На правах рукописи

Силинин Антон Владимирович

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СЛОЖНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР СОВОКУПНОСТЬЮ ПОДРЕШЕТОК БРАВЭ

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Кемерово – 2007

Работа выполнена в ГОУ ВПО «Кемеровский государственный университет» на кафедре теоретической физики.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор, Заслуженный деятель науки РФ **Поплавной Анатолий Степанович**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор **Козлов Эдуард Викторович**;

доктор физико-математических наук, профессор **Тютерев Валерий Григорьевич**

Ведущая организация: ОСП «Сибирский физико-технический институт имени акад. В.Д. Кузнецова Томского государственного университета»

Защита состоится «15» мая 2007 г. в 16:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.269.02 в ГОУ ВПО «Томский политехнический университет» по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке им. В.А. Обручева Томского политехнического университета.

Автореферат разослан «13» апреля 2007 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.269.02
доктор физико-математических наук М.В. Коровкин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В современном материаловедении в круг исследований вовлекаются все более сложные вещества. Это требует создания более эффективных методов исследования кристаллов, соответствующих современной компьютерной технике и прецизионности исследований.

В сложных кристаллах в элементарной ячейке содержатся десятки и сотни атомов разного сорта, расчеты их электронной и колебательной структуры традиционными методами требуют больших вычислительных ресурсов. Классические подходы к расчету спектров элементарных возбуждений основаны на представлении идеального кристалла как бесконечно повторяющейся в пространстве элементарной ячейки. Однако структуру кристалла можно представить и как суперпозицию подрешеток, содержащих трансляционно эквивалентные атомы одного сорта. Если первый подход ведет к сложным расчетам для всего кристалла, то второй позволяет исследовать характеристики кристалла с помощью расчетов соответствующих параметров его подрешеток.

Второй подход можно условно назвать методом подрешеток. Метод подрешеток разработан и применялся рядом авторов для изучения свойств пространственного распределения электронной плотности кристалла путем проведения расчетов данной плотности кристаллов и их подрешеток, определен ряд новых закономерностей формирования электронной плотности и химической связи в ионных и ионно-молекулярных кристаллах. Разработан также метод моделирования **зонных спектров (ЗС)** сложных кристаллов в базисе состояний их подрешеток, исследован генезис энергетических зон из подрешеточных состояний в оксидах и сульфидах щелочно-земельных металлов, а также в сульфидах щелочных металлов с решеткой антифлюорита.

Теоретико-групповые исследования ограничиваются рассмотрением симметрии кристалла как целого. Представление сложных кристаллических структур совокупностью подрешеток Бравэ позволяет при наличии в структуре высокосимметричных подрешеток, с одной стороны, выявить дополнительную, «скрытую» симметрию, которая может быть выше симметрии **пространственной группы (ПГ)** кристалла и проявляется в его физических и физико-химических свойствах, а с другой стороны – упростить расчет некоторых характеристик кристаллов, например, спектров элементарных возбуждений, путем расчета данных характеристик для отдельных подрешеток и учета взаимодействия между ними по теории возмущений, что позволяет существенно сэкономить компьютерные мощности. Дополнительная симметрия может быть также приближенной. Это имеет место тогда, когда какая-либо из подрешеток путем малых смещений атомов может быть переведена в более симметричную.

Подрешетки Бравэ в кристалле должны быть трансляционно совместимы с решеткой кристалла, что определяется системой матриц с целочисленными элементами, связывающими между собой **векторы элементарных трансляций (ВЭТ)** подрешеток и кристалла. Отсюда возникает задача нахождения условий трансляционной совместимости между всеми сингониями с учетом схемы их подчинения. Из условий подчинения набора подрешеток пространственной симметрии для каждой из 230 ПГ могут быть найдены векторы, задающие начала отсчета подрешеток в элементарных ячейках сложных кристаллов.

Изучение симметрии обратного пространства позволяет установить генезис спектров элементарных возбуждений из состояний подрешеток. При перестройке **зон Бриллюэна (ЗБ)** подрешеток в ЗБ кристалла возникают вырождения двух типов: трансляционные, приводящие к свертыванию ветвей спектров; а также вырождения, обусловленные более высокой точечной симметрией подрешеток. Эти вырождения снимаются при учете гибридизации подрешеток.

Целью настоящей работы является разработка метода представления кристаллических структур совокупностью составляющих их подрешеток одинакового или различающихся типов Бравэ. Для этого необходимо разработать кристаллографический метод, позволяющий для заданной трансляционной и пространственной симметрии кристалла найти все возможные трансляционно совместимые с ней подрешетки и варианты их взаимного размещения в кристалле, а также разработать метод поиска в кристаллах подрешеток, отличающихся по своему типу Бравэ от кристаллического, реализованный в соответствующем **программном обеспечении (ПО)**.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**.

1. Найти условия трансляционной и пространственной совместимости подрешеток с кристаллической решеткой, матрицы, связывающие ВЭТ кристалла и подрешеток, и векторы смещения подрешеток друг относительно друга.
2. Разработать алгоритмы и создать ПО:
   – позволяющее автоматически выделять в сложных кристаллических соединениях подрешетки Бравэ в соответствии с принципом их минимального числа;
   – программы построения трансляционно-совместимых многогранников Дирихле-Вороного и первых ЗБ.
3. Определить условия совмещения первых ЗБ кристалла и подрешеток и проанализировать некоторые физические следствия, обусловленные их различием.

Научная новизна работы заключается в развитии нового метода представления кристаллических структур совокупностью составляющих их подрешеток одинакового или различающегося типов Бравэ, создании соответствующего ПО. Разработана техника построения трансляционно-совместимых многогранников Дирихле-Вороного и первых ЗБ для кубических кристаллов и подрешеток; выполнен теоретико-групповой анализ спектров элементарных возбуждений с учетом более высокой по сравнению с кристаллической симметрии подрешеток.

Практическая значимость заключается в возможности на основе разработанных методов и ПО представлять кристаллические структуры любой сложности в виде совокупности подрешеток Бравэ, выявлять более высокую, чем кристаллическая, симметрию подрешеток, анализировать особенности физических и физико-химических свойств соединений, обусловленные этой более высокой симметрией, в частности, предсказывать наличие квазивырождений в спектрах элементарных возбуждений.

Положения, выносимые на защиту:

1. Предложенный метод представления сложных кристаллических структур совокупностью подрешеток одинакового или различающихся типов Бравэ позволяет при наличии в структуре высокосимметричных подрешеток выявить дополнительную, «скрытую» симметрию, которая может быть выше симметрии пространственной группы кристалла и проявляется в его физических и физико-химических свойствах.
2. Найденные матрицы совместимости векторов элементарных трансляций подрешеток с кристаллическими определяют разрешенные при заданной трансляционной симметрии кристалла геометрические параметры подрешеток для всех возможных сочетаний 14 решеток Бравэ, а пространственная группа симметрии определяет являющиеся обобщением системы эквивалентных кристаллографических позиций векторы размещения подрешеток в элементарной ячейке кристалла.
3. Разработанная техника построения трансляционно-совместимых многогранников Дирихле-Вороного, зон Бриллюэна кристаллов кубической сингонии, а также теоретико-групповая модель генезиса спектров элементарных возбуждений кристаллов из спектров подрешеток позволяют предсказывать топологические особенности спектров элементарных возбуждений в кристаллах, наличие в них вырождений и квазивырождений.

