

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.*

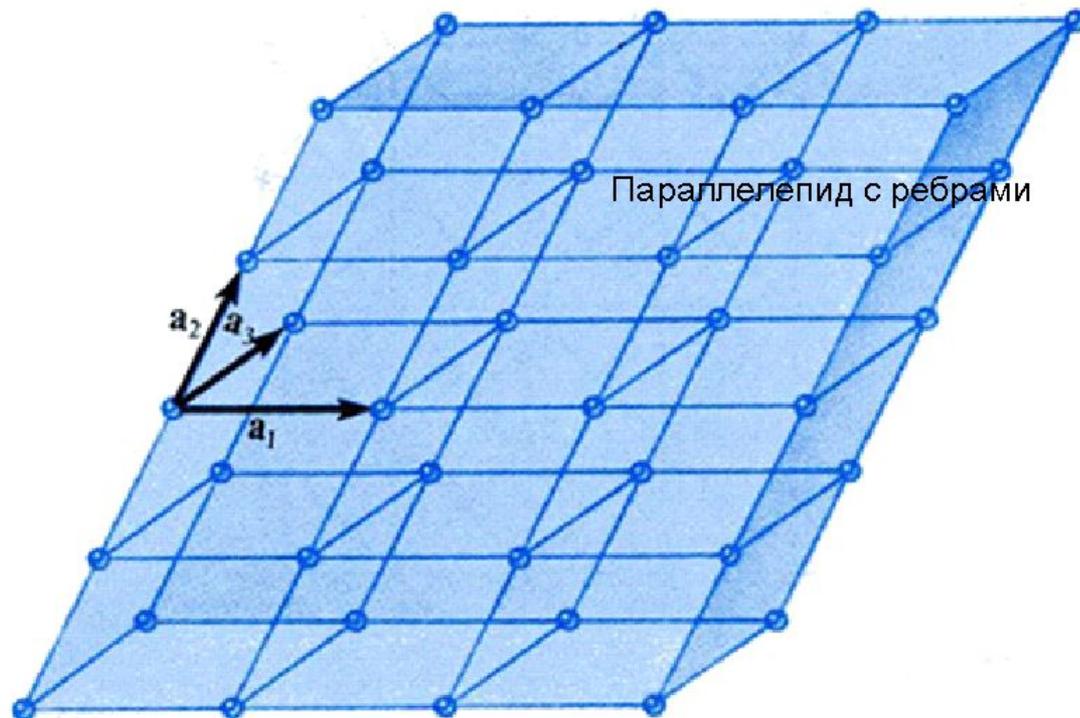
Симметрия. Элементы симметрии.

- 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° .

Решетка Браве

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



Параллелепипед с ребрами

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

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*

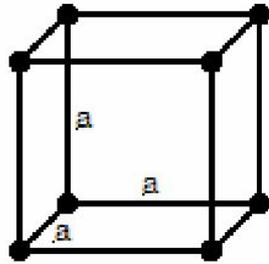
- Вектора $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ в общем случае начинаются в одном из узлов и заканчиваются на соседних к нему узлах

- 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

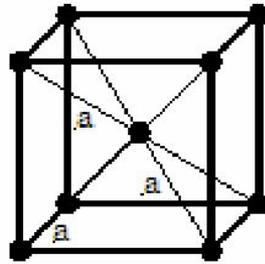
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ (в порядке приоритетности условий)

