Лекция №2.

Раздел 1. Особенности строения вещества

Тема: Строение кристаллов

- 1. Кристаллическая решетка и кристаллические плоскости.
- 2. Решетки Бравэ. Индексы Миллера.

Строение кристаллов

- ***Условием термодинамической устойчивости любого кристаллического состояния при данной температуре является минимум свободной энергии***

- ***Кристаллическая структура описывается в пространстве с помощью периодически повторяющейся элементарной части кристаллической решетки, называемой элементарной ячейкой, с каждой точкой которой связана некоторая группа атомов, называемая базисом.***

Симметрия. Элементы симметрии.

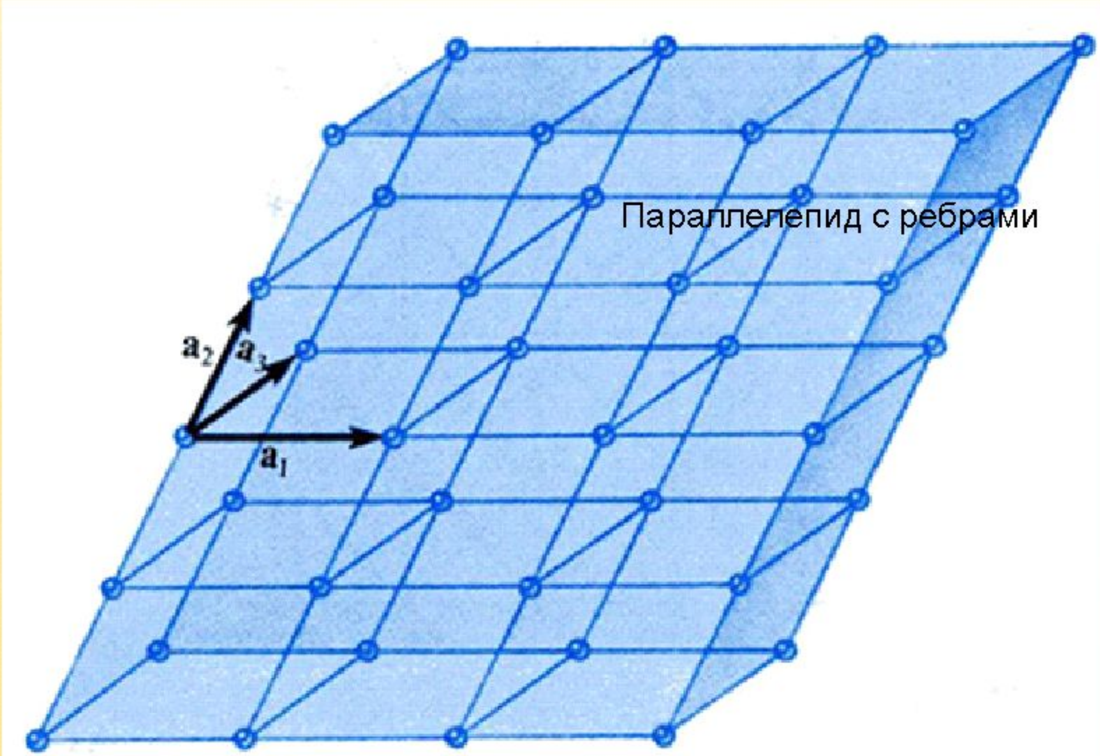
- ***Симметричной фигурой*** **называется такая фигура, в которой отдельные части мысленно могут быть совмещены друг с другом посредством симметричного преобразования.**
- ***Точечную группу (класс) симметрии кристаллической решетки можно определить как совокупность операций симметрии, т.е. симметричных преобразований, осуществленных относительно какой-нибудь точки решетки, в результате которых решетка совмещается сама с собой.***

- **Если фигуру повернуть на 180° вокруг линии, перпендикулярной чертежу и проходящей через центр фигуры, то нижняя ее часть совместится с верхней и наоборот. Эта линия называется осью симметрии.**
- **Порядком оси называется число совмещений фигуры при повороте на 360°.**

Параллелепид с ребрами

Решетка Браве

$$\vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$



$$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$$

вместе с атомами в его вершинах называется элементарной ячейкой кристаллической решетки

- Если заменить структурные элементы кристалла точками, то получим периодически расположенные в пространстве узлы, образующие *кристаллическую решетку*

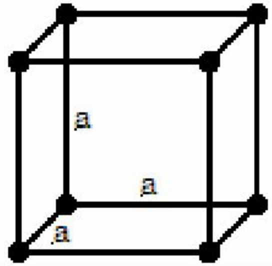
- Вектора $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ в общем случае начинаются в одном из узлов и заканчиваются на соседних к нему узлах

