

*На правах рукописи*



Николаева Елена Владимировна

**ВЫСОКОСИММЕТРИЧНЫЕ ПОДРЕШЕТКИ В КРИ-  
СТАЛЛАХ РОМБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ И ИХ ПРОЯВЛЕНИЕ  
В СТРУКТУРЕ ЗОННЫХ И ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ**

Специальность 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Барнаул 2011

Работа выполнена в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет».

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор, Заслуженный деятель науки РФ Поплавной Анатолий Степанович
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор Попов Валерий Андреевич
	доктор физико-математических наук, профессор Тютютерев Валерий Григорьевич
Ведущая организация:	ОСП «Сибирский физико-технический институт имени акад. В.Д. Кузнецова Томского государственного университета», г. Томск

Защита состоится «25» мая 2011 г. в 15.00 ч. на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова» по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ГОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова».

Автореферат разослан «        » апреля 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
кандидат физико-математических наук

Романенко В.В.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Электронные и колебательные спектры кристаллов, содержащих несколько формульных единиц в элементарной ячейке, имеют, как правило, сложный характер. Кроме того, при феноменологическом описании фононных спектров необходимо вводить достаточно большое число параметров, физический смысл которых не всегда ясен. Но даже при получении численных результатов их интерпретация оказывается не менее сложной задачей из-за обилия электронных и колебательных ветвей. В представленной работе используется метод симметричного анализа спектров кристаллов, составленных из подрешеток Бравэ, который позволяет провести качественный анализ спектров без проведения вычислений и интерпретировать некоторые их особенности, если спектры вычислены. Основным последовательно учитываемым фактором при этом анализе является симметрия подрешеток, которая может быть выше симметрии составленной кристаллической решетки. Эта дополнительная симметрия может уменьшить число параметров теории при феноменологическом подходе к моделированию силового взаимодействия, а также позволяет установить некоторые качественные особенности спектров. Трансляционные квазивырождения возникают при условии, если объем примитивной ячейки подрешетки меньше объема примитивной ячейки кристалла, и также вырождения находятся путем свертывания ветвей спектра подрешетки в **зону Бриллюэна (ЗБ)** кристалла. Другой тип квазивырождений возникает при условии, если точечная симметрия подрешеток окажется выше точечной симметрии кристалла.

В качестве объектов исследования избраны кристаллы ромбической сингонии, содержащие высокосимметричные подрешетки. Эти кристаллы относятся к трем точечным группам симметрии и **59 пространственным группам (ПГ)**, соответствующей симметрией обладают многие сложные соединения.

**Целью** настоящей работы является исследование кристаллических соединений ромбической сингонии с помощью метода подрешеток, выявление высокосимметричных подрешеток, описание проявления имеющейся скрытой симметрии в структуре электронных и колебательных спектров.

Для достижения данной цели необходимо решить следующие **задачи**:

1. Найти матрицы трансляционной совместимости кристаллических решеток ромбической сингонии с подрешетками высших сингоний с учетом схемы их подчинения.
2. Выявить реальные кристаллы ромбической сингонии с подрешетками различного типа Бравэ.
3. Построить трансляционно-совместимые **многогранники Дирихле-Вороного (МДВ)** и первые ЗБ для кристаллической решетки и подрешеток, получить таблицы сопоставления звезд волновых векторов подрешеток и кристалла.

4. Описать проявление имеющейся скрытой симметрии подрешеток в реальных кристаллах ромбической сингонии в структуре их электронных и колебательных спектров.

**Научная новизна** работы. Найдены матрицы совместимости, связывающие ВЭТ кристалла ромбической сингонии и подрешеток, и условия на их геометрические параметры (пространственные периоды и углы). Выявлены реальные кристаллы ромбической сингонии с подрешетками типа отличного от кристаллического. С помощью построенных трансляционно-совместимых первых ЗБ и полученных таблиц сопоставления звезд волновых векторов подрешеток и кристалла обсуждены особенности электронных и колебательных спектров для кристаллов с имеющейся скрытой симметрией.

**Практическая значимость** заключается в возможности на основе метода подрешеток представлять кристаллические структуры любой сложности в виде совокупности подрешеток Бравэ, выявлять более высокую, чем кристаллическая, симметрию подрешеток, анализировать особенности электронных и колебательных спектров, обусловленные этой более высокой симметрией, в частности, предсказывать наличие в них квазивырождений и других топологических особенностей.

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Найденные матрицы трансляционной совместимости кристаллических решеток ромбической сингонии и подрешеток высших сингоний, позволяющие моделировать реальные кристаллические структуры, обладающие скрытой симметрией.

2. Выявленные реальные кристаллические соединения ромбической сингонии с подрешетками, обладающими более высокой (скрытой) симметрией, чем кристаллическая, построенные трансляционно-совместимые многогранники Дирихле-Вороного, зоны Бриллюэна, таблицы сопоставления звезд волновых векторов кристалла и подрешеток.

3. Установленные топологические особенности электронных и колебательных спектров типа вырождений и квазивырождений для ряда сложных кристаллических соединений ромбической сингонии.

**Достоверность** полученных результатов достигается за счет использования надежных и хорошо апробированных методов теории групп. Выводы, сформулированные в данной работе, являются взаимно согласованными и не содержат внутренних противоречий.

**Личный вклад автора.** В статьях, опубликованных в соавторстве, автору принадлежат результаты, сформулированные в защищаемых положениях и выводах работы. Идея исследования, постановка задач, анализ результатов обсуждались совместно с научным руководителем.

**Апробация работы.** Основные результаты работы опубликованы в 3 статьях в ведущих рецензируемых научных журналах из списка ВАК и 6 статьях в сборниках докладов международных научных конференций, докла-

дывались и обсуждались на следующих конференциях: Двенадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Новосибирск, 2006), Тринадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Ростов-на-Дону, 2007), XLVI Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс» (Новосибирск, 2008), Четырнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Уфа, 2008), XI Российской научной студенческой конференции «Физика твердого тела» (Томск, 2008), XI Международной школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2008), Пятнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Кемерово-Томск, 2009), IV Международной научной конференции "Актуальные проблемы физики твердого тела" (Минск, 2009), Шестнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Волгоград, 2010), XII Российской научной студенческой конференции «Физика твердого тела» (Томск, 2010), 23 Международной конференции по физике конденсированного состояния (Польша, Варшава, 2010), XII Международной школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2010). Всего по теме диссертации опубликовано 20 работ.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, трех приложений и списка литературы из 114 наименований. Общий объем диссертации составляет 156 страниц, работа содержит 18 таблиц и 46 рисунков.

### **КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цель диссертационной работы, задачи исследований, описаны научная новизна, практическая значимость и основные защищаемые положения, приведены сведения об их апробации и публикациях, изложена структура диссертации.

**В первой главе** дан обзор литературных данных по использованию понятия «подрешетка» в различных областях физики твердого тела. При этом смысл данного понятия при решении различных задач оказывается разным. В большинстве случаев подрешетки являются структурами с пониженной симметрией в какой-либо высокосимметричной структуре.

При построении кристалла путем вложения друг в друга трансляционно совместимых подрешеток Бравэ одинаковых или различных сингоний, состоящих из атомов одного сорта, возникает возможность наличия в нем подрешеток с симметрией выше кристаллической.

Подрешетки Бравэ, входящие в единую кристаллическую структуру, (структурные подрешетки) должны удовлетворять условиям трансляционной совместимости с решеткой кристалла, для учета которой введены матрицы совместимости кристаллической решетки и подрешетки, изложен метод их определения. Для нахождения возможных вариантов пространственного размеще-

ния подрешеток приведен метод учета пространственной симметрии кристалла. Описан программный комплекс «SubFinder», позволяющий выделять высокосимметричные подрешетки в кристаллах произвольной сингонии и химического состава любой сложности, а также визуализировать их в прямом и обратном кристаллических пространствах.

