

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ (ТУСУР)

КАФЕДРА ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ (ЭП)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР ТУСУР
_____ П.Е. Троян
« ____ » _____ 2017 года

Давыдов В.Н.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛА
ПРИ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ**

Учебно - методическое пособие к лабораторной работе
по дисциплине «Материалы электронной техники»
для студентов направления
11.03.04 – Электроника и наноэлектроника,
Профиль «Квантовая и оптическая электроника»

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ.....	3
2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ.....	3
2.1. Предельные группы симметрии Кюри.....	3
2.2. Принципы кристаллофизики: принцип Неймана и принцип Кюри.....	6
2.3. Правила перемножения точечных групп симметрии.....	7
2.4. Вопросы для самостоятельного контроля знаний.....	8
3. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ.....	8
3.1. Задание к лабораторной работе.....	8
3.2. Схема определения группы симметрии кристалла при воздействии.....	9
4. ТРЕБОВАНИЯ К СОДЕРЖАНИЮ И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА.....	10
5. ЛИТЕРАТУРА.....	11

1. ВВЕДЕНИЕ

Для создания элементов электронной техники широко используют электро-технические материалы, находящиеся в различных состояниях: аморфные, поликристаллические, сплавы, кристаллы и т.д. Среди этих состояний кристаллические материалы используют для изготовления прецизионной аппаратуры, высокочувствительных резисторов, конденсаторов и других элементов. Для того, чтобы на основе кристалла получить элемент электронной техники на основе конкретного физического свойства необходимо знать какой должна быть симметрия кристалла и симметрия требуемого воздействия на кристалл.

В этой связи необходимо студентам должны знать фундаментальные принципы кристаллофизики, позволяющие на основе законов симметрии предсказать наличие в кристалле с заданной точечной группой симметрии того или иного физического свойства, если симметрия внешнего воздействия на кристалл также известна.

Целью данной лабораторной работы является изучение студентами принципов кристаллофизики, а также получение навыков определения условий наблюдения заданного физического свойства при известной симметрии внешнего воздействия, которое необходимо для реализации выбранного свойства.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1. Предельные группы симметрии Кюри

Из наблюдений следует, что если кристалл обладает определенной симметрией, то и физические свойства этого кристалла должны иметь такую же симметрию: поскольку структура кристалла в определенных направлениях одинакова, то одинаковыми должны быть в этих направлениях и его физические свойства. Однако нам известно, что полная симметрия кристалла описывается пространственной группой симметрии, которая складывается из элементов точечной симметрии, трех элементов трансляционной симметрии и набора «перекрестных» элементов симметрии. Относительно всех ли элементов пространственной группы симметрично физическое свойство кристалла? Оказывается, нет. Действительно, если необходимо измерить, например, электропроводность кристалла (он имеет идеальную решетку и бесконечные размеры по сравнению с измерительными площадками, к которым припаяны омические контакты), то, располагая измерительные контакты в любой точке торцов и сохраняя кристаллографическое направление измерения электропроводности, будем получать абсолютно одинаковые значения отыскиваемого физического свойства. Следовательно, трансляционная симметрия не должна входить в симметрию физического свойства. Поскольку в группу

симметрии физического свойства не вошла трансляционная симметрия, то не войдут и перекрестные элементы симметрии как содержащие трансляцию.

Остаются только элементы точечной симметрии – именно относительно их должны быть симметричны физические свойства кристалла. Но из практического опыта известно, что некоторые свойства могут в кристаллических веществах обладать *изотропностью* (одинаковостью), т.е. их величина не зависит от направления его измерения. Описать же изотропность физического свойства (повторяемость при повороте на любой угол, в том числе на бесконечно малый) можно введением оси симметрии бесконечного порядка: $\alpha = 2\pi/n \rightarrow 0$, если $n \rightarrow \infty$.

Далее, кроме кристаллических веществ в электронной технике широко используются изотропные вещества, т.е. вещества, однородные по всем параметрам во всех направлениях. Если в группу симметрии кристалла входят оси симметрии порядка 1, 2, 3, 4, 6, то в группы симметрии изотропных веществ должны также входить оси симметрии ∞ -ного порядка, поскольку в них поворот на произвольный угол (в том числе бесконечно малый) не изменяет ни структуру вещества, ни его физические свойства. Наличие такой оси отражает тот факт, что в плоскости перпендикулярной ей имеет место изотропность рассматриваемого физического свойства. Кроме того, оси симметрии порядка ∞ могут входить в группы симметрии физических полей: электрического, магнитного, упругого. Значит, должны существовать точечные группы симметрии, содержащие оси симметрии ∞ -ного порядка.