Достоверность полученных результатов достигается за счет использования надежных и хорошо апробированных методов теории групп. Разработанное ПО позволило проиллюстрировать работу на целом ряде конкретных кристаллов. Выводы, сформулированные в данной работе, являются взаимно согласованными и не содержат внутренних противоречий. Полученные результаты находятся в соответствии с теоретическими расчетами других авторов при их наличии.

Личный вклад автора. Результаты, представленные в защищаемых положениях и выводах, получены лично автором. Идея исследования, постановка задач, анализ результатов обсуждались совместно с научным руководителем.

Апробация работы. Основные результаты работы опубликованы в 2 статьях в ведущих рецензируемых научных журналах из списка ВАК и 4 статьях в сборниках докладов международных научных конференций, докладывались и обсуждались на следующих конференциях: Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов-2003» (Москва, 2003), Всероссийских научных конференциях студентов-физиков и молодых ученых (Красноярск, 2003; Москва, 2004; Екатеринбург, 2005; Новосибирск, 2006), 31-й апрельской научной конференции студентов и молодых ученых КемГУ (Кемерово, 2004), конференции «Химия и химическая технология на рубеже тысячелетий» (Томск, 2004), Международной конференции «Физико-химические процессы в неорганических материалах» (Кемерово, 2004), Итоговой конференции Всероссийского конкурса на лучшие научные работы студентов по естественным, техническим наукам (проекты в области высоких технологий) и инновационным научно-образовательным проектам (Москва, 2004), Конференции молодых ученых Форума «Всемирный год физики в Московском университете» (Москва, 2005), VI и VII Молодежных семинарах по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, 2005, 2006), Международной научной конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела» (Минск, 2005), VIII и IX Международных школах-семинарах «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2005, 2006), Региональной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике (Владивосток, 2005), 10-й конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике полупроводниковых, диэлектрических и магнитных материалов (Владивосток, 2006), VII Всероссийской научно-технической конференции «Теоретические и прикладные вопросы современных информационных технологий» (Улан-Удэ, 2006). Полный список публикаций по теме диссертации включает 27 наименований и включен в список литературы диссертации, основные из них приведены в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка литературы из 143 наименований. Общий объем диссертации составляет 146 страниц, работа содержит 19 таблиц и 24 рисунка.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность проведенного исследования, определены цели и задачи работы, показаны научная новизна и практическая значимость работы, сформулированы положения, выносимые на защиту, приведены сведения об их апробации и публикациях, изложена структура диссертации.

В первой главе анализируются используемые в настоящее время подходы к описанию симметрии сложных кристаллических структур: сверхструктуры в теории фазовых переходов, полупроводниковые кристаллы со сверхструктурами, подрешетки в целых решетках, модулированные кристаллические структуры, композиционные кристаллы и суперпространственные группы. Показывается оригинальность подхода автора к описанию сложных кристаллических структур, ставятся задачи исследования.

В большинстве рассмотренных случаев подрешетки являются структурами с пониженной симметрией в какой-либо высокосимметричной структуре. В данной работе метод подрешеток развивается для описания структур сложных кристаллических соединений как совокупности вложенных друг в друга решеток Бравэ одинаковых или различающихся сингоний. Чтобы отличать эти подрешетки от различных других, описанных в обзоре, предложено называть их «структурными подрешетками», и в дальнейшем речь будет идти именно о таких подрешетках и в тех случаях, когда термин «структурные» опущен. При этом в общем случае не идет речь о какой-либо общей высокосимметричной структуре, наоборот, структурные подрешетки могут иметь более высокую симметрию, чем составленный из них кристалл. Наличие общей высокосимметричной структуры – как, например, в сложных алмазоподобных полупроводниках – частный случай в представляемой модели. В последующих главах изложено детальное развитие этой модели.

Во второй главе изложен метод представления кристаллических структур совокупностью подрешеток одинакового или различающихся типов Бравэ. Для учета трансляционной совместимости подрешеток введены матрицы совместимости подрешеток Бравэ, изложен метод их определения, описано разработанное программное обеспечение для выделения подрешеток в сложных кристаллах кубической и тетрагональной сингоний. Приведен метод учета пространственной симметрии кристалла для нахождения возможных вариантов пространственного размещения подрешеток. Изложена техника перестройки ЗБ подрешеток в кристаллические и качественного анализа спектров элементарных возбуждений.

Значительная часть кристаллов представляют собой совокупность подрешеток одинакового типа Бравэ. Простейшими классическими примерами являются кристаллы со структурой каменной соли, составленные из двух гранецентрированных кубических (Γ_c^f) подрешеток; CsCl, составленные из двух простых кубических (Γ_c) подрешеток; алмаза и сфалерита, составленные из двух Γ_c^f подрешеток и т.п.

Однако существует достаточно много кристаллических структур, в которых одинаковые подрешетки расположены таким образом, что их совокупность можно рассматривать как подрешетку Бравэ другого типа с более высокой трансляционной симметрией, чем исходные подрешетки и кристалл в целом. Такие кристаллы можно рассматривать как состоящие из подрешеток разного типа Бравэ, обладающих различной симметрией. Примерами являются кристаллы флюорита и антифлюорита, составленные из Γ_c^f и Γ_c подрешеток; куприт, составленный из одной Γ_c^f подрешетки меди и одной Γ_c^v подрешетки кислорода; пирит, составленный из одной Γ_c^f подрешетки железа и восьми Γ_c подрешеток серы, а также кристаллы скуттерудита, Cr_3Si, Pt_3O_4, $CrFe_4Ni_3$ (гипотетический), рутила, PtS, SiU_3, ThH_2 и т.п. Приведены примеры только кубических и тетрагональных кристаллов, существуют еще более многочисленные примеры кристаллов, составленных из подрешеток, отвечающих разным сингониям.

Введем ВЭТ кристаллической решетки Γ_L и подрешетки Γ_S: $\mathbf{a}_i(\Gamma_L)$ и $\mathbf{a}_{sj}(\Gamma_S)$ (i, j=1,2,3), – и свяжем их между собой с помощью соотношения:

$$\mathbf{a}_i(\Gamma_L) = \sum_{j=1}^{3} (\Gamma_L \mid \Gamma_S)_{ij} \mathbf{a}_{sj}(\Gamma_S). \qquad (1)$$

Матрицу $(\Gamma_L|\Gamma_S)_{ij}$ будем называть матрицей совместимости решетки Γ_L и подрешетки Γ_S. Чтобы подрешетка была трансляционно совместима с кристаллической решеткой, все элементы $(\Gamma_L|\Gamma_S)_{ij}$ должны быть целыми.

Мы проанализировали все типы решеток Браве на предмет выявления всех возможных подрешеток, удовлетворяющих трансляционной симметрии избранной решетки. При этом подрешетки могут относиться как к той же сингонии, что и кристаллическая решетка, так и к другим.

Введем матрицы $\widehat{A}(\Gamma_L)$ и $\widehat{A}_s(\Gamma_S)$ следующим образом: эти матрицы состоят из компонент ВЭТ решетки и подрешетки, соответственно, причем первый индекс соответствует номеру вектора, а второй – номеру компоненты этого вектора. Тогда из соотношения (1) можно получить выражение для матрицы $(\Gamma_L|\Gamma_S)$:

$$(\Gamma_L \mid \Gamma_S) = \widehat{A}(\Gamma_L)\widehat{A}_s^{-1}(\Gamma_S), \qquad (2)$$

где $\widehat{A}_s^{-1}(\Gamma_S)$ – матрица, обратная $\widehat{A}_s(\Gamma_S)$.

