



ПОВЕДЕНИЕ МАТЕРИАЛОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ

ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ КРИСТАЛЛА

Существование стабильных связей между атомами в кристалле

$$U_{\text{кр}} = U_{\text{кин}} + U_{\text{пот}} < \Sigma U_{\text{ат}}$$

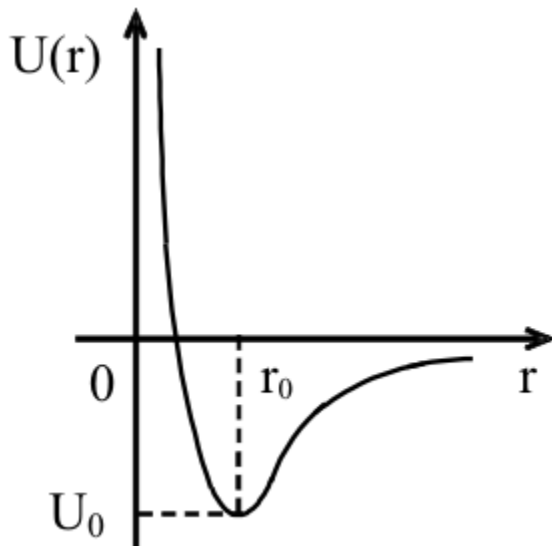
$U_{\text{кр}}$ – полная энергия кристалла

$U_{\text{ат}}$ – полная энергия свободных атомов

Энергия связи кристалла:

$$U_{\text{св}} = \Sigma U_{\text{ат}} - U_{\text{кр}}$$

$U_{\text{св}} = (0.1 - 7 \text{ и более}) \text{ эВ}$



- ИОННАЯ
- КОВАЛЕНТНАЯ
- МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ
- ВОДОРОДНАЯ
- СВЯЗЬ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА

Энергия взаимодействия атомов

Виды связей в веществе

ХИМИЧЕСКИЕ

энергия

$\sim 10^2$ кДж/моль:

- Ионная
- Ковалентная полярная
- Ковалентная неполярная
- Металлическая

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ

- Силы Ван-Дер-Ваальса
 $\sim 0,1 \div 1$ кДж/моль
- Водородная
 $\sim 10 \div 50$ кДж/моль

Проводниковые материалы

Агрегатное состояние

Газо-
образные

Твёрдые

Жидкие

Плазма

Металлы высокой γ

Сплавов высокого ρ

Модификации С

Расплавленные Ме

Электролиты

проводники
первого рода

проводники
второго рода

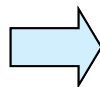
ИОННАЯ СВЯЗЬ

Кулоновское взаимодействие между разноименно заряженными ионами.

Галогениды щелочных металлов: LiF, NaCl, KBr, CsCl и т.д.

Ненаправленна и насыщена

Одинарная связь всегда слабее, чем кратные связи - двойная и тройная - между теми же атомами.



КОВАЛЕНТНАЯ СВЯЗЬ

Обменное электронное взаимодействие между атомами.

алмаз, Si, Ge, серое олово

Количество ковалентных связей, образуемых каждым атомом со своими соседями, равно количеству неспаренных внешних электронов атома в свободном или возбужденном валентном состоянии.

Направленна и насыщена

Прочность связи обычно уменьшается с увеличением ее длины.

	HF	HCl	HBr	HI
Длина связи, пм	92	128	141	160
Энергия связи, кДж/моль	565	431	364	217

Энергии некоторых простых и кратных связей

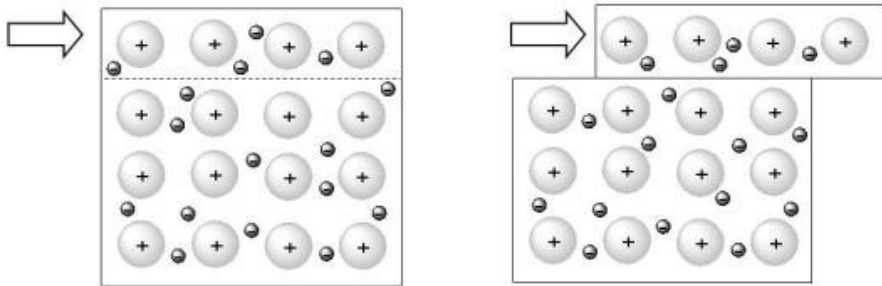
Связь	Энергия (кДж/моль)	Связь	Энергия (кДж/моль)
<u>C-C</u>	343	<u>C-O</u>	351
<u>C=C</u>	615	<u>C=O</u>	711
<u>C≡C</u>	812	<u>C≡O</u>	1096

МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

Возникает при взаимодействии атомов электроположительных элементов, внешние валентные электроны которых относительно слабо связаны с ядром.

"Электронный газ" компенсирует силы отталкивания между положительно заряженными ионами, что обеспечивает стабильность решетки.

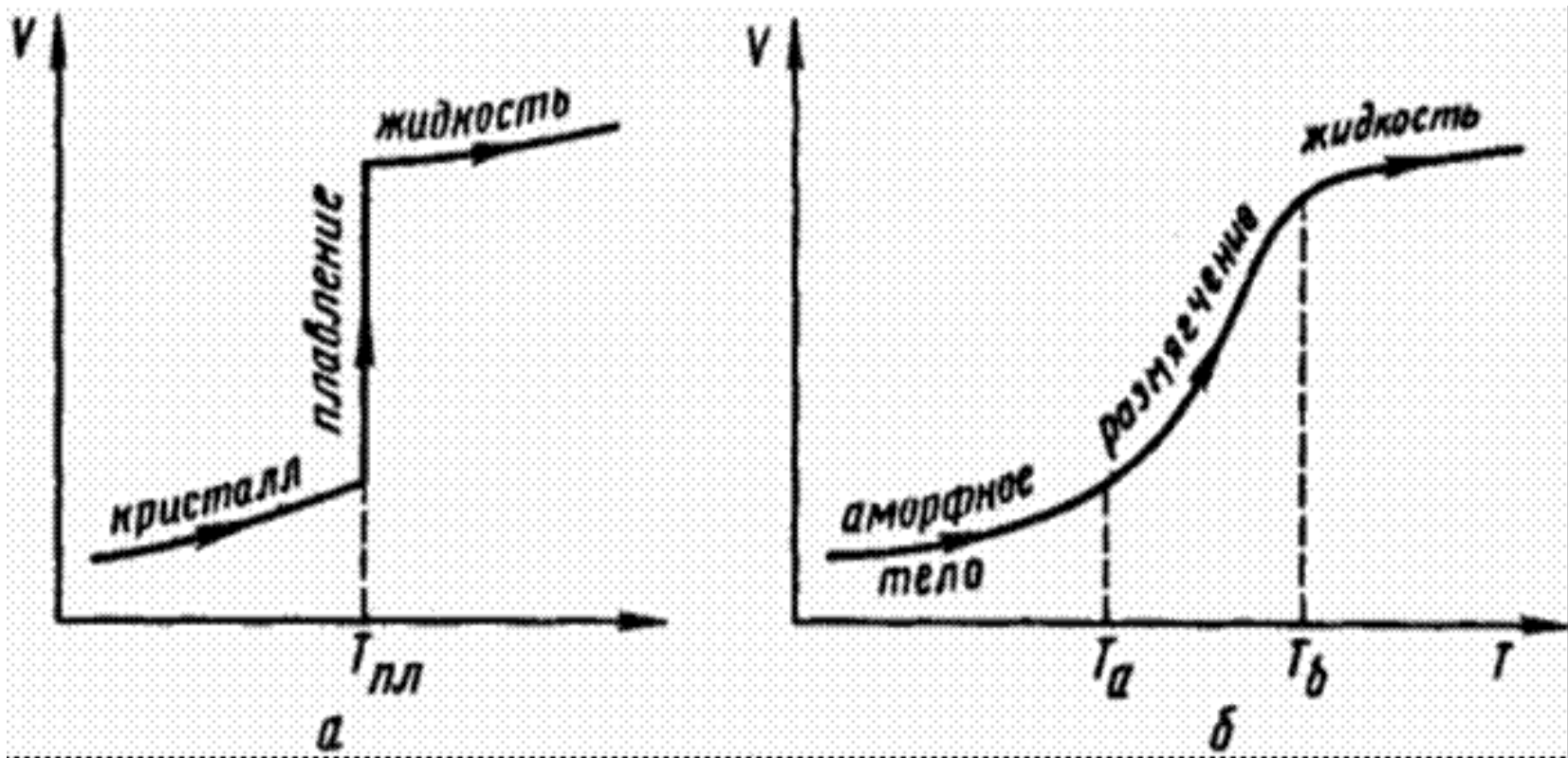
Ненаправленный и ненасыщенный характер металлической связи



ВОДОРОДНАЯ СВЯЗЬ

Взаимодействие между двумя электроотрицательными атомами одной или разных молекул посредством атома водорода: А–Н ... В (чертой обозначена ковалентная связь, тремя точками - водородная связь)

Возникает, как правило, между атомами фтора, азота и кислорода (наиболее электроотрицательные элементы), реже - при участии атомов хлора, серы и других неметаллов. Прочные водородные связи образуются в таких жидких веществах, как вода, фтороводород, кислородсодержащие неорганические кислоты, карбоновые кислоты, фенолы, спирты, аммиак, амины.



