

Лекция 1

Тема Лекции: Типы кристаллических решеток и их симметрия

к.ф.-м.н., PhD, ассоциированный профессор
Тулегенова Аида Тулегенкызы

Цель лекции:

Ознакомление с основными типами кристаллических решёток, их симметрией и параметрами, объяснить физическую сущность пространственной периодичности, понятие элементарной ячейки, узлов кристаллической решётки и кристаллографических систем.

Основные вопросы:

1. Понятие кристаллического состояния вещества.
2. Пространственная решётка и элементарная ячейка.
3. Типы кристаллических решёток.
4. Симметрия кристаллов и кристаллографические системы.
5. Элементы симметрии кристаллов.
6. Примеры веществ с различными типами решёток.

Введение

Типы кристаллических решеток и их симметрия

Кристаллические структуры - это структуры, представляющие периодическую решетку, в узлах которой расположены атомы.

Трехмерная кристаллическая структура построена на трех координатных осях x, y, z, расположенных в общем случае под углами α , β , γ.

Периоды трансляции атомов по осям (параметры решетки) равны, соответственно, a, b, c.

Элементарная ячейка кристалла - это параллелепипед, построенный на векторах трансляции a, b, c.

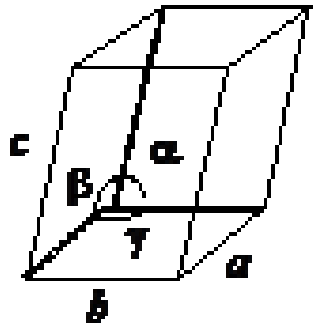
Такая ячейка называется примитивной.

В результате трансляции элементарной ячейки в пространстве получается пространственная простая решетка - называемая решеткой Браве.

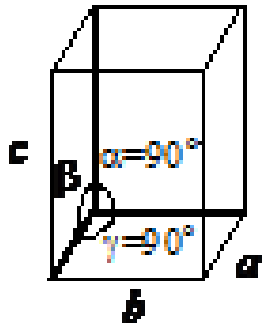
Существует 14 типов решеток Браве.

Решетки Браве подразделяются на семь систем, называемых кристаллографическими сингониями, в соответствии с семью различными типами элементарных ячеек:

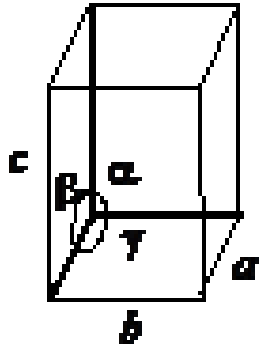
триклинной, моноклинной, ромбической, тетрагональной, тригональной, кубической и гексагональной (рис)..



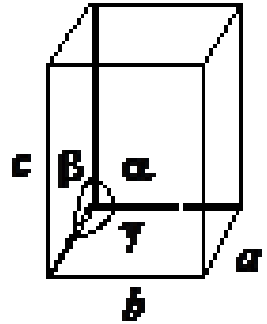
Триклинная



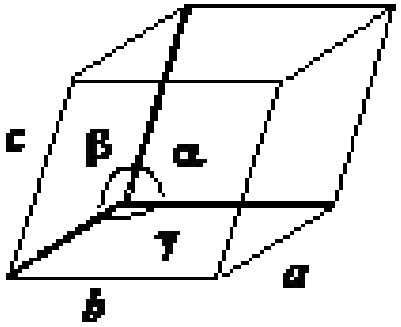
Моноклинная



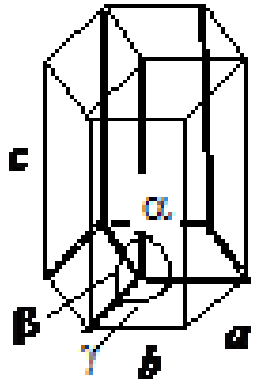
Ромбическая



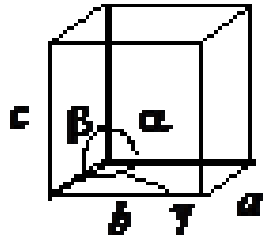
Тетрагональная



Тригональная



Гексагональная



Кубическая

Кристаллографические системы (сингонии)