Точечные группы симметрии, в которые входят оси симметрии бесконечного порядка, называются предельными группами симметрии или группами Кюри. Таких групп семь и каждая из 32-х групп точечной симметрии кристаллов является подгруппой по меньшей мере одной из них. Так, например, предельная группа симметрии, характеризуемая одной осью симметрии ∞ -ного порядка, имеет кристаллографические подгруппы 1, 2, 3, 4, 6. Геометрические фигуры, характеризующие набор элементов симметрии для наиболее используемых предельных групп Кюри, показаны на рис. 16.

1. **Группа ∞ .** Данная группа симметрии состоит только из оси симметрии бесконечного порядка, т.е. оси с поворотом на произвольный угол. Геометрической фигурой, соответствующей данной точечной группе, является вращающийся вокруг оси конус. Ось симметрии бесконечного порядка проходит по оси конуса. Вращение фигуры необходимо для того, чтобы исключить бесконечное количество плоскостей симметрии, имеющих в покоящемся конусе и проходящих через ось ∞ .

2. **Группа ∞m .** Покоящийся конус характеризуется точечной группой ∞m , т.е. осью ∞ и бесконечным числом плоскостей симметрии, проходящих через эту ось. Ось симметрии ∞ в

конусе - полярна. Полярное направление в кристалле характеризуется тем, что физическое свойство, измеренное в его прямом и обратном направлении, имеет разную величину. Такой симметрией обладает любое физическое свойство или внешнее воздействие, описываемое полярным вектором, например, электрическое поле, механическая сила и т.д. Ось симметрии ∞ -ного порядка совпадает с направлением силовых линий описываемого воздействия.

3. **Группа ∞/m .** Данная группа симметрии включает в себя одну ось симметрии бесконечного порядка и одну перпендикулярную ей плоскость симметрии. Характерной геометрической фигурой группы ∞/m является вращающийся вокруг своей оси в какую-либо сторону цилиндр. Вращение необходимо для того, чтобы исключить из группы плоскости симметрии, проходящие через ось покоящегося цилиндра. Ось симметрии бесконечного порядка направлена по оси цилиндра. Этой группе подчинены группы $6/m, 4/m, 2/m, m, 6, 4, 3, 1$. Симметрией ∞/m обладает любое физическое свойство, описываемое аксиальным вектором, например, однородное магнитное поле.

4. **Группа ∞/mmm .** Покоящийся цилиндр, а также цилиндр, растянутый или сжатый вдоль главной оси, характеризуется симметрией ∞/mmm , т.е. неполярной осью симметрии бесконечного порядка, бесконечным числом продольных плоскостей и одной перпендикулярной плоскостью, а также бесконечным числом поперечных осей порядка 2 и центром симметрии.

5. **Группа $\infty 2$.** Цилиндр, закрученный вдоль геометрической оси (вращение нижней части цилиндра противоположно вращению его верхней части), имеет симметрию $\infty 2$, т.е. неполярную ось ∞ и бесконечное число поперечных осей порядка 2. Вращение исключает бесконечное число продольных плоскостей, а его закручивание - плоскость симметрии, перпендикулярную оси цилиндра.

6. **Группа $\infty \infty m$.** Эта группа симметрии есть группа симметрии обыкновенного шара, в которой имеется бесконечное число осей ∞ -ного порядка и бесконечным числом плоскостей m . Она называется **ортогональной группой** и представляет собой группу с самым полным набором элементов симметрии.

