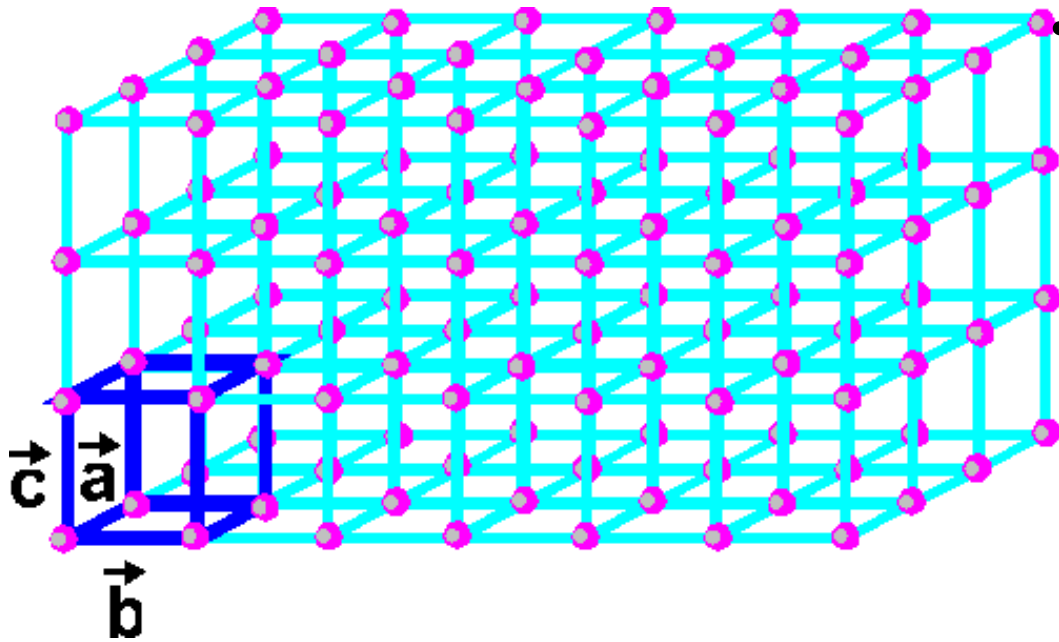


Кристаллы

Кристаллическая решетка

1. Пространственная кристаллическая решетка

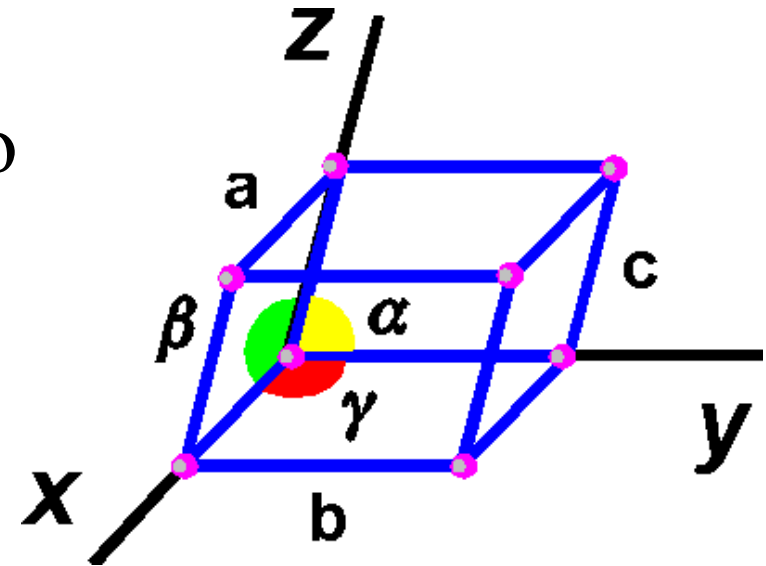


Трехмерное регулярное распределение узлов в пространстве, предполагающее, что прямая линия, проходящая через любые два узла, пройдет последовательность подобных узлов, расположенных на одинаковом расстоянии друг от друга, называется **пространственной решеткой**.