Сложные элементарные ячейки:

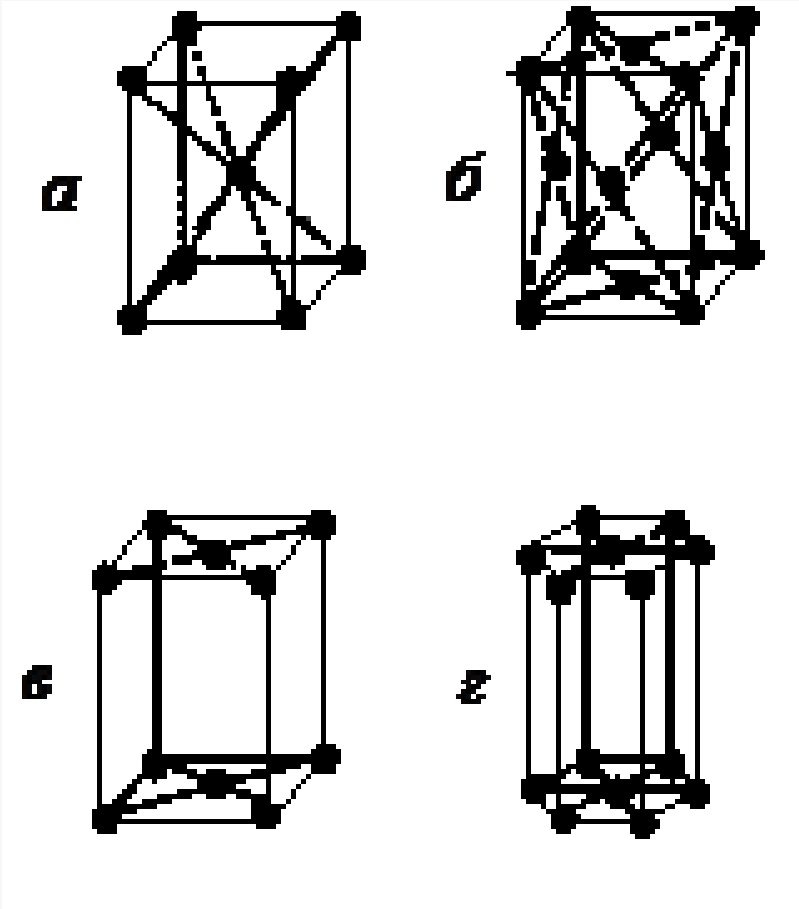
Объемноцентрированная (ОЦК) ячейка (рис. а) - содержит дополнительно один атом на пересечении пространственных диагоналей куба. (V, Cr, Fe, и др.)

Гранецентрированная (ГЦК) ячейка (рис. б) – содержит дополнительно по одному атому в плоскости каждой грани (Al, Ni, Cu, Ag, Au и др.)

Сложные элементарные ячейки:

а)объемноцентрированная б)гранецентрированная,

в) базоцентрированная г) гексагональная .