Матрицы совместимости подрешеток Бравэ простого (т.е. не базо-, гране- или объемноцентрированного) типа можно также получить на основе формул, полученных для наинизшей – триклинной сингонии.

В случае сложных низкосимметричных кристаллов поиск подрешеток Бравэ, отличных по типу от кристаллического, «вручную» крайне сложен. В связи с этим ведется разработка ПО для выделения подрешеток в кристаллах путем анализа их структурных данных. В настоящее время разработана и протестирована программа, осуществляющая поиск подрешеток разного типа Бравэ в кристаллах кубической и тетрагональной сингоний.

Матрицы совместимости позволяют определить только условия для нахождения значений геометрических параметров подрешеток (пространственных периодов и углов). Для полного описания возможного представления кристалла как совокупности подрешеток нужно определить векторы смещения подрешеток друг относительно друга, что можно сделать путем учета пространственной симметрии кристалла в уравнении:

$$\widehat{h}_\alpha \mathbf{c} + \boldsymbol{\tau}_\alpha = \mathbf{c}' + \sum_{i=1}^{3} n_{\alpha i}\mathbf{a}_{si}(\Gamma_S), \ \alpha = 1, 2, ..., N, \qquad (3)$$

где $\hat{h}_\alpha$ – α-й точечный элемент ПГ симметрии кристалла, состоящей из N элементов, $\boldsymbol{\tau}_\alpha$ – соответствующая ему нецелочисленная трансляция для несимморфной группы, **c** – вектор смещения начала отсчета подрешетки от общего центра кристалла, $n_{\alpha i}$ – набор целых чисел, соответствующий каждому α-му элементу, $\mathbf{a}_{sj}(\Gamma_S)$ – ВЭТ подрешетки, **c**′ – совпадает либо с **c**, либо с началом отсчета симметрично эквивалентной подрешетки.

При анализе данного соотношения рассмотрим два случая:

1) векторы **c**′ совпадают с векторами **c**, т.е. подрешетка под действием элементов ПГ переходит сама в себя;
2) векторы **c**′ отличаются от векторов **c**, т.е. подрешетка под действием элементов ПГ переходит в симметрично эквивалентную подрешетку.

В первом случае из уравнения (3) определяем векторы смещения **c**, возможные для заданного сочетания типов Бравэ решетки и подрешетки в избранной ПГ. При этом в несимморфных ПГ возникают дополнительные условия на геометрические параметры подрешеток.

Во втором случае из данного уравнения не вытекает никаких ограничений на возможные векторы смещения **c**, т.к. для любого вектора **c** найдутся векторы **c**′, описывающие смещения симметрично эквивалентных подрешеток. Следовательно, возможен вариант, когда низкосимметричный кристалл составлен из подрешеток Бравэ более высоких сингоний, в котором сохраняется высокая трансляционная симметрия подрешеток, а пространственная понижается до ПГ низкосимметричной кристаллической решетки. Это возможно, когда подрешетки расположены так, что перестают быть эквивалентными друг другу относительно элементов ПГ более высоких сингоний. Таким образом, в любой ПГ любой сингонии подрешетки помимо получаемых векторов смещений могут быть размещены также в произвольной общей позиции, но при этом во всех эквивалентных к ней точках должны быть размещены такие же подрешетки.

В результате исключения из набора векторов смещения **c** тех, которым соответствуют точки одной и той же подрешетки, получаем системы точек, по своему виду совпадающие с системой эквивалентных позиций для соответствующей ПГ, однако нужно учесть, что полностью они будут совпадать только в частном случае одинаковых типов Бравэ решетки и подрешетки и равенства их геометрических параметров.

Проанализируем строение энергетических зон кристалла с позиции зонных состояний подрешеток. Кристаллический потенциал $V_L(\mathbf{r})$ представим в форме

$$V_L(\mathbf{r}) = \sum_S V_S(\mathbf{r}) + \Delta W_{LS}(\mathbf{r}), \qquad (4)$$

где $V_S(\mathbf{r})$ – потенциалы подрешеток, $\Delta W_{LS}(\mathbf{r})$ – потенциал, отвечающий за гибридизацию подрешеточных состояний. Введем векторы обратной решетки кристалла и подрешеток: $\mathbf{b}_i(\Gamma_L)$ и $\mathbf{b}_{sj}(\Gamma_L)$ (i, j = 1, 2, 3).

Поскольку примитивная ячейка кристалла вмещает в себя примитивные ячейки всех подрешеток, объем ее ЗБ меньше либо равен объему ЗБ любой подрешетки, при этом наибольшей оказывается ЗБ подрешетки с наименьшим объемом элементарной ячейки. Из-за трансляционной совместимости всех подрешеток с кристаллической решеткой их ЗБ могут быть перестроены в ЗБ кристалла. Перестройка векторов ЗБ подрешеток $\mathbf{k}_S$ в векторы ЗБ кристалла $\mathbf{k}_L$ производится согласно соотношению:

$$\mathbf{k}_L = \mathbf{k}_S + \sum_{i=1}^{3} n_i(\Gamma_L \mid \Gamma_S)\mathbf{b}_i(\Gamma_L), \qquad (5)$$

где $n_i(\Gamma_L \mid \Gamma_S)$ – целые числа. При перестройке ЗБ подрешеток в ЗБ кристалла нужно принять во внимание точечную симметрию, которая может оказаться выше для подрешетки по отношению к кристаллической. В таком случае необходимо провести разложение неприводимых представлений групп симметрии подрешетки по кристаллическим. Это разложение начинается с установления соответствия между неприводимыми звездами представлений подрешеток и кристаллической решетки с использованием соотношения (5), а далее ведется разложение неприводимых представлений групп волновых векторов. В итоге устанавливается генезис ЗС кристалла из подрешеточных состояний.

Размещение энергетических зон подрешеток в ЗБ кристалла приводит к появлению вырождений двух типов: а) трансляционные вырождения, возникающие при свертывании спектров подрешеток; б) вырождения, обусловленные более высокой точечной симметрией подрешеток, если таковая имеется. Эти вырождения снимаются при учете гибридизации подрешеточных состояний. При слабой гибридизации подрешеточных состояний хорошим нулевым приближением к ЗС кристалла будет спектр «свернутых» подрешеточных состояний, расщепления в котором можно вычислить по теории возмущений.

В третьей главе разработанный метод применен к кристаллам кубической и тетрагональной сингоний со структурами флюорита, антифлюорита, куприта, пирита, скуттерудита, типов Cr_3Si, Pt_3O_4, $CrFe_4Ni_3$ (гипотетический), куперита, рутила, типов SiU_3, ThH_2, халькопирита. Выполнена перестройка ЗБ подрешеток в кристаллические для кристаллов кубической сингонии и проведен соответствующий качественный анализ строения валентных зон в кристаллах кубической сингонии.

В качестве примера рассмотрим различные сочетания решеток и подрешеток трех типов – Γ_c, Γ_c^f, Γ_c^v – в кубических кристаллах и ограничимся рассмотрением кристаллов, построенных из подрешеток двух типов с максимальными пространственными периодами, возможными для данных сочетаний решеток Бравэ. Матрицы совместимости для этих случаев представлены в табл. 1, где a – постоянная решетки кристалла, a_s – подрешетки.

