соседним элементарным ячейкам. Поскольку всего узлов (или вершин параллелепипеда) восемь, то $(8 \cdot \frac{1}{8} = 1)$ и на примитивную элементарную ячейку приходится всего один узел.

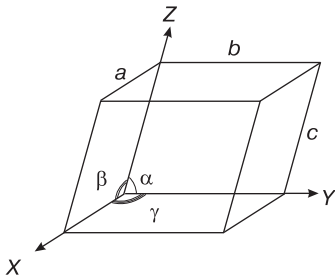


Рис. 1.5. Элементарная ячейка

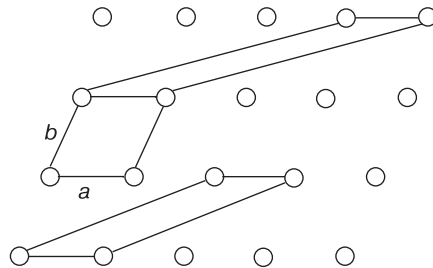


Рис. 1.6. Различные способы выбора элементарных ячеек

Казалось бы, что выбор элементарной ячейки произволен. На рис. 1.6 все три плоские ячейки примитивны. Хотя трансляции в двух из них и не являются кратчайшими, но любая из них воспроизводит при переносе параллельно самой себе

в двух направлениях всю «структуру кристалла». Однако Бравэ были сформулированы 3 правила выбора элементарных ячеек, выполняемые в указанной ниже последовательности.

1. Симметрия элементарной ячейки должна соответствовать симметрии кристалла.
2. Элементарная ячейка должна иметь максимальное число равных ребер и равных углов.
3. При условии выполнения двух первых правил элементарная ячейка должна иметь минимальный объем.

При выполнении этих правил элементарная ячейка, в отличие от примитивной, кроме узлов в вершинах, может иметь дополнительные узлы.

Совокупность координат всех узлов, приходящихся на элементарную ячейку, называют ее *базисом*. В отличие от индексов узлов кристаллической решетки, индексы базиса могут быть дробными. Они показывают доли векторов элементарных трансляций по соответствующей оси для данного узла базиса элементарной ячейки. Сложную ячейку обычно выбирают так, чтобы узлы находились либо в центрах граней, либо в центре объема. Поэтому принята система наиболее распространенных видов сложных ячеек.

Приведем примеры сложных элементарных ячеек, в узлах которых находятся атомы одного сорта.

Объемноцентрированная ячейка (обозначается буквой I) (рис. 1.7, а). Кроме узла, находящегося в начале координат, она имеет дополнительный узел, расположенный на пересечении телесных диагоналей. Таким образом, на данную элементарную ячейку приходится всего два узла и ее базис $[[000], [\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]]$.

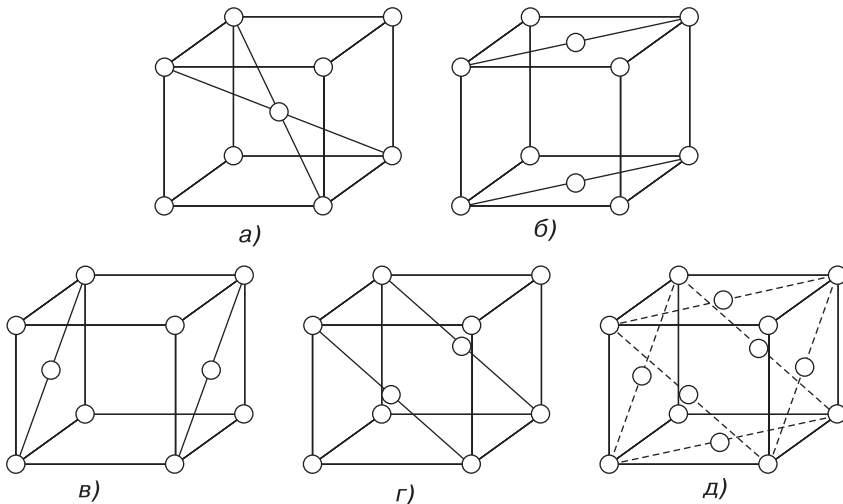


Рис. 1.7. Примеры элементарных ячеек

Базоцентрированная ячейка (обозначается буквой С) (рис. 1.7, б), так же, как и объемноцентрированная, характеризуется базисом из двух узлов, индексы

которых $[[000]]$, $[[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]]$. На рисунке видно, что в этой ячейке дополнительные узлы находятся в центрах граней, перпендикулярных оси c . Ясно, что данные узлы принадлежат этой ячейке только наполовину, но т. к. таких граней в ячейке две, то ей принадлежит один узел, находящийся на грани.