- В 1848 году О.Бравэ показал, что все многообразие кристаллических решеток кристаллов можно описать с помощью *7 кристаллографических классов (сингоний)* и *14 типов решеток (решетки Бравэ)* если следовать следующим правилам при выборе векторов

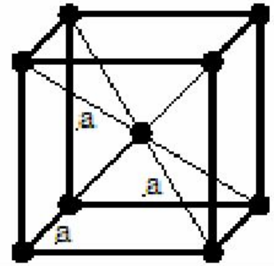
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ (в порядке приоритетности условий)

1. Построенный на этих векторах параллелепипед *(элементарная ячейка кристалла)* наилучшим образом отражает симметрию кристалла
2. Элементарная ячейка имеет максимально возможное число прямых углов
3. Элементарная ячейка имеет наименьший объем после выполнения первых двух условий

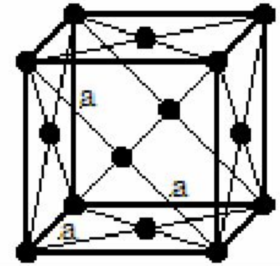
РЕШЕТКИ БРАВЭ



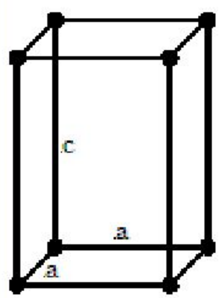
Простая кубическая



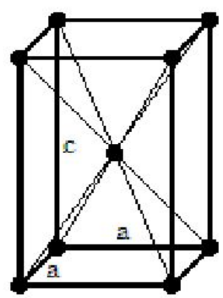
Кубическая Объемоцентри-рованная



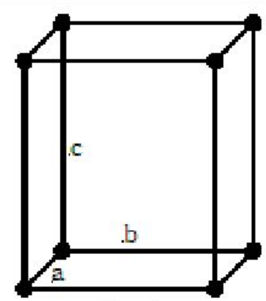