Таблица 1

Матрицы совместимости кристаллической решетки с подрешетками для кристаллов кубической сингонии с различным типом решетки Бравэ

		Подрешетка		
		Γ_c	Γ_c^f	Γ_c^v
1		**2**	**3**	**4**
Кристал-лическая решетка	Γ_c	$\frac{a}{a_s}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}$	$\frac{a}{a_s}\begin{pmatrix}-1 & 1 & 1\\1 & -1 & 1\\1 & 1 & -1\end{pmatrix}$	$\frac{a}{a_s}\begin{pmatrix}0 & 1 & 1\\1 & 0 & 1\\1 & 1 & 0\end{pmatrix}$
	Γ_c^f	$\frac{a}{2a_s}\begin{pmatrix}0 & 1 & 1\\1 & 0 & 1\\1 & 1 & 0\end{pmatrix}$	$\frac{a}{a_s}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}$	$\frac{a}{2a_s}\begin{pmatrix}2 & 1 & 1\\1 & 2 & 1\\1 & 1 & 2\end{pmatrix}$
	Γ_c^v	$\frac{a}{2a_s}\begin{pmatrix}-1 & 1 & 1\\1 & -1 & 1\\1 & 1 & -1\end{pmatrix}$	$\frac{a}{2a_s}\begin{pmatrix}3 & -1 & -1\\-1 & 3 & -1\\-1 & -1 & 3\end{pmatrix}$	$\frac{a}{a_s}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}$

Из требования целочисленности всех элементов матриц совместимости в пяти из девяти возможных сочетаний решеток Бравэ получаем $a_s = a/n$, а в остальных – $a_s = a/(2n)$ ($n \in N$). Мы здесь рассматриваем случай максимально возможных пространственных периодов подрешеток ($n = 1$).

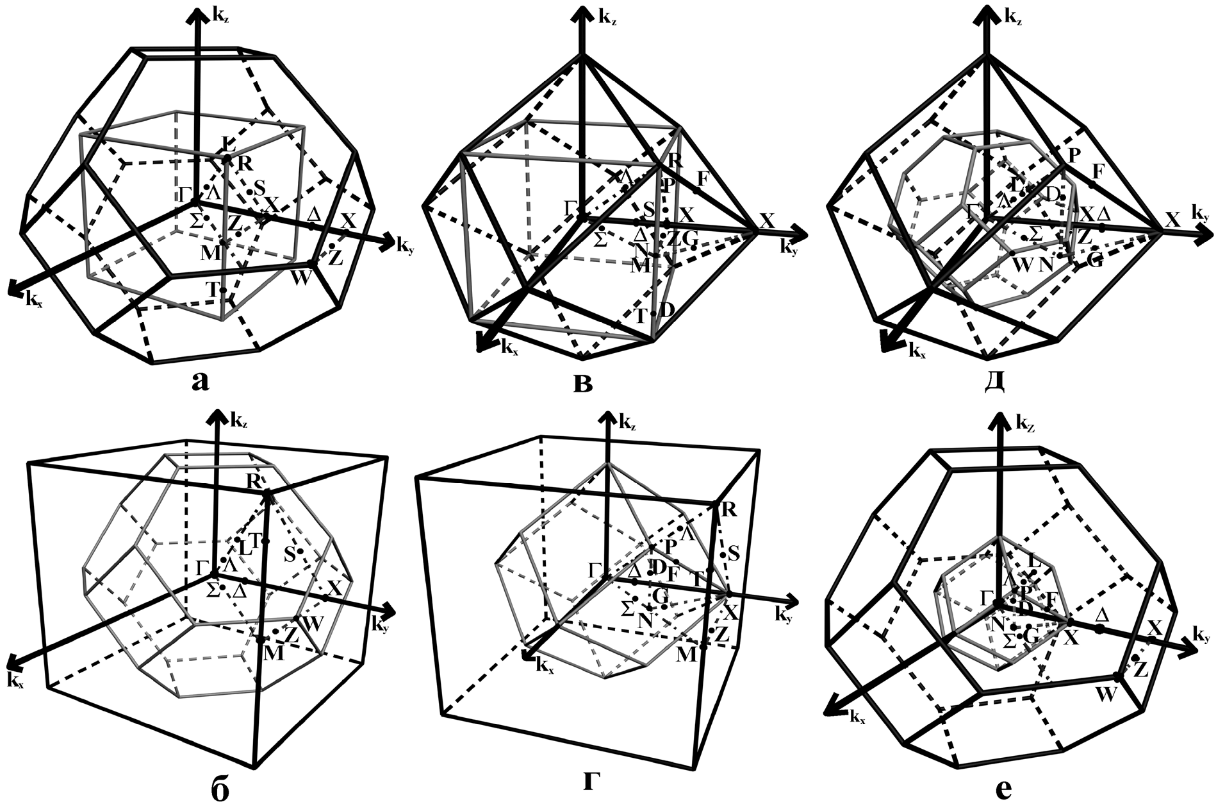

Рис. 1. ЗБ кристаллов и подрешеток кубической сингонии для различных сочетаний типов решетки Бравэ: а) Γ_c решетка и Γ_c^f подрешетка; б) Γ_c^f решетка и Γ_c подрешетка; в) Γ_c решетка и Γ_c^v подрешетка; г) Γ_c^v решетка и Γ_c подрешетка; д) Γ_c^f решетка и Γ_c^v подрешетка; е) Γ_c^v решетка и Γ_c^f подрешетка.

Таблица 2

Разложение неприводимых звезд Γ_c подрешетки по неприводимым звездам Γ_c^f кристалла

Решетка кристалла		Подрешетка	
Тип звезды	**Векторы звезды (ед. $2\pi/a$)**	**Тип звезды**	**Векторы звезды (ед. $2\pi/a$)**
1	**2**	**3**	**4**
Γ	(0, 0, 0)	Γ	(0, 0, 0)
		R	(1, 1, 1)
X	(0, 1, 0)	X	(0, 1, 0)
		M	(1, 1, 0)
W	(1/2, 1, 0)	Z_0	(1/2, 1, 0)
L	(1/2, 1/2, 1/2)	Λ_0	(1/2, 1/2, 1/2)
K	(3/4, 3/4, 0)	Σ_0	(3/4, 3/4, 0)
U	(1/4, 1, 1/4)	S_0	(1/4, 1, 1/4)
Δ	(0, 2μ, 0), -1/2<μ<0	Δ	(0, 2μ, 0), -1/2<μ<0
		T	(1, 2μ, 1), 0<μ<1/2
	(0, 2μ, 0), 0<μ<1/2	Δ	(0, 2μ, 0), 0<μ<1/2
		T	(1, 2μ, 1), -1/2<μ<0