Изменение объема веществ при нагревании: а – кристаллических; б – аморфных

СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

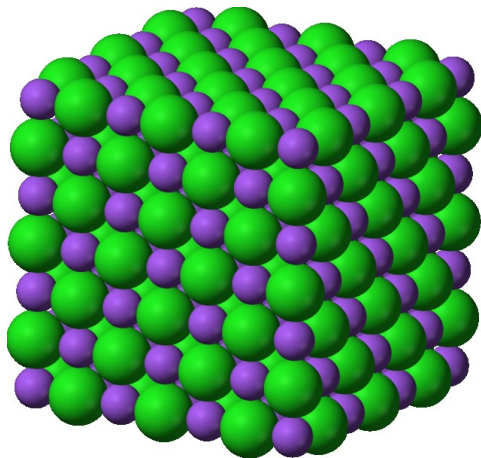
КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА. ТРАНСЛЯЦИЯ

Кристаллическая решетка – пространственное периодическое расположение атомов (ионов) в кристаллическом веществе.

Узлы кристаллической решетки – точки кристаллической решетки, в которых расположены атомы и ионы.

Кристаллографические (атомные) плоскости – плоскости, проходящие через три узла кристаллической решетки.

Элементарная ячейка – параллелепипед, построенный на узлах кристаллической решетки и представляющий собой минимальный объем, отражающий все особенности кристаллического вещества, параллельные переносы (трансляции) которого в трех измерениях позволяют построить всю кристаллическую решетку.



Кристаллическая структура
хлорида натрия

Кристаллическая структура — такая совокупность атомов, в которой с каждой точкой **кристаллической решетки** связана определённая группа атомов, называемая **мотивной единицей**, причем все такие группы одинаковые по составу, строению и ориентации относительно решётки.

Структура возникает в результате синтеза решётки и мотивной единицы, в результате размножения мотивной единицы группой **трансляции**.

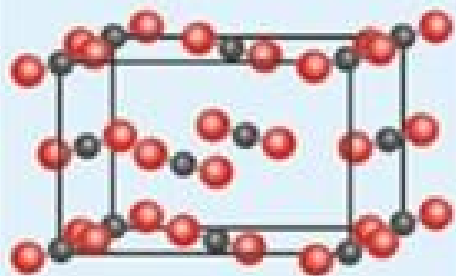
Трансляция (от лат. translatio — перенос, передача) — симметричное преобразование, в результате которого узел пространственной решетки совпадает с другим ближайшим идентичным узлом (частный случай параллельного переноса).

Три некопланарные трансляции задают стороны примитивной элементарной ячейки в кристаллической решетке.

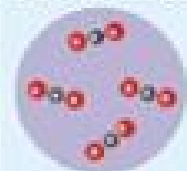
ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

- тип кристаллической решётки (сингония, решетка Бравэ);
- пространственная группа;
- параметры элементарной ячейки (линейные размеры и углы);
- координаты атомов в ячейке;
- координационные числа всех атомов.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ
CO₂



Углекислый
газ

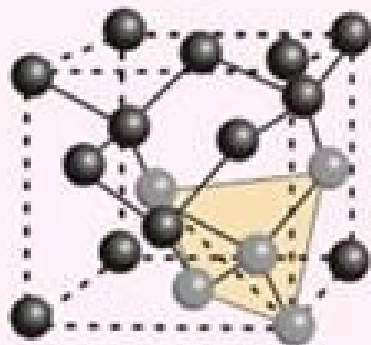


$t_{\text{кип}} -78^{\circ}\text{C}$

Твердая двуокись
углерода



АТОМНЫЕ
C

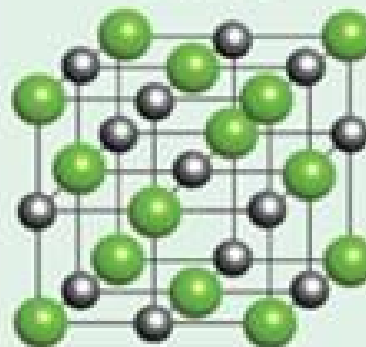


$t_{\text{пл}} 3500^{\circ}\text{C}$
 $t_{\text{кип}} 4200^{\circ}\text{C}$

Алмаз



ИОННЫЕ
NaCl

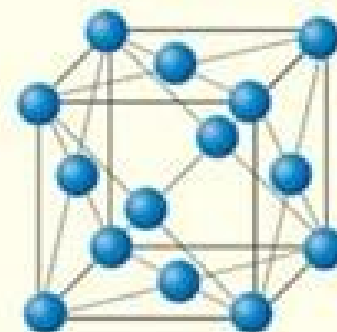


$t_{\text{пл}} 801^{\circ}\text{C}$
 $t_{\text{кип}} 1465^{\circ}\text{C}$

Галит



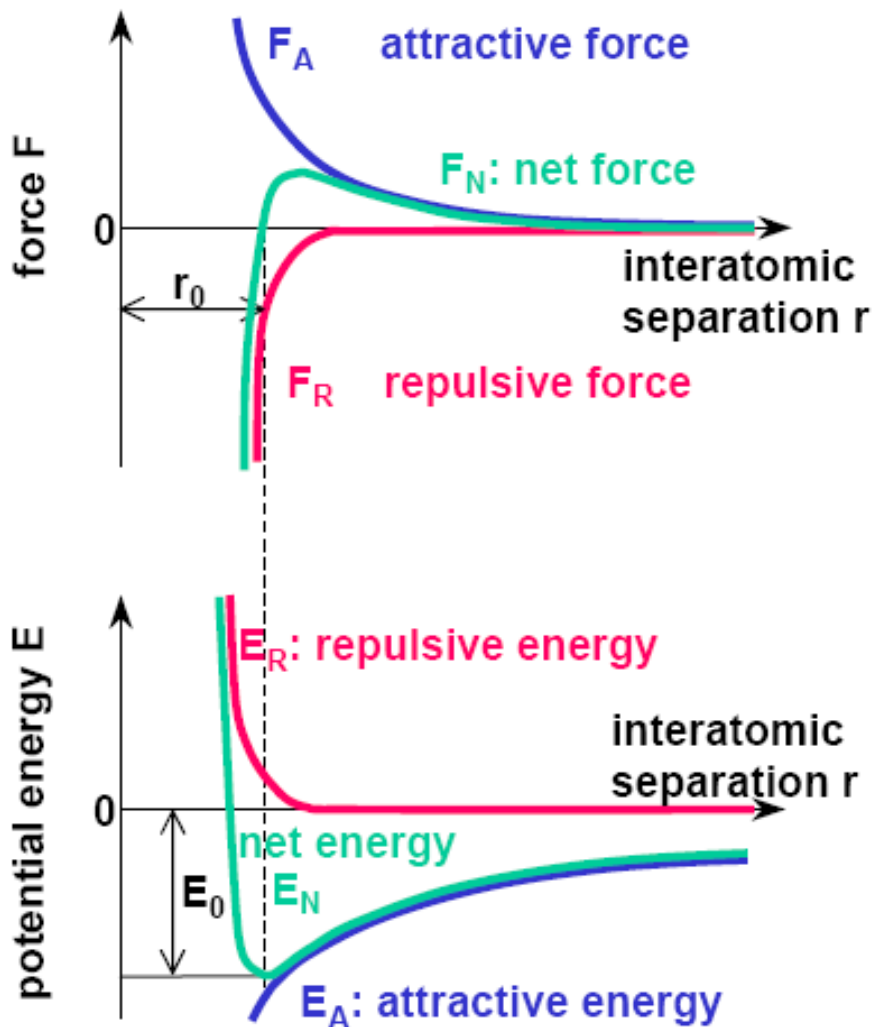
МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ
Cu



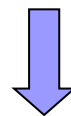
$t_{\text{пл}} 1083^{\circ}\text{C}$
 $t_{\text{кип}} 2567^{\circ}\text{C}$