Кубическая Гранецентри-рованная



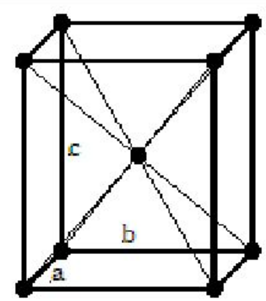
Простая Тетра-гональная



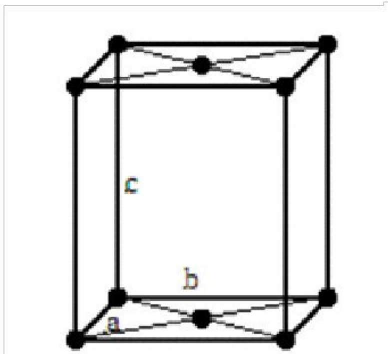
Объемоцентри-рованная тетра гональная



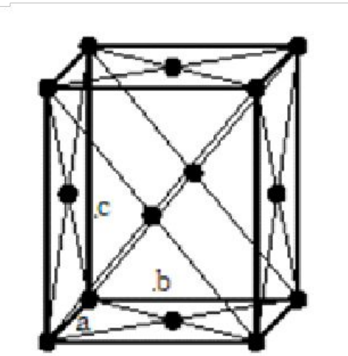
Простая Ортором-бическая



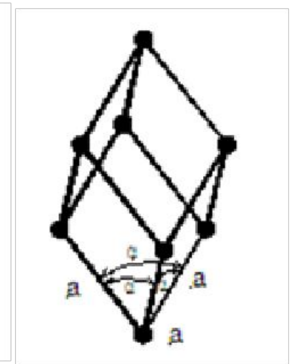
Ортором-бическая Объемоцент-рированная



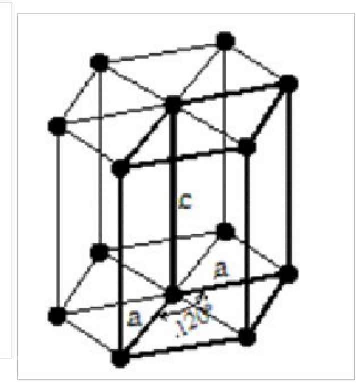
Орторомбическая базоцентрированная



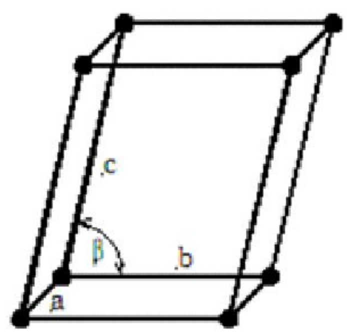
Орторомбическая гранецентрированная



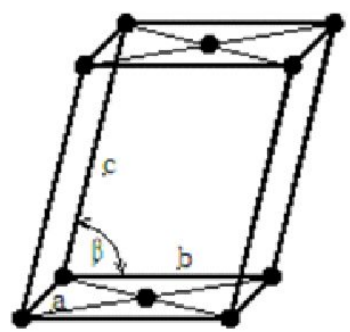
Ромбоэдрическая



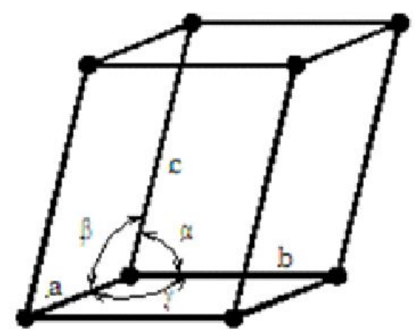
Гексагональная



Простая моноклинная



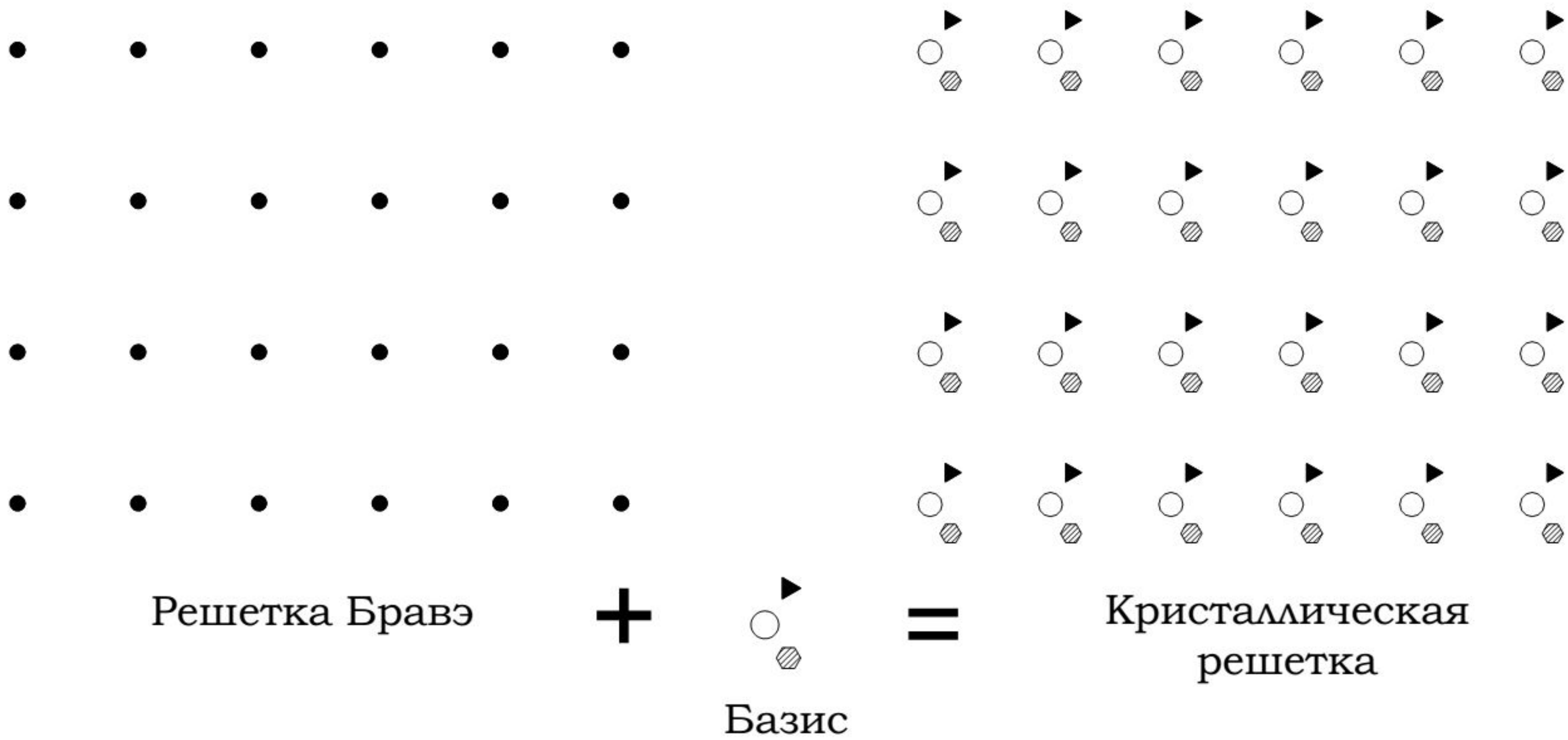
Моноклинная базоцентрированная



Триклинная

- ***Решетка Бравэ*** –это бесконечная периодическая структура, образованная дискретными точками и имеющая абсолютно одинаковый пространственный порядок и ориентацию независимо от того, какую точку мы принимаем за исходную.