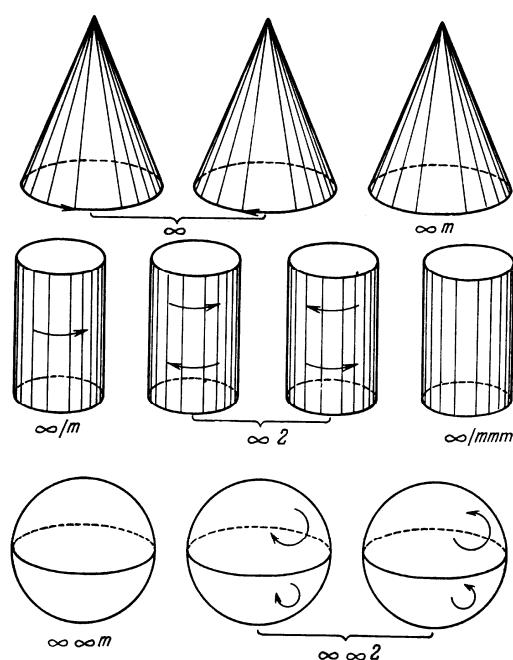


Рис.1

7. **Группа $\infty \infty 2$** имеет набор элементов симметрии шара, у которого все радиусы вращаются: имеется бесконечное число осей ∞ -ного порядка, но нет плоскостей симметрии. Последние уничтожены в симметрии шара вращением радиусов. Группа $\infty \infty 2$ описывает симметрию процедуры преобразования системы декартовых координат и называется **группой вращения**.

Элементы симметрии имеют не только электрическое и магнитное поле. Одноосное растягивающее или сжимающее напряжение характеризуется группой ∞/mmm , механическое напряжение чистого сдвига - mmm , а всестороннее сжатие - группой $\infty \infty t$. Явление вращения плоскости поляризации (эффект Фарадея) характеризуется предельной группой $\infty \infty$.

2.2. Принципы кристаллофизики: принцип Неймана и принцип Кюри

Как же соотносятся группы симметрии физических свойств кристалла и его элементарной ячейки? На этот вопрос отвечает принцип Неймана: **группа симметрии физического свойства должна включать в себя точечную группу симметрии кристалла. Под симметрией физического свойства кристалла понимается симметрия тензорной поверхности, с помощью которой описывается данное свойство.** Из этого принципа следует, что определенными физическими свойствами кристалл может обладать лишь тогда, когда точечная группа симметрии кристалла является подгруппой точечной группы симметрии рассматриваемого физического свойства. Например, спонтанной электрической поляризацией и пьезоэлектрическими свойствами могут обладать кристаллы, симметрия которых подчинена симметрии полярного вектора ∞t : 1, 2, 3, 4, 6, t , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$. О какой же точечной группе кристалла идет здесь речь? Об исходной или о группе симметрии, которая получается у кристалла под воздействием? Ответ на этот вопрос таков: о второй. Действительно, если кристалл подвергается, например, периодическому сжатию растяжению вдоль направления [100], то в течение всего времени наблюдения исследуемого физического свойства кристалл будет находиться под воздействием: исходная, например, кубическая симметрия преобразуется в тетрагональную симметрию. Только в моменты прохождения упругого напряжения через нуль при смене знака упругого напряжения симметрия кристалла будет описываться исходной точечной группой симметрии – кубической. Таким образом, **в принципе Неймана точечная группа симметрии кристалла берется такой, какой она становится при внешнем воздействии, необходимом для наблюдения рассматриваемого физического свойства.**

Как же определить симметрию кристалла при внешнем воздействии и как быть, если воздействий несколько? Ответ на этот вопрос даёт принцип Кюри: **когда несколько явлений природы накладываются друг на друга, образуя единую систему, их диссимметрии (от-**

существование элемента симметрии) складываются. В итоге в результирующем явлении остаются только те элементы симметрии, которые являются общими для каждого явления, взятого в отдельности.

При практическом использовании принципа Кюри важным является взаимная ориентация элементов симметрии складываемых явлений (например, кристаллов и воздействий на них), так что сочетание одних и тех же элементов в разных ориентациях может дать несовпадающие между собой наборы общих элементов симметрии. Так, если на кристалл наложить параллельно электрическое и магнитное поля, то точечная группа симметрии такого воздействия будет ∞ . Если поля взаимно перпендикулярны, то группа симметрии результирующего воздействия будет m .

2.3. Правила перемножения точечных групп симметрии

Поясним принцип Кюри на конкретных примерах. Пусть на кристалл точечной симметрии $4mm$ накладывается внешнее одноосное растяжение вдоль оси симметрии четвертого порядка. Какой будет симметрия кристалла под воздействием? Решить данную задачу можно двояко: во-первых, рассматривая геометрическую картину до и после воздействия или, во-вторых, поочередно накладывая элементы симметрии внешнего воздействия на элементы симметрии кристалла.

Первый способ. Характерной фигурой группы симметрии $4mm$ является четырехугольная пирамида. Если пирамиду растянуть вдоль её высоты, то она останется пирамидой, не изменится и число углов в ней. Значит, симметрия кристалла под указанным воздействием останется $4mm$.

Второй способ. При наложении оси симметрии бесконечного порядка и оси симметрии четвертого порядка друг на друга результирующим элементом будет ось симметрии четвертого порядка. Поясним этот вывод: если в цилиндр вдоль его оси ввести четырехугольную пирамиду так чтобы их оси совпадали, то результирующая фигура (цилиндр, из которого по его длине выступают четыре ребра пирамиды) будет иметь ось симметрии четвертого порядка. Теперь будем совмещать плоскости симметрии: во внешнем воздействии их бесконечное количество вдоль оси, а в пирамиде только четыре (две по осям X_1 и X_2 , а также две по диагонали между осями X_1 и X_2). Поскольку должны остаться только общие плоскости, то в результирующей фигуре будет четыре плоскости симметрии, совпадающие с плоскостями пирамиды. Таким образом, оставшийся набор элементов симметрии будет такой же, что и в группе $4mm$. Значит, симметрия исходной фигуры при указанном внешнем воздействии не изменится.

Если в этой задаче изменить ориентацию внешнего воздействия, например, направив растягивающее усилие перпендикулярно оси пирамиды, то результирующая фигура будет иметь совсем другую симметрию. Действительно, пусть усилие направлено по оси X_1 или X_2 , т.е. в плоскости симметрии фигуры. Тогда из всех элементов симметрии пирамиды останутся только две пересекающиеся плоскости симметрии по осям X_1 и X_2 и проходящие через ось X_3 . Согласно первому свойству элементов симметрии, такая конфигурация даст дополнительно ось симметрии второго порядка, которая будет лежать по линии пересечения плоскостей. Результирующая группа симметрии будет $mm2$. Действительно, представьте, что четырехугольную пирамиду растянули, взяв её за два противоположных ребра. И последнее, если растягивающее усилие, будучи перпендикулярным оси пирамиды, не лежит на осях X_1 или X_2 , то результирующая фигура не будет иметь других элементов симметрии кроме оси симметрии первого порядка (единичный элемент группы).

2.4. Вопросы для самостоятельной проверки знаний

1. Какие группы точечной симметрии существуют? Перечислите их.
2. Опишите геометрический образ каждой из предельных групп.
3. Перечислите все элементы симметрии в предельных группах.
4. Какие внешние воздействия описываются предельными группами? Перечислите их.
5. Сформулируйте принцип Неймана и поясните его.
6. Сформулируйте принцип Кюри и поясните его.
7. Какая симметрия кристалла используется в принципе Неймана: исходная или измененная внешним воздействием?
8. Как должны быть ориентированы элементы симметрии, чтобы при вычислении произведения точечных групп эти элементы вошли в произведение групп?
9. Опишите последовательность действий по получению точечной группы симметрии при одновременном действии нескольких воздействий (со своими симметричными свойствами).
10. Как, пользуясь принципами кристаллофизики и предельными группами симметрии, предсказать возможность наблюдения поляризации в кристалле, если внешнее воздействие на него – это изменение температуры кристалла?

3. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

3.1. Задание к лабораторной работе

3.1.1. Получите у преподавателя задание на лабораторную работу в виде указания точечной группы симметрии кристалла и задания двух внешних воздействий с заданной

ориентацией и заданной симметрией.

3.1.2. Составьте схему расчета результирующей точечной группы симметрии кристалла с использованием принципа Неймана и принципа Кюри, а также правил вычисления произведения точечных групп.

3.1.3. Получите точечную группу симметрии кристалла, подвергнутого действию двух внешних факторов, указанных в задании с лабораторной работе.

3.1.4. Составьте отчет о проделанной работе.

3.2. Схема определения группы симметрии кристалла при воздействии

Продемонстрируем схему определения группы симметрии кристалла, подвергнутого воздействию на конкретном примере. Известно, что кристаллы кварца являются пьезоэлектрическими, т.е. поляризуются под действием механических напряжений. Применяя принцип Кюри и принцип Неймана, ответить на следующие вопросы:

- Какие из ориентированных кварцевых пластинок: пластинки, перпендикулярные оси 3 или оси 2, следует выбрать в качестве чувствительных элементов пьезоэлектрических датчиков одноосного давления?
- Можно ли использовать кристаллы кварца в качестве датчиков гидростатического давления?