Медь

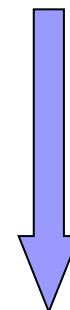




Кристаллическая решетка



Решетки Бравэ



Решетки с базисом

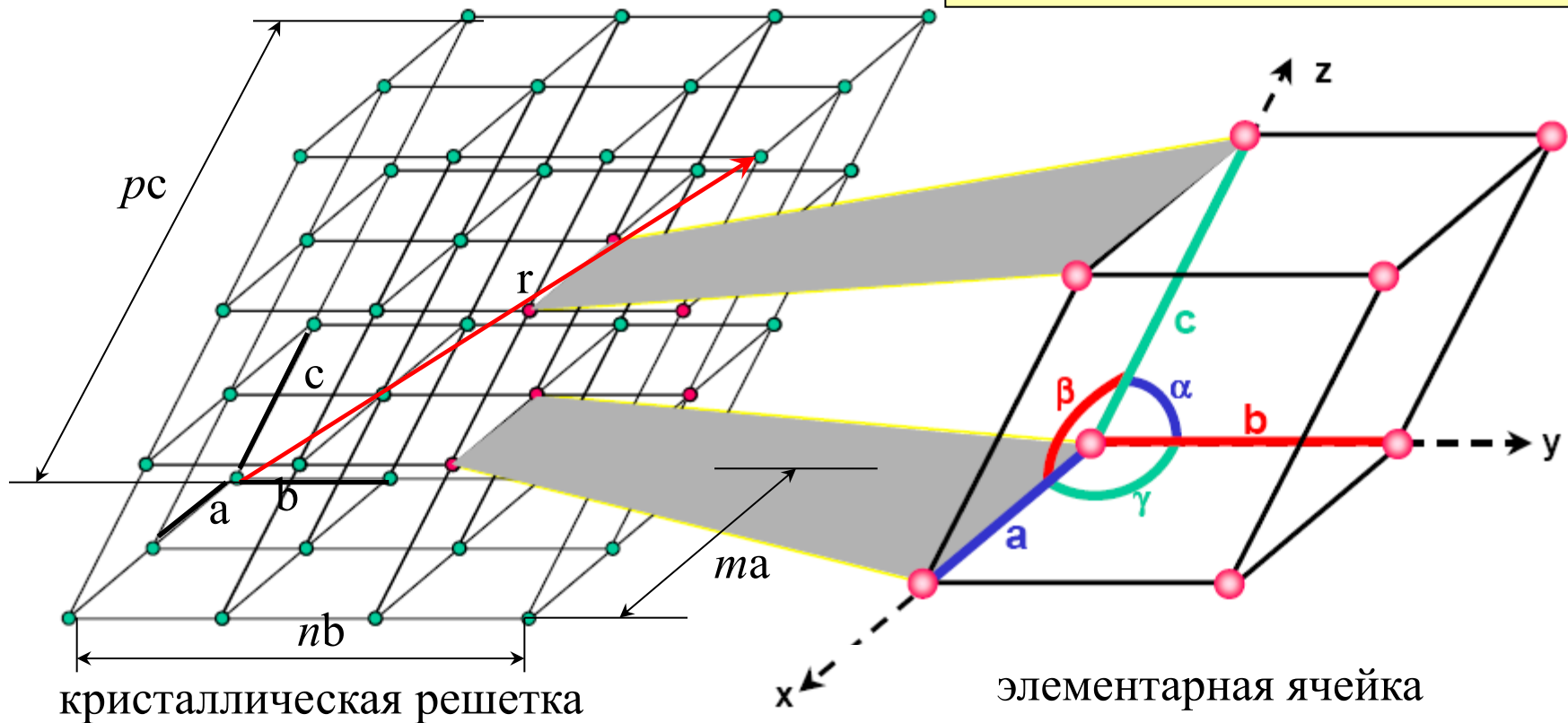
Зависимость силы и энергии взаимодействия частиц от расстояния r между ними

РЕШЕТКИ БРАВЭ

Положение любой частицы в такой решетке определяется вектором:

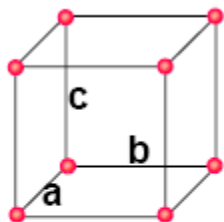
$$\mathbf{r} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

x, y, z – оси координат
 a, b, c – вектора трансляции
 α, β, γ – углы между гранями

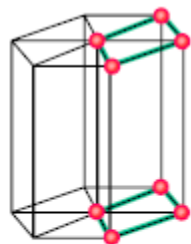


ГЕОМЕТРИЯ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЯЧЕЕК ДЛЯ СЕМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ (СИНГОНИЙ)

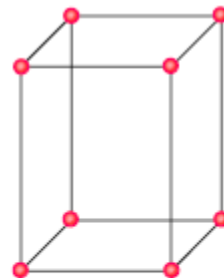
По форме различают семь типов элементарных ячеек: триклинную, моноклинную, ромбическую, ромбоэдрическую, гексагональную, тетрагональную и кубическую.



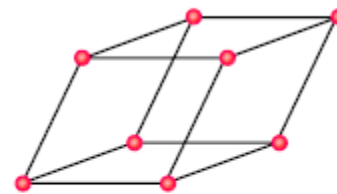
кубическая
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



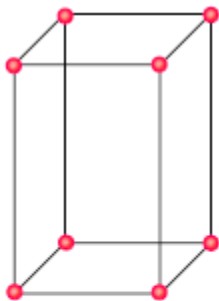
гексагональная
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$



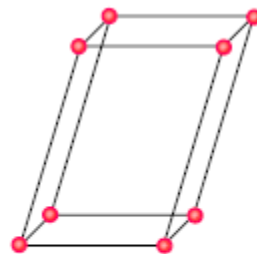
тетрагональная
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



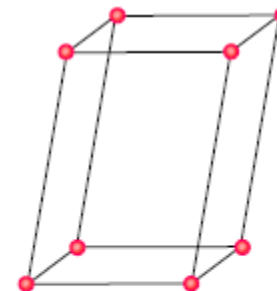
ромбоэдрическая
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$









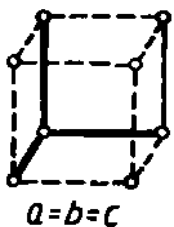
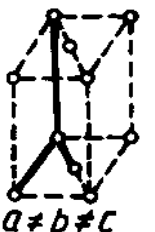
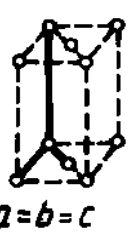


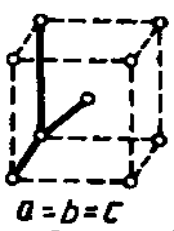

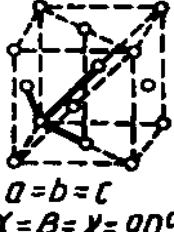
ромбическая
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



моноклинная
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$



триклинная
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Тип решетки	Сингония						
	Триклинная	Моноклиная	Ромбическая	Тетрагональная	Тригональная	Гексагональная	Кубическая
Примитивный $z=1$	 $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	 $a = b \neq c$ $\gamma = 120^\circ$ $\alpha = \beta = 90^\circ$	 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Базоцентрированный $z=2$		 $a \neq b \neq c$ $\beta \neq 90^\circ \neq \alpha = \gamma = 90^\circ$	 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
Объемно центрированный $z=2$			 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$			 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гранецентрированный $z=4$			 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

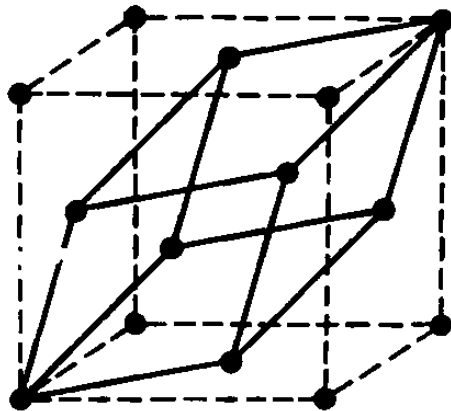
ПРОСТЫЕ И СЛОЖНЫЕ РЕШЕТКИ

В **простой решетке** на одну ячейку приходится один узел, в *сложной* — несколько узлов.