- Число ближайших соседей любой точки решетки Бравэ называется ***координационным числом***.

Решетка Бравэ и кристаллическая решетка



Сингонии кристаллов

- Форма элементарной ячейки (соотношение между длинами векторов трансляций и углы между ними) определяет сингонию кристаллов. Различают следующие типы сингоний:

Кубическая	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90°$
Тетрагональная	$a=b\neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90°$
Ромбическая	$a\neq b\neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90°$
Гексагональная	$a=b\neq c$	$\alpha=\beta=90°$; $\gamma=120°$
Моноклинная	$a\neq b\neq c$	$\alpha=\gamma=90°\neq\beta$
Триклинная	$a\neq b\neq c$	$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90°$

СИММЕТРИИ ПРИМИТИВНЫХ РЕШЕТОК

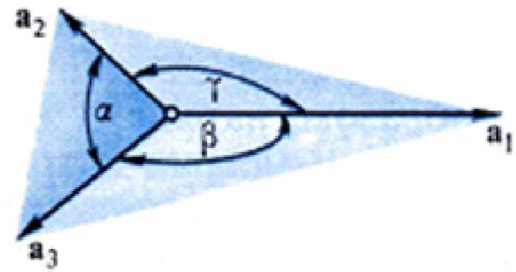
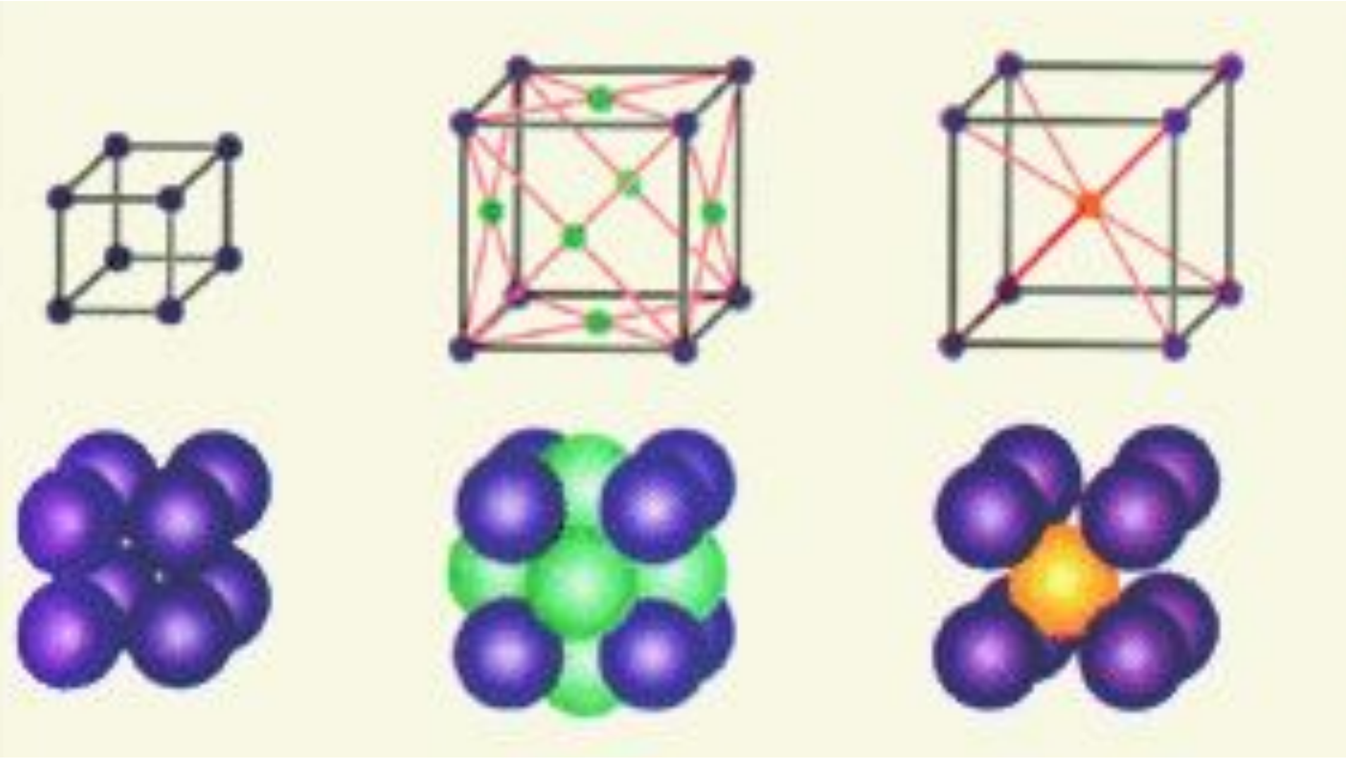