1	2	3	4
Z	$(2\mu, 1, 0), -1/4<\mu<0$	Z	$(2\mu, 1, 0), -1/4<\mu<0$
			$(2\mu, 1, 0), 1/4<\mu<1/2$
	$(2\mu, 1, 0), 0<\mu<1/4$	Z	$(2\mu, 1, 0), -1/2<\mu<-1/4$
			$(2\mu, 1, 0), 0<\mu<1/4$
Σ	$(2\mu, 2\mu, 0), -3/8<\mu<0$	Σ	$(2\mu, 2\mu, 0), -3/8<\mu<0$
		S	$(2\mu, 2\mu, 1), 1/8<\mu<1/2$
	$(2\mu, 2\mu, 0), 0<\mu<3/8$	Σ	$(2\mu, 2\mu, 0), 0<\mu<3/8$
		S	$(2\mu, 2\mu, 1), -1/2<\mu<-1/8$
S	$(\mu, 1, \mu), -1/4<\mu<0$	S	$(2\mu, 1, 2\mu), -1/8<\mu<0$
		Σ	$(2\mu, 0, 2\mu), 3/8<\mu<1/2$
	$(\mu, 1, \mu), 0<\mu<1/4$	S	$(2\mu, 1, 2\mu), 0<\mu<1/8$
		Σ	$(2\mu, 0, 2\mu), -1/2<\mu<-3/8$
Q	$(1/2-2\mu, 1/2+2\mu, 1/2), -1/4<\mu<1/4$	—	—
Λ	$(\mu, \mu, \mu), -1/2<\mu<0$	Λ	$(2\mu, 2\mu, 2\mu), -1/4<\mu<0$
			$(2\mu, 2\mu, 2\mu), 1/4<\mu<1/2$
	$(\mu, \mu, \mu), 0<\mu<1/2$	Λ	$(2\mu, 2\mu, 2\mu), -1/2<\mu<-1/4$
			$(2\mu, 2\mu, 2\mu), 0<\mu<1/4$

Представленную технику проиллюстрируем на примере простейших кристаллов с различающимися подрешетками Бравэ, к которым относятся фториды щелочноземельных металлов с решеткой флюорита (например, CaF_2), оксиды и сульфиды щелочных металлов с решеткой антифлюорита (K_2O). Структура флюорита сформирована из двух кубических подрешеток анионов и катионов, при этом атомы катиона занимают позиции в узлах Γ_c^f подрешетки с периодом a, атомы аниона – в узлах Γ_c подрешетки с периодом $a/2$, сдвинутой относительно катионной подрешетки на четверть пространственной диагонали куба. Структура антифлюорита является обратной структуре флюорита в смысле взаимной замены анионов и катионов.

Обратимся теперь к первым ЗБ катионной и анионной подрешеток флюорита (см. рис. 1б). Разложение неприводимых звезд волновых векторов подрешетки фтора по неприводимым звездам представлений группы симметрии кристалла флюорита представлено в табл. 2, с помощью которой ЗС подрешетки фтора свертывается в ЗБ решетки флюорита и определяются, в частности, трансляционные вырождения.

Элементарная ячейка флюорита содержит 2 семивалентных аниона и 1 двухвалентный катион, число валентных электронов равно 16, и энергетический спектр валентной зоны состоит из 8 ветвей. Валентный ЗС 2-кратно заряженной анионной подрешетки в ЗБ Γ_c решетки содержит 4 ветви. При перестройке ЗБ аниона в ЗБ кристалла в соответствии с рис. 1б и табл. 2 произойдет удвоение числа валентных ветвей и их двукратное трансляционное вырождение в некоторых симметричных точках.

ЗС флюорита, рассчитанный в рамках теории функционала плотности методом псевдопотенциала, представлен на рис. 2. Там же изображены ЗС однократно заряженной подрешетки фтора – исходный спектр в ЗБ анионной подре-

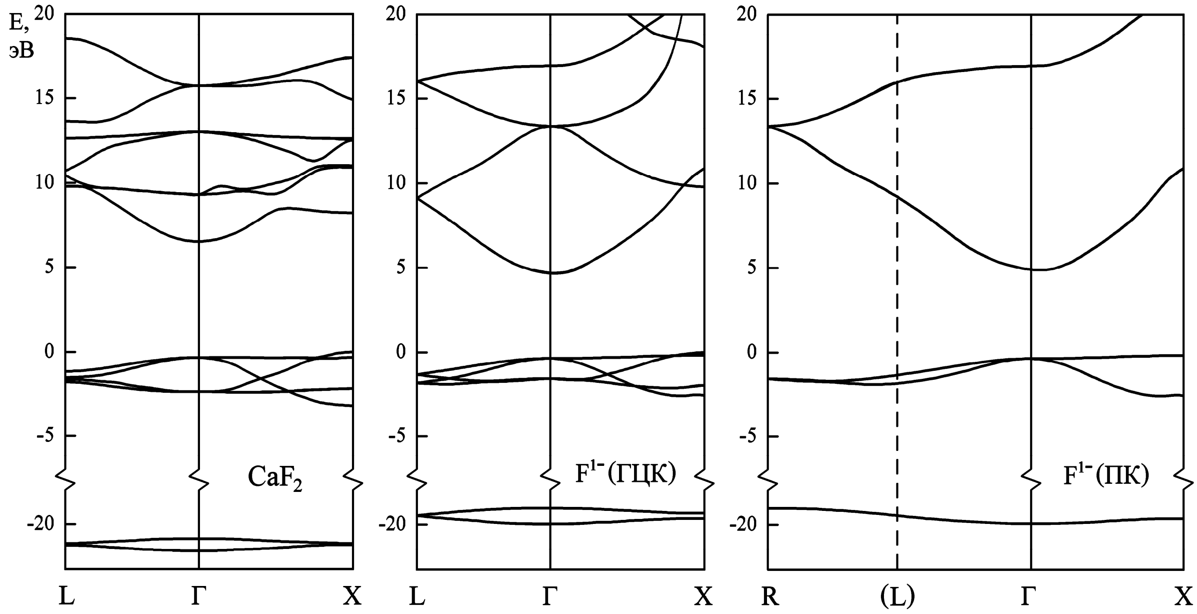

Рис. 2. Зонные спектры кристалла CaF_2 и заряженной подрешетки F^{1-} (значения энергии даны в эВ). На крайнем правом рисунке изображен зонный спектр подрешетки F^{1-} в ЗБ Γ_c подрешетки фтора, на среднем рисунке изображен зонный спектр подрешетки F^{1-} в ЗБ кристалла CaF_2 в результате свертки.

шетки и свернутый спектр в результате помещения подрешетки фтора в кристаллическую решетку кристалла. Как видно из рис. 2, свернутый ЗС заряженной подрешетки фтора повторяет все особенности кристаллического ЗС в области валентной зоны. Двукратное вырождение в точках L и X, возникшее при свертывании, снимается по теории возмущений. Без учета свертывания ЗС анионной подрешетки особенности топологической структуры ЗС кристалла кажутся просто случайными. Таким образом, проделанный анализ ЗС флюорита с позиции подрешеток качественно подтверждается результатами вычислений для кристаллической решетки.

В кристаллах антифлюорита элементарная ячейка содержит 2 одновалентных катиона и 1 шестивалентный анион, число валентных электронов равно 8, валентных зон – 4. В этих кристаллах ЗБ подрешетки аниона совпадает с ЗБ кристалла, поэтому из подобного анализа следует, что валентная зона антифлюорита имеет строение, аналогичное валентным зонам кристаллов с решеткой NaCl. Энергетические зоны катиона находятся в зоне проводимости, и там имеет место их квазивырождение за счет свертывания ЗС Γ_c катионной подрешетки в ЗБ Γ_c^f решетки. Расчеты ЗС подрешеток антифлюорита находятся в соответствии с этими выводами.

Аналогично анализируется генезис ЗС кристаллов куприта.