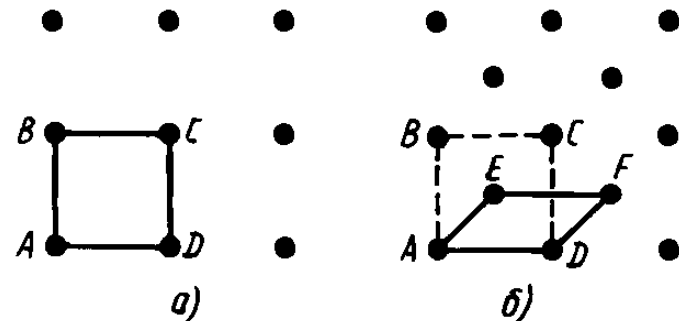
Объемно центрированная решетка (ОЦ) — двухузельная

Гранецентрированная (ГЦ) — четырехузельная

Базоцентрированная (БЦ) — двухузельная

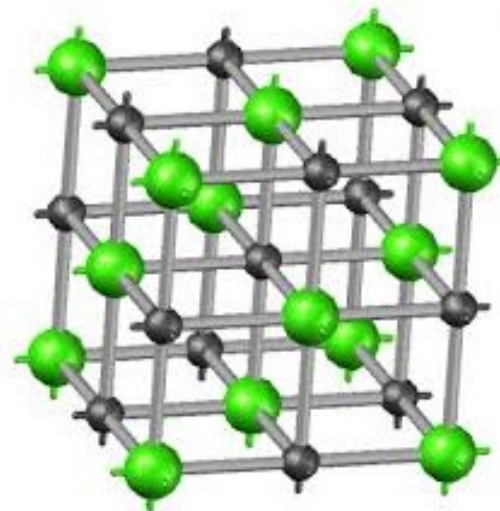
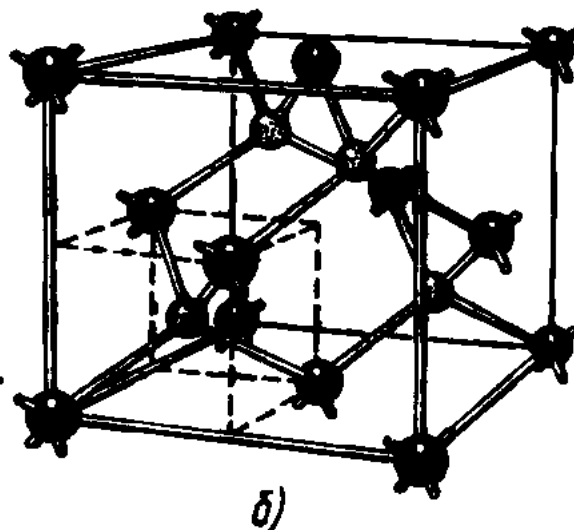
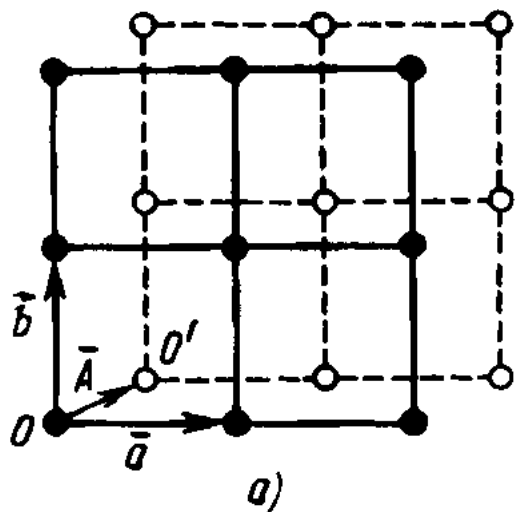


Четырехузельная гранецентрированная решетка (обведена пунктиром) и отвечающая ей одноузельная простая решетка (обведена сплошными линиями)



Форма элементарной ячейки: а) одноузельная квадратная ячейка ABCD, б) двухузельная квадратная ячейка ABCD, которой соответствует одноузельная ячейка AEFD

РЕШЕТКА С БАЗИСОМ



а) плоская решетка с базисом (OO' – базис решетки), б) объемная решетка с базисом – решетка типа алмаза с тетраэдрическим расположением атомов (тетраэдр выделен штриховыми линиями)

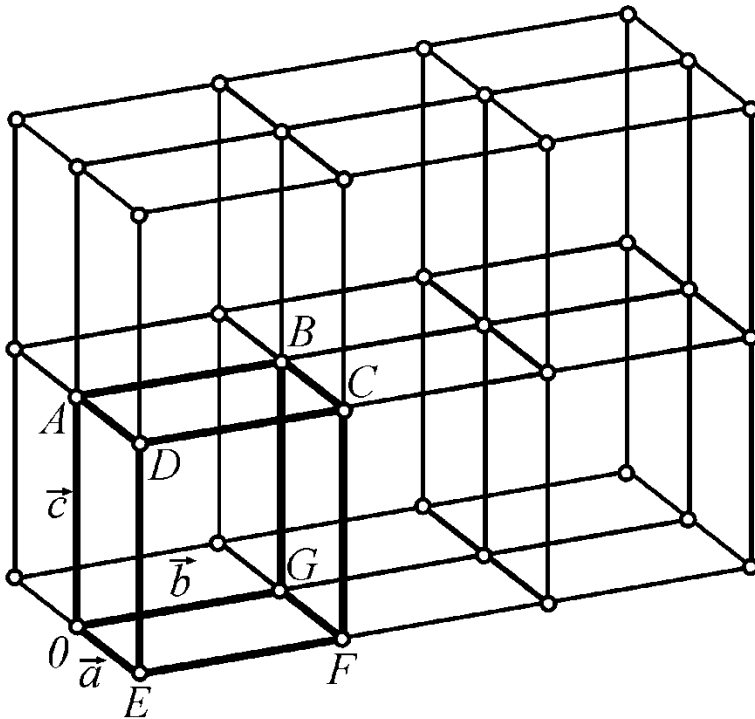
ВЫБОР КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ КООРДИНАТ

- В кристаллографии описание решетки начинается с выбора координатной системы, причем выбор осей берется в соответствии с решеткой Бравэ.
- За начало координат в решетке принимается, как правило, положение одного из узловых атомов.
- За единицу измерения вдоль каждой оси принимается период решетки, т. е. длина ребер элементарной ячейки

Существуют два отличия кристаллографической системы координат от обычной геометрической:

- В кристаллографической системе масштаб измерений по каждой оси самостоятелен и равен периоду идентичности.
- В случае косоугольной элементарной ячейки в кристаллографии принимается косоугольная система координат, а не ортогональная.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ РЕШЕТКА



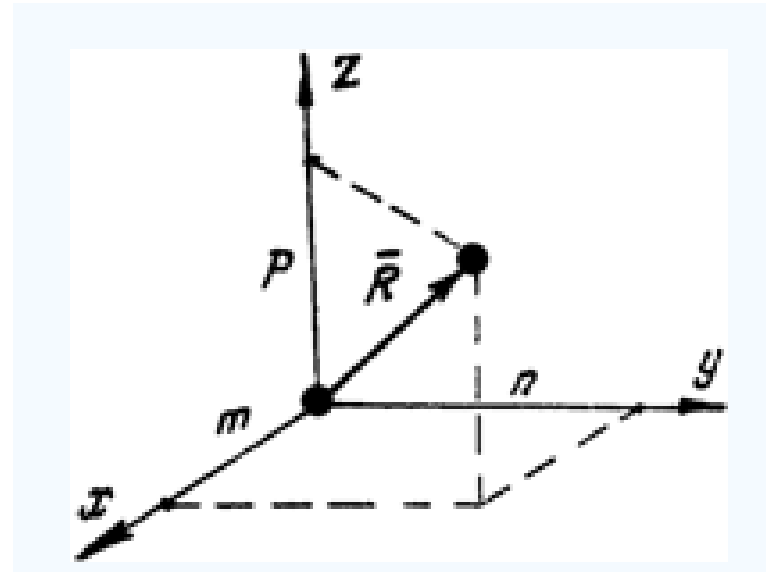
Обозначение узлов решетки

- $[mnp]$ или $\left[\left[\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c} \right] \right]$

Вектор трансляций:

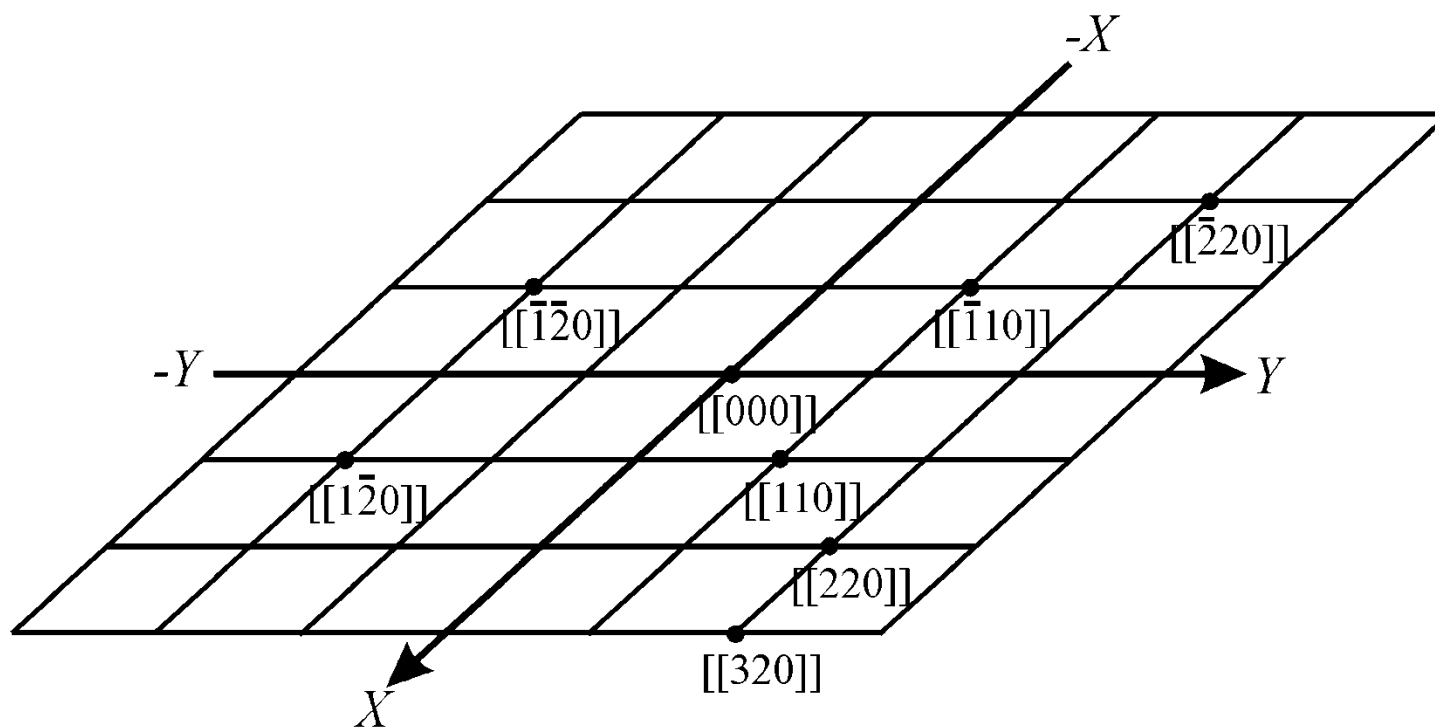
$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$$

m , n , p – целые числа, которые называют **индексами узлов пространственной решетки**



Кристаллографические индексы узла $[[mnp]]$

СИМВОЛЫ НЕСКОЛЬКИХ УЗЛОВ В КОСОУГОЛЬНОЙ ПЛОСКОЙ СЕТКЕ

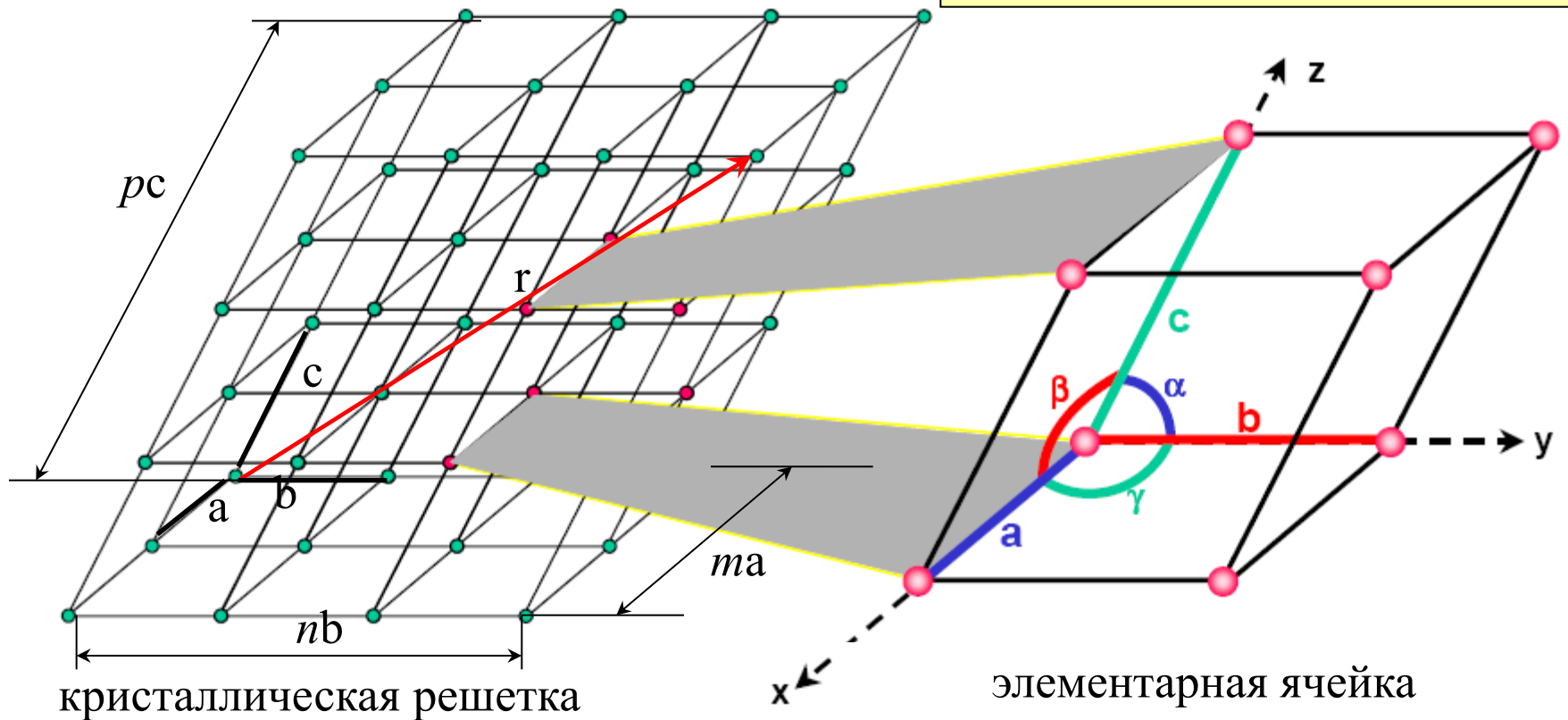


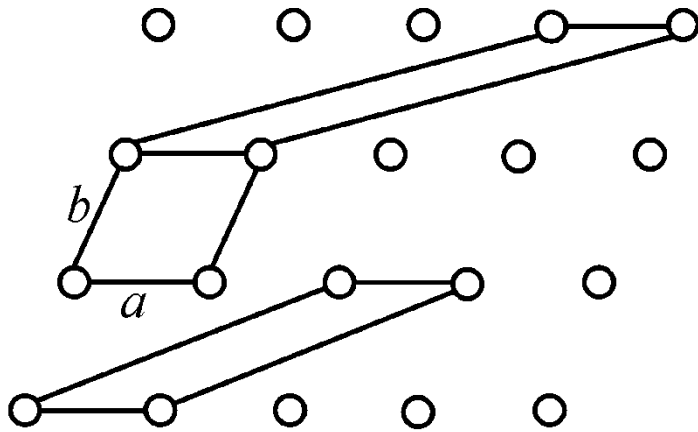
РЕШЕТКИ БРАВЭ

Модули векторов $|a|$, $|b|$, $|c|$ - периоды элементарной ячейки

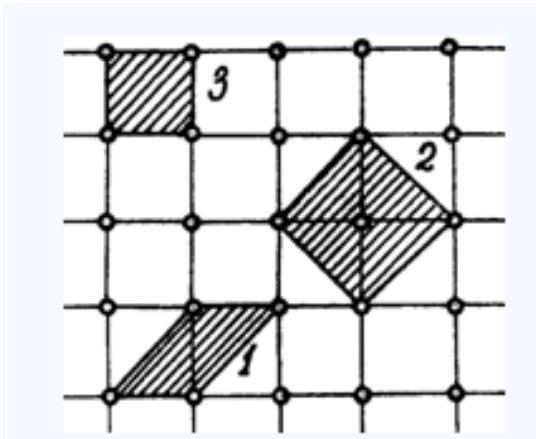
$$\mathbf{r} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

x, y, z – оси координат
 a, b, c – вектора трансляции
 α, β, γ – углы между гранями