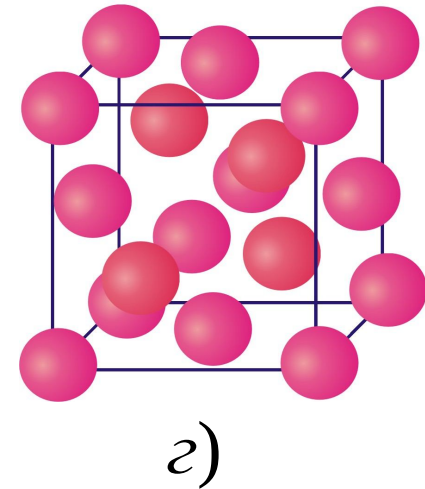
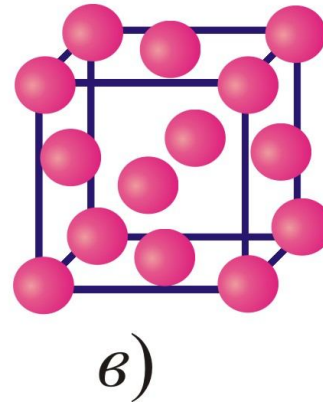
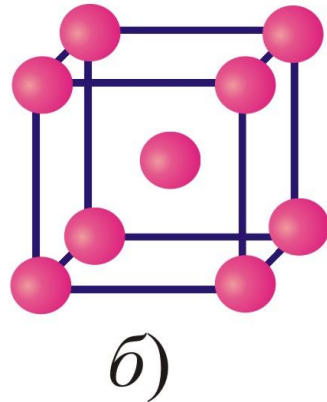
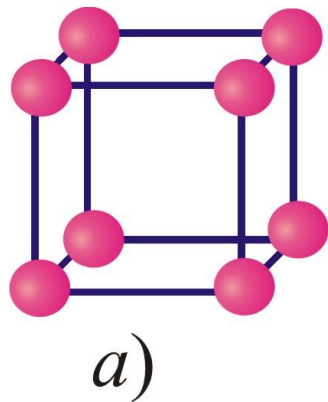
- **Узлы** пространственной решетки ассоциируются с центрами тяжести **структурных единиц** кристалла и отражают их пространственное расположение в кристалле. **Структурной единицей** может быть атом, ион, молекула.
- Кристаллическая решетка характеризуется **энергией** образования кристалла из газообразных ионов, атомов или других частиц, находящихся в узлах решетки. От величины **энергии решетки** зависят, например, **температура плавления, модуль упругости, прочность, твердость** и т.п.

1.1. Элементарная ячейка

- Решетку можно описать с помощью периодически повторяющегося в пространстве элементарного параллелепипеда – *элементарной ячейки*, построенной на трех некопланарных векторах переноса, или единичных трансляциях $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$.