**Вторая глава** посвящена описанию структур некоторых кристаллов ромбической сингонии с высокосимметричными подрешетками. Дается описание ромбической сингонии, характеризующейся наличием трех взаимно перпендикулярных особых направлений, вдоль которых проходят оси второго порядка и/или которым перпендикулярны плоскости симметрии. Кристаллы, принадлежащие к данной сингонии, имеют **примитивную** ( $\Gamma_o$ ), **базоцентрированную** ( $G_o^i$ , где  $i = a, b$  или  $c$ )), **объемноцентрированную** ( $G_o^v$ ) или **гранецентрированную** ( $G_o^f$ ) ячейку Бравэ с параметрами  $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$  (оси второго порядка направлены вдоль ребер ячейки) и относятся к 3 точечным группам симметрии ( $222$ ,  $mm2$ ,  $mmm$ ) и 59 ПГ симметрии. Для данной сингонии было найдено 119 матриц совместимости и условия на геометрические параметры согласно схеме подчинения сингоний, которые представлены в приложении 2 диссертационной работы. Проведен анализ структур некоторых реальных кристаллов ромбической сингонии с точки зрения наличия в них подрешеток разного типа. Рассмотрено восемь различных семейств кристаллов, представителями которых являются  $\text{In}_4\text{Te}_3$ ,  $\text{MgGeN}_2$ ,  $\text{MgSiN}_2$ ,  $\text{CaTiO}_3$ ,  $\text{PbF}_2$ ,  $\text{SiS}_2$ ,  $\text{AlPS}_4$ ,  $\text{FeS}_2$ , среди которых найдены как точные, так и приближенные высокосимметричные подрешетки. Представлены совмещенные МДВ кристаллической решетки и подрешеток данных кристаллов.

Для иллюстрации представления кристаллов в виде совокупности подрешеток Бравэ разного типа рассмотрим кристаллы со структурой  $\text{In}_4\text{Te}_3$ ,  $\text{MgSiN}_2$ ,  $\text{CaTiO}_3$ .

В  $\text{In}_4\text{Te}_3$  кристаллическая решетка относится к  $\Gamma_o$  с параметрами:  $a = 15.619 \text{ \AA}$ ,  $b = 12.749 \text{ \AA}$ ,  $c = 4.445 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ; ПГ № 58 ( $D_{2h}^{12}$ ). Изоструктурным  $\text{In}_4\text{Te}_3$  является кристалл  $\text{In}_4\text{Se}_3$ . Элементарная ячейка имеет 28 атомов: три симметрично неэквивалентных типа атомов теллура, четыре симметрично неэквивалентных типа атомов индия (рис. 1а). Т.е. в данном случае мы имеем 28 «точных»  $\Gamma_o$  подрешеток с пространственными периодами, совпадающими с кристаллическими. Однако, если приближенно (с точностью не менее 6 %) переместить все атомы в более симметричные позиции, то 12  $\Gamma_o$  подрешеток Te объединятся в 6  $\Gamma_o^a$  подрешеток, 4  $\Gamma_o$  подрешеток In объединятся в 2  $\Gamma_o^a$  подрешетки, 8  $\Gamma_o$  подрешеток In объединятся в 4  $\Gamma_o^v$  подрешетки, при этом пространственные периоды всех подрешеток совпадают с кристаллическими, и 4  $\Gamma_o$  подрешетки In останутся эквивалентны по своему типу и пространственным периодам кристаллической решетки (рис. 1б).

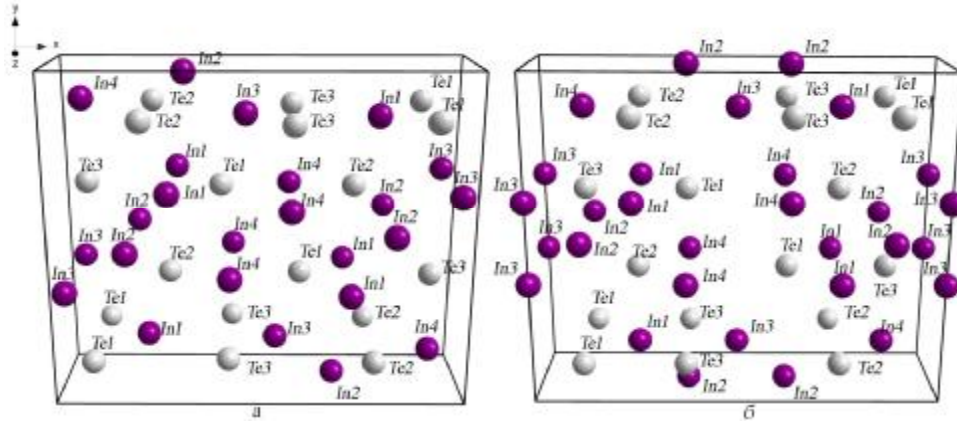


Рис. 1. Элементарная ячейка  $\text{In}_4\text{Te}_3$ : а) точная, б) приближенная

На рис. 2 представлены трансляционно-совместимые МДВ кристалла и подрешеток для кристалла со структурой  $\text{In}_4\text{Te}_3$ , которые соотносятся как 2:1.

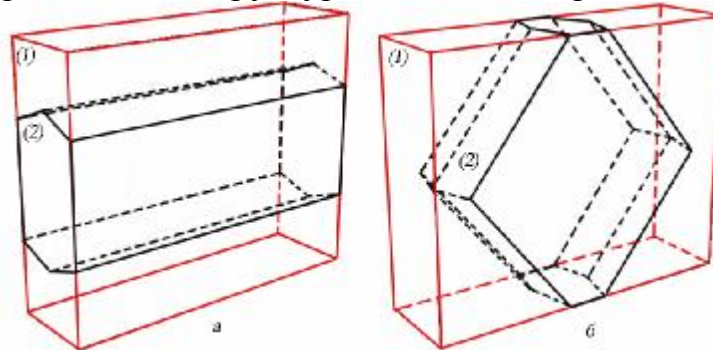


Рис. 2. МДВ  $\text{In}_4\text{Te}_3$ : а) кристаллической решетки (1) и «приближенных»  $\Gamma_a^a$  подрешеток Te и In1 (2); б) кристаллической решетки (1) и «приближенных»  $\Gamma_v^v$  подрешеток In2, In3 (2)

В  $\text{MgSiN}_2$  кристаллическая решетка относится к  $\Gamma_o$  с параметрами:  $a = 5.279 \text{ \AA}$ ,  $b = 6.476 \text{ \AA}$ ,  $c = 4.992 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ; описывается пространственной группой № 33 ( $C_{2v}^9$ ) (рис. 3а). Элементарная ячейка имеет 16 атомов:

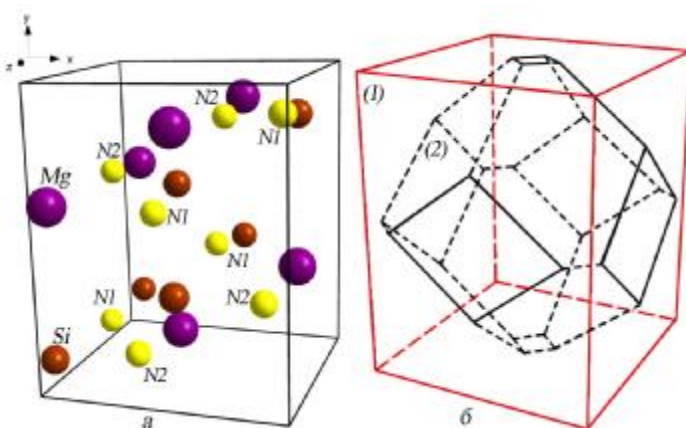


Рис 3. а) Элементарная ячейка; б) МДВ кристаллической решетки (1) и «приближенных»  $\Gamma_o^v$  подрешеток N1 (2)  $\text{MgSiN}_2$

которые можно отнести к 4 группам: Mg, Ge, N1 и N2, каждая из которых состоит из 4 трансляционно неэквивалентных атомов. Т.е. в данном случае мы имеем 16 «точных»  $\Gamma_o$  подрешеток с пространственными периодами, совпадающими с кристаллическими. Однако, если приблизительно (с погрешностью не более 5 %) переместить атомы азота N1 в более симметричные позиции, то четыре  $\Gamma_o$  подрешетки N1 объединятся в две  $\Gamma_o^v$  подрешетки с пространственными периодами, совпадающими с кристаллическими. На рис. 3б пред-

ставлены трансляционно-совместимые МДВ кристалла и подрешеток для кристалла со структурой  $\text{MgSiN}_2$ , которые соотносятся как 2:1.

ставлены трансляционно-совместимые МДВ кристалла и подрешеток, объемы которых соотносятся как 2:1.