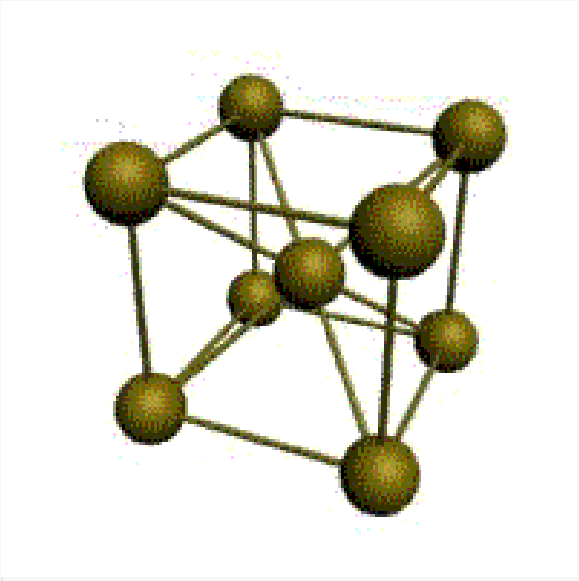
Сложные элементарные ячейки

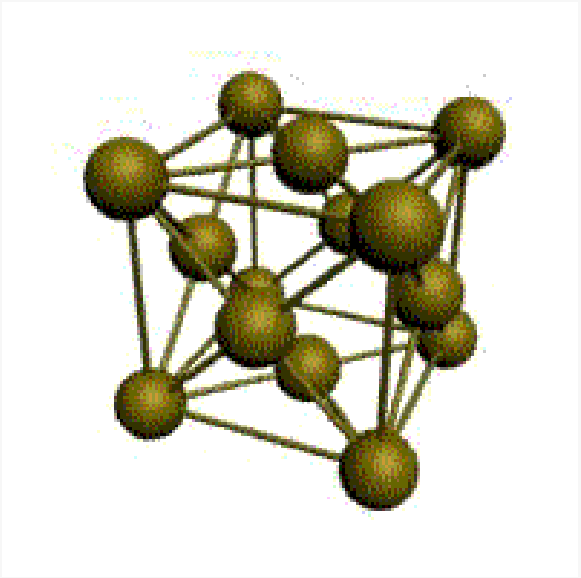
а) объемно-центрированная кубическая (ОЦК);

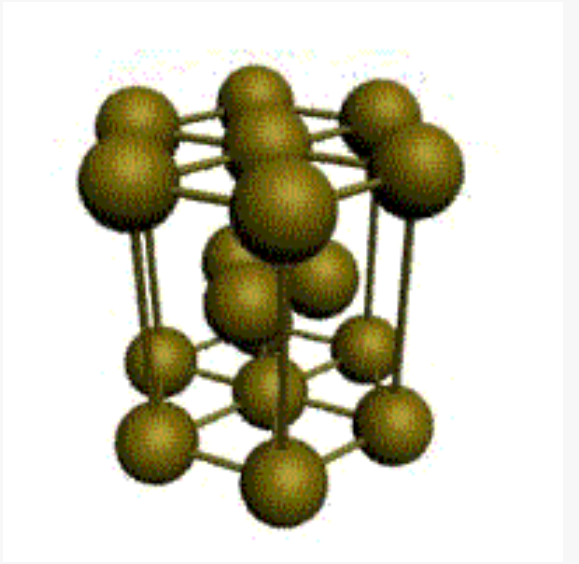
б)гранецентрированная кубическая (ГЦК);

в)гексагональная плотноупакованная (ГПУ);

а б в





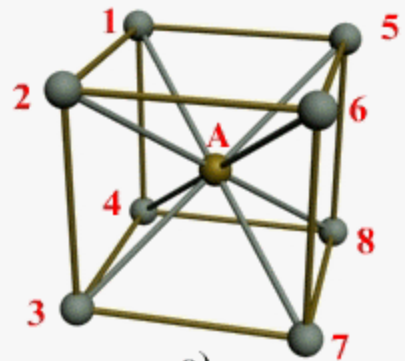


Гексагональная плотноупакованная ГПУ-ячейка состоит из отстоящих друг от друга на параметр **c** параллельных центрированных гексагональных оснований.

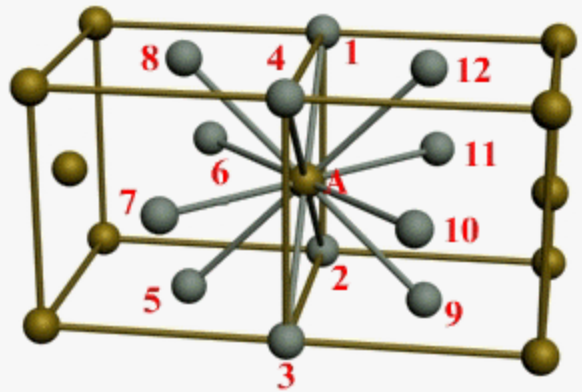
Три иона (атома) находятся на средней плоскости между основаниями.

Отношение параметра c/a у ГПУ решеток всегда больше единицы.