Различные способы выбора
элементарных ячеек



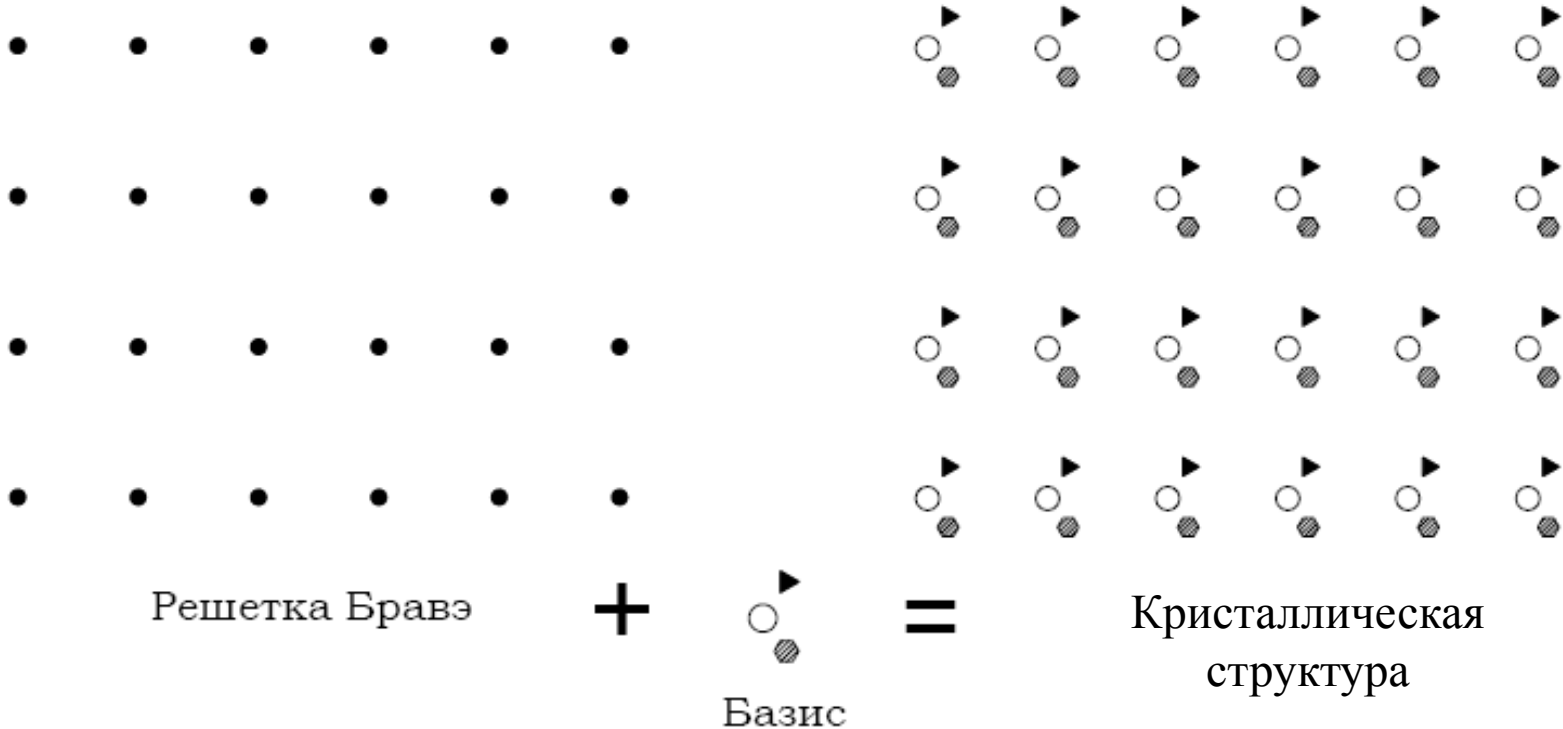
Выбор элементарной ячейки

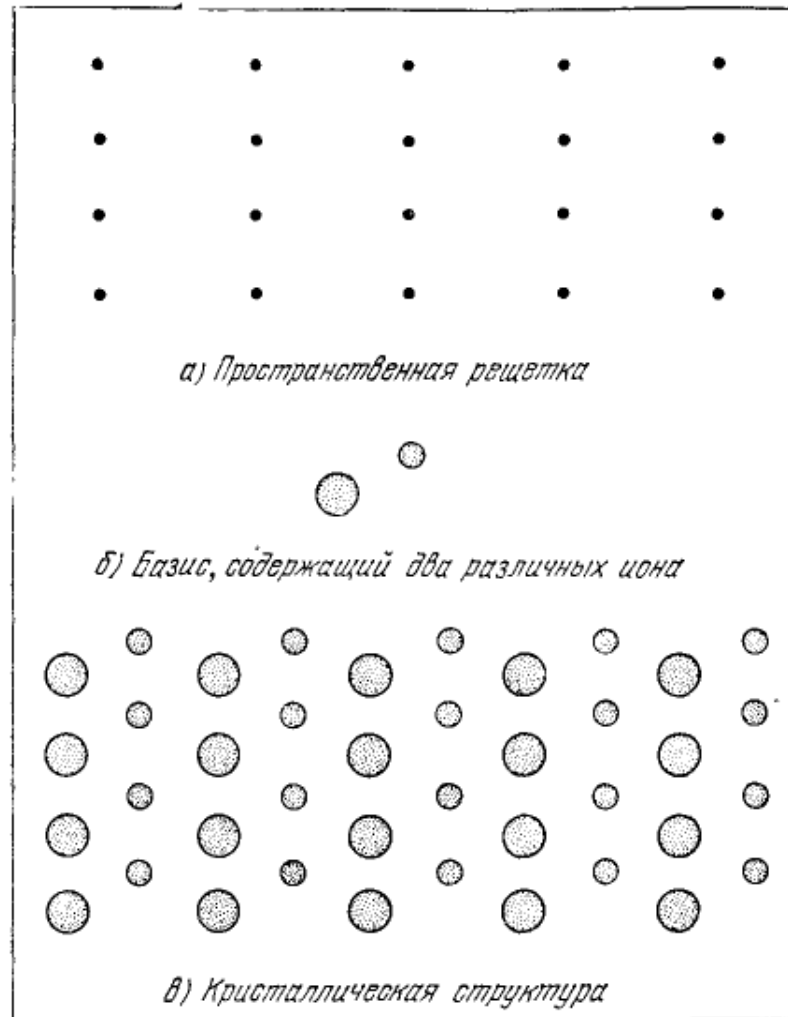
ПРАВИЛА ВЫБОРА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЯЧЕЕК

- Симметрия элементарной ячейки должна соответствовать симметрии кристалла.
- Элементарная ячейка должна иметь максимальное число равных ребер и равных углов.
- При условии выполнения двух первых правил элементарная ячейка должна иметь минимальный объем.

РЕШЕТКИ БРАВЭ РЕШЕТКИ С БАЗИСОМ

Базис – это совокупность координат атомов, расстояний между ними и направлений (углов) связей, которая повторяется в окрестности каждой точки решетки одинаковым образом, так что учитывается любой атом в кристалле.





Образование кристаллической структуры путем присоединения базиса (б) к каждой точке решетки (а).

**ОБЪЕМНОЦЕНТРИРОВАННАЯ
ЯЧЕЙКА**

(Обозначается буквой I)

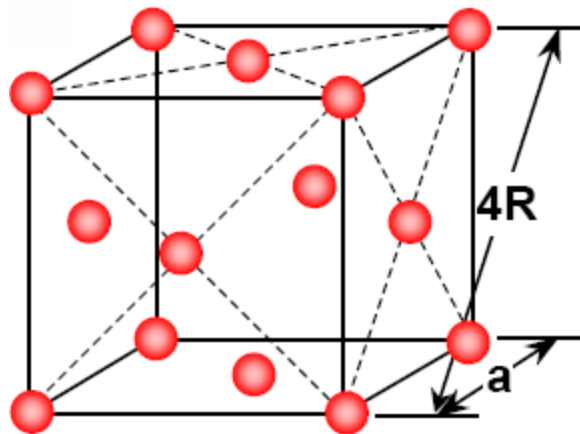
**БАЗОЦЕНТРИРОВАННАЯ
ЯЧЕЙКА**

(Обозначается буквой С)

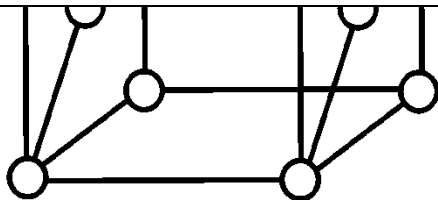
**ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННАЯ
ЯЧЕЙКА**

(Обозначается буквой F)

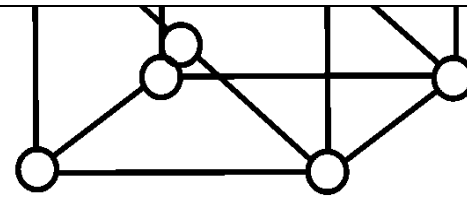
Н
П
е



Базис $[[000]]$, $[[0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}]]$, $[[\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}]]$, $[[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0]]$



B - $[[000]]$, $[[\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}]]$



A - $[[000]]$, $[[0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}]]$

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПЛОСКОСТИ

Кристалл можно представить в виде совокупности плоскостей, на которых расположены центры частиц.