В  $\text{CaTiO}_3$  кристаллическая решетка –  $\Gamma_o$ , параметры кристаллической решетки:  $a = 5.3881 \text{ \AA}$ ,  $b = 5.4471 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.6541 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , ПГ № 62 ( $D_{2h}^{16}$ ) (рис. 4а). Четыре подрешетки Ti объединяются в одну  $\Gamma_o^c$  подрешетку, при этом пространственный период подрешетки вдоль оси  $z$  вдвое меньше соответствующего пространственного периода кристаллической решетки, а периоды вдоль осей  $x$  и  $y$  совпадают с кристаллическими. Если атомы кальция переместить (с погрешностью не более 3%) в симметричные позиции, то 1) 4 точных  $\Gamma_o$  подрешеток Ca объединяются в одну  $\Gamma_o^c$  подрешетку аналогичную  $\Gamma_o^c$  подрешетке Ti. Атомы O разделены на два неэквивалентных множества атомов кислорода O1 и O2. Если их (с погрешностью не более 6%) переместить в симметричные позиции, то 12  $\Gamma_o$  подрешеток O объединяются в три  $\Gamma_o^c$  подрешетки: одну O1 и две O2 аналогичные  $\Gamma_o^c$  подрешетке Ti; при этом атомы O2 можно сгруппировать в одну  $\Gamma_o$  подрешетку с пространственными периодами вдоль всех осей вдвое меньше кристаллических. Объемы МДВ кристаллической решетки,  $\Gamma_o^c$  и приближенной  $\Gamma_o$  подрешеток в данном случае соотносятся как 8:2:1 соответственно.

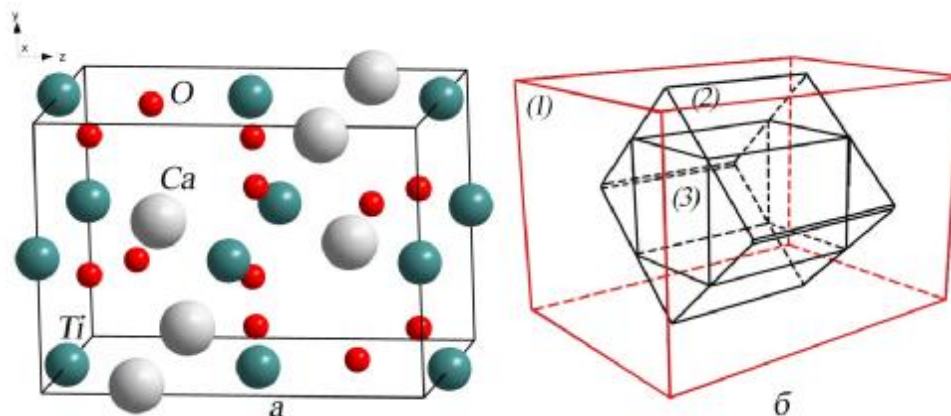


Рис. 4. а) Элементарная ячейка; б) МДВ: кристалла (1),  $\Gamma_o^c$  подрешеток Ti, «приближенных»  $\Gamma_o^c$  подрешеток Ca и O (2) и «приближенной»  $\Gamma_o$  подрешетки O (3) для ромбической модификации  $\text{CaTiO}_3$

**В третьей главе** проанализированы особенности зонных спектров, обусловленные более высокой симметрией подрешеток по сравнению с кристаллической. В начале изложен метод исследования генезиса зонных спектров кристаллов, основанный на анализе симметрии подрешеток.

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

$$V_L(\mathbf{r}) = \sum_S V_S(\mathbf{r}) + \Delta W_{LS}(\mathbf{r}), \quad (1)$$



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

Поскольку элементарная ячейка кристалла вмещает в себя элементарные 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

$$\mathbf{k}_L = \mathbf{k}_S + \sum_{i=1}^3 n_i(\Gamma_L | \Gamma_S) \mathbf{b}_i(\Gamma_L) \quad (2)$$

где  $n_i(\Gamma_L | \Gamma_S)$  – целые числа,  $\mathbf{b}_i(\Gamma_L)$  – векторы обратной решетки кристалла. При перестройке ЗБ подрешеток в ЗБ кристалла необходимо 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. В итоге устанавливается генезис зонного спектра кристалла из подрешеточных состояний.

Изложенный метод проиллюстрирован на примере кристалла со структурой флюорита, составленного из двух различающихся подрешеток Бравэ, для которого ранее был рассчитан зонный спектр как для самого кристалла в целом, так и для высокосимметричной подрешетки. С помощью построенных совмещенных ЗБ решетки и подрешетки и полученной на их основе таблицы разложения неприводимых звезд волновых векторов подрешетки по кристаллическим показано, как будут сворачиваться зонные ветви подрешетки в ЗБ кристалла.

Далее с помощью описанной методики обсуждены топологические особенности в структуре зонных спектров, обусловленные симметрией подрешеток, некоторых кристаллов ромбической сингонии:  $\text{In}_4\text{Se}_3$ ,  $\text{MgGeN}_2$ ,  $\text{MgSiN}_2$ ,  $\text{CaTiO}_3$ .

Зонный спектр, полные и парциальные плотности состояний кристалла  $\text{In}_4\text{Se}_3$  вычислены в [1] и [2] и представлены на рис. 5. Как видно из рис. 5б, нижняя связка валентной зоны в основном сформирована состояниями подрешеток Se. Пики валентной зоны в интервале энергий от -7 до -4 эВ формируются преимущественно состояниями In. Следующий пик валентной зоны в интервале энергий от -4 до 0 эВ формируется в основном состояниями Se. Далее, как видно из рис. 5б, вклад в зонный спектр в области зоны проводимости вносят как подрешетки In, так и подрешетки Se.

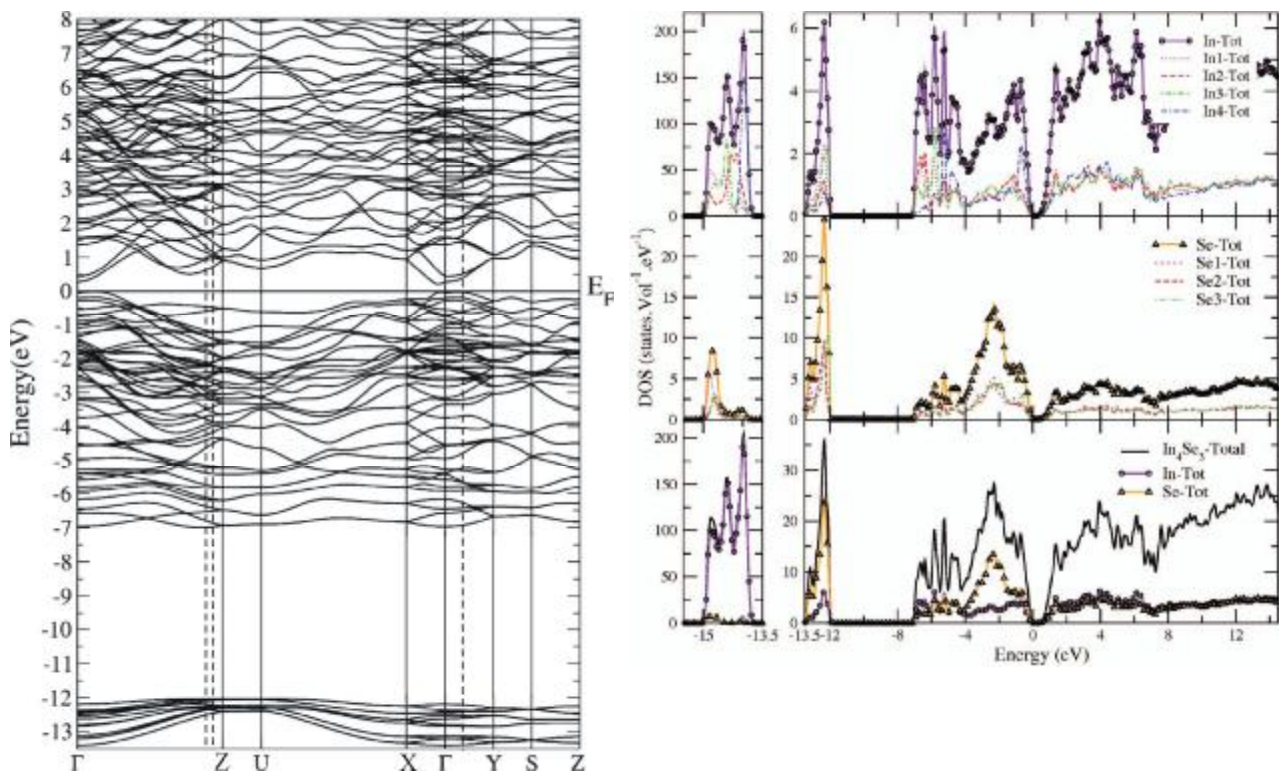


Рис. 5. а) Зонная структура  $\text{In}_4\text{Se}_3$ , б) Полные и парциальные плотности состояний  $\text{In}_4\text{Se}_3$  [1,2]

Для того чтобы рассмотреть поведение зонных ветвей с позиции имеющих в  $\text{In}_4\text{Se}_3$  подрешеток, необходимо построить совмещенные ЗБ и составить таблицы сопоставления звезд волновых векторов кристаллической решетки и подрешеток.