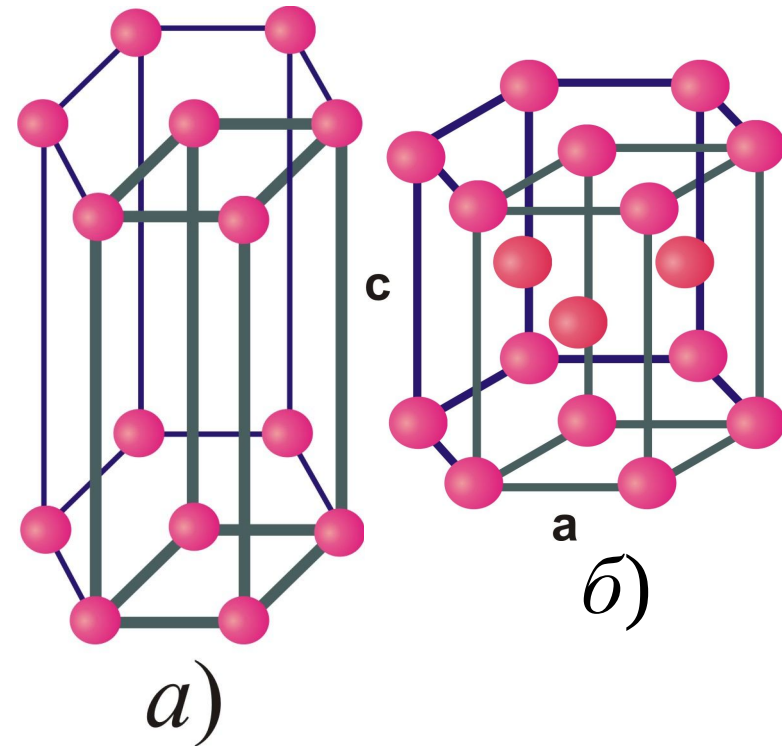
1.2. Кубическая сингония



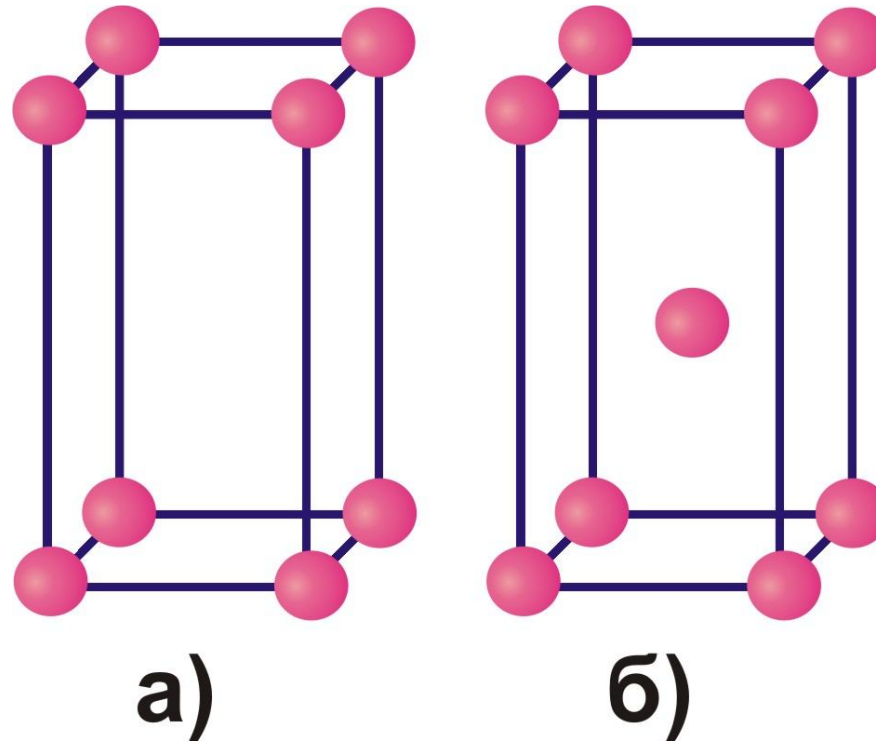
- Кубическая решетка: *a)* примитивная; *б)* объемно-центрированная, ОЦК; *в)* гранецентрированная, ГЦК; *г)* алмаз.
- $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.
- Решетку **ОЦК** имеют металлы: Ba, Be_β, Ca_β, Cr, Cs, Eu, Fe_{α(δ)}, Gd_β, Ho_β, K, Li_α, Mn_{α(δ)}, Mo, Na, Nb, Np_γ, Pr_β, Rb, Sc_β, Sm_β, Sr_γ, Ta, Th_β, Ti_β, V, W, Yb, Yb_β, Zr_β и др.
- Решетка **ГЦК** у металлов: As, Ag, Al, Am_β, Au, Ca_α, Ce, Co_β, Cu, Fe_γ, Ir, Mn_γ, Ni, Pb, Pd, Rh, Pt, Sc_α, Sr_α, Th_α, Yb_α и др.
- Решетка типа **алмаза** у C (алмаз), Ge, Si, Sn_α.