Пусть плоскость проходит через координатные оси в узлах, которые находятся от начала координат на расстоянии ma , nb , pc . Индексы этих узлов соответственно $[[m00]]$, $[[0n0]]$, $[[00p]]$. Обратные числа $1/m$, $1/n$, $1/p$.

Приведем эти числа к общему знаменателю: $\frac{np}{mnp}$ $\frac{mp}{mnp}$ $\frac{nt}{mnp}$

$$\left. \begin{array}{l} np = H \\ mp = K \\ mn = L \end{array} \right\} \text{индексы Миллера} \rightarrow (HKL)$$

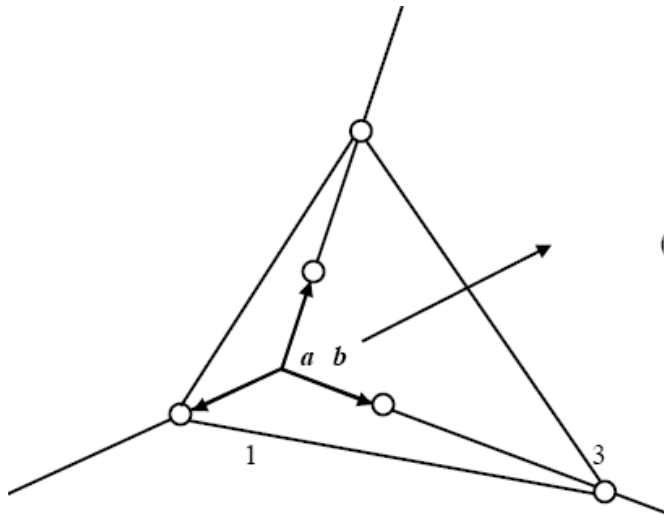
ПРИМЕР: плоскость проходит через узлы $[[003]]$; $[[020]]$; $[[001]]$.

Обратные числа $1/3$, $1/2$, 1 , следовательно, данная плоскость имеет индексы Миллера (236).

ИНДЕКСЫ МИЛЛЕРА

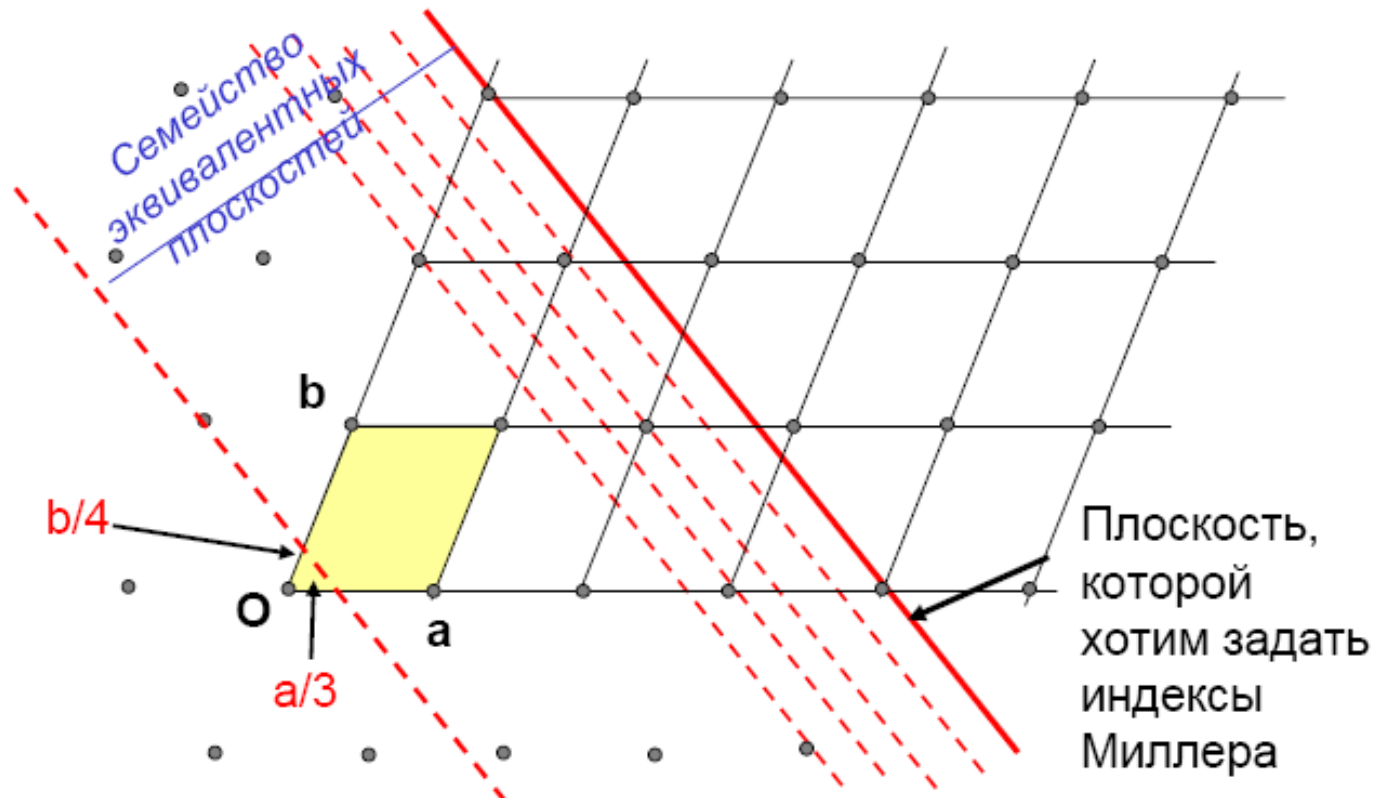
Определяются следующим образом:

- Положение одного из атомов выбирают за начало координат, от которого проводят координатные оси в направлениях основных векторов (a, b, c).
- Точки пересечения воображаемой кристаллографической плоскости с этими координатными осями выражают целыми числами, приняв за единицу длины основных векторов (точки 1, 2, 3 на рисунке)
- Величины, обратные этим числам, умножают на их минимальный общий знаменатель, получая простейшую последовательность целых чисел.



индексы Миллера для данной кристаллографической плоскости $(1/1, 1/3, 1/2) \cdot 6 = (623)$.