На рис. 3 представлены ЗБ кристалла и подрешеток для кристалла со структурой  $\text{In}_4\text{Te}_3$ . Для  $\Gamma_0$  кристаллической решетки ЗБ имеет вид прямоугольного параллелепипеда (на рисунке обозначена цифрой 1). ЗБ для «приближенных»  $\Gamma_0^a$  подрешеток – прямая призма, имеющая в основании неправильный шестиугольник (2), а ЗБ «приближенных»  $\Gamma_0^v$  подрешеток будет иметь вид «искаженного» усеченного октаэдра (2) (под понятием «искаженный» мы имеем ввиду то, что его гранями являются неправильные шестиугольники и прямоугольники). Т.к. пространственные периоды подрешеток, отличных от решетки кристалла, совпадают с кристаллическими, то объем данных ЗБ в 2 раза больше объема ЗБ кристаллической решетки.

Ниже представлены таблицы сопоставления некоторых звезд волновых векторов кристаллической решетки (соответствующих звездам волновых векторов, по которым рассчитан зонный спектр на рис. 5) и подрешеток  $\Gamma_0^a$  (табл. 1) и  $\Gamma_0^v$  (табл. 2) с пространственными периодами, совпадающими с кристаллическими. Точки и линии ЗБ подрешетки помечены штрихами, нижним индексом «0» обозначены конкретные точки на определенной линии ЗБ подре-

шетки, не соответствующие никаким симметричным точкам в общепринятой классификации.

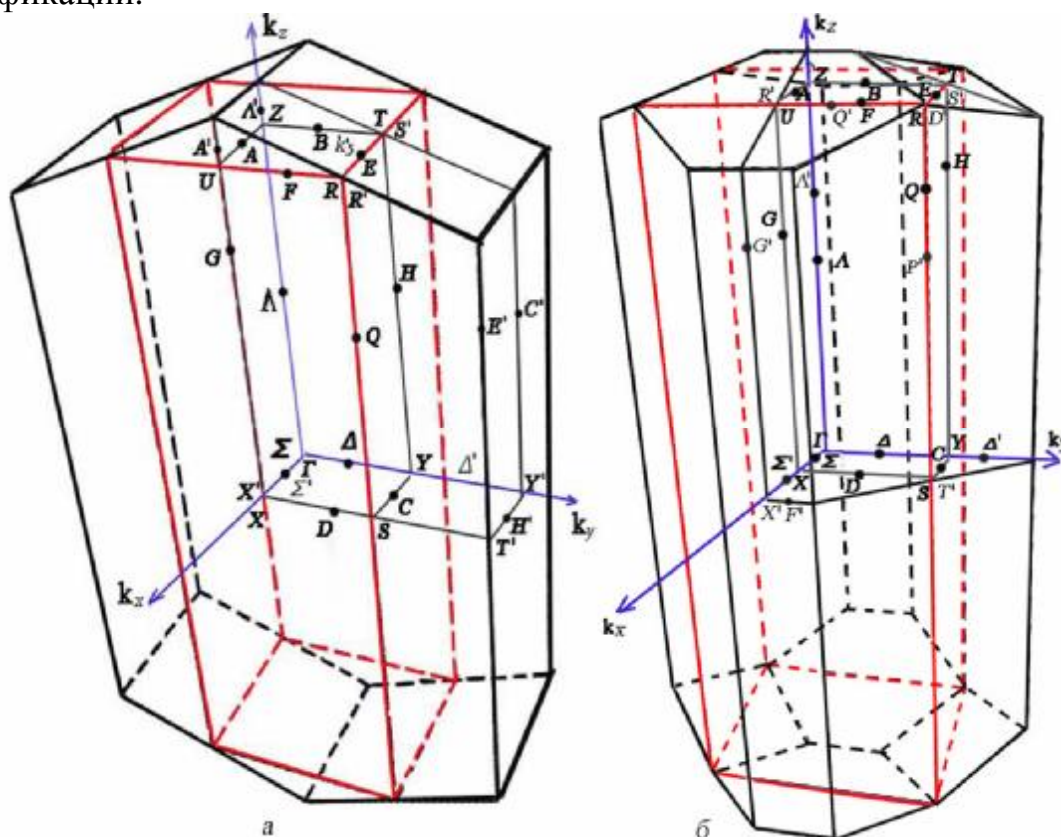


Рис. 6. ЗБ  $\text{In}_4\text{Te}_3$ : а) кристаллической решетки (1) и «приближенных»  $\Gamma_a^a$  подрешеток Te и In1 (2); б) кристаллической решетки (1) и «приближенных»  $\Gamma_v^v$  подрешеток In2, In3 (2)

**Таблица 1. Разложение неприводимых звезд  $\Gamma_a^a$  подрешетки по неприводимым звездам  $\Gamma_0$  кристалла**

Решетка кристалла		Подрешетка	
Тип звезды	Векторы звезды (ед. $2\pi$ )	Тип звезды	Векторы звезды (ед. $2\pi$ )
1	2	3	4
$\Gamma$	(0;0;0)	$\Gamma'$	(0;0;0)
$X$	(1/(2a);0;0)	$Y'$	(0;1/b;0)
$Y$	(0;1/(2b);0)	$X'$	(1/(2a);0;0)
$Z$	(0;0;1/(2c))	$T'$	(1/(2a);1/b;0)
$U$	(1/(2a);0;1/(2c))	$\Delta'_0$	(0;1/(2b);0)
$\Delta$	(0; $\mu$ /b;0), $-1/2 < \mu < 0$	$\Lambda'_0$	(0;0;1/(2c))
$\Delta$	(0; $\mu$ /b;0), $0 < \mu < 1/2$	$A'_0$	(1/(2a);0;1/(2c))
$\Lambda$	(0;0; $\mu$ /c), $-1/2 < \mu < -1/2 + c^2/(2b^2)$	$\Delta'$	(0;2 $\mu$ /b;0), $-1/4 < \mu < 0$
$\Lambda$	(0;0; $\mu$ /c), $-1/2 + c^2/(2b^2) < \mu < 0$	$\Delta'$	(0;2 $\mu$ /b;0), $1/4 < \mu < 1/2$
		$\Delta'$	(0;2 $\mu$ /b;0), $0 < \mu < 1/4$
		$\Delta'$	(0;2 $\mu$ /b;0), $-1/2 < \mu < -1/4$
		$\Lambda'$	(0;0; $\mu$ /c), $-1/2 < \mu < -1/2 + c^2/(2b^2)$
		$\Lambda'$	(0;0; $\mu$ /c), $1/2 < \mu < 1/2 + c^2/(2b^2)$
		$\Lambda'$	(0;0; $\mu$ /c), $-1/2 + c^2/(2b^2) < \mu < 0$
		$C'$	(0;1/b; $\mu$ /c), $-1/2 + c^2/(2b^2) < \mu < 0$

1	2	3	4
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2b^2)$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2b^2)$
		$C'$	$(0;1/b;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2b^2)$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), 1/2 - c^2/(2b^2) < \mu < 1/2$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), 1/2 - c^2/(2b^2) < \mu < 1/2$
		$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), -1/2 - c^2/(2b^2) < \mu < -1/2$
$\Sigma$	$(\mu/a;0;0), -1/2 < \mu < 1/2$	$\Sigma'$	$(\mu/a;0;0), -1/2 < \mu < 1/2$
		$H'$	$(\mu/a;1/b;0), -1/2 < \mu < 1/2$