Решение. Вначале уясним следующее обстоятельство: возникновение поляризации кристалла есть появление напряженности электрического поля в его объеме. Симметрия электрического поля, т.е. желаемого физического свойства кристалла, есть ∞m . Согласно принципу Неймана группа симметрии кристалла должна быть подгруппой группы ∞m . Кристаллы кварца принадлежат к классу 32, который не является в исходном состоянии подгруппой группы физического свойства. Однако при внешнем воздействии симметрия кристалла изменяется и в определенных ситуациях может стать такой, что будет удовлетворять принципу Неймана. Эти ситуации устанавливаются принципом Кюри и именно они будут нас интересовать в этой задаче.

В предыдущих задачах рассматривалась стереографическая проекция этого класса и записывали матрицы преобразования системы координат. Поэтому при необходимости можно обратиться к учебно-методическому пособию.

- В кристаллах может наблюдаться поляризация, если в результате наложения симметрии воздействия на симметрию кристалла, согласно принципу Кюри, останется симметрия

одного из 10 полярных классов, причем неважно, будет ли это достигнуто за счет симметрии кристалла при самой высокой симметрии воздействия (пироэлектрический эффект), или, наоборот, за счет полярной симметрии воздействия, когда поляризация может наблюдаться в кристалле любой симметрии и даже в изотропном теле. Это с одной стороны. А с другой, поляризация кристаллов под действием одноосного сжатия возникает в том случае, если в кристалле имеется единичное направление, являющееся одновременно и полярным. В классе 32 ось третьего порядка является единичным, но не полярным направлением из-за присутствия перпендикулярных этой оси осей второго порядка (напомним, что полярное направление это такое направление, концы которого не могут быть совмещены никакими элементами симметрии, входящими в группу симметрии кристалла).

Действуем на кристалл кварца сжатием, обладающим группой симметрии ∞/mmm вдоль оси третьего порядка, что условно можно записать в виде

$$32 \cap |||_3 \infty/mmm$$

где \cap - знак, обозначающий пересечение (или произведение) групп. Получаем, что симметрия кристалла в этом случае не изменяется:

$$32 \cap |||_3 \infty/mmm = 32.$$

Следовательно, сжимая кварцевую пластинку, вырезанную так, что ее рабочие грани были перпендикулярны оси 3 (пластинка Z-среза), эффекта поляризации не будет.

Теперь попробуем сжать кристалл кварца вдоль одной из осей 2:

$$32 \cap ||_2 \infty/mmm = 2.$$

Итак, при сжатии вдоль оси симметрии второго порядка симметрия кварца понижается до группы 2 и из всех полярных направлений кристалла, располагающихся в плоскости, перпендикулярной оси симметрии порядка 3, выделяется одно. Теперь оно оказывается единичным и полярным; следовательно, вдоль него может располагаться вектор пьезоэлектрической поляризации.

Для получения пьезоэлектрического эффекта при действии одноосного сжатия кварцевую пластину следует вырезать так, чтобы её рабочие грани были перпендикулярны одной из осей 2 (пластинка X-среза).

- В качестве датчиков гидростатического давления, симметрия которого характеризуется группой ∞m , могут использоваться кристаллы, которые обладают единичным полярным направлением в отсутствие воздействия. Их в группе 32 нет. Поэтому для этой цели кристаллы кварца не годятся.

4. ТРЕБОВАНИЯ К СОДЕРЖАНИЮ И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА

1. Отчет по лабораторной работе в обязательном порядке должен содержать следующие разделы:
 - цель лабораторной работы,
 - теоретическая часть,
 - описание расчетной части лабораторной работы,
 - конкретные данные на выполнение лабораторной работы,
 - полученные расчетные результаты в виде набора элементов симметрии, международного символа точечной группы,
 - объяснение полученных результатов на основе теории симметрии кристалла.
2. Отчет должен быть набран в редакторе Word и представлен в скрепленном виде. Схемы и графики выполнены в графическом редакторе и вставлены в текст отчета. Рекомендуемые параметры для набора текста: шрифт Arial – 12, поля со всех сторон по 2 см, одиночный интервал между строк.
3. В случае выполнения работы несколькими студентами в конце отчета должно быть указано конкретное участие каждого в выполнении работы.
4. В соответствии с рейтинговой системой качество выполнения лабораторной работы и оформления отчета оценивается в баллах, которые суммируются с баллами по контрольным работам.

5. ЛИТЕРАТУРА

1. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М: Наука, 1979. - 640с.
2. Най Дж. Физические свойства кристаллов. - М.: Мир, - 1967. - 388с.
3. Давыдов В.Н. Материалы электронной техники и методы их анализа. Томск, ТУСУР, 2013. - 132 с.