Бокоцентрированная ячейка. Возможны два варианта: А-ячейка, в которой центрирована грань, перпендикулярная оси a , и В-ячейка, где дополнительные узлы находятся в центре граней, перпендикулярных оси b , базисы которых соответственно: А — $[[000]]$, $[[0\frac{1}{2}\frac{1}{2}]]$ (рис. 1.7, з), В — $[[000]]$, $[[\frac{1}{2}0\frac{1}{2}]]$ (рис. 1.7, в).

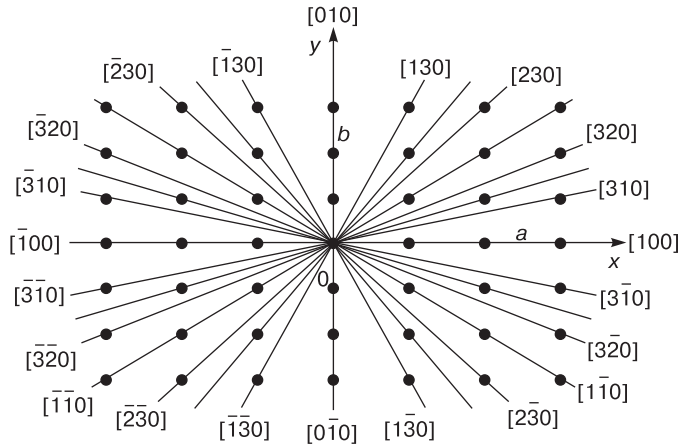
Гранецентрированная ячейка (рис. 1.7, д) (обозначается буквой F). Дополнительные узлы находятся в центрах граней. Общее число узлов, приходящихся на гранецентрированную ячейку, — четыре. Ее базис $[[000]]$, $[[0\frac{1}{2}\frac{1}{2}]]$, $[[\frac{1}{2}0\frac{1}{2}]]$, $[[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]]$.

1.2.2. Кристаллографические направления, плоскости и зоны

Кристаллографическим направлением называют направление прямой, проходящей как минимум через два узла решетки. *Индексы направлений* рассчитываются как разность индексов узлов, через которые проходит прямая.

Приведем пример: пусть прямая проходит через узлы решетки с индексами $[[111]]$ и $[[422]]$, следовательно, индексы направлений можно рассчитать как $4 - 1 = 3$; $2 - 1 = 1$; $2 - 1 = 1$. В этом случае индекс направления $[311]$ (обозначение $[mnp]$). На рис. 1.8 линиями показаны кристаллографические направления в плоской (плоскость xy) сетке узлов и соответствующие им символы.

Рис. 1.8. Символы некоторых направлений в плоской сетке



Кристаллографические плоскости

Введем понятие кристаллографической плоскости. Кристалл можно представить в виде совокупности плоскостей, на которых расположены центры частиц.

Пусть плоскость проходит через координатные оси в узлах, которые находятся от начала координат на расстоянии ma , nb , pc . Индексы этих узлов соответственно $[[m00]]$, $[[0n0]]$, $[[00p]]$. Обратные числа $1/m$, $1/n$, $1/p$. Приведем эти числа

к общему знаменателю: $\frac{np}{mnp}$, $\frac{mp}{mnp}$, $\frac{nm}{mnp}$. Произведения $np = H$, $mp = K$, $nm = L$ представляют собой индексы данной кристаллографической плоскости, которые в кристаллографии носят название *индексов Миллера*. Обозначают индексы Миллера записью в круглых скобках без запятых (HKL). Правильно произносить такую запись для конкретной плоскости, например (110), следует как «один-один-ноль». Например, плоскость проходит через узлы $[[003]]$; $[[020]]$; $[[001]]$. Обратные числа — $1/3$, $1/2$, 1 , следовательно, данная плоскость имеет индексы Миллера (236). Если плоскость пересекает ось координат в области отрицательных значений, то ее индекс Миллера будет отрицательным и записывается с чертой над ним, например $(0\bar{1}0)$.