ИНДЕКСЫ МИЛЛЕРА

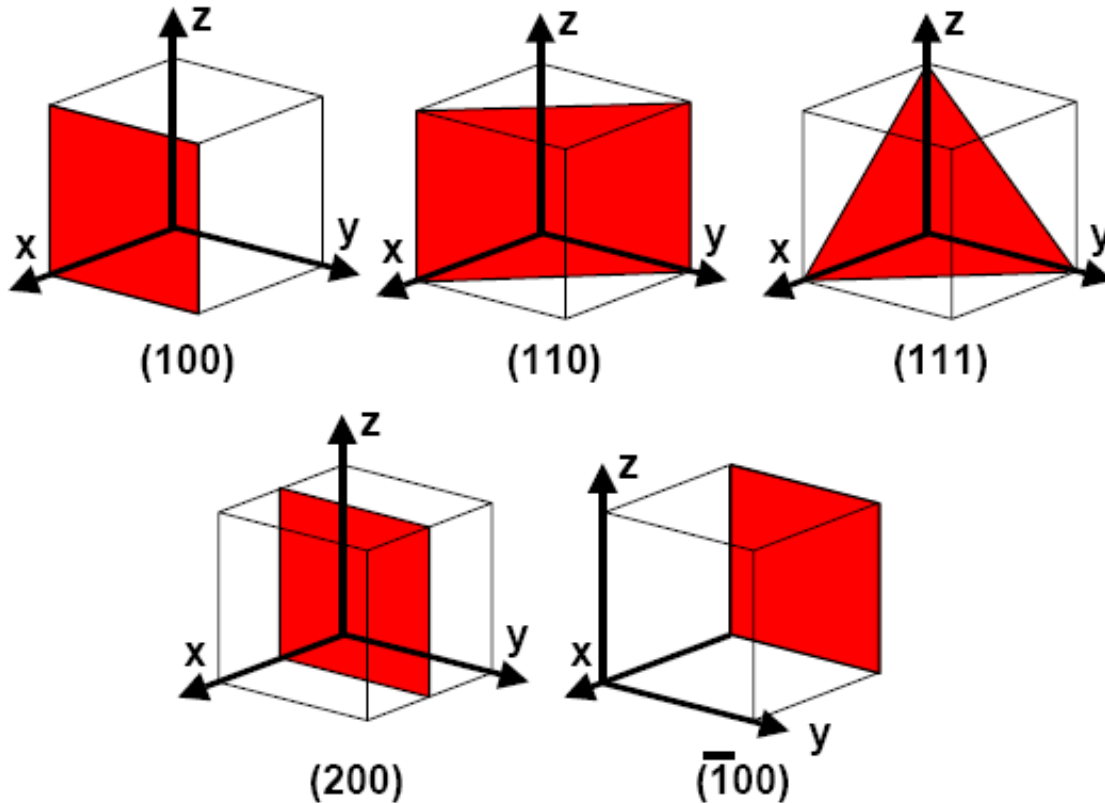


Возьмем плоскость, которая пересекает кристаллические оси в точках с координатами $4a$ и $3b$

Ближайшая к началу координат и параллельная заданной плоскость пересекает оси в точках $a/3$ и $b/4$

Соответственно искомая плоскость называется плоскость $(3,4)$ где 3 и 4 обозначают *индексы Миллера*

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПЛОСКОСТИ



Miller indices of a (200) plane

intercepts	0,5	∞	∞
reciprocals	2	0	0
reductions	not necessary		
enclosure	(200)		

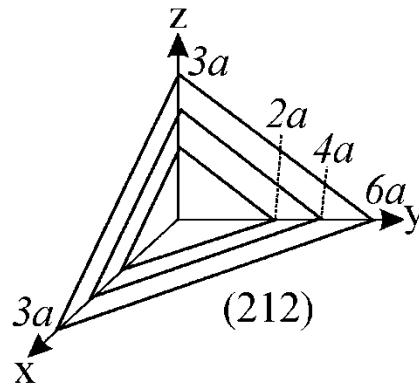
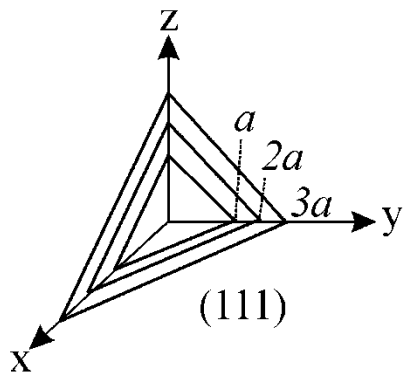
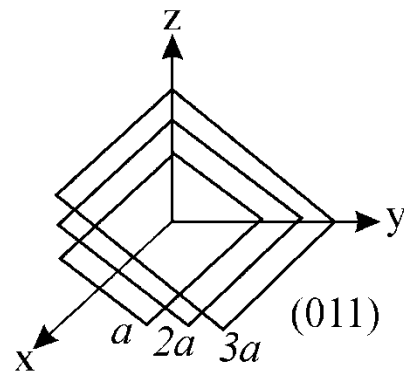
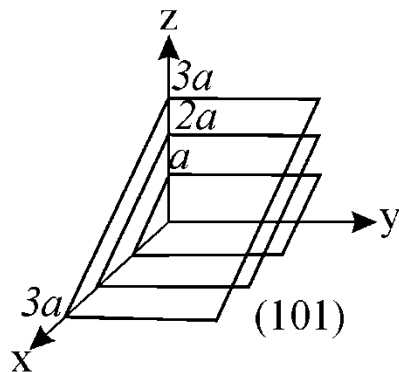
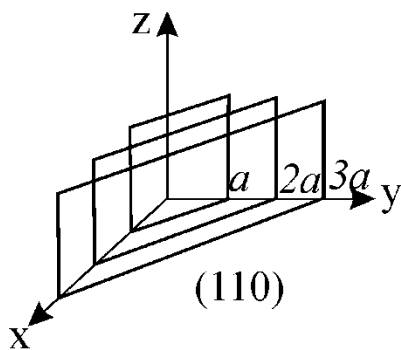
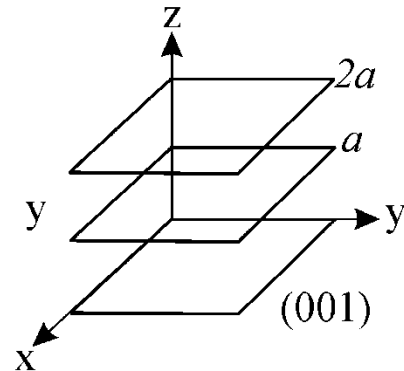
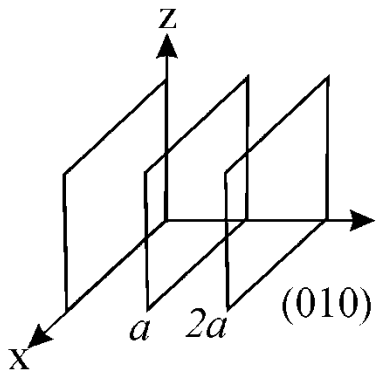
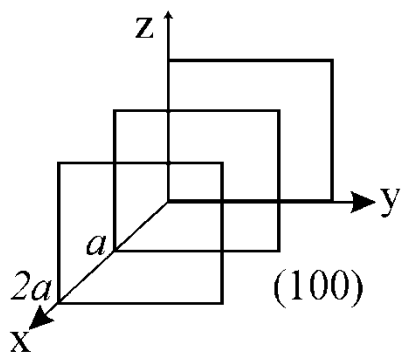
Miller indices of a $(\bar{1}00)$ plane

intercepts	-1	∞	∞
reciprocals	-1	0	0
reductions	not necessary		
enclosure	$(\bar{1}00)$		

A "family" of (hkl) : $\{hkl\}$
 e.g., in cubic crystals, $\{100\}$:
 (100) , (010) , (001)
 $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$

• crystallographic plane - Miller indices (hkl)

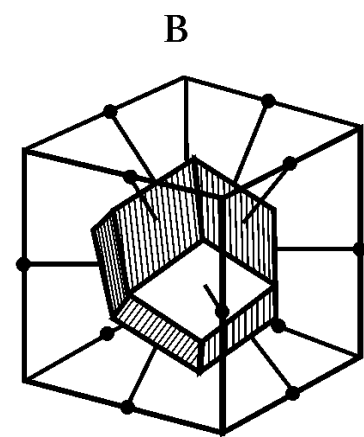
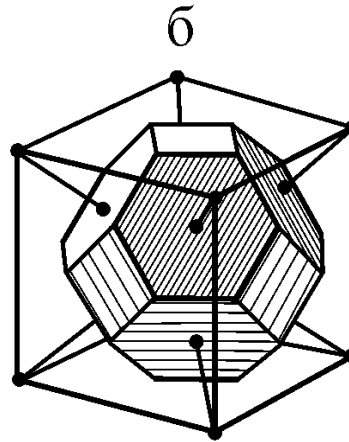
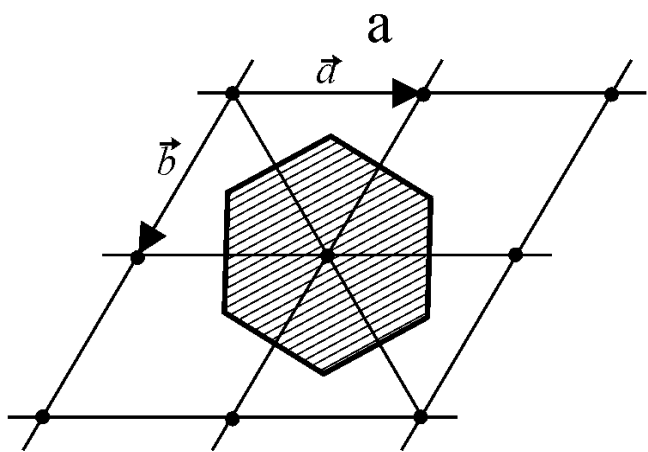
СЕМЕЙСТВО ПЛОСКСТЕЙ



ЯЧЕЙКА ВАГНЕРА-ЗЕЙТЦА