В четвертой главе рассмотрены подрешетки в кристаллах триклинной и моноклинной сингоний. Представлены соответствующие матрицы совместимости, проанализированы варианты пространственного размещения подрешеток для всех ПГ данных сингоний. Показана связь векторов смещения подрешеток с системами эквивалентных позиций кристалла.

Элементы матрицы совместимости для случая, когда кристаллическая решетка и подрешетка относятся к триклинной сингонии, имеют вид:

$$\alpha_{11} = a / a_s,$$
$$\alpha_{12} = \alpha_{13} = \alpha_{22} = 0,$$
$$\alpha_{21} = \frac{b}{a_s}\left(\cos\gamma - \sin\gamma \operatorname{ctg}\gamma_s\right),$$
$$\alpha_{22} = \frac{b\sin\gamma}{b_s\sin\gamma_s},$$
$$\alpha_{31} = \frac{c}{a_s}\left(\cos\beta - \frac{(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma)\operatorname{ctg}\gamma_s}{\sin\gamma} - \frac{\cos\beta_s - \cos\alpha_s\cos\gamma_s}{\sin\gamma\sin\gamma_s}\times\right.$$
$$\left.\times\sqrt{\frac{1-\cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}{1-\cos^2\alpha_s - \cos^2\beta_s - \cos^2\gamma_s + 2\cos\alpha_s\cos\beta_s\cos\gamma_s}}\right),$$
$$\alpha_{32} = \frac{c}{b_s\sin\gamma\sin\gamma_s}\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma - (\cos\alpha_s - \cos\beta_s\cos\gamma_s)\times\right.$$
$$\left.\times\sqrt{\frac{1-\cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}{1-\cos^2\alpha_s - \cos^2\beta_s - \cos^2\gamma_s + 2\cos\alpha_s\cos\beta_s\cos\gamma_s}}\right), \qquad (6)$$
$$\alpha_{33} = \frac{c\sin\gamma_s}{c_s\sin\gamma}\sqrt{\frac{1-\cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}{1-\cos^2\alpha_s - \cos^2\beta_s - \cos^2\gamma_s + 2\cos\alpha_s\cos\beta_s\cos\gamma_s}},$$

где a, b, c, α, β, γ – геометрические параметры решетки; аналогичные параметры подрешетки имеют индекс s. При трансляционно совместимых подрешетках все элементы матрицы принимают целые значения, следовательно, составляем уравнения и находим возможные значения некоторых геометрических параметров подрешетки:

$$a_s = a/k,\ b_s = \frac{b}{l}\sqrt{\sin^2\gamma + \left(\cos\gamma + \frac{ma}{kb}\right)^2},$$
$$\operatorname{tg}\gamma_s = \frac{\operatorname{tg}\gamma}{1 + \dfrac{ma}{kb\cos\gamma}},\ \text{где } k, l \in N;\ m \in Z. \qquad (7)$$

Аналитически удается найти только 3 из 6 геометрических параметров подрешетки.

В кристаллах триклинной сингонии существует всего две ПГ: C^1 и C_i^1. В первой группе имеется только единичный элемент, во второй к нему добавляется инверсия, поэтому в первой группе нет никаких дополнительных условий на пространственное размещение подрешеток, во второй группе нужно рассмотреть два случая, когда векторы **c′** совпадают с векторами **c** и противоположный.

В первом случае (3) приводит к следующему виду вектора **c**:

$$\mathbf{c} = (n_1\mathbf{a}_{s1} + n_2\mathbf{a}_{s2} + n_3\mathbf{a}_{s3})/2, \qquad (8)$$

откуда следует, что в ПГ C_i^1 векторы смещения подрешеток могут быть направлены в точки, соответствующие центрам ребер, граней или объемов составляющих подрешетку элементарных ячеек, если бы вершина одной из них совпадала с общим началом отсчета кристалла.

Второй случай допускает вариант составления триклинной кристаллической решетки из подрешеток Бравэ более высоких сингоний. При этом сохраняется высокая трансляционная симметрия, но пространственная симметрия понижается до одной из двух триклинных ПГ. Это возможно, когда подрешетки расположены так, что перестают быть эквивалентными друг другу относительно точечных элементов ПГ более высоких сингоний. Проведенный анализ триклинных кристаллов из базы данных Inorganic Crystal Structure Database ver. 2.01 (23.04.1996) выявил 80 кристаллов, имеющих трансляционную симметрию более высоких сингоний.

Для примера приведем кристаллы FeS_2 и NiS_2, в одной из своих фаз кристаллизующиеся в ПГ C^1, полностью теряющей точечную симметрию, но сохраняющей трансляционную симметрию Γ_c решетки Бравэ. При этом данные структуры можно рассматривать как слабо искаженную структуру пирита, т.к. отклонения координат атомов аниона в триклинной фазе от соответствующих координат в фазе пирита составляют не более 0,7 % от постоянной решетки, а атомов катионов – не более 0,4 %.

Кристаллические формы соединения FeS_2 представляют большой интерес с точки зрения метода подрешеток. Известны три фазы данного соединения: кубическая (пирит), ромбическая (марказит) и триклинная. В каждой из них кристаллическую структуру можно представить совокупностью подрешеток Бравэ разного типа, причем в триклинной фазе они сохраняют свою высокую трансляционную симметрию, теряя точечную.

В кристаллах моноклинной сингонии имеется два типа решетки Бравэ: простая (Γ_m) и базоцентрированная (Γ_m^b), – следовательно, существует четыре варианта сочетания подрешеток. В качестве примера приведем случай, когда в моноклинном простом кристалле можно выделить подрешетку того же типа, но отличающуюся своими параметрами решетки:

$$(\Gamma_m \mid \Gamma_m) = \begin{pmatrix} \dfrac{a}{a_s} & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{b}{b_s} & 0 \\ \dfrac{c\cos\beta}{a_s}\left(1 - \dfrac{\mathrm{tg}\,\beta}{\mathrm{tg}\,\beta_s}\right) & 0 & \dfrac{c\sin\beta}{c_s\sin\beta_s} \end{pmatrix},\ a_s = a/k,\ b_s = b/l,$$

$$c_s = \frac{c}{m}\sqrt{\sin^2\beta + \left(\cos\beta + \frac{na}{kc}\right)^2},\ \mathrm{tg}\,\beta_s = \frac{\mathrm{tg}\,\beta}{1 + \dfrac{na}{kc\cos\beta}},\ \text{где } k, l, m \in N;\ n \in Z. \qquad (9)$$

Далее были найдены возможные варианты пространственного размещения подрешеток в кристаллах моноклинной сингонии.

В результате проверки полученного набора векторов смещения **c** на предмет принадлежности одной и той же подрешетке точек, определяемых разными векторами **c**, и исключения соответствующих векторов получим представленный в табл. 5 и 6 набор векторов смещения для подрешеток Γ_m и Γ_m^b в симморфной ПГ C_2^1.