Вследствие периодичности кристаллической решетки каждая плоскость имеет очень много параллельных ей плоскостей — *семейство плоскостей*. Индексы ближайшей к началу координат плоскости семейства (HKL) характеризуют все данное семейство плоскостей (рис. 1.9). Ближайшая к началу координат плоскость семейства отсекает на осях элементарных трансляций x, y, z отрезки a/H , b/K , c/L .

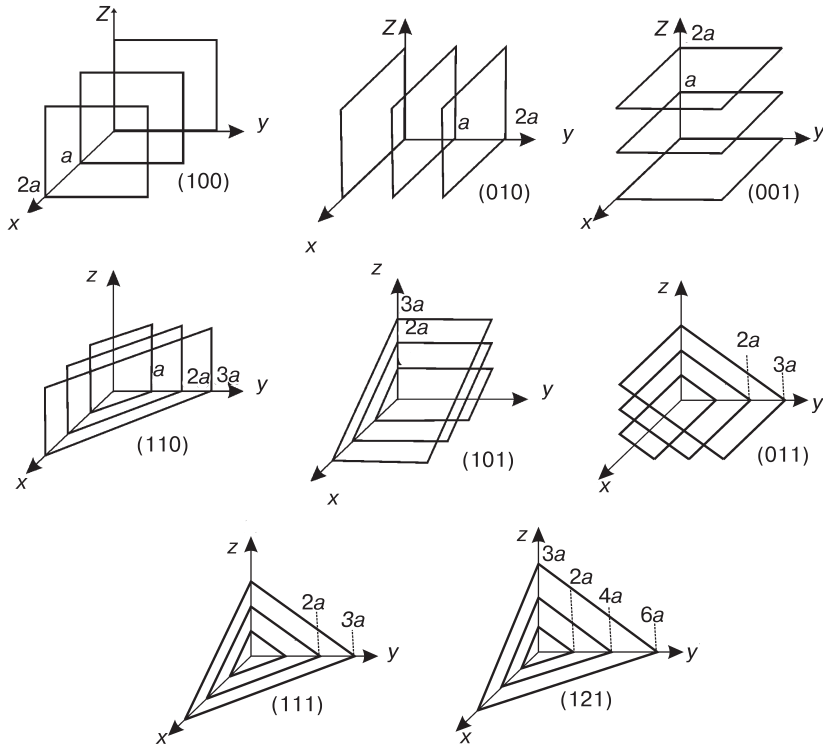


Рис. 1.9. Символы основных плоскостей в кубической решетке

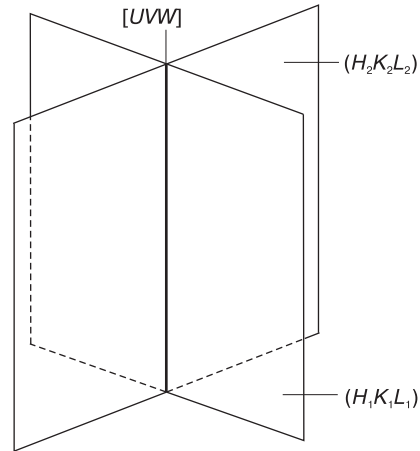
Кристаллографические плоскости одного семейства находятся на равных расстояниях друг от друга. Кратчайшее расстояние между этими плоскостями,

измеренное по нормали к ним, называется *межплоскостным расстоянием* и обозначается d_{HKL} .

Кристаллографическая зона

Семейство плоскостей, имеющих общую прямую, называют кристаллографической зоной, а общую прямую — осью зоны (рис. 1.10).

Рис. 1.10. Две плоскости с индексами $(H_1K_1L_1)$ и $(H_2K_2L_2)$ принадлежат зоне с индексами $[UVW]$



Если две плоскости с индексами Миллера $(H_1K_1L_1)$ и $(H_2K_2L_2)$ принадлежат одной зоне, то *индексы оси зоны* U, V, W можно найти так:

$$U/V/W = (K_1L_2 - K_2L_1)/(L_1H_2 - L_2H_1)/(H_1K_2 - H_2K_1).$$

Символы оси зоны, как и символы направлений, записываются тремя цифрами в квадратных скобках $[UVW]$.