Таблица 5. **Характеристики кристаллических систем**

Кристаллическая система	Соотношение ребер элементарной ячейки	Соотношение между углами в элементарной ячейке
Триклинная	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Моноклинная	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
Ромбическая	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тетрагональная	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Кубическая	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ромбоэдрическая	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma$, но $< 120^\circ$ и $\neq 90^\circ$
Гексагональная	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$

- **Кубическая – 3** решетки Бравэ:
  - Простая кубическая;
  - Объемноцентрированная
  - Гранецентрированная
- **Тетрагональная – 2** решетки Бравэ
  - Простая тетрагональная
  - Центрированная тетрагональная
- **Ромбическая – 4** решетки Бравэ
  - Простая ромбоэдрическая
  - Базоцентрированная ромбическая
  - Объемноцентрированная ромбическая
  - Гранецентрированная ромбическая
- **Моноклинная – 2** решетки Бравэ
  - Простая моноклинная
  - Центрированная моноклинная
- **Триклинная - 1** решетка Бравэ
- **Тригональная - 1** решетка Бравэ
- **Гексагональная - 1** решетка Бравэ

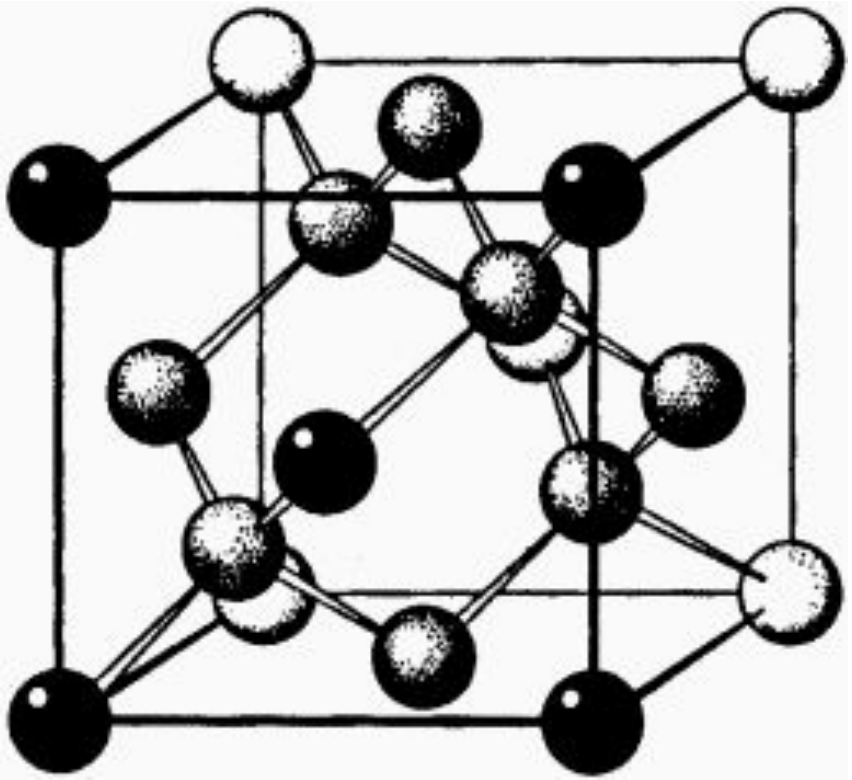
Кубическая сингония



Координаты узлов кубических ячеек

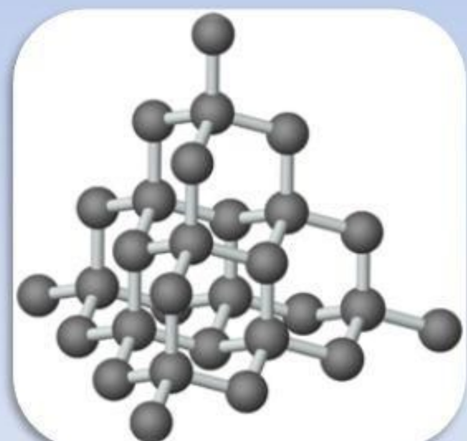
ПК	**[0,0,0]**
ОЦК	**[0,0,0], [1/2,1/2,1/2]**
ГЦК	**[0,0,0],[1/2,1/2, 0], [1/2, 0,1/2], [0,1/2,1/2]**

Кристаллическая решетка типа алмаз

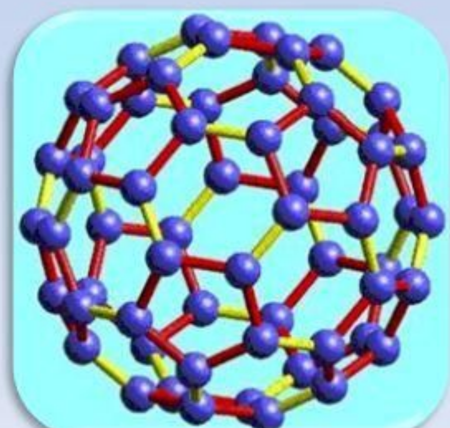


Аллотропные модификации углерода имеют атомную кристаллическую решетку.
Их строение