1.3. Гексагональная сингония

- Гексагональная решетка:
 - а) примитивная;
 - б) плотноупакованная (ГПУ).
- $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.
- ГПУ-решетку имеют металлы:
 Am_α , Be_α , Ca_β , Cd , Co_α , Gd_α ,
 Hf_α , Ho_α , Li_β , Lu_α , Mg , Os , Pr_α ,
 Re , Ru , Sr_β , Ti_α , Zn , Zr_α , Y_α и др.

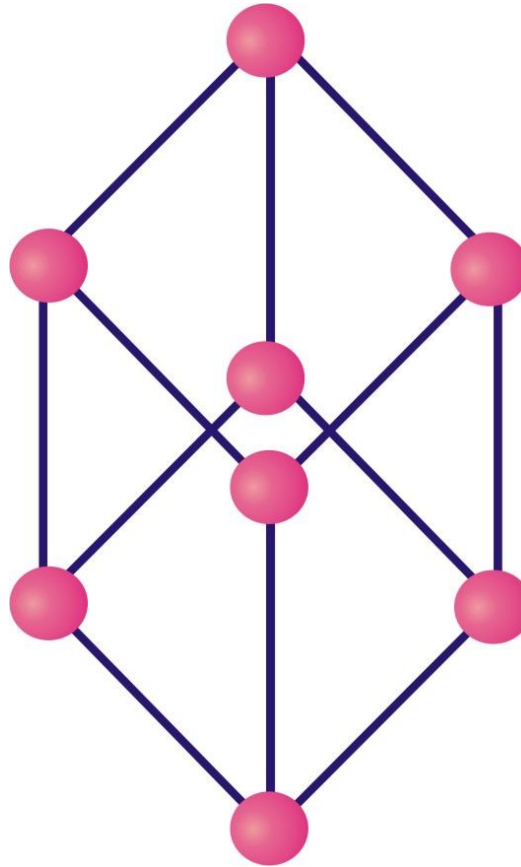


1.4. Тетрагональная сингония



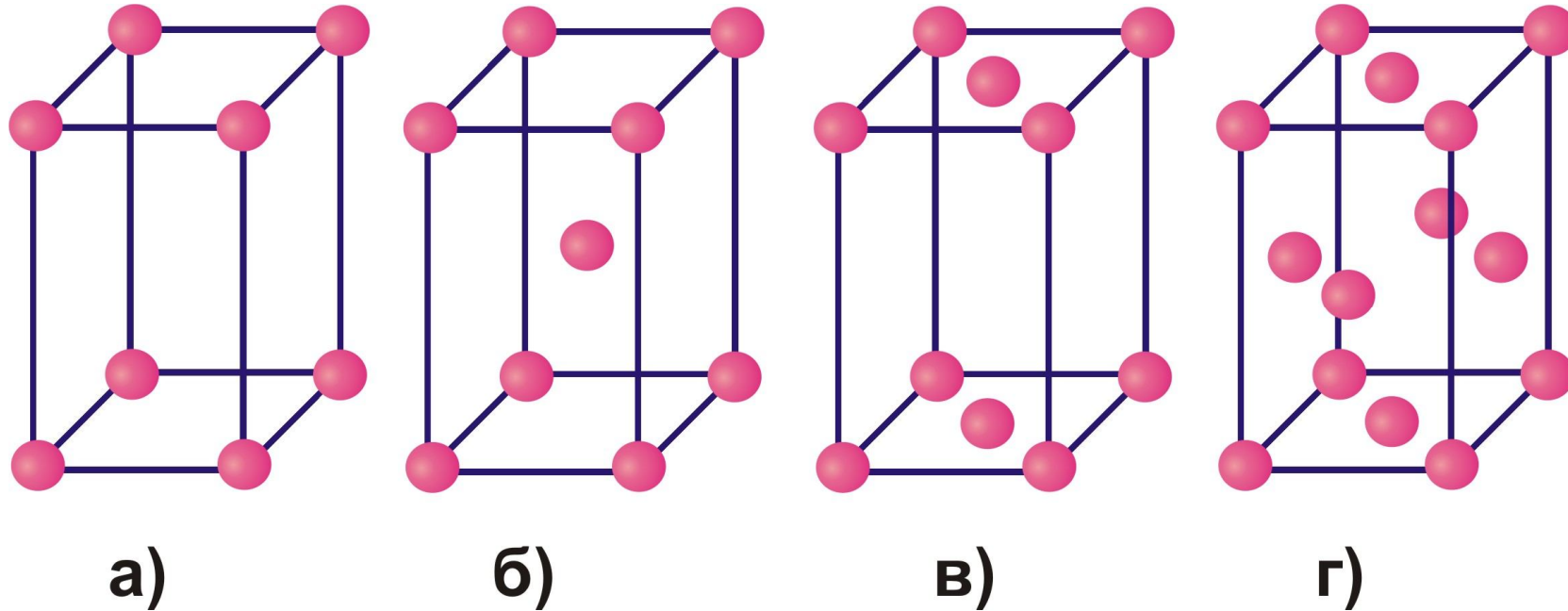
- *a)* примитивная; *б)* объемно-центрированная, ОЦТ.
- $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