Таблица 5

Набор векторов смещения подрешетки Γ_m, вставленной в решетку того же типа с ПГ C_2^1

Вектор смещения c		Символ системы эквивалентных позиций
разложенный по координатам	**разложенный по векторам элементарных трансляций подрешетки**	
$\left(0, c_y, 0\right)$	$\dfrac{c_y}{b}\mathbf{a}_2$	a
$\left(\dfrac{1}{2}c_s\cos\beta_s, c_y, \dfrac{1}{2}c_s\sin\beta_s\right)$	$\dfrac{c_y}{b}\mathbf{a}_2 + \dfrac{1}{2}\mathbf{a}_3$	b
$\left(\dfrac{1}{2}a_s, c_y, 0\right)$	$\dfrac{1}{2}\mathbf{a}_1 + \dfrac{c_y}{b}\mathbf{a}_2$	c
$\left(\dfrac{1}{2}a_s + \dfrac{1}{2}c_s\cos\beta_s, c_y, \dfrac{1}{2}c_s\sin\beta_s\right)$	$\dfrac{1}{2}\mathbf{a}_1 + \dfrac{c_y}{b}\mathbf{a}_2 + \dfrac{1}{2}\mathbf{a}_3$	d

Данные системы точек по своему виду совпадают с системой эквивалентных позиций для ПГ C_2^1, однако нужно учесть, что полностью они будут совпадать только в частном случае равенства геометрических параметров решетки и подрешетки ($k = l = m = 1$, $n = 0$). В остальных же случаях они сходны только внешне.

Таблица 6

Набор векторов смещения подрешетки Γ_m^b, вставленной в решетку Γ_m с ПГ C_2^1

Вектор смещения c		Символ системы эквивалентных позиций
разложенный по координатам	**разложенный по векторам элементарных трансляций подрешетки**	
$\left(0, c_y, 0\right)$	$\dfrac{c_y}{b}\mathbf{a}_2$	a
$\left(\dfrac{1}{2}c_s\cos\beta_s, c_y, \dfrac{1}{2}c_s\sin\beta_s\right)$	$\dfrac{c_y}{b}\mathbf{a}_2 + \dfrac{1}{2}\mathbf{a}_3$	b

Здесь «пропали» системы эквивалентных позиций c и d, т.к. c входит в систему точек Γ_m^b подрешетки, помещенной в b, а d – в a. Таким образом, Γ_m^b подрешетку, помещенную в систему эквивалентных позиций a или b, можно рассматривать как совокупность двух Γ_m подрешеток, помещенных в a и d либо b и c, соответственно.

В несимморфной ПГ C_2^2 будут получаться следующие результаты:

1. **подрешетка $\boldsymbol{\Gamma_m}$**: в данном случае векторы смещения **c** имеют тот же вид, что и в ПГ C_2^1, с дополнительным условием $l = 2q$ ($q \in N$), поэтому набор векторов смещения будет эквивалентен набору для подрешетки данного типа в ПГ C_2^1.
2. **подрешетка** Γ_m^b: здесь отличие от векторов смещения **c** в ПГ C_2^1 состоит в добавлении к компоненте c_x величины $-la_s/4$.

Сопоставление с системами эквивалентных позиций не было проведено, т.к. в данной ПГ имеется только общая позиция, что не подтверждается нашими вычислениями.

В заключении кратко сформулированы основные полученные в работе результаты и сделанные на их основе выводы, а также возможные направления дальнейших исследований.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Развит метод представления сложных кристаллических структур совокупностью подрешеток Бравэ, позволяющий, с одной стороны, выявить имеющуюся в кристаллах дополнительную, «скрытую» симметрию, которая может быть выше симметрии пространственной группы кристалла при наличии в структуре высокосимметричных подрешеток и проявляющуюся в его физических и физико-химических свойствах, а с другой стороны – упростить расчет некоторых характеристик кристаллов, например, спектров элементарных возбуждений, путем расчета данных характеристик для отдельных подрешеток и учета взаимодействия между ними по теории возмущений, что позволяет существенно сэкономить компьютерные мощности.
2. Разработан кристаллографический метод, позволяющий для заданной трансляционной (14 типов решетки Бравэ) и пространственной (230 пространственных групп) симметрии кристалла найти все возможные трансляционно совместимые с ней подрешетки, а также варианты их взаимного размещения в кристалле.
3. Найдены матрицы совместимости ВЭТ подрешеток с кристаллическими, из которых определены разрешенные при заданной трансляционной симметрии кристалла геометрические параметры подрешеток (пространственные периоды a, b, c и углы α, β, γ) для всех возможных сочетаний 14 решеток Бравэ.
4. Из условий подчинения набора подрешеток пространственной симметрии кристалла найдены векторы, задающие начала отсчета подрешеток в элементарных ячейках сложных кристаллов, для кристаллов триклинной и моно-

клинной сингоний, а также дополнительные условия на геометрические параметры подрешеток, возникающие в несимморфных пространственных группах.

5. Разработан метод поиска в сложных кристаллах подрешеток, отличающихся по своему типу Бравэ от кристаллического, реализованный в соответствующем ПО, позволяющем автоматически выделять в сложных кристаллических соединениях кубической и тетрагональной сингоний подрешетки Бравэ в соответствии с принципом минимального числа подрешеток для случаев, когда геометрические параметры элементарной ячейки и координаты атомов в ней заданы численно.
6. В кристаллах кубической сингонии установлен генезис спектров элементарных возбуждений из состояний подрешеток, относящихся к простому, гранецентрированному и объемноцентрированному кубическим типам Бравэ, построены совмещенные первые ЗБ и составлены таблицы перестройки ЗС для всех сочетаний данных типов Бравэ в кристаллической решетке и подрешетке. При перестройке ЗБ подрешеток в ЗБ кристалла возникают трансляционные вырождения, приводящие к свертыванию ветвей спектров. Эти вырождения снимаются при учете гибридизации подрешеток.
7. Получена связь векторов смещения подрешеток друг относительно друга с системами эквивалентных позиций пространственных групп. Установлено, что получаемые в рамках развитого подхода наборы векторов смещения подрешеток являются более общим случаем по отношению к кристаллографическим системам эквивалентных позиций и переходят в них при совпадении типов Бравэ и равенстве геометрических параметров решетки и подрешетки как частный случай. Показано, при каком пространственном размещении трансляционно менее симметричных подрешеток их можно объединить в трансляционно более симметричную подрешетку.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Поплавной, А.С. Подрешетки в кристаллах / А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Кристаллография. – 2005. – Т. 50, № 5. – С. 782-787.
2. Поплавной, А.С. Кристаллы с подрешетками кубической сингонии и особенности их спектров элементарных возбуждений / А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Известия вузов. Физика. – 2006. – Т. 49, № 5. – С. 21-27.
3. Поплавной, А.С. Зоны Бриллюэна подрешеток в некоторых кристаллах кубической и тетрагональной сингоний / А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – Т. 2, № 1. – С. 131-134.
4. Поплавной, А.С., Подрешетки в низкосимметричных кристаллах / А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2006. – Т. 3, № 1. – С. 89-91.
5. Кособуцкий, А.В. Генезис зонных спектров кристаллов с подрешетками кубической сингонии / А.В. Кособуцкий, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Актуальные проблемы физики твердого тела: Сб. докл. Междунар. науч. конф. / Гл.

редактор. Н.М. Олехнович. – Минск: Изд. центр БГУ, 2005. – Т. 2. – С. 233-235.
6. Поплавной, А.С. Геометрия кристалла в модели подрешеток / А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Физико-химические процессы в неорганических материалах: Доклады Девятой международной конф., посв. 50-летию Кемеровского государственного университета / Отв. редактор Э.П. Суровой; КемГУ. – Кемерово: Кузбассвузиздат, 2004. – Т. 2. – С. 461-464.
7. Кособуцкий, А.В. Классификация спектров элементарных возбуждений сложных кристаллов на основе состояний их подрешеток / А.В. Кособуцкий, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Вестник КемГУ. – 2006. – № 2. – С. 74-78.
8. Силинин, А.В. Программное обеспечение для выделения подрешеток в сложных кристаллах кубической и тетрагональной сингоний / А.В. Силинин, В.А. Тарасов // Теоретические и прикладные вопросы современных информационных технологий: Материалы VII Всероссийской научно-технической конференции / Гл. редактор В.В. Найханов; Восточно-Сибирский государственный технологический университет. – Улан-Удэ: Издательство ВСГТУ, 2006. – Т. 2. – С. 469-472.
9. Кособуцкий, А.В. Метод подрешеток и генезис энергетических зон в кристаллах со структурами флюорита и антифлюорита / А.В. Кособуцкий, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Сборник материалов конференции «Химия и химическая технология на рубеже тысячелетий». – Томск, 2004. – С. 186-187.
10. Силинин, А.В. Генезис зонных спектров кристаллов кубической сингонии из зонных спектров подрешеток с различающимся типом решетки Бравэ // Сборник материалов Конференции молодых ученых Форума «Всемирный год физики в Московском университете». – Москва, 2005. – С. 58-60.
11. Силинин, А.В. Фазовые переходы и метод подрешеток // Международная конференция студентов и аспирантов по фундаментальным наукам «Ломоносов-2003». Секция «Физика»: Сборник тезисов / Физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова. – М.: Физический факультет МГУ, 2003. – С. 254.
12. Ляшков, П.С. Исследование симметрии подрешеток и ее проявления в физико-химических свойствах кристаллов / П.С. Ляшков, А.В. Силинин, А.В. Кособуцкий, В.Н. Дворовенко // Федеральная итоговая научно-техническая конференция «Всероссийского конкурса на лучшие научные работы студентов по естественным, техническим наукам (проекты в области высоких технологий) и инновационным научно-образовательным проектам»: Материалы итоговой конференции / Московский государственный институт электроники и математики (технический университет). – М.: МИЭМ, 2004. – С. 347-350.
13. Ляшков, П.С. Исследование симметрии подрешеток и ее проявления в физико-химических свойствах кристаллов / П.С. Ляшков, А.В. Силинин, А.В. Кособуцкий, В.Н. Дворовенко // Всероссийский конкурс среди учащейся молодежи высших учебных заведений Российской Федерации на лучшие научные работы по естественным наукам: Тезисы научных работ / Саратовский государственный технический университет. – Саратов: СГТУ, 2004. – С. 106-107.

14. Силинин, А.В. Подрешетки в кристаллах // Девятая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: Тезисы докладов / Редактор А.Г. Арапов; Ассоциация студентов-физиков России. – Екатеринбург-Красноярск: издательство АСФ России, 2003. – Ч. I – С. 110-111.
15. Силинин, А.В. Матрицы связи подрешеток тетрагональной сингонии // Сборник тезисов Десятой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых: Тезисы докладов / Редактор А.Г. Арапов; Ассоциация студентов-физиков России. – Екатеринбург-Красноярск: издательство АСФ России, 2004. – Т. 1. – С. 96-98.
16. Ляшков, П.С. Применение метода подрешеток в кристаллах со структурой халькопирита / П.С. Ляшков, А.В. Силинин // Сборник тезисов Десятой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых: Тезисы докладов / Редактор А.Г. Арапов; Ассоциация студентов-физиков России. – Екатеринбург-Красноярск: издательство АСФ России, 2004. – Т. 1. – С. 71-72.
17. Силинин, А.В. Зоны Бриллюэна подрешеток в некоторых кристаллах кубической сингонии // Сборник тезисов Одиннадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых: Тезисы докладов / Редактор А.Г. Арапов; Ассоциация студентов-физиков России. – Екатеринбург: издательство АСФ России, 2005. – С. 129-130.
18. Ерукаева, Е.В. Выделение подрешеток в бинарных и тройных кубических кристаллических соединениях / Е.В. Ерукаева, А.В. Силинин, П.С. Ключников // Двенадцатая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-12, Новосибирск): Материалы конференции, тезисы докладов / Редактор А.Г. Арапов; Ассоциация студентов-физиков и молодых ученых России. – Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2006. – С. 105-106.
19. Сатучин, Р.Р. Алгоритм построения трансляционно-совместимых многогранников Дирихле-Вороного подрешеток в кристалле / Р.Р. Сатучин, А.В. Силинин // Двенадцатая всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-12, Новосибирск): Материалы конференции, тезисы докладов / Редактор А.Г. Арапов; Ассоциация студентов-физиков и молодых ученых России. – Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2006. – С. 165-166.
20. Силинин, А.В. Трансляционно совместимые многогранники Дирихле-Вороного подрешеток в кристаллах кубической сингонии // Двенадцатая всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-12, Новосибирск): Материалы конференции, тезисы докладов / Редактор А.Г. Арапов; Ассоциация студентов-физиков и молодых ученых России. – Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2006. – С. 169-170.
21. Силинин, А.В. Программное обеспечение для выделения подрешеток в сложных кристаллах кубической сингонии / А.В. Силинин, В.А. Тарасов // VI Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния ве-

щества: Тезисы докладов / Институт физики металлов УрО РАН. – Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2005. – С. 58.
22. Ерукаева, Е.В. Подрешетки в различных кристаллических модификациях FeS_2 / Е.В. Ерукаева, А.В. Силинин // VI Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества: Тезисы докладов / Институт физики металлов УрО РАН. – Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2005. – С. 59-60.
23. Ерукаева, Е.В. Выделение подрешеток в кристаллических соединениях тетрагональной сингонии / Е.В. Ерукаева, А.В. Силинин // VII Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества: Тезисы докладов / Институт физики металлов УрО РАН. – Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2006. – С. 26-27.
24. Силинин, А.В. Зоны Бриллюэна подрешеток в кристаллах кубической сингонии / А.В. Силинин, Р.Р. Сатучин // Региональная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по физике: Тезисы докладов. – Владивосток: Издательство Дальневосточного университета, 2005. – С. 42-43.
25. Кособуцкий, А.В. Генезис зонных спектров кристаллов со структурой флюорита, антифлюорита и куприта / А.В. Кособуцкий, А.В. Силинин // Конференция аспирантов и молодых ученых: Труды X конференции по физике полупроводниковых, диэлектрических и магнитных материалов / Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН. – Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2006. – С. 159-163.
26. Силинин, А.В. Подрешетки в ромбических кристаллических системах // Сборник трудов молодых ученых Кемеровского государственного университета, посвященный 30-летию Кемеровского государственного университета / Отв. редактор Ю.А. Захаров; Кемеровский госуниверситет. – Кемерово: Полиграф, 2004. – С. 192-194.
27. Силинин, А.В. Матрицы связи решеток кубической с подрешетками других сингоний // Сборник трудов студентов и молодых ученых Кемеровского государственного университета, посвященный 50-летию Кемеровского государственного университета / Отв. редактор Ю.А. Захаров; КемГУ. – Кемерово: Полиграф, 2004. – Т. 2. – С. 221-223.

Подписано к печати «   » апреля 2007 г. Формат 60×84 1/16. Печать офсетная. Бумага белая. Усл. печ. л. 1,5. Тираж 125 экз. Заказ № 34/

ГОУ ВПО «Кемеровский государственный университет».

650043, Кемерово, ул. Красная, 6.

Отпечатано в типографии издательства «Кузбассвузиздат».

650043, Кемерово, ул. Ермака, 7.