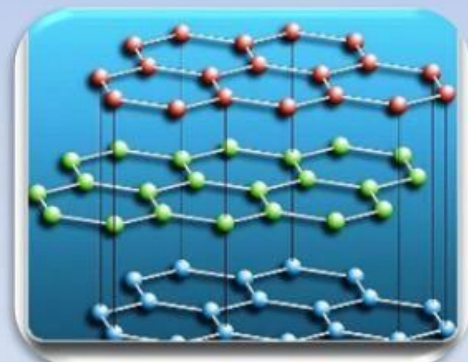
Алмаз



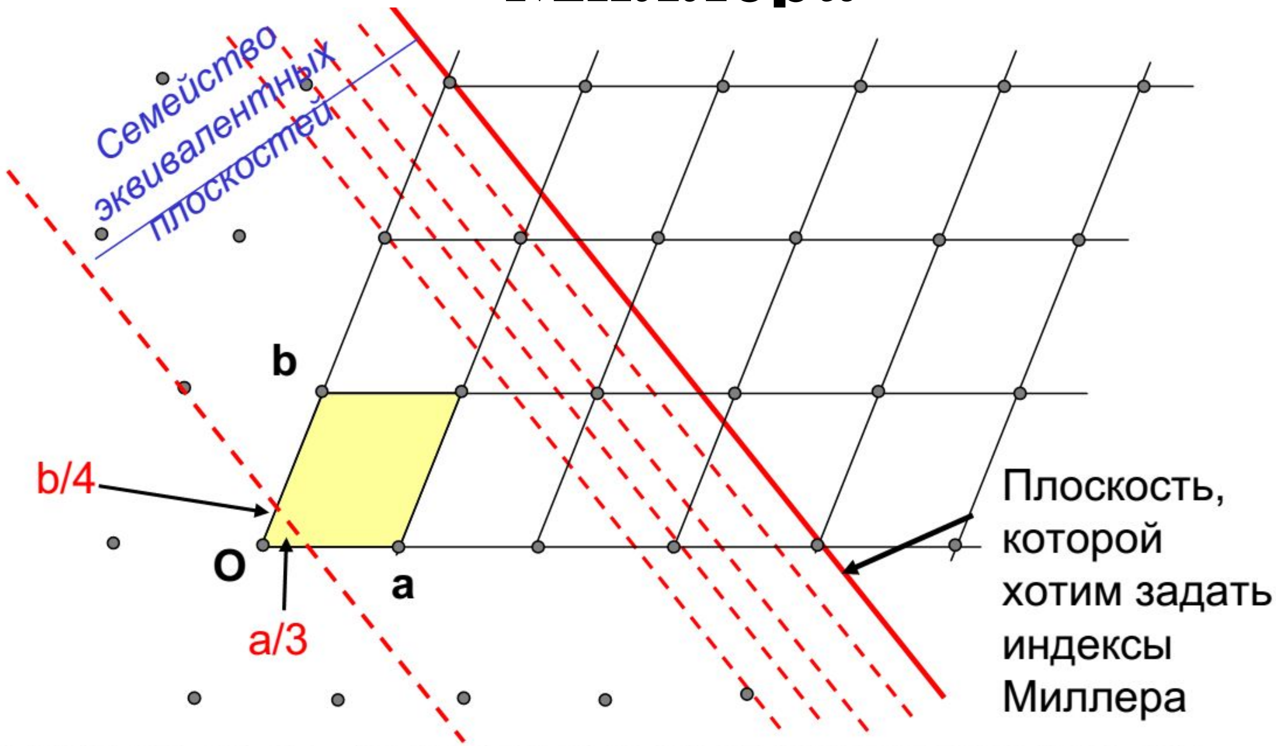
Фуллерен



Графит



Кристаллические плоскости и индексы Миллера



- **Кристаллографическое направление** – это направление прямой, проходящей через два узла решетки.
- Если один из узлов, через который проведена прямая, принять за начало координат, то положение ближайшего к нему узла на прямой, выраженное через числа ***m,n,p***, полностью характеризует положение прямой в кристалле. Координаты этого узла, приведенные к целым числам, заключают в квадратные скобки [***mnp***] и называют **символом направления** (ряда) в решетке, а сами индексы ***m,n,p*** – **индексами Миллера** для ряда.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

Плоскости обычно обозначаются как (h, k, l)

Семейства эквивалентных плоскостей $\{h, k, l\}$

Направления в кристаллической решетке $[h, k, l]$

Узлы решетки x, y, z