1.5. Тригональная (ромбоэдрическая) сингония



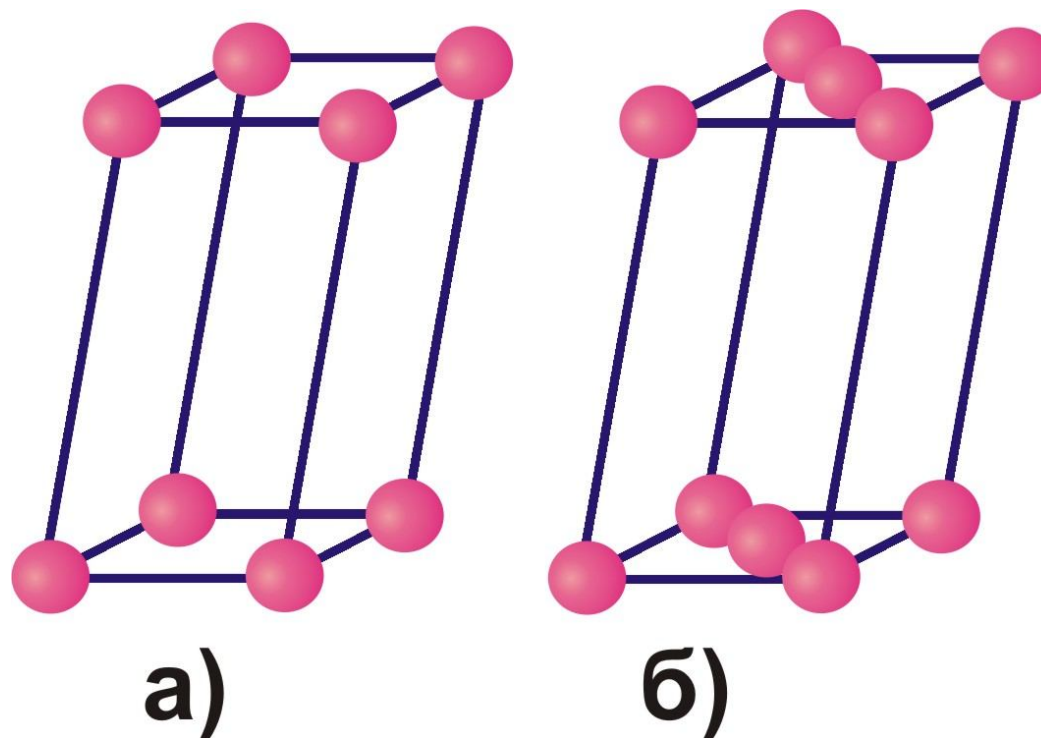
- примитивная: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ, < 120^\circ$.