**Таблица 2.** Разложение неприводимых звезд  $\Gamma_o^v$  подрешетки по неприводимым звездам  $\Gamma_o$  кристалла

Решетка кристалла		Подрешетка	
Тип звезды	Векторы звезды (ед. $2\pi$ )	Тип звезды	Векторы звезды (ед. $2\pi$ )
$\Gamma$	$(0;0;0)$	$\Gamma'$	$(0;0;0)$
		$X'$	$(1/a;0;0)$
$X$	$(1/(2a);0;0)$	$\Sigma'_0$	$(1/(2a);0;0)$
$Y$	$(0;1/(2b);0)$	$\Delta'_0$	$(0;1/(2b);0)$
$Z$	$(0;0;1/(2c))$	$\Lambda'_0$	$(0;0;1/(2c))$
$S$	$(1/(2a);1/(2b);0)$	$T'$	$(1/(2a);1/(2b);0)$
$U$	$(1/(2a);0;1/(2c))$	$R'$	$(1/(2a);0;1/(2c))$
$\Delta$	$(0;\mu/b;0), -1/2 < \mu < -1/2 + b^2/(2a^2)$	$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), -1/2 < \mu < -1/2 + b^2/(2a^2)$
		$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), 1/2 < \mu < 1/2 + b^2/(2a^2)$
$\Delta$	$(0;\mu/b;0), -1/2 + b^2/(2a^2) < \mu < 0$	$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), -1/2 + b^2/(2a^2) < \mu < 0$
		$F'$	$(1/a;\mu/b;0), -1/2 + b^2/(2a^2) < \mu < 0$
$\Delta$	$(0;\mu/b;0), 0 < \mu < 1/2 - b^2/(2a^2)$	$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), 0 < \mu < 1/2 - b^2/(2a^2)$
		$F'$	$(1/a;\mu/b;0), 0 < \mu < 1/2 - b^2/(2a^2)$
$\Delta$	$(0;\mu/b;0), 1/2 - b^2/(2a^2) < \mu < 1/2$	$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), 1/2 - b^2/(2a^2) < \mu < 1/2$
		$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), -1/2 - b^2/(2a^2) < \mu < -1/2$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), -1/2 < \mu < -1/2 + c^2/(2a^2)$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), -1/2 < \mu < -1/2 + c^2/(2a^2)$
		$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), 1/2 < \mu < 1/2 + c^2/(2a^2)$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), -1/2 + c^2/(2a^2) < \mu < 0$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), -1/2 + c^2/(2a^2) < \mu < 0$
		$G'$	$(1/a;0;\mu/c), -1/2 + c^2/(2a^2) < \mu < 0$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2a^2)$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2a^2)$
		$G'$	$(1/a;0;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2a^2)$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), 1/2 - c^2/(2a^2) < \mu < 1/2$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), 1/2 - c^2/(2a^2) < \mu < 1/2$
		$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), -1/2 - c^2/(2a^2) < \mu < -1/2$
$\Sigma$	$(\mu/a;0;0), -1/2 < \mu < 0$	$\Sigma'$	$(2\mu/a;0;0), -1/4 < \mu < 0$
		$\Sigma'$	$(2\mu/a;0;0), 1/4 < \mu < 1/2$
$\Sigma$	$(\mu/a;0;0), 0 < \mu < 1/2$	$\Sigma'$	$(2\mu/a;0;0), 0 < \mu < 1/4$
		$\Sigma'$	$(2\mu/a;0;0), -1/2 < \mu < -1/4$

Рассмотри теперь особенности зонных спектров с позиции имеющих подрешеток. Для подрешеток Se (рис. 6а, табл. 1) в направлении  $\Delta$  ( $0, k_y, 0$ ) в центр ЗБ кристалла попадает точка  $Y'$  ЗБ подрешетки, следовательно, в точке  $Y$  ЗБ кристалла будет происходить «свертка» зонного спектра подрешетки Se. Для подрешетки In (рис. 6б, табл. 2) в центр ЗБ кристалла попадают точки  $Y'$  и  $X'$  ЗБ подрешетки, и в точках  $Y$  и  $X$  ЗБ кристалла будет иметь место «свертка» зонного спектра. Достаточно сложная картина наблюдается для направления  $\Gamma$ - $Z$  ЗБ

кристалла. Для этого направления, в случае как подрешетки Se, так и In, в точке Z будет иметь место «свертка» зонного спектра, кроме того, в этом направлении возникают пересечения с ребрами ЗБ перестроенных подрешеток, то же наблюдается и в направлении Г-У для подрешеток In. Точки этих пересечений на рис. 5а представлены пунктирной вертикальной линией.

Итак, в точках X, Y, Z ЗБ кристалла имеет место «свертка» зонных ветвей. Наиболее сложные особенности спектра – типа пересечений ветвей и квазивырождений – наблюдаются вблизи пунктирных линий на рис. 5а, за счет «переноса» зонных ветвей с различных линий ЗБ подрешеток в соответствии с табл. 1 и 2.

Зонная структура  $MgSiN_2$  вычислялась в рамках локального приближения теории функционала плотности с использованием сохраняющих норму атомных псевдопотенциалов, генерированных программой PWscf с параметрами Педью-Цангера. Результаты вычислений представлены на рис. 7.

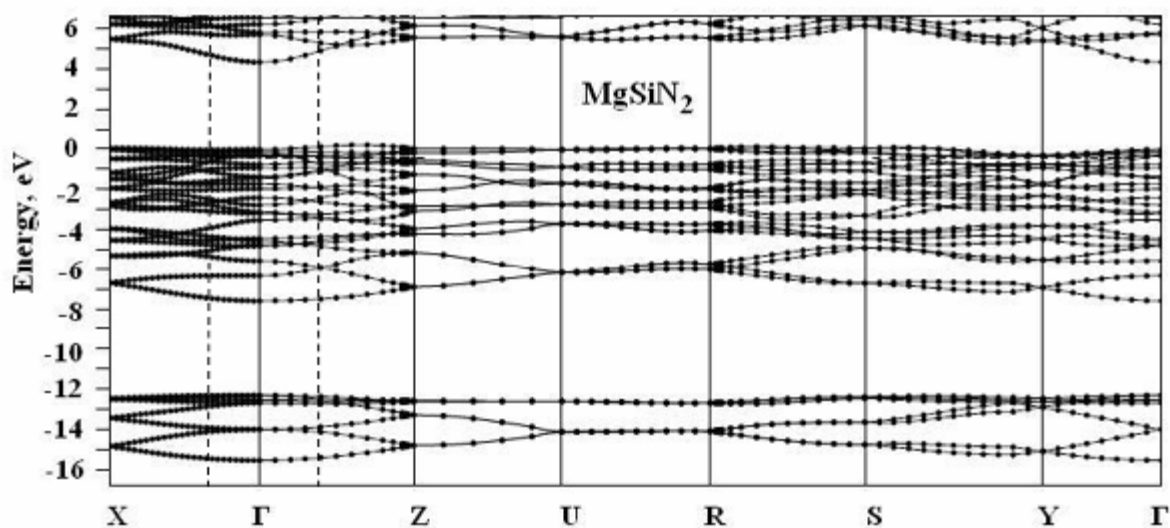


Рис. 7. Зонная структура  $MgSiN_2$

Согласно нашим расчетам кристаллы  $MgSiN_2$  являются непрямозонными, поскольку абсолютный минимум зоны проводимости находится в точке Г, а вершина валентной зоны реализуется на линии Г-Z в точке с координатами (0, 0, 0.7), где расположен абсолютный максимум. Вычисленная ширина запрещенной зоны соединения  $MgSiN_2$  составляет 4.32 и 4.56 эВ для не прямой и прямой щели, соответственно. Характерной особенностью строения вершины валентной зоны  $MgSiN_2$  является наличие большого числа локальных максимумов в двух взаимно перпендикулярных направлениях Г-Z и Г-X, которые будут давать большое число прямых и не прямых переходов из валентной зоны в зону проводимости.