1.2.3. Сингонии кристаллов

На основе перечисленных в подпараграфе 1.2.1 принципов выбора элементарной ячейки Бравэ всю совокупность кристаллов можно отнести к семи различным группам, названным *сингониями*. К одной сингонии относятся кристаллы, имеющие одинаковую кристаллографическую систему координат и одинаковую симметрию элементарной ячейки (табл. 1.1) [75].

Таблица 1.1. Кристаллографические сингонии и их характеристики

Кристаллографические сингонии	Соотношение между периодами элементарной ячейки	Углы между осями
Кубическая	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гексагональная	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$
Тетрагональная	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригональная (ромбоэдрическая)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Ромбическая	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Моноклиная	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Триклиная	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

В зависимости от числа равных длин трансляций и углов сингонии принято разделять на 3 категории: высшую, среднюю и низшую. К высшей категории относится кубическая сингония, к средней — гексагональная, тетрагональная и тригональная, и к низшей категории причисляют ромбическую, моноклинную и триклинную сингонии.

В литературе часто можно встретить описание только шести сингоний. Дело в том, что тригональная (или иначе ромбоэдрическая) и гексагональная сингонии имеют одинаковые по форме элементарные ячейки. Поэтому тригональную сингонию принимают за частный случай гексагональной.

1.2.4. Решетки Бравэ. Ячейка Вигнера–Зейтца

Решетки Бравэ









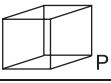
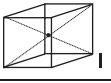




Каждую кристаллическую структуру можно охарактеризовать определенным набором элементарных трансляций. В зависимости от соотношения значений и взаимной ориентации основных трансляций a , b , c получаются решетки, отличающиеся друг от друга своей симметрией. Бравэ доказал, что существует всего 14 типов решеток, отличающихся своей симметрией. Они названы *решетками Бравэ*. Среди этих 14 решеток 7 являются примитивными и 7 — базисными. Распределение 14 решеток Бравэ по 7 сингониям показано в табл. 1.2.

Ячейка Вигнера – Зейтца

Вигнером и Зейтцем был предложен способ построения таких примитивных ячеек, которые обладали бы полной симметрией решетки Бравэ. Этот способ состоит в том, что произвольно выбранный узел решетки Бравэ соединяют прямыми линиями с ближайшими эквивалентными узлами; затем проводят плоскости, перпендикулярные этим прямым и проходящие через их середину (рис. 1.11, *а*). В результате получают замкнутую область пространства с центром в выбранном узле, все точки которой лежат ближе к этому узлу, чем к любому другому узлу решетки. Эта область носит название *ячейки Вигнера – Зейтца*. Она примитивна, поскольку только атом в центре принадлежит ей. Объем ее равен объему элементарной ячейки, построенной на кратчайших трансляциях решетки.

Ячейка Вигнера – Зейтца для примитивной кубической решетки имеет форму куба. Для объемноцентрированной кубической (ОЦК) решетки выберем в качестве исходного узла центральный узел куба. Восемь перпендикулярных плоскостей, проведенных через середины отрезков, соединяющих исходный узел с узлами, находящимися в вершинах куба, образуют правильный восьмигранник (октаэдр). Шесть перпендикулярных плоскостей, проведенных через середины отрезков, соединяющих исходный узел с узлами, находящимися в центре соседних кубов, отсекут шесть вершин октаэдра, образуя четырнадцатигранник. Восемь его граней — правильные шестиугольники, а шесть граней — квадраты (рис. 1.11, *б*). Аналогично можно построить ячейку Вигнера – Зейтца для гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки (рис. 1.11, *в*). Ячейки Вигнера – Зейтца будут в дальнейшем необходимы при рассмотрении тепловых и электрических свойств кристаллических твердых тел.