Отметим, что $[h, k, l]$ направление не обязательно перпендикулярно к (h, k, l) плоскости

Индексы Миллера, направления и узлы могут задаваться отрицательными значениями, напр. $(1, \bar{1}, \bar{1})$

Они могут также обладать множественностью, напр. для кубического кристалла $\{1, 0, 0\}$ имеет множественность 6:

$(1,0,0)$ $(\bar{1},0,0)$

$(0,1,0)$ $(0,\bar{1},0)$

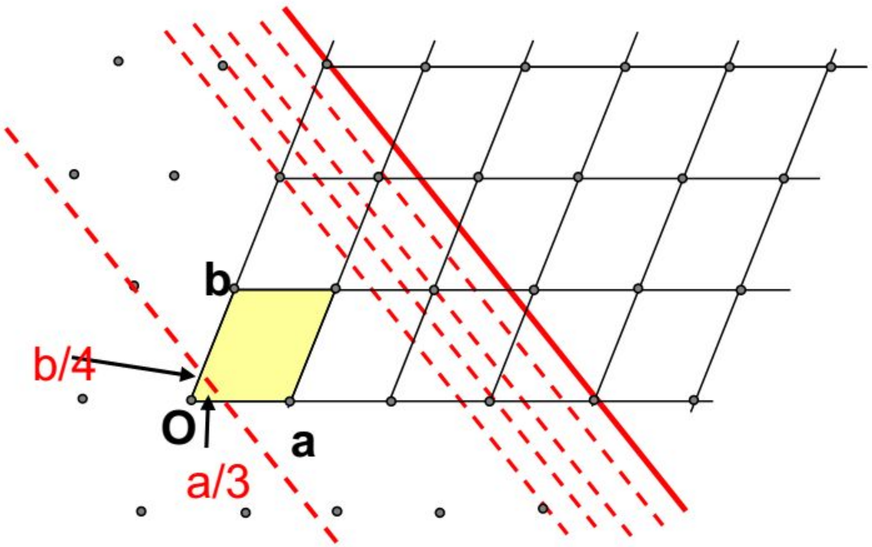
$(0,0,1)$ $(0,0,\bar{1})$

Правила вычисления индексов Миллера

1. Определить координаты (x, y, z), пересечения плоскости с кристаллографическими осями в единицах параметров элементарной ячейки (a,b,c).

2. Рассчитать обратные значения этих координат: (1/x, 1/y, 1/z)

3. Умножить значения на наименьшее целое кратное к знаменателям: (h, k, l)



4. (h, k, l) – индексы Миллера, определяющие набор эквивалентных плоскостей, отсекающих на координатных осях (a,b,c) отрезки длиной пропорциональной 1/h, 1/k and 1/l.