Анализ парциальных вкладов плотности состояний атомов, образующих соединение  $MgSiN_2$  (рис. 8), показывает, что нижняя связка валентных зон в интервале энергий от -12 до -16 эВ образована преимущественно из s-состояний атомов аниона (N), имеет трехпиковую структуру, обусловленную наличием в составе  $MgSiN_2$  двух неэквивалентных атомов N. Наиболее интенсивный пик в

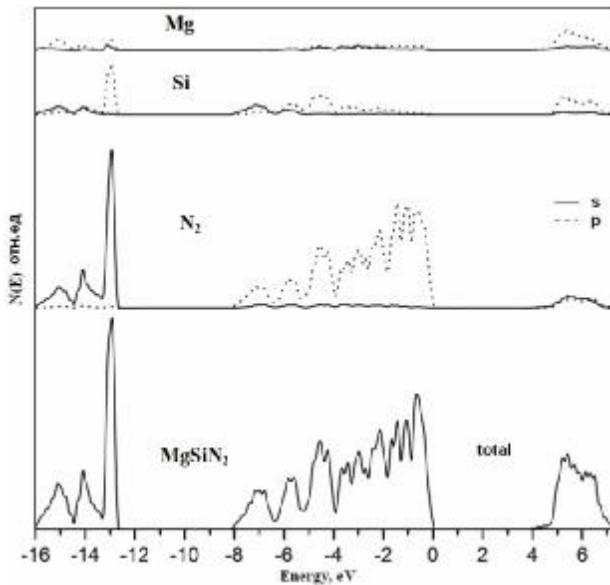


Рис. 8. Полная и парциальные плотности состояний  $\text{MgSiN}_2$

состояний аниона N.

На рис. 9 представлены ЗБ кристалла и подрешетки азота  $\text{MgSiN}_2$ . ЗБ кристаллической решетки имеет вид прямоугольного параллелепипеда (1), ЗБ для «приближенных»  $\Gamma_0^v$  подрешеток азота – «искаженный» усеченный октаэдр (2) с объемом в 2 раза больше объема ЗБ кристаллической решетки.

Ниже приведена таблица 3 сопоставления звезд волновых векторов  $\Gamma_0$  кристаллической решетки  $\text{MgSiN}_2$  и  $\Gamma_0^v$  подрешетки.

Рассмотрим связи валентных зон, которые согласно рис. 8 обусловлены преимущественно подрешеткой азота.

Как видно из рис. 9 и табл. 3, в направлении  $\Delta$  ( $0, k_y, 0$ ) граница ЗБ кристалла находится на середине линии ( $\Gamma$ - $X'$ ), точка  $X'$  ЗБ подрешетки попадает в центр ЗБ кристалла. Следовательно, в точке  $Y$  ЗБ кристалла будет происходить «свертка» зонного спектра подрешетки, что и можно наблюдать на рис. 7.

Другая ситуация реализуется в направлениях  $\Sigma$  ( $k_x, 0, 0$ ) и  $\Lambda$  ( $0, 0, k_z$ ). Как видно из рис. 9 и табл. 3, на направление  $\Sigma$  переходят как отрезки из плоскости, перпендикулярной ( $0, k_y, 0$ ) ЗБ подрешетки, так и лежащие за пределами ЗБ кристалла в направлении ( $k_x, 0, 0$ ); аналогично на направление  $\Lambda$  переходят отрезки из плоскости, перпендикулярной ( $0, k_y, 0$ ) ЗБ подрешетки, и лежащие за преде-

этой связке в области -12.5 эВ содержит вклады р-состояний катионов из элементов IV группы (Si), что характеризуется  $sp^3$ -гибридизацией в рассматриваемых соединениях с тетраэдрической координацией атомов. Верхняя полоса валентной зоны от -8 эВ и выше является непрерывной и формируется в основном из р-состояний атомов азота. Уровни энергии, имеющие  $sp^3$ -гибридизованные состояния атомов Si и N, расположены в интервале от -8 до -6 эВ. Дно зоны проводимости содержит вклады преимущественно р-состояний катионов Mg и Si, к которым примешиваются вклады s-

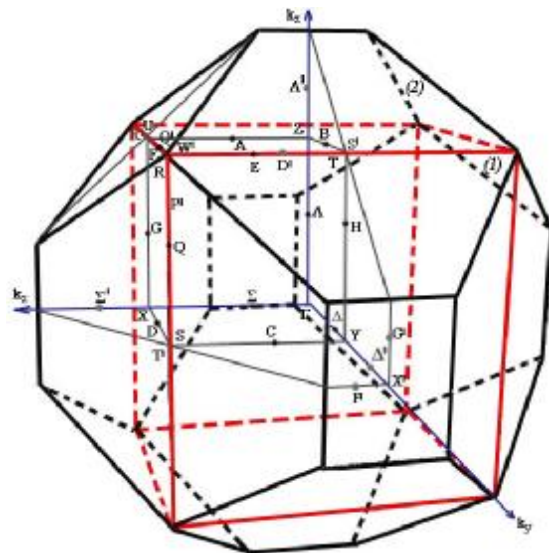


Рис. 9. ЗБ кристаллической решетки (1) и «приближенных»  $\Gamma_0^v$  подрешеток N1 (2)  $\text{MgSiN}_2$

лами ЗБ кристалла в направлении  $(0,0,k_z)$ . Таким образом, эти направления пересекает одно из ребер ЗБ подрешетки. Из рис. 7 видно, что именно на пересечении с этой линией (или вблизи нее) находятся наиболее сложные особенности зонного спектра, такие как «квазивырождения», на других же направлениях видно достаточно гладкое поведение ветвей

**Таблица 3. Разложение неприводимых звезд  $\Gamma_o^\nu$  подрешетки по неприводимым звездам  $\Gamma_o$  кристалла**

Решетка кристалла		Подрешетка	
Тип звезды	Векторы звезды (ед. $2\pi$ )	Тип звезды	Векторы звезды (ед. $2\pi$ )
1	2	3	4
$\Gamma$	$(0;0;0)$	$\Gamma'$	$(0;0;0)$
		$X'$	$(0;1/b;0)$
$X$	$(1/(2a);0;0)$	$\Sigma_0'$	$(1/(2a);0;0)$
$Y$	$(0;1/(2b);0)$	$\Delta_0'$	$(0;1/(2b);0)$
$Z$	$(0;0;1/(2c))$	$\Lambda_0'$	$(0;0;1/(2c))$
$R$	$(1/(2a);1/(2b);1/(2c))$	$W'$	$(1/(2a);1/(2b);1/(2c))$
$S$	$(1/(2a);1/(2b);0)$	$T'$	$(1/(2a);1/(2b);0)$
$T$	$(0;1/(2b);1/(2c))$	$S'$	$(0;1/(2b);1/(2c))$
$U$	$(1/(2a);0;1/(2c))$	$R'$	$(1/(2a);0;1/(2c))$
$\Delta$	$(0;\mu/b;0), -1/2 < \mu < 0$	$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), -1/2 < \mu < 0$
		$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), 1/2 < \mu < 1$
$\Delta$	$(0;\mu/b;0), 0 < \mu < 1/2$	$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), 0 < \mu < 1/2$
		$\Delta'$	$(0;\mu/b;0), -1 < \mu < -1/2$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), -1/2 < \mu < -1/2 + c^2/(2b^2)$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), -1/2 < \mu < -1/2 + c^2/(2b^2)$
		$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), 1/2 < \mu < 1/2 + c^2/(2b^2)$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), -1/2 + c^2/(2b^2) < \mu < 0$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), -1/2 + c^2/(2b^2) < \mu < 0$
		$G'$	$(0;1/b;\mu/c), -1/2 + c^2/(2b^2) < \mu < 0$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2b^2)$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2b^2)$
		$G'$	$(0;1/b;\mu/c), 0 < \mu < 1/2 - c^2/(2b^2)$
$\Lambda$	$(0;0;\mu/c), 1/2 - c^2/(2b^2) < \mu < 1/2$	$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), 1/2 - c^2/(2b^2) < \mu < 1/2$
		$\Lambda'$	$(0;0;\mu/c), -1/2 - c^2/(2b^2) < \mu < -1/2$
$\Sigma$	$(\mu/a;0;0), -1/2 < \mu < -1/2 + a^2/(2b^2)$	$\Sigma'$	$(\mu/a;0;0), -1/2 < \mu < -1/2 + a^2/(2b^2)$
		$\Sigma'$	$(\mu/a;0;0), 1/2 < \mu < 1/2 + a^2/(2b^2)$
$\Sigma$	$(\mu/a;0;0), -1/2 + a^2/(2b^2) < \mu < 0$	$\Sigma'$	$(\mu/a;0;0), -1/2 + a^2/(2b^2) < \mu < 0$
		$F'$	$(\mu/a;1/b;0), -1/2 + a^2/(2b^2) < \mu < 0$
$\Sigma$	$(\mu/a;0;0), 0 < \mu < 1/2 - a^2/(2b^2)$	$\Sigma'$	$(\mu/a;0;0), 0 < \mu < 1/2 - a^2/(2b^2)$
		$F'$	$(\mu/a;1/b;0), 0 < \mu < 1/2 - a^2/(2b^2)$
$\Sigma$	$(\mu/a;0;0), 1/2 - a^2/(2b^2) < \mu < 1/2$	$\Sigma'$	$(\mu/a;0;0), 1/2 - a^2/(2b^2) < \mu < 1/2$
		$\Sigma'$	$(\mu/a;0;0), -1/2 - a^2/(2b^2) < \mu < -1/2$

**В четвертой главе** проанализированы особенности фононных спектров, обусловленные более высокой симметрией подрешеток по сравнению с кристаллической. Изложена техника вычислений колебательных спектров кристаллов и их подрешеток.

Структура колебательных спектров кристаллов определяется силами связи между химическими элементами, входящими в их состав, а также массами этих

элементов. В случае, если в состав какого либо соединения входят химические элементы, массы которых много меньше остальных, то эти химические элементы будут определять строение самых верхних оптических ветвей колебательно-го спектра. Если же, напротив, какой-либо химический элемент обладает мас-сой, намного превышающей массы остальных, тогда этот химический элемент будет преимущественно определять строение акустических ветвей соединений.

В качестве иллюстрации изложенный метод применен к кристаллам кубиче-ской сингонии со структурами  $\beta$ -PbF<sub>2</sub> с решеткой флюорита и CaTiO<sub>3</sub>, со-ставленным из подрешеток Бравэ разного типа. Достаточно простой характер фононного спектра таких кристаллов позволяет наглядно увидеть особенности спектров, обусловленные свертыванием фононных ветвей подрешетки в ЗБ кристалла. Далее с помощью анализа построенных совмещенных ЗБ кристал-лической решетки и подрешеток и полученных на их основе таблиц разложения неприводимых звезд волновых векторов подрешетки по кристаллическим неко-торые топологические особенности колебательных спектров кристаллов ром-бической сингонии обсуждены на примере фононного спектра In<sub>4</sub>Te<sub>3</sub> и предска-заны в кристаллах CaTiO<sub>3</sub>, PbF<sub>2</sub>, InPS<sub>4</sub>, FeC<sub>2</sub>, для которых не имеется численных расчетов.

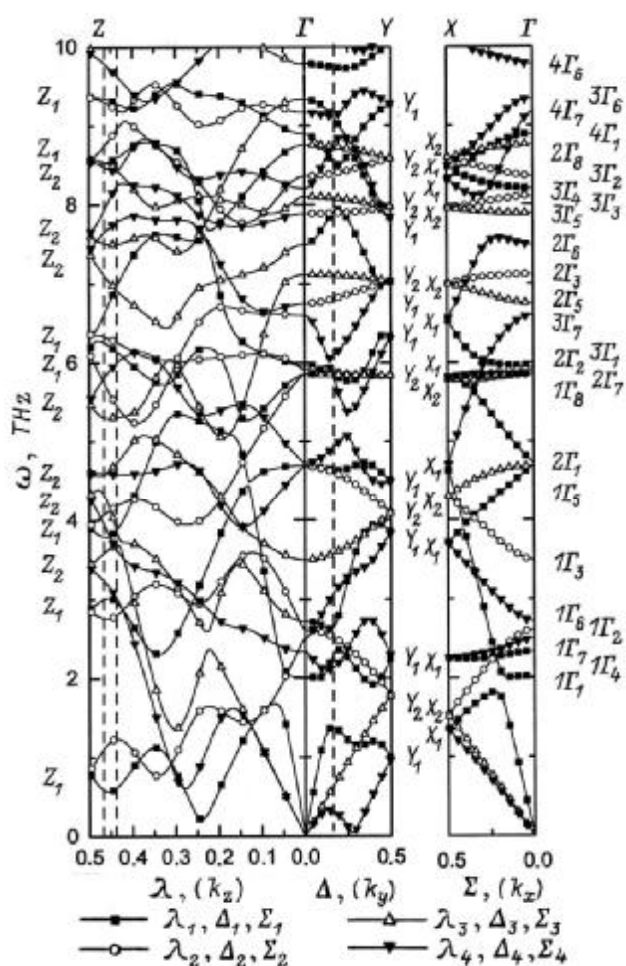


Рис. 10 Низкоэнергетические ветви фононного спектра кристалла In<sub>4</sub>Te<sub>3</sub> [3]

заны в кристаллах CaTiO<sub>3</sub>, PbF<sub>2</sub>, InPS<sub>4</sub>, FeC<sub>2</sub>, для которых не имеется численных расчетов.

Низкоэнергетические ветви фононного спектра In<sub>4</sub>Te<sub>3</sub> представле-ны на рис. 10. В элементарной ячейке In<sub>4</sub>Te<sub>3</sub> имеется 28 атомов и, сле-довательно, всего фононных ветвей 84. По этой причине картина спек-тра чрезвычайно сложна. Рассмотрим поведение фононных ветвей с позиции имеющих в In<sub>4</sub>Te<sub>3</sub> под-решеток, воспользовавшись совме-щенными ЗБ решетки и подрешеток, приведенными на рис. 6, и таблицами 1 и 2.

В направлении  $\Sigma$  ( $k_x, 0, 0$ ) фо-нонные ветви оказываются наиболее гладкими. Как видно из рис. 6а гра-ницы ЗБ кристалла и «приближен-ных»  $\Gamma_0^a$  подрешеток Te и In1, про-ходящие через точку X совпадают. Следовательно, фононные ветви с преимущественными вкладами в ко-лебания атомов подрешеток  $\Gamma_0^a$  не

претерпевают свертывания и идентичны с кристаллическими. Для подрешеток



$\Gamma_o^v$  In2 и In3 ЗБ полностью охватывают кристаллическую (рис. 5б). Точка X ЗБ подрешетки попадает в центр ЗБ кристалла, в то время как точка с тем же обозначением X кристалла находится на середине расстояния  $\Gamma$ -X подрешетки (табл. 2). Следовательно, фононные ветви с преимущественным вкладом атомов подрешеток  $\Gamma_o^v$  будут простейшим способом свернуты в ЗБ кристалла, что и обеспечивает относительную гладкость и общую топологию поведения фононных ветвей в направлении  $\Sigma$ .

Другая ситуация реализуется в направлении  $\Delta$  (0,  $k_y$ , 0). Как видно из рис. 6а, в этом направлении граница ЗБ кристалла находится на середине расстояния  $\Gamma$ -Y в подрешетке  $\Gamma_o^a$ , точка Y ЗБ подрешетки попадает в центр ЗБ кристалла (табл. 1). Это обеспечивает «простейший» тип свертывания фононных ветвей, отвечающих подрешеткам  $\Gamma_o^a$ , что проявляется в наличии фононных ветвей с относительно гладким поведением на рис. 10 для направления  $\Delta$ . Для подрешеток  $\Gamma_o^v$  в направлении  $\Delta$  ситуация с перестройкой ЗБ подрешетки в ЗБ кристалла значительно сложнее. Как видно из табл. 2, на это направление переходят как отрезки из плоскости, перпендикулярной ( $k_x, 0, 0$ ) ЗБ подрешетки, так и лежащие за пределами ЗБ кристалла в направлении (0,  $k_y, 0$ ). Таким образом, это направление пересекает одно из ребер ЗБ подрешетки (на рис. 10 представлено пунктирной вертикальной линией). Из рис. 10 видно, что именно на пересечении с этой линией (или вблизи нее) находятся наиболее сложные особенности фононных ветвей.