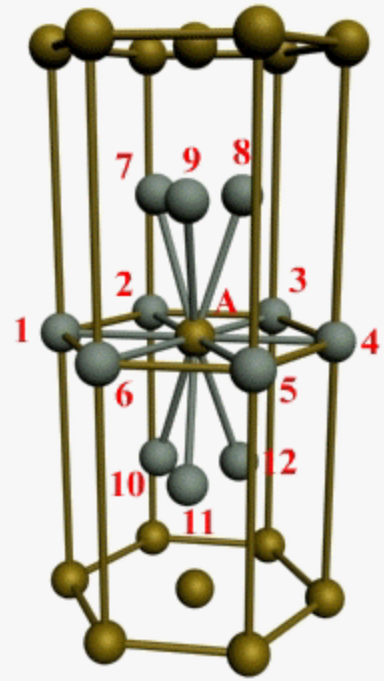
Такую решетку имеют магний, титан, берилий и др.



а)



б)



в)

Компактность кристаллической решетки или степень заполненности ее объема атомами является важной характеристикой кристаллической решетки.

Компактность определяется такими показателями: параметр решетки, число атомов в каждой элементарной ячейке, координационное число и плотность упаковки.

Параметр решетки - это расстояние между атомами по ребру элементарной ячейки. Параметры решетки измеряется в нанометрах (1 нм = 10^{-9} м = 10 Å).

Параметры кубических решеток характеризуются длиной ребра куба и обозначаются буквой ***a***. Параметры **a** кубических решеток металлов находятся в пределах от 0,286 до 0,607 нм.

Для характеристики ГПУ решетки принимают два параметра - сторону шестигранника **a** и высоту призмы **c**.

Когда отношение c/a = 1,633, то атомы упакованы наиболее плотно, и решетка называется гексагональной плотноупакованной.

Некоторые металлы имеют гексагональную решетку с менее плотной упаковкой атомов (c/a > 1,633).

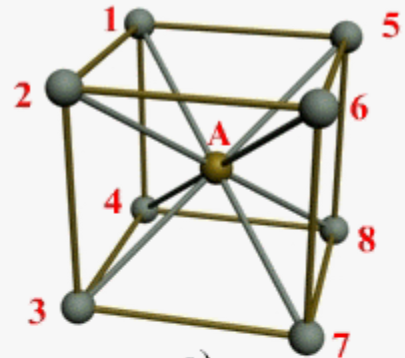
Например, у цинка c/a = 1,86, у кадмия c/a = 1,88.

Параметры кристаллических решеток измеряются с помощью рентгеноструктурного анализа.

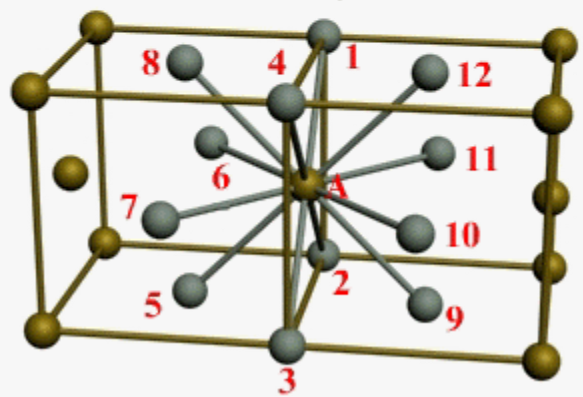
Координационное число - количество ближайших соседей данного атома.

При подсчете числа атомов в каждой элементарной ячейке следует иметь в виду, что каждый атом входит одновременно в несколько ячеек.

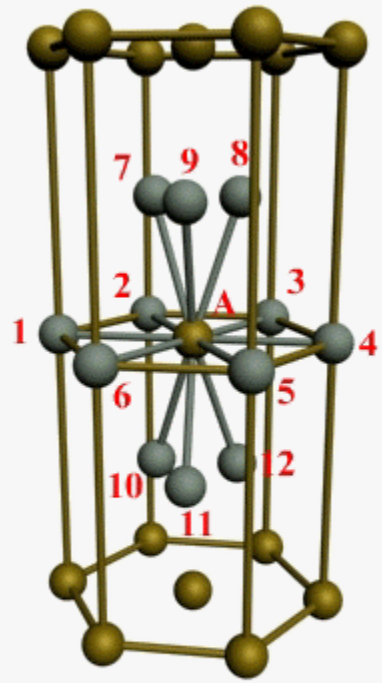
В ОЦК решетке (рис. а) атом А (в центре) находится на наиболее близком равном расстоянии от восьми атомов, расположенных в вершинах куба. Координационное число ОЦК решетки равно 8.



а)



б)



в)

В ГЦК решетке (рис. б) атом А (на грани куба) находится на наиболее близком равном расстоянии:

от 4 атомов 1, 2, 3, 4, расположенных в вершинах куба,

от 4 атомов 5, 6, 7, 8, расположенных на гранях куба,

от 4 атомов 9, 10, 11, 12, принадлежащих расположенной рядом кристаллической ячейке.

Атомы 9, 10, 11, 12 симметричны атомам 5, 6, 7, 8.

Таким образом, ГЦК решетки координационное число равно 12.

В ГПУ решетке при c/a = 1,633 (рис. в) атом А в центре шестигранного основания призмы находится на наиболее близком равном расстоянии:

от шести атомов 1, 2, 3, 4, 5, 6, размещенных в вершинах шестигранника,

от трех атомов 7, 8, 9, расположенных в средней плоскости призмы,

от трех атомов 10, 11, 12, принадлежащих кристаллической ячейке, лежащей ниже основания. Атомы 10, 11, 12 симметричны атомам 7, 8, 9.

Для ГПУ решетки координационное число равно 12 .

Плотность упаковки - отношение суммарного объема, занимаемого собственно атомами в кристаллической решетке, к ее полному объему.

В ГЦК, ГПУ решетках атомы занимают ~ 74 % всего объема кристаллической решетки, а межатомные промежутки («поры») 26 %.

В ОЦК решетке атомы занимают 68 % всего объема, а «поры» 32 %.

Плотность упаковки решетки зависит от особенностей электронной структуры металлов и характера связи между их атомами.

От типа кристаллической решетки сильно зависят свойства металла.

Кристаллографические направления - это прямые линии, выходящие из точки отсчета, вдоль которых в кристаллической решетке располагаются атомы.

Точками отсчета служат вершины куба, а кристаллографическими направлениями - его ребра и диагонали, а также диагонали граней (рис. а).

Кристаллографическими плоскостями являются плоскости граней кубов (рис. б), диагональные плоскости вместе с находящимися на них атомами (рис. в, г).

Для ГПУ решеток кристаллографическими плоскостями могут быть плоскости оснований

Для определения индекса направления находят индекс ближайшего к данной точке отсчета атома, который находится на данном направлении.

Индекс ближайшего атома вдоль оси OX обозначается 100 (рис. а). Цифры представляют собой координаты этого атома относительно точки O вдоль осей OX, OY и OZ.

Индексы направления OX и параллельных ему направлений обозначаются [100].

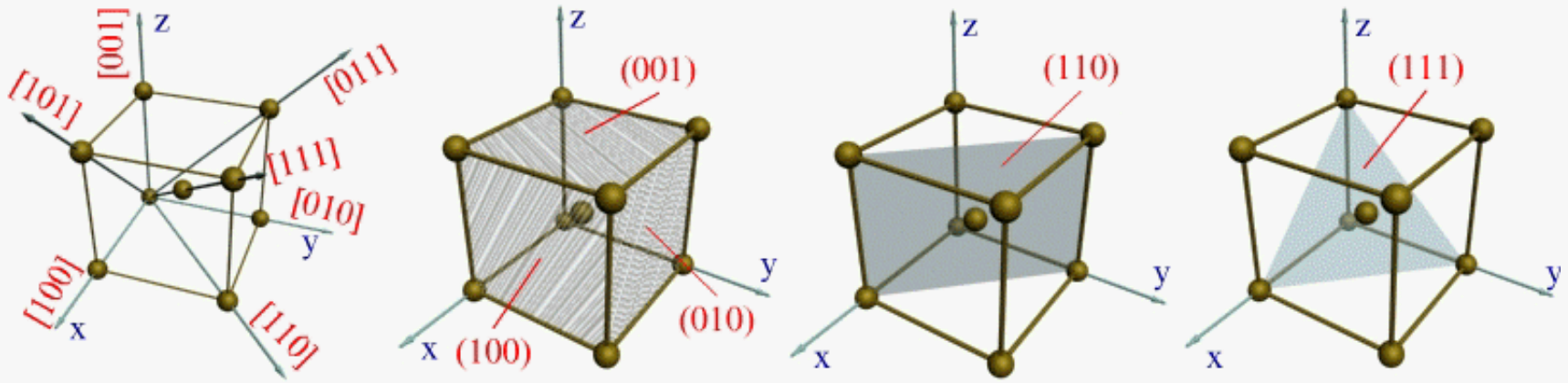
Индексы направления OY и OZ - [010] и [001],

вдоль диагоналей граней XOZ, XOY и YOZ - [101], [110] и [011],

вдоль диагонали куба - [111].

Рис. Кристаллографические направления и плоскости в кристаллической решетке: а) - основные направления и их обозначение; б), в), г) - основные плоскости и их обозначение

а б в г



Индексы плоскостей, параллельных плоскостям XOZ и YOZ обозначаются (010) и (100) (рис. б),

вертикальной диагональной плоскости куба - (110),

наклонной плоскости, пересекающейся со всеми тремя осями координат на удалении одного параметра - (111) (рис. г).

Выводы лекции: Кристаллическое состояние. В кристалле атомы, ионы или молекулы расположены упорядоченно и периодически, то есть существует дальний порядок. Поэтому кристаллы имеют определённую температуру плавления и анизотропию свойств. Аморфные тела этим не обладают: у них есть только ближний порядок.

Пространственная решётка и элементарная ячейка. Периодичность кристалла описывается пространственной решёткой — бесконечной системой узлов, получаемой трансляцией. Наименьший повторяющийся объём, который полностью передаёт симметрию решётки, называется элементарной ячейкой. Она задаётся шестью параметрами: тремя рёбрами (a, b, c) и тремя углами (α, β, γ). Если транслировать элементарную ячейку в трёх направлениях, получается весь кристалл.

Кристаллографические системы. По соотношению параметров ячейки все кристаллы делятся на 7 кристаллографических систем (сингоний): триклинную, моноклинную, ромбическую, тетрагональную, тригональную (ромбоэдрическую), гексагональную и кубическую. С учётом способа центрировки (примитивная, базоцентрированная, объёмноцентрированная, гранецентрированная) получается 14 типов решёток Браве.

Элементы симметрии. К элементам симметрии кристаллов относятся центр симметрии (инверсии), плоскости симметрии, поворотные оси и инверсионные оси. Из-за периодичности решётки в кристалле возможны только оси 1, 2, 3, 4 и 6-го порядка; оси 5-го и выше 6-го порядка невозможны. Сочетания элементов симметрии дают 32 класса симметрии (точечные группы), а с учётом трансляций — 230 пространственных групп.

Вопросы для контроля изучаемого материала:

1. Что представляет собой кристаллическая решётка и элементарная ячейка?
2. Какие существуют типы кристаллических решёток по центровке?
3. Перечислите основные кристаллографические системы.
4. Какие элементы симметрии могут иметь кристаллы?
5. Приведите примеры веществ с кубической и гексагональной решётками.
6. Как симметрия влияет на физические свойства кристаллов?

Список литературных источников:

1. Соколова Т. Н. Физика конденсированного состояния. — М.: Лань, 2020.
2. Китаев В. П. Физика твёрдого тела. — М.: Физматлит, 2021.
3. Капустин А. П. Кристаллография, минералогия и физика твёрдого тела. — М.: МИСиС, 2020.
4. Kittel, C. Introduction to Solid State Physics. — Wiley, 2022.
5. Ashcroft, N. W., Mermin, N. D. Solid State Physics. — Cengage, 2019.