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

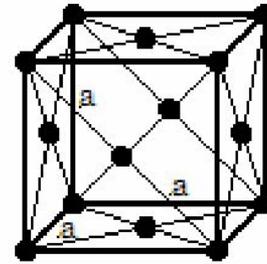
РЕШЕТКИ БРАВЭ



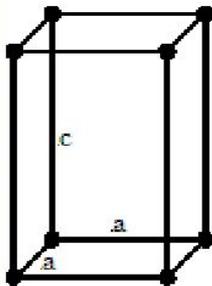
*Простая
кубическая*



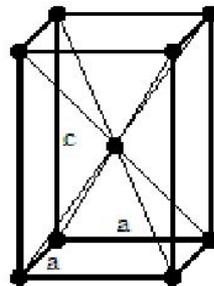
*Кубическая
Объемоцентри-
рованная*



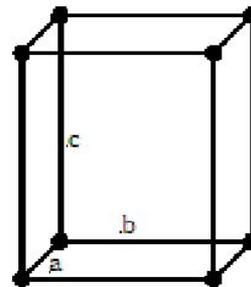
*Кубическая
Гранецентри-
рованная*



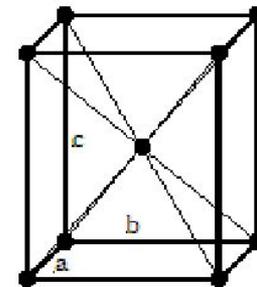
*Простая
Тетра-
гональная*



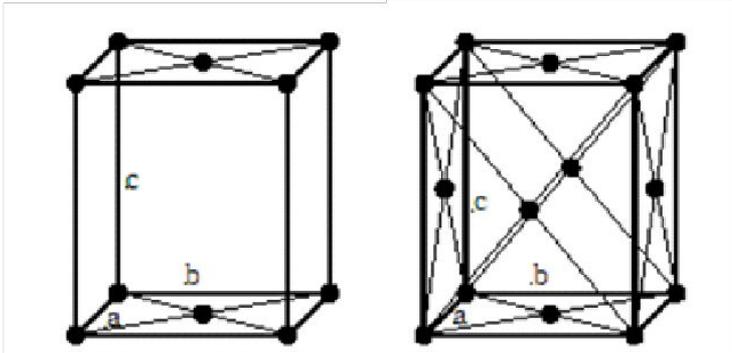
*Объемоцентри-
рованная тетра-
гональная*



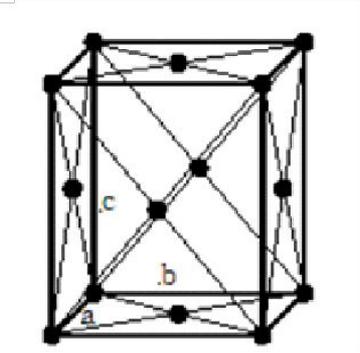
*Простая
Ортором-
бическая*



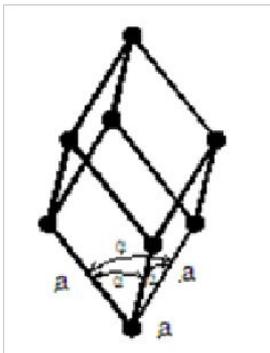
*Ортором-
бическая
Объемоцент-
рированная*



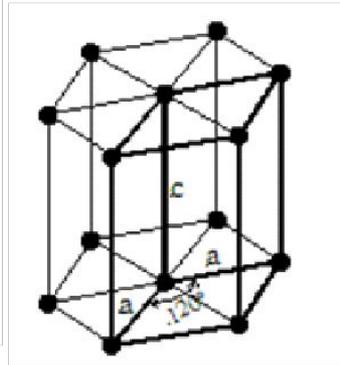
Орторомбическая
базоцентрированная



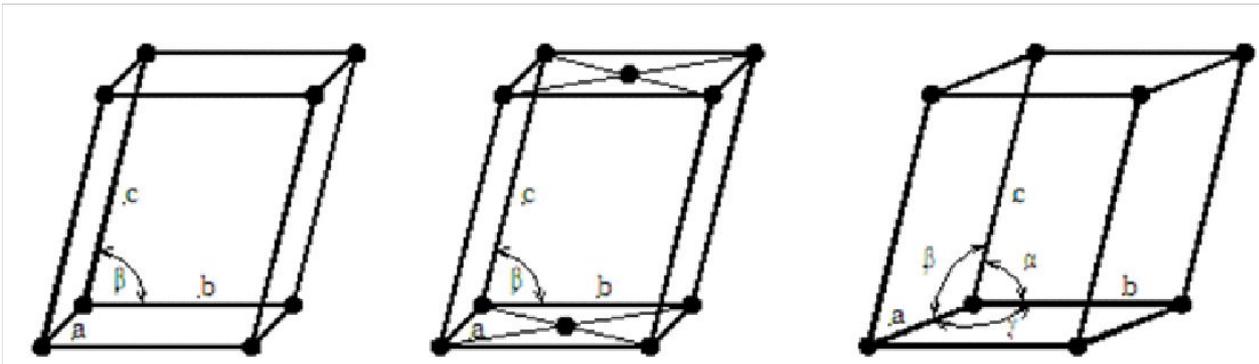
Орторомбическая
гранецентрированная



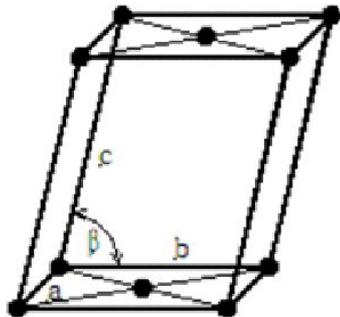
Ромбоэдрическая



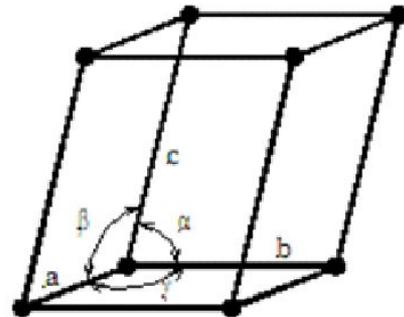
Гексагональная



Простая
моноклинная



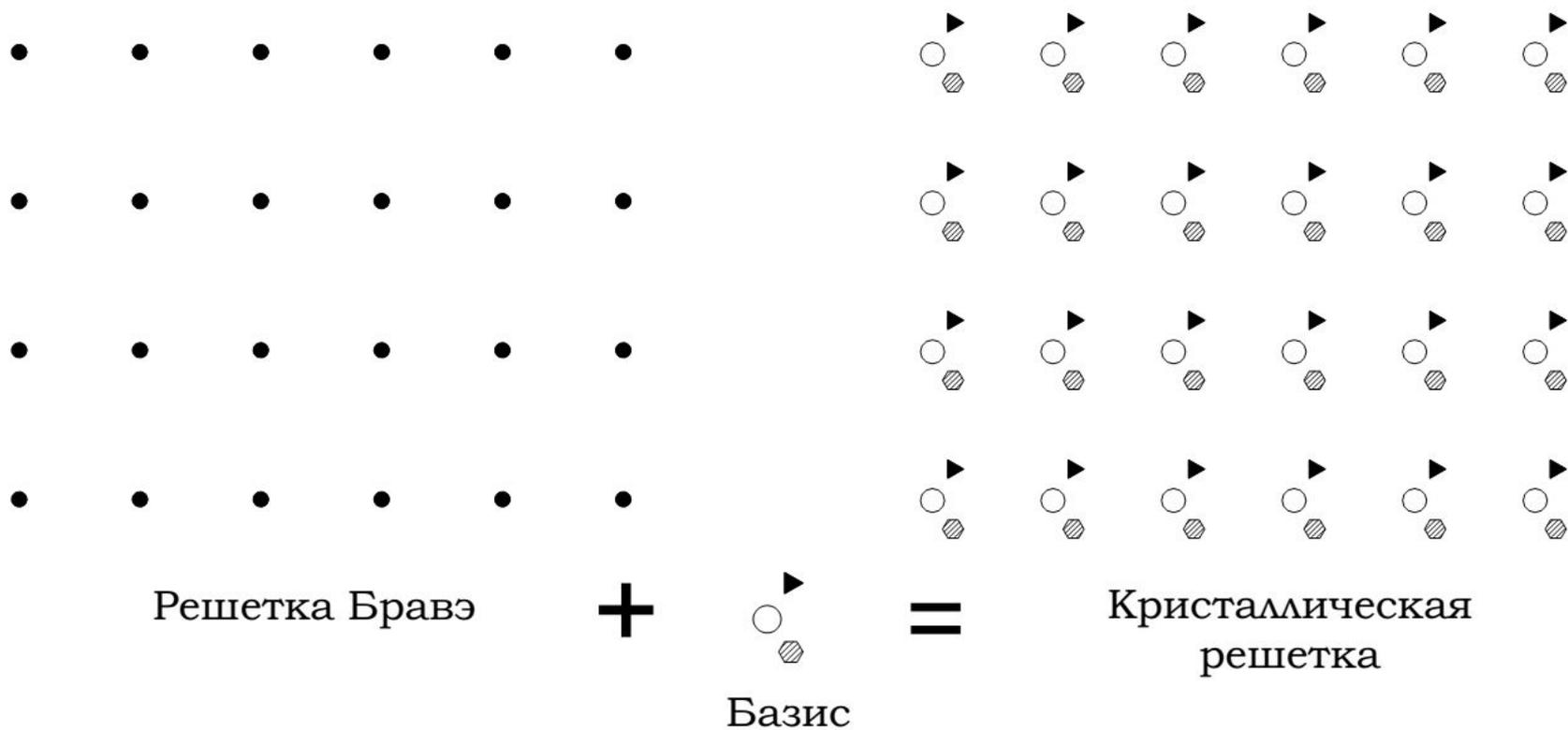
Моноклинная
базоцентрированная



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

СИММЕТРИИ ПРИМИТИВНЫХ РЕШЕТОК

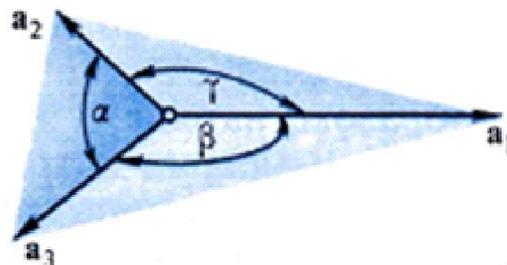
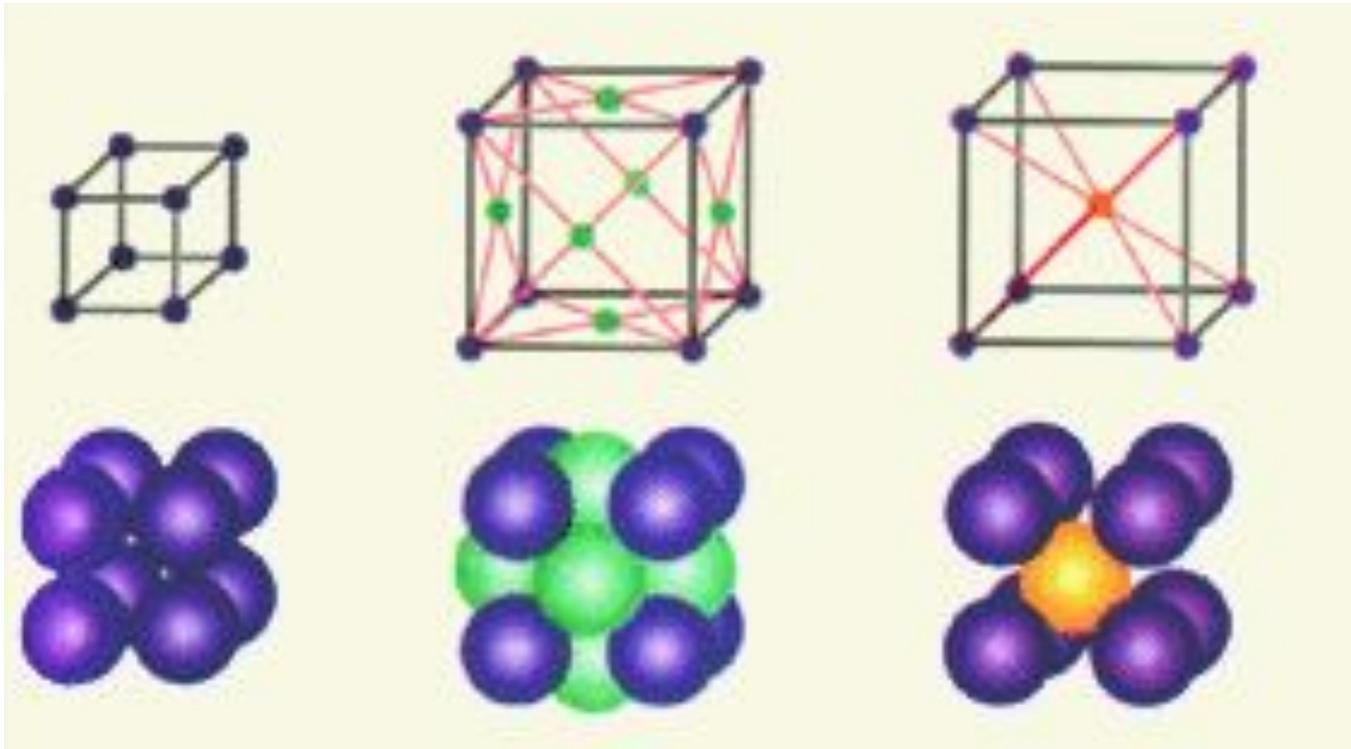


Таблица 5. Характеристики кристаллических систем

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

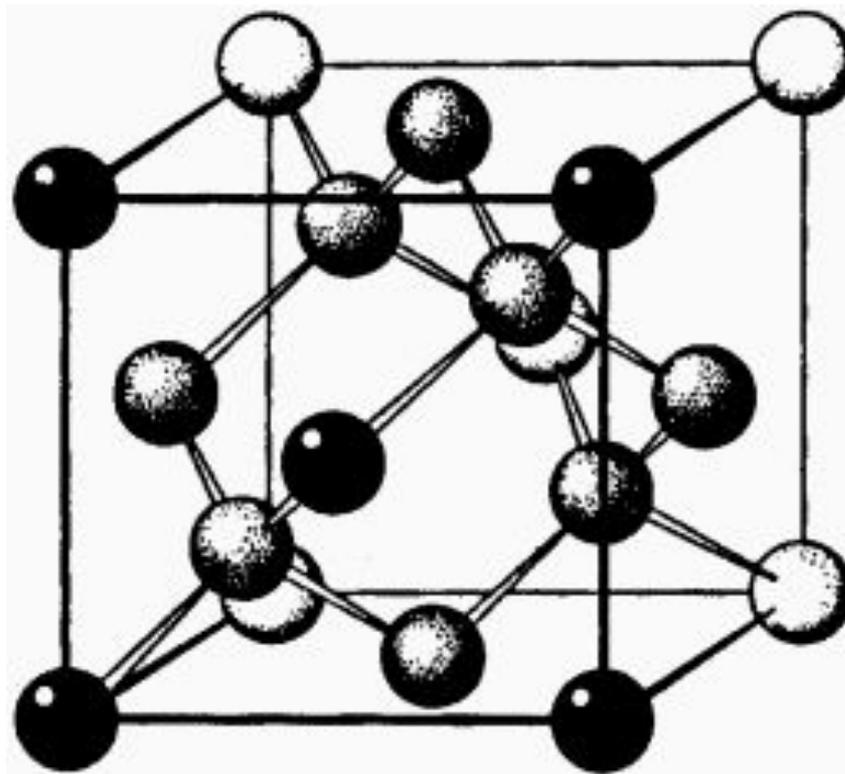
Кубическая сингония



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

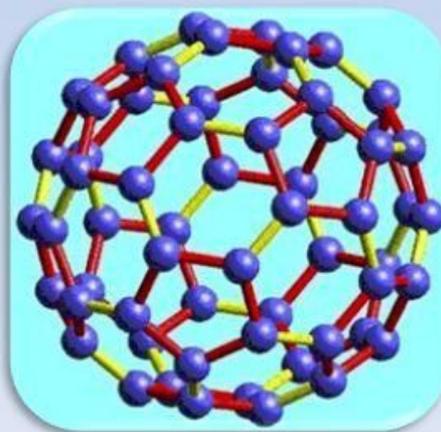


*Аллотропные модификации углерода
имеют атомную кристаллическую
решетку.
Их строение*

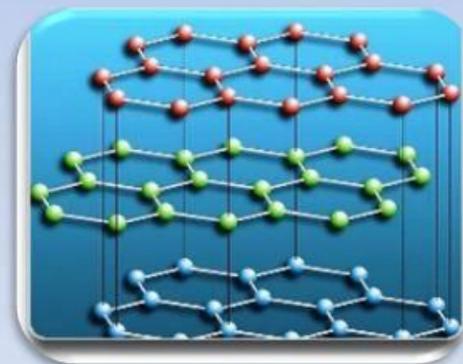
Алмаз



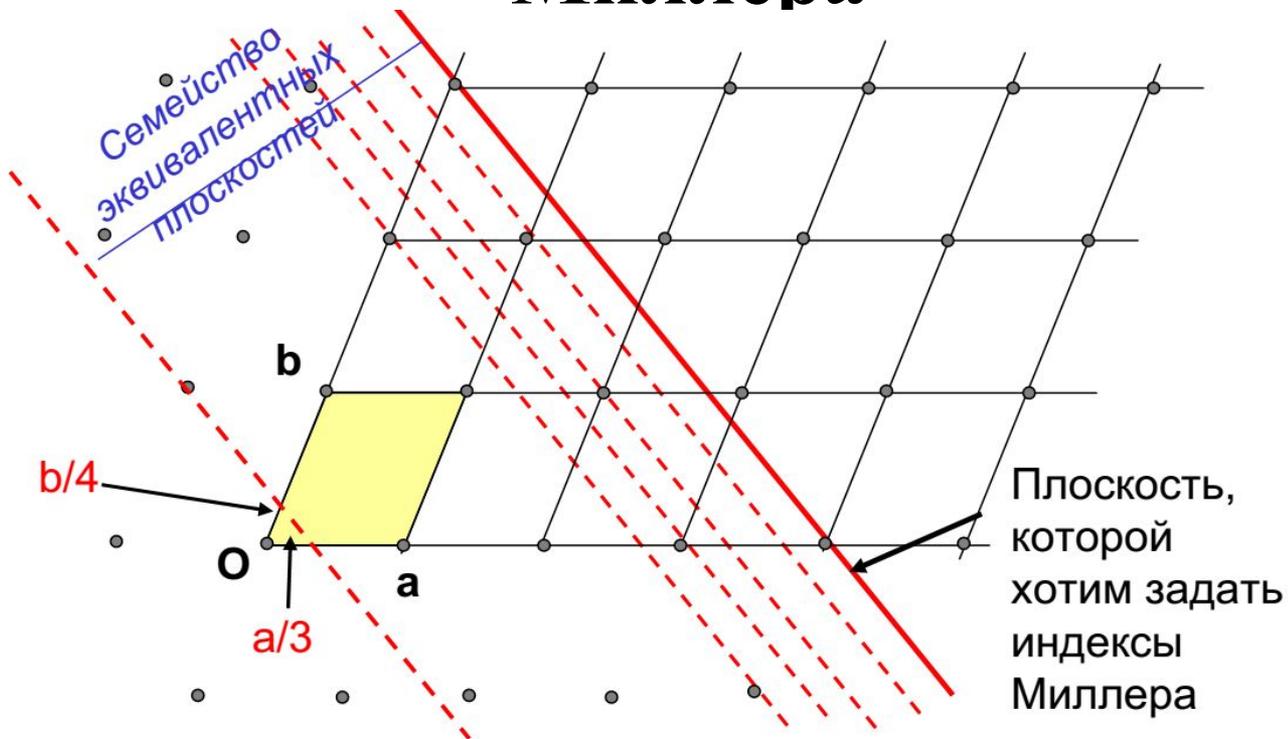
Фуллерен



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 t, n, p , полностью характеризует положение прямой в кристалле. Координаты этого узла, приведенные к целым числам, заключают в квадратные скобки $[tnp]$ и называют **символом направления** (ряда) в решетке, а сами индексы t, 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:

$$\begin{array}{ll} (1, 0, 0) & (\bar{1}, 0, 0) \\ (0, 1, 0) & (0, \bar{1}, 0) \\ (0, 0, 1) & (0, 0, \bar{1}) \end{array}$$

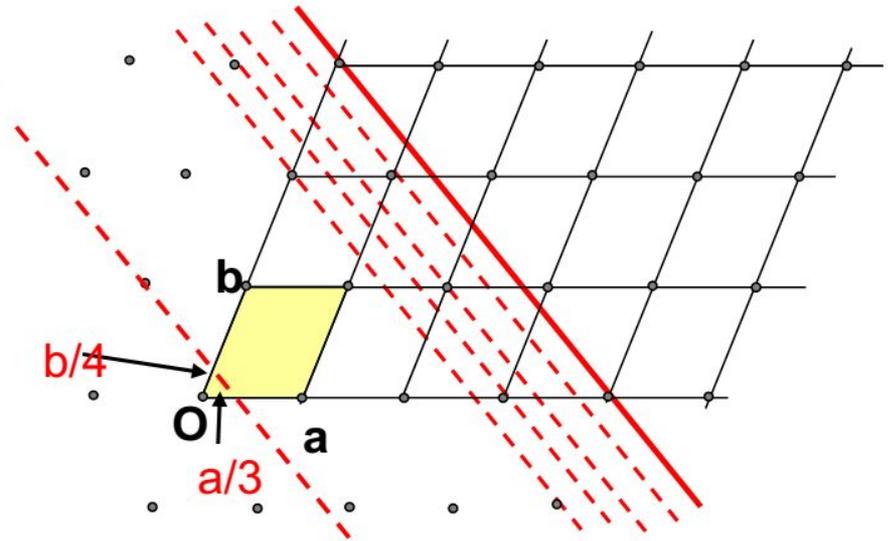
Правила вычисления индексов Миллера

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

$x=4, y=3 \longrightarrow 1/4, 1/3$

Индексы Миллера $(3, 4)$

Пример для 3-мерного случая

$x=5, y=3, z=1 \longrightarrow 1/5, 1/3, 1$

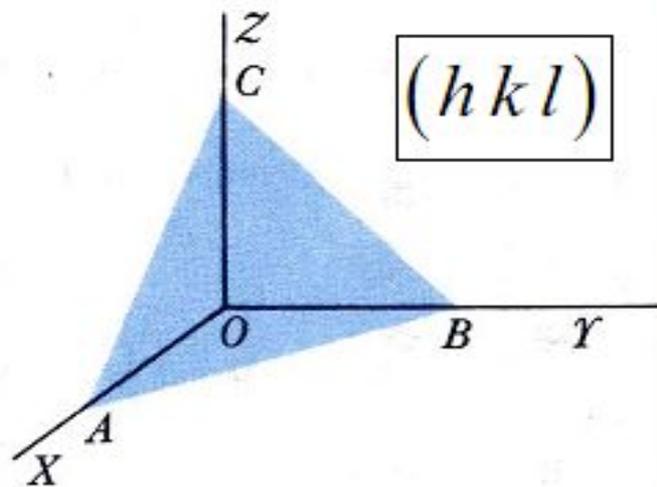
Индексы Миллера $(3, 5, 15)$

ИНДЕКСЫ МИЛЛЕРА

Уравнение плоскости в
прямолинейных
(не обязательно прямоугольных)
координатах:

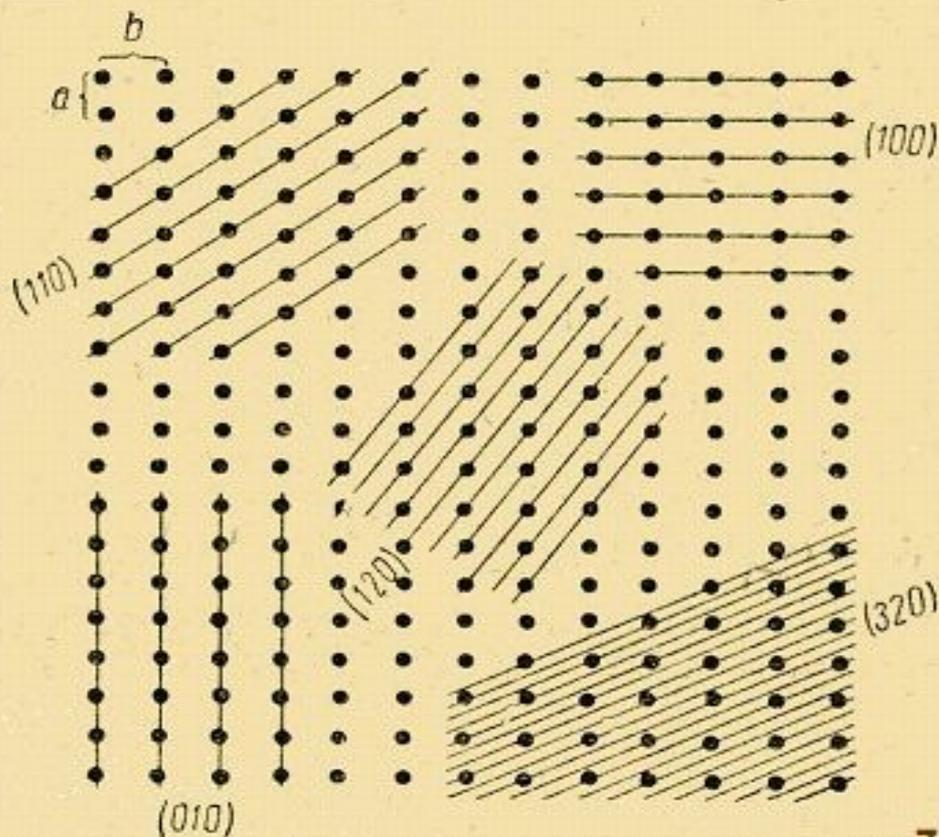
$$\frac{x}{|OA|} + \frac{y}{|OB|} + \frac{z}{|OC|} = 1$$

$$hx + ky + lz = D$$



$[hkl]$

- 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