1.6. Ромбическая (орторомбическая) сингония



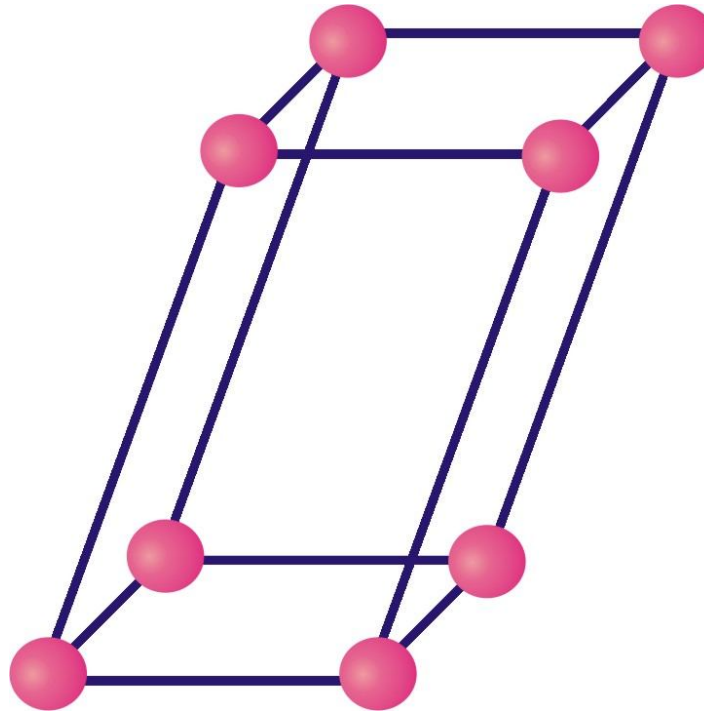
- а) примитивная; б) объемно-центрированная; в) базоцентрированная; г) гранецентрированная.
- $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

1.7. Моноклинная сингония



- *a*) примитивная; *б*) базоцентрированная, ОЦТ.
- $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$.

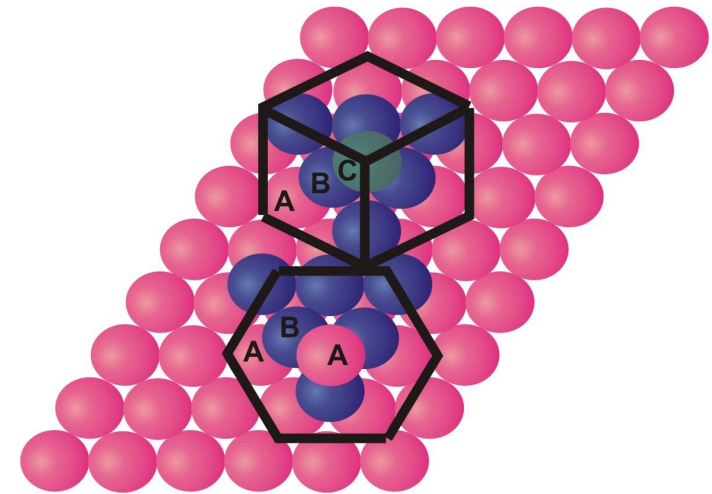
1.8. Триклинная сингония



- примитивная: $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$.

2. Плотнупакованные структуры

- Требования к плотнейшей шаровой упаковке в кристаллической структуре:
 - наличие в кристаллической структуре параллельных равноотстоящих друг от друга атомных плоскостей, составленных из атомов одного сорта;
 - наличие для атомов этого сорта координационного числа, равного 12;
 - наличие осей симметрии третьего порядка либо винтовых осей симметрии шестого порядка, а также зеркальных плоскостей симметрии, которые ориентированы перпендикулярно слоям предполагаемой плотной шаровой упаковки.
- Чередование слоев типа ABCABC соответствует **КПУ** (кубической плотноупакованной, или ГЦК для атомов одного сорта), а типа ABAB – **ГПУ** (гексагональной плотноупакованной) решеткам.
- Отметим, что атомы третьего слоя в положениях А и С не могут находиться в одной плоскости.