Пример для 2-мерного случая

x=4, y=3 ⟶ 1/4,1/3

Индексы Миллера (3,4)

Пример для 3-мерного случая

x=5, y=3, z=1 ⟶ 1/5,1/3,1

Индексы Миллера (3,5,15)

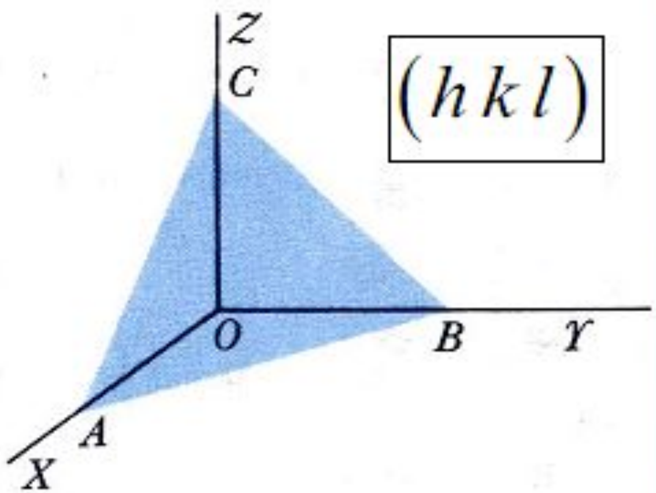
ИНДЕКСЫ МИЛЛЕРА

Уравнение плоскости в прямолинейных (не обязательно прямоугольных) координатах:

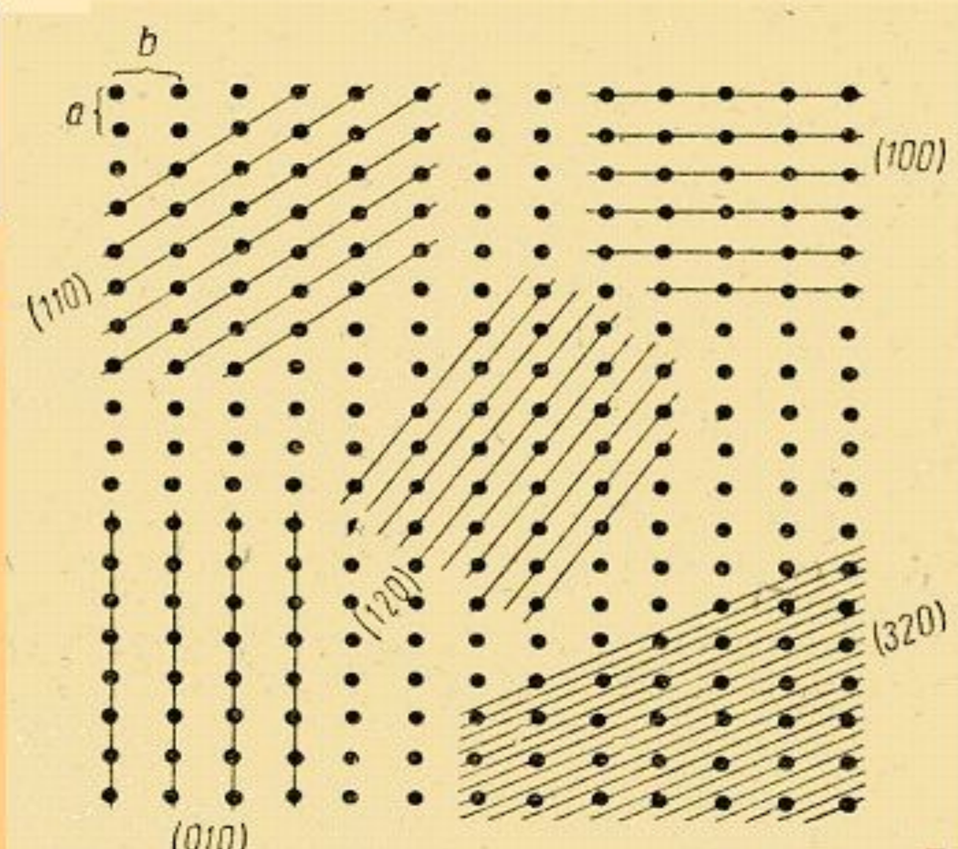
$$\frac{x}{|OA|}+\frac{y}{|OB|}+\frac{z}{|OC|}=1$$

$$hx+ky+lz=D$$

$$(h\,k\,l)$$



$$[h\,k\,l]$$ **- перпендикуляр к плоскости**



Индексы Миллера

- 1) найдем точки, в которых данная плоскость пересекает основные координатные оси, и запишем их координаты в единицах постоянных решетки;
- 2) возьмем обратные значения полученных чисел и приведем их к наименьшему целому, кратному каждому из чисел.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПЛОСКОСТИ