

## 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.*

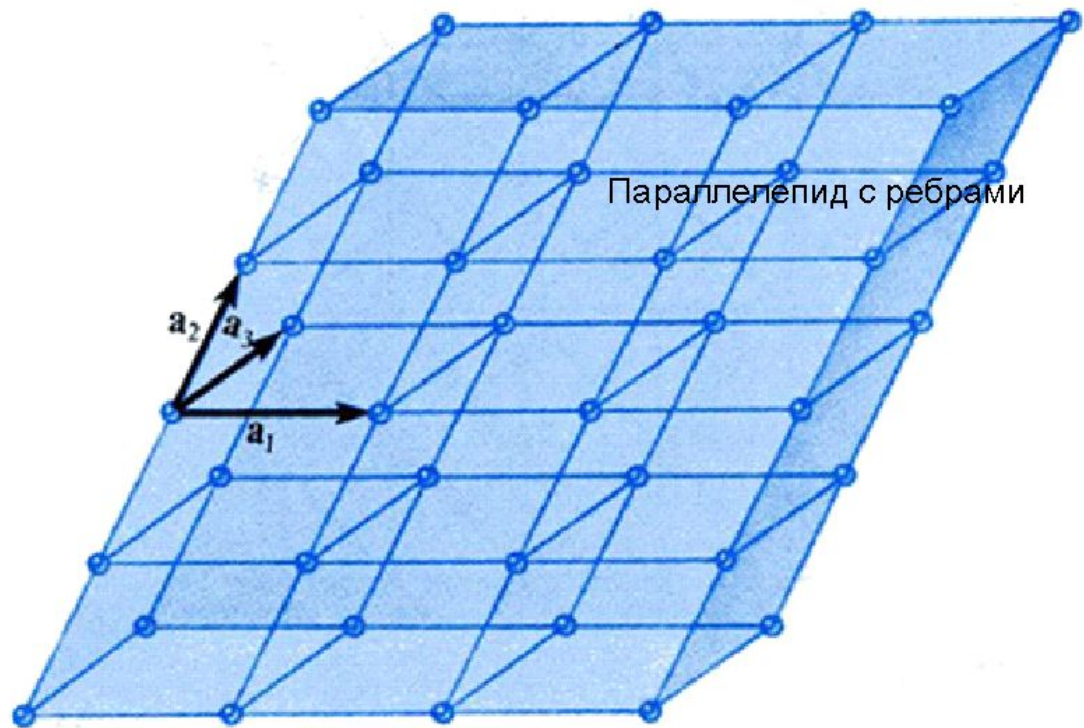
# Симметрия. Элементы симметрии.

- 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  $180^\circ$  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  $360^\circ$ .

## 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*

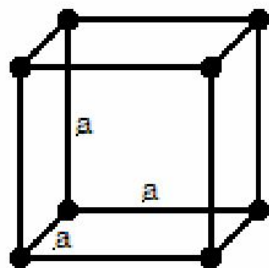
- Вектора  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  в общем случае начинаются в одном из узлов и заканчиваются на соседних к нему узлах

- 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

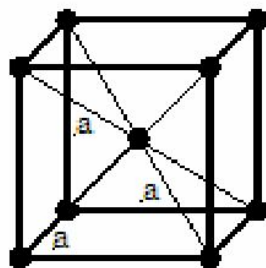
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  (в порядке приоритетности условий)

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

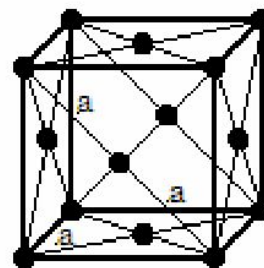
# РЕШЕТКИ БРАВЭ



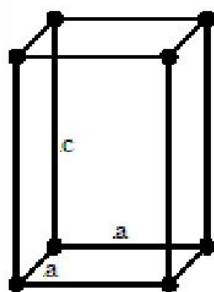
*Простая  
кубическая*



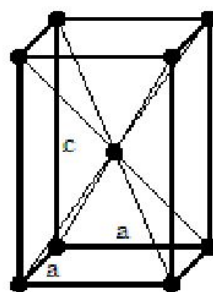
*Кубическая  
Объемоцентри-  
рованная*



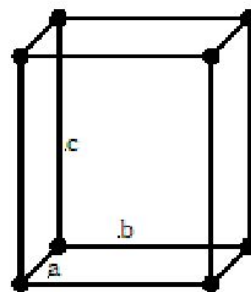
*Кубическая  
Гранецентри-  
рованная*



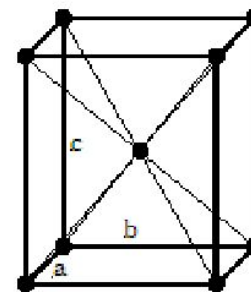
*Простая  
Тетра-  
гональная*



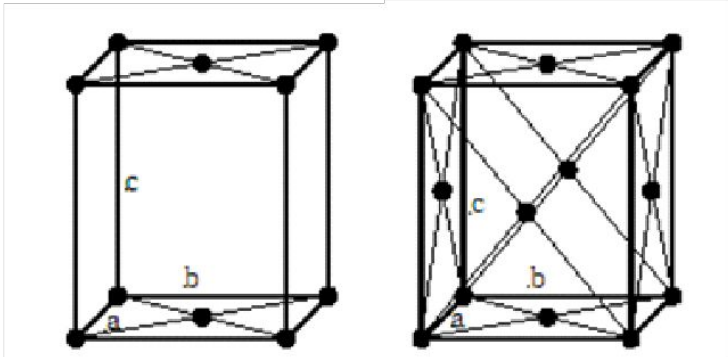
*Объемоцентри-  
рованная тетра-  
гональная*



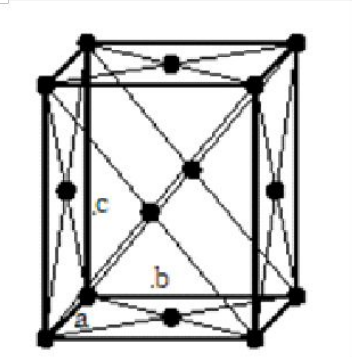
*Простая  
Ортором-  
бическая*



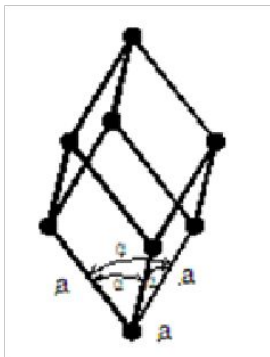
*Ортором-  
бическая  
Объемоцент-  
рированная*



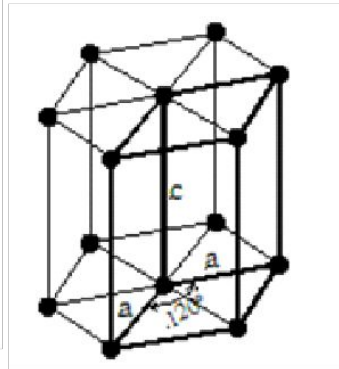
Орторомбическая  
 базоцентрированная



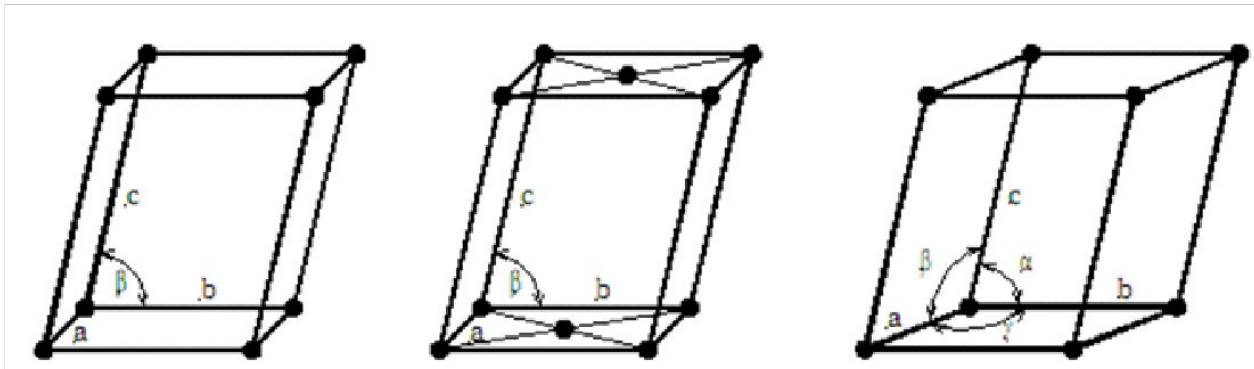
Орторомбическая  
 гранецентрированная



Ромбодрическая



Гексагональная



Простая  
 моноклиная

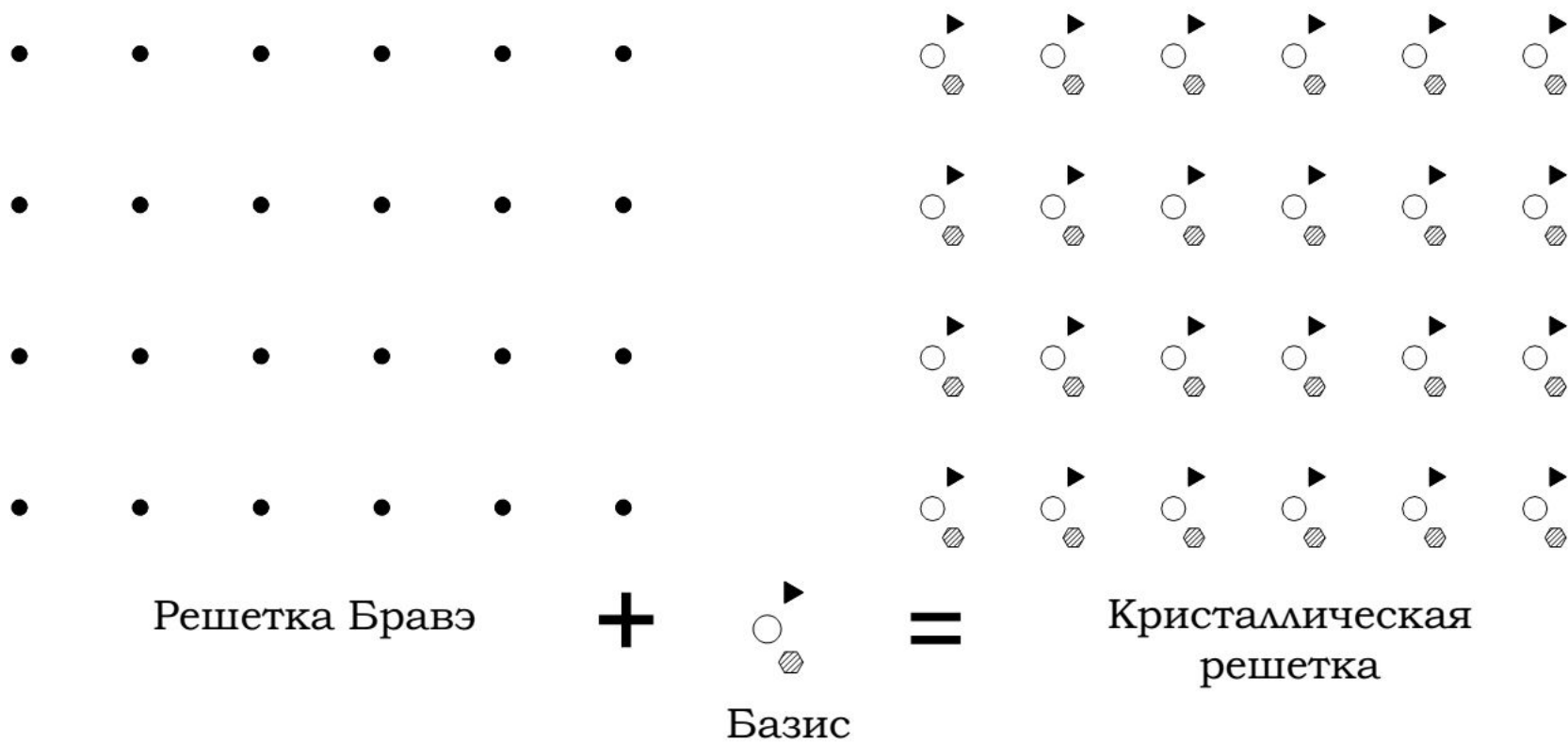
Моноклиная  
 базоцентрированная

Триклиная



- *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

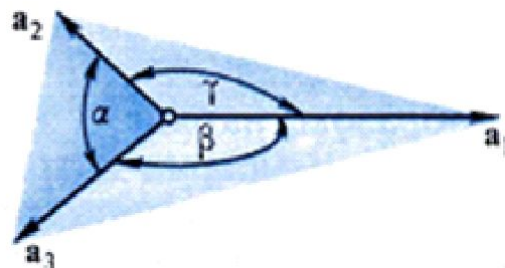
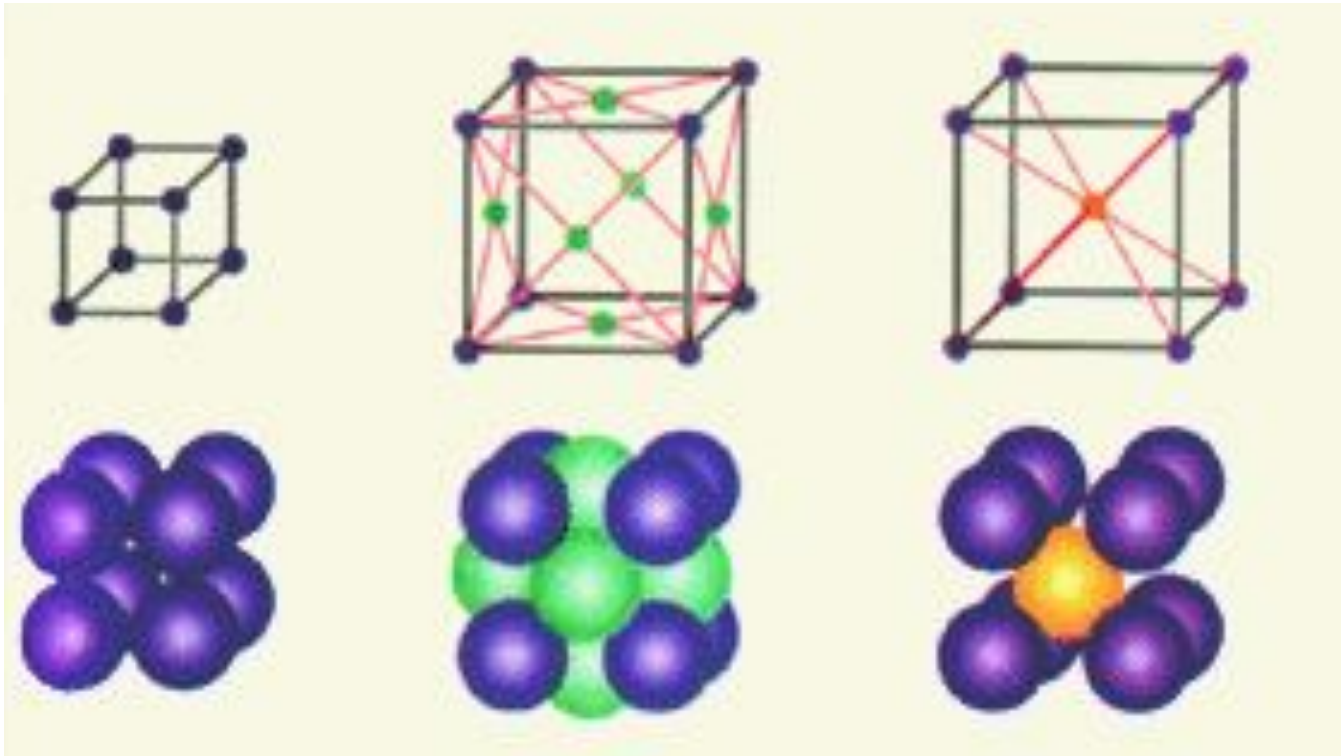


Таблица 5. Характеристики кристаллических систем

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

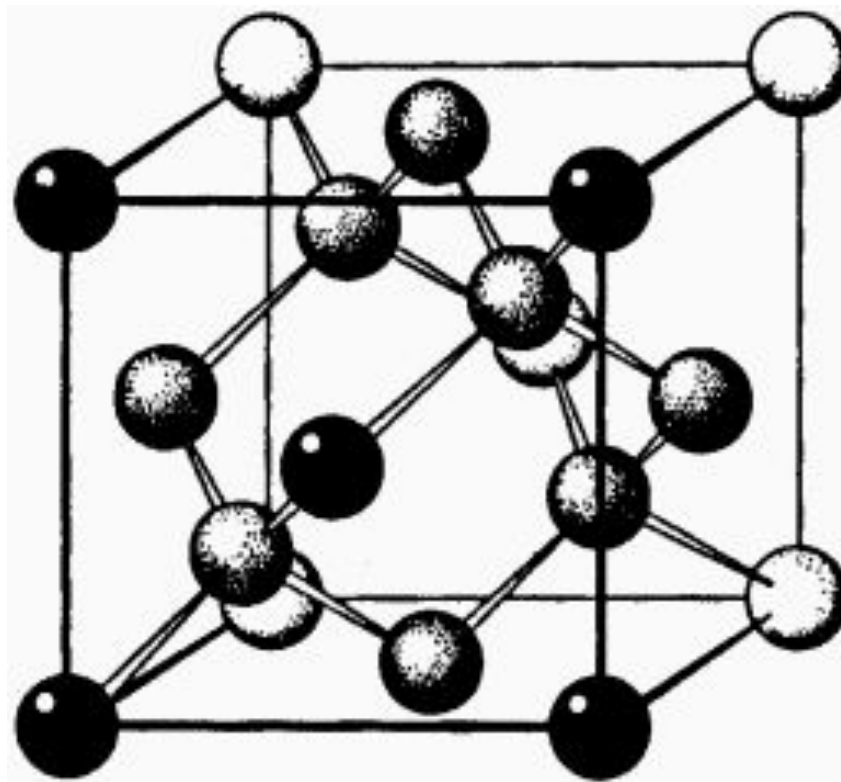
# Кубическая сингония



# Координаты узлов кубических ячеек

<b>ПК</b>	<b>[0,0,0]</b>
<b>ОЦК</b>	<b>[0,0,0], [1/2,1/2,1/2]</b>
<b>ГЦК</b>	<b>[0,0,0],[1/2,1/2, 0], [1/2, 0,1/2], [0,1/2,1/2]</b>

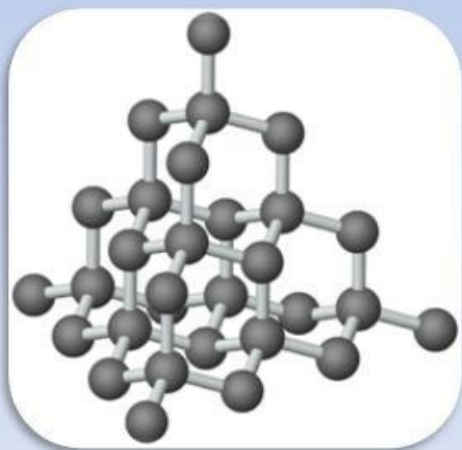
# Кристаллическая решетка типа алмаз





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

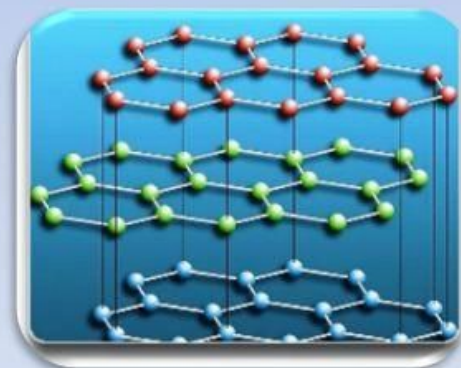
*Алмаз*



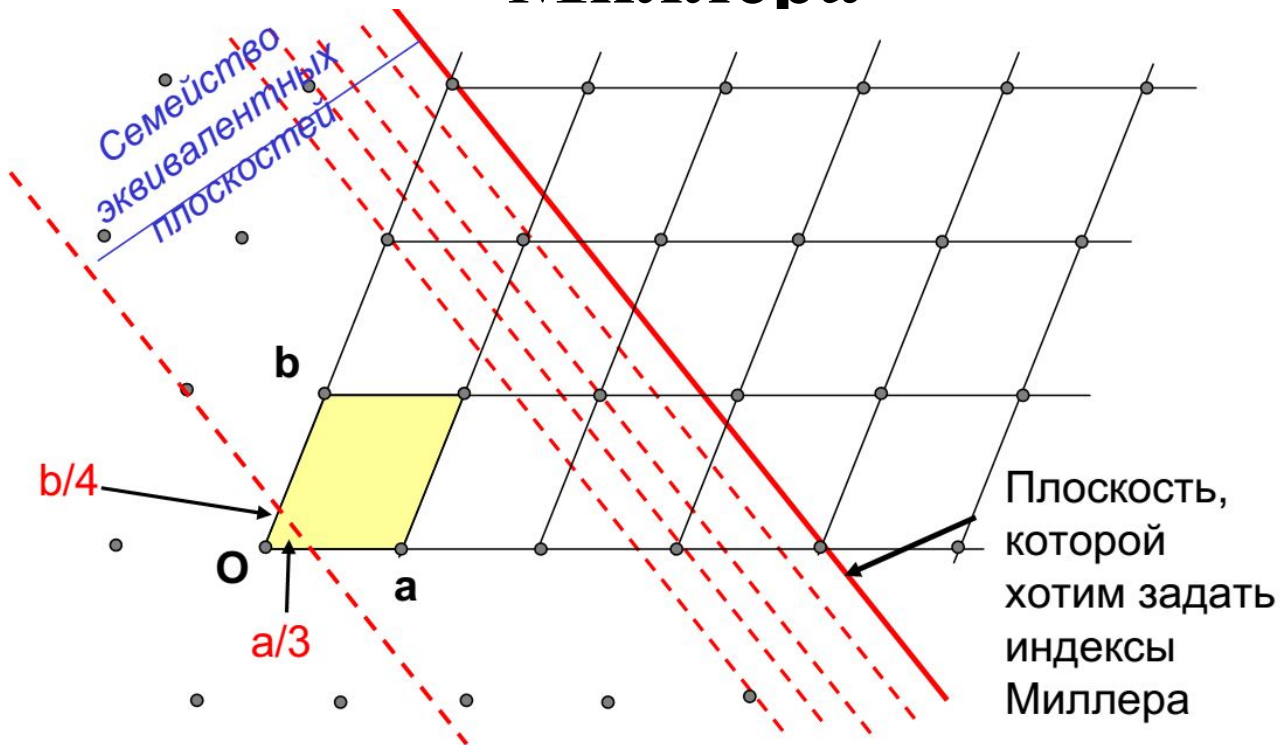
*Фуллерен*



*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:

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

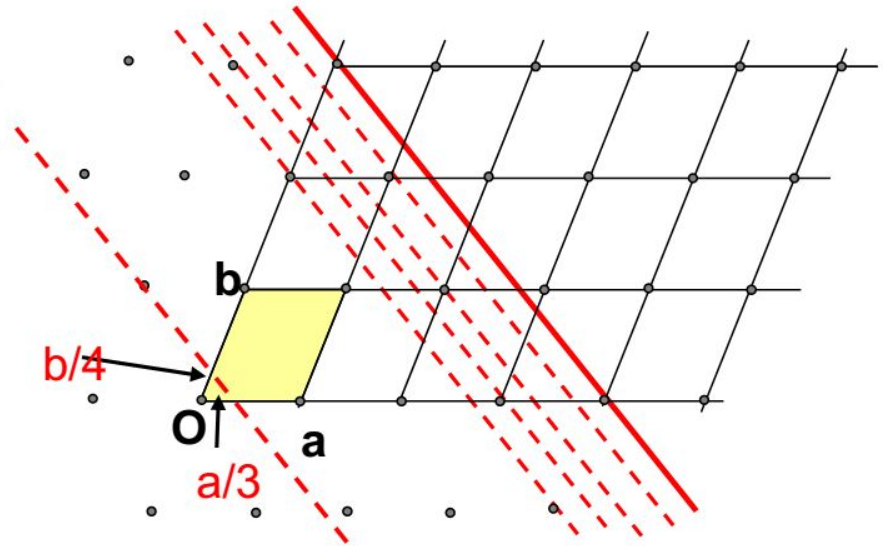
# Правила вычисления индексов Миллера

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*

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

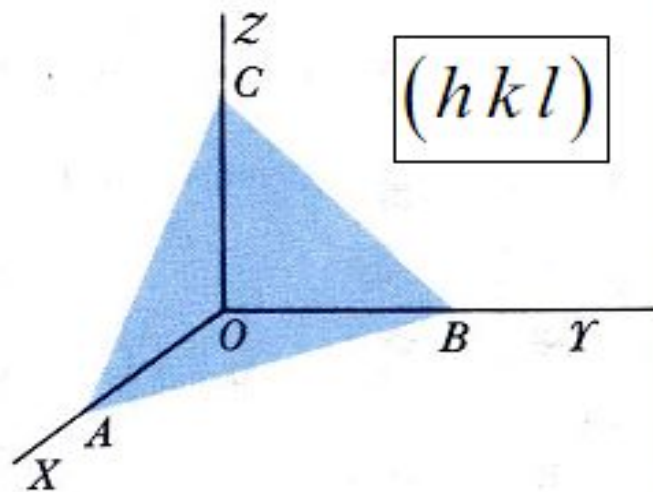
Индексы Миллера  $(3, 5, 15)$

# ИНДЕКСЫ МИЛЛЕРА

Уравнение плоскости в  
прямолинейных  
(не обязательно прямоугольных)  
координатах:

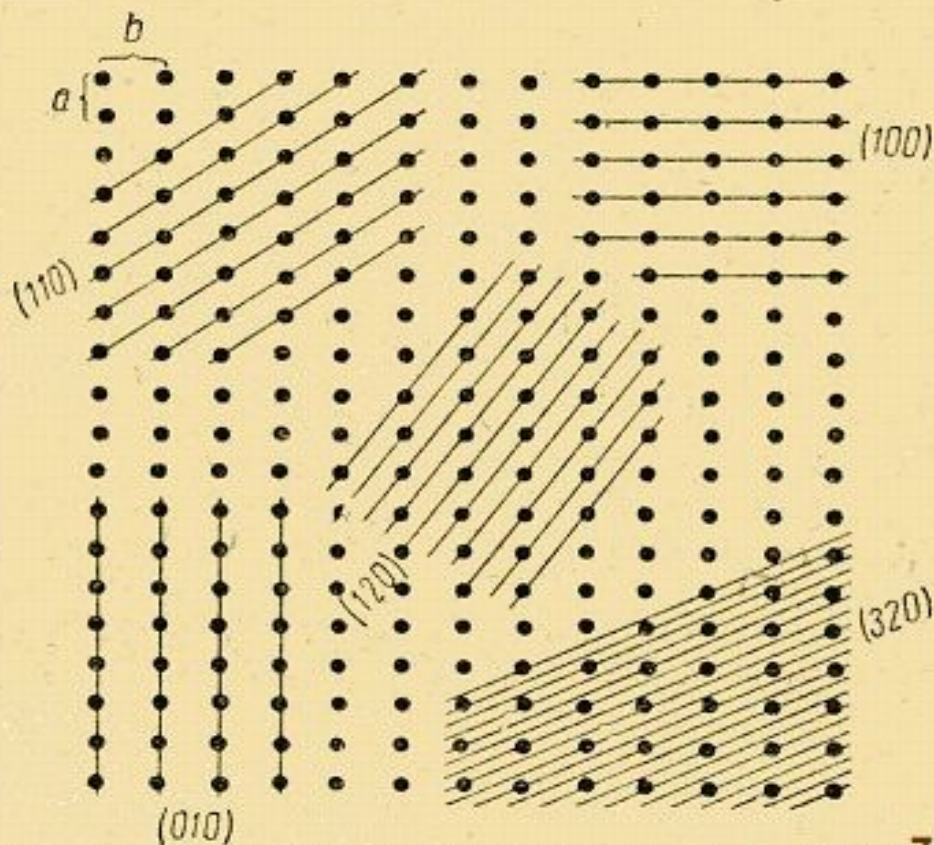
$$\frac{x}{|OA|} + \frac{y}{|OB|} + \frac{z}{|OC|} = 1$$

$$hx + ky + lz = D$$



$[hkl]$

- 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