Таблица 1.2. Решетки Бравэ [83]

Сингония	Тип решетки			
	Примитивная	Базоцентри- рованная	Объемноцентри- рованная	Гранецентри- рованная
Триклинная				
Моноклинная				
Ромбическая				
Тригональная (ромбоэдрическая)				
Тетрагональная				
Гексагональная				
Кубическая				

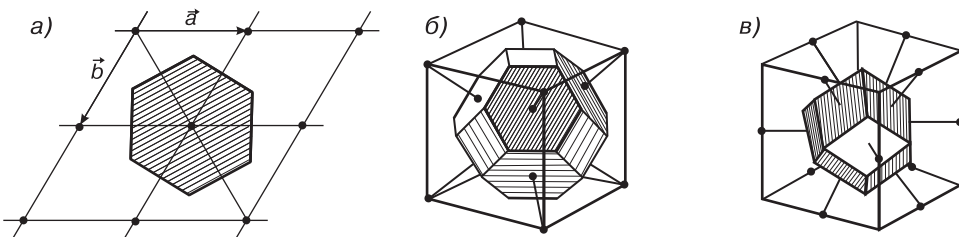


Рис. 1.11. Ячейка Вигнера – Зейтца: а) — двумерный случай (заштрихованная область); б) — для объемноцентрированной кубической ячейки; в) — для гранецентрированной кубической ячейки [74]

1.3. Симметрия кристаллов

При описании структуры кристалла необходимо определить сингонию кристалла, т. е. выбрать кристаллографическую систему координат и элементарную ячейку

ку, определить базис элементарной ячейки и набор операций симметрии, при помощи которых будет осуществляться перенос кристаллической структуры параллельно самой себе.

К операциям (или преобразованиям) симметрии относятся:

1. *Трансляционные преобразования*, определяемые вектором $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$.
2. *Операции вращения и отражения*, приводящие к совмещению решетки с самой собой. Их называют *точечными операциями или группами симметрии*.
3. Сложные симметрические преобразования, состоящие из комбинации первых двух операций, образуют пространственные группы симметрии.

1.3.1. Точечные операции симметрии

Воображаемые точки, линии и плоскости, с помощью которых осуществляются упомянутые операции вращения и отражения, называются *элементами симметрии*. В кристаллографии для обозначения операций симметрии и соответствующих им элементов симметрии служат специальные символы. Наиболее распространенными из них являются международные символы, принятые Интернациональным союзом кристаллографов, и символика, основанная на формулах симметрии [27]. Перечислим элементы и связанные с ними операции симметрии.

Центр симметрии (центр инверсии) — это некая воображаемая точка внутри кристаллической решетки, характеризующаяся тем, что любая прямая, проведенная через нее, встречает идентичные друг другу узлы решетки на равных расстояниях от центра. Симметричное преобразование в центре симметрии — это зеркальное отражение кристаллической решетки в точке. Обозначается центр симметрии буквой C .

Поворотные оси симметрии представляют собой прямые линии, при повороте вокруг которых на некоторый определенный угол кристаллическая решетка совмещается сама с собой. По формуле симметрии поворотные оси обозначают буквами L_n , где n — порядок оси, который может принимать значения только 1; 2; 3; 4; 6. Порядок оси симметрии n показывает, сколько раз решетка совместится сама с собой при полном повороте вокруг этой оси. Таким образом, поворотные оси определяют вращение вокруг них на углы 2π (первый порядок), $2\pi/2$ (второй порядок), $2\pi/3$ (третий порядок), $2\pi/4$ (четвертый порядок), $2\pi/6$ (шестой порядок), которое приводит к совмещению решетки с самой собой. Геометрические обозначения поворотных осей различных порядков приведены в табл. 1.3. Следует особо отметить, что в кристаллах невозможны оси симметрии 5-го порядка и порядка, большего чем 6. Это ограничение связано с тем, что в кристаллическом состоянии вещество представляет собой систему материальных частиц, симметрично повторяющихся в пространстве. Такие симметричные ряды, непрерывно заполняющие пространство, несовместимы с осями 5-го, 7-го и других порядков. Доказательство этого утверждения можно обнаружить в любом учебнике по кристаллографии.

Плоскости зеркального отражения делят фигуру на две части, расположенные друг относительно друга как предмет и его зеркальное отражение.