Еще более запутанная ситуация с перестройкой ЗБ подрешеток в ЗБ кристалла реализуется для направления  $\Lambda$  (0, 0,  $k_z$ ). Детали этой ситуации устанавливаются на основе рис. 3а, б и табл. 1, 2. На рис. 10 мы пунктирными линиями выделили точки на направлении (0, 0,  $k_z$ ), которые пересекаются с ребрами подрешеток  $\Gamma_o^a$  и  $\Gamma_o^v$  - как видно, на пересечении с этими линиями имеются достаточно сложные особенности фононных ветвей. Особенности спектра, расположенные между центром ЗБ и пунктирной линией, обусловлены пересечением фононных ветвей подрешеток, перестроенных из разных граней ЗБ обеих подрешеток, и их расщеплением за счет взаимодействия подрешеток.

В целом сложный характер фононного спектра  $\text{In}_4\text{Te}_3$  может быть объяснен интерференцией фононных волн на внутренних симметричных структурах – подрешетках.

**В заключении** кратко сформулированы основные результаты, полученные в работе, и сделанные на их основе выводы.

## **ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ**

1. Найдены матрицы совместимости векторов элементарных трансляций кристаллической решетки ромбической сингонии и подрешеток высших сингоний.

2. Найдены кристаллы ромбической сингонии с подрешетками разного типа Бравэ. При этом показано, что в кристаллах могут быть подрешетки типа отличного от кристаллического как точные, так и «приближенные».

3. Для ряда кристаллов ромбической сингонии построены трансляционно-совместимые МДВ и первые ЗБ и составлены таблицы перестройки неприводимых представлений звезд волновых векторов для всех сочетаний данных типов Бравэ кристаллической решетки и подрешетки.

4. В тех направлениях, где границы ЗБ подрешетки и кристалла совпадают, ветви электронных и колебательных спектров с преимущественными вкладами от состояний атомов данной подрешетки не претерпевают свертывания и идентичны с кристаллическими.

5. В тех направлениях, на которых граница ЗБ кристалла приходится на середину соответствующей линии ЗБ подрешетки, ветви электронных и колебательных спектров с преимущественным вкладом атомов данной подрешетки будут простейшим образом свернуты в ЗБ кристалла, что и обеспечивает относительную гладкость и общую топологию поведения зонных или фононных ветвей.

6. В направлениях, для которых граница ЗБ кристалла лежит в общей точке соответствующей линии ЗБ подрешетки, ветви электронных и колебательных спектров с преимущественным вкладом атомов данной подрешетки перестраиваются в ЗБ кристалла из различных направлений ЗБ подрешетки, что приводит к достаточно сложной картине спектров.

7. Указанные в выводах 4-6 особенности спектров выявлены на примере фононного спектра  $\text{In}_4\text{Te}_3$ , зонных спектров  $\text{In}_4\text{Se}_3$ ,  $\text{MgGeN}_2$ ,  $\text{MgSiN}_2$ ,  $\text{CaTiO}_3$ .

8. Предсказаны некоторые топологические особенности колебательных спектров в кристаллах  $\text{CaTiO}_3$ ,  $\text{PbF}_2$ ,  $\text{InPS}_4$ ,  $\text{FeC}_2$ , для которых не имеется численных расчетов.

#### Список цитируемой литературы

1. Losovyj, Ya. B. The anisotropic band structure of layered  $\text{In}_4\text{Se}_3$  (001) / Ya. B. Losovyj, L. Makinistian, E. A. Albanesi, A. G. Petukhov, Jing Liu, P. Galii, O. R. Dveriy, P. A. Dowben // *Journal of applied physics*. – 2008. – V. 104. – Pp. 083713-1-083713-7.
2. Makinistian, L. Ab initio calculations and ellipsometry measurements of the optical properties of the layered semiconductor  $\text{In}_4\text{Se}_3$  / L. Makinistian, E. A. Albanesi, N. V. Gonzalez Lemus, A. G. Petukhov, D. Schmidt, E. Schubert, Ya. B. Losovyj, P. Galii, P. A. Dowben // *Phys. Rev. B*. – 2010. – V. 81, № 7. – Pp. 075217-1–075217-8.
3. Берча, Д. М. Динамические параметры и фононный спектр кристалла  $\text{In}_4\text{Te}_3$  / Д. М. Берча, К. З. Руцанский // *Физика твердого тела*. – 1999. – Т. 41, вып. 10. – С. 1843-1847.

## Основные публикации по теме диссертации

### *Статьи журналов списка ВАК:*

1. Николаева, Е.В. Трансляционная совместимость высокосимметричных подрешеток Бравэ в кристаллах ромбической сингонии / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Известия вузов. Физика. – 2008 – Т. 51, № 12. – С. 99 (Деп. в ВИНТИ 28.11.2008, № 915-В2008).
2. Николаева, Е.В. Подрешетки в кристаллах со структурой  $\text{In}_4\text{Te}_3$  и особенности их фононных спектров / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Известия вузов. Физика. – 2010. – Т.53, № 8. С. 3-8.
3. Николаева, Е.В. Высокосимметричные подрешетки в кристаллических модификациях  $\text{CaTiO}_3$  и особенности их электронных и колебательных спектров / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Известия вузов. Физика. 2010. – Т. 53, № 12. – С. 104 (Деп. в ВИНТИ 30.08.2010, № 501-В2010).
4. Басалаев, Ю.М. Зонная структура и ее генезис из состояний подрешеток в орторомбическом  $\text{MgGeN}_2$  / Ю.М. Басалаев, П.В. Демушин, Е.В. Николаева, А.В. Силинин // Вестник Московского университета. Серия 3. Астрономия. Физика. – 2011. – № 1. – С. 39-43.

### *Статьи в сборниках трудов*

1. Николаева, Е.В. Представление сложных кристаллических структур простого ромбического типа Бравэ в виде совокупности подрешеток разного типа Бравэ / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2008. – Т. 5, № 1. – С. 35-40.
2. Николаева, Е.В. Зоны Бриллюэна кристаллов и подрешеток для трех структурных модификаций  $\text{CaTiO}_3$  / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Актуальные проблемы физики твердого тела: сб. докл. Междунар. науч. конф., 20-23 окт. 2009 г., Минск. В 3 т. Т. 2. – Минск: Вараксин А.Н., 2009. – С. 307-309.
3. Николаева, Е.В. Высокосимметричные подрешетки в  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазах кристаллов  $\text{PbF}_2$  и их влияние на спектры элементарных возбуждений / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2010. – Т. 6, № 2. – С. 48-54
4. Николаева, Е.В. Подрешетки в кристаллах со структурой кубического перовскита и особенности их фононных спектров / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Вестник КемГУ. – 2010. – Т. 42, № 2. – С. 83-87.
5. Николаева, Е.В. Зоны Бриллюэна ромбической фазы кристалла  $\text{SiS}_2$  и его подрешеток / Е.В. Николаева, А.В. Силинин // Образование наука, инновации – вклад молодых исследователей: материалы V (XXXVII) Междунар. науч.- практич. конф., Кемеровский государственный университет. – Кемерово: ООО «ИНТ». –2010. – Вып. 11. Т. 2. – С. 395-397.

6. Николаева, Е.В. Пространственное размещение структурных подрешеток в кристаллах со структурой  $\text{AlPS}_4$  / Е.В. Николаева, А.В. Силинин // Физика твердого тела: Сборник материалов XI Российской научной студенческой конференции (13-15 мая 2008 г., Томск). – Томск: Томский государственный университет, 2008. – С. 196-198.
7. Николаева, Е.В. Подрешетки в кристаллах  $\text{MgGeN}_2$  и особенности их спектров элементарных возбуждений / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Физика твердого тела: Сборник материалов XII Российской научной студенческой конференции (12-14 мая 2010г., Томск). – Томск: Томский государственный университет, 2010. – С. 183-185.
8. Nikolaeva, E.V. Theory of electronic structures. Sublattices in  $\text{MgSiN}_2$  crystals and special features of their elementary excitation spectra / E.V. Nikolaeva, A.S. Poplavnoi, A.V. Silinin // 23 General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society Conference Digest (30-03.09.2010, Warsaw, Poland). – P.48.
9. Николаева, Е.В. Подрешетки в кристаллах  $\text{MgSiN}_2$  и особенности их спектров элементарных возбуждений / Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин // Сборник тезисов, материалы Шестнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-16, Волгоград): материалы конференции, тезисы докладов. Екатеринбург, Волгоград: Издательство АСФ России, 2010. – С 135-136.