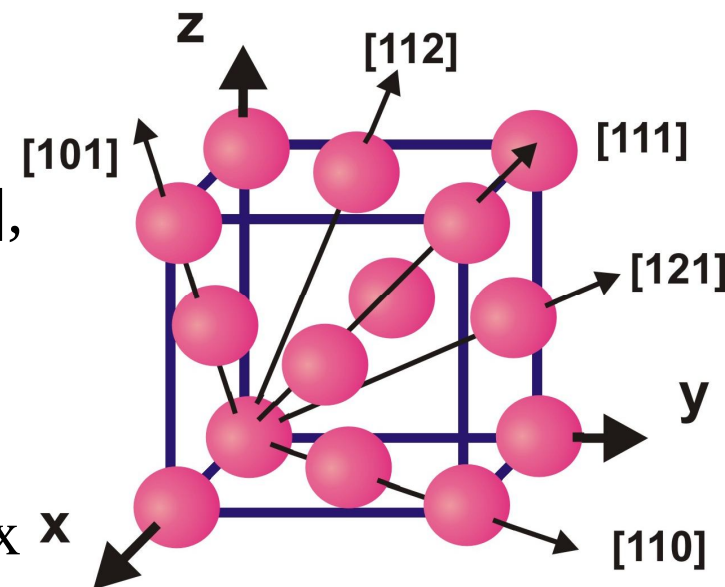
3. Кристаллографические индексы

3.1. Символ узла

- Если какой-нибудь узел выбрать за начало отсчета, то радиус-вектор любого другого узла решетки может быть определен по выражению $\vec{r} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$, где n_1, n_2, n_3 – числа, которые обычно выражают в долях ребер ячейки и называют **индексами** данного узла; $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ – базисные векторы решетки, единичные трансляции. Совокупность трех индексов записывают в двойных квадратных скобках $[[n_1, n_2, n_3]]$ и называют **символом узла**.

3.2. Индексы направления

- **Индексами направления** служат три целых, взаимно простых (не имеющих общего делителя) числа u, v, w , пропорциональных координатам $[[m, n, p]]$ любого узла, лежащего на данном направлении. Эти числа, заключенные в квадратные скобки $[uvw]$, являются индексами и всех других направлений, параллельных данному.
- Совокупность направлений, эквивалентных в силу симметрии, обозначается одним символом в угловых скобках. Например, направления координатных осей в кубических кристаллах $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$ эквивалентны по симметрии и обозначаются символом $\langle 100 \rangle$.



3.3. Кристаллографические индексы Миллера

- Для определения *индексов кристаллографической плоскости* необходимо установить координаты точек пересечения плоскости с осями координат в единицах периодов решетки: m , n , p . Затем взять обратные значения этих величин и привести их к наименьшему целому, кратному каждому из чисел: $1/m$, $1/n$, $1/p$. Полученные значения простых целых чисел в круглых скобках: (hkl) , не имеющие общего множителя, являются *кристаллографическими индексами Миллера* для плоскости. Например, плоскость, параллельная координатной плоскости yz и перпендикулярная оси x , отсекает на осях отрезки $(1, \infty, \infty)$; тогда индексы плоскости будут (100) .
- Индексы Миллера в круглых скобках обозначают семейство параллельных плоскостей. Семейство плоскостей, эквивалентных в силу симметрии (более широкое семейство), обозначают в фигурных скобках: $\{hkl\}$. Например, в кубическом кристалле плоскости (110) , (101) , (011) эквивалентны по симметрии. Их совокупность обозначают символом $\{110\}$.
- Для гексагональной сингонии часто используется четвёртый индекс $i = -(h + k)$. $(hkl) = (hki\ell) = (hk(h+k)\ell)$.

3.3.1. Кристаллографические индексы плоскости

Плоскости плотной упаковки называют **плоскостями скольжения**, так как по этим плоскостям смещаются атомы при *пластической деформации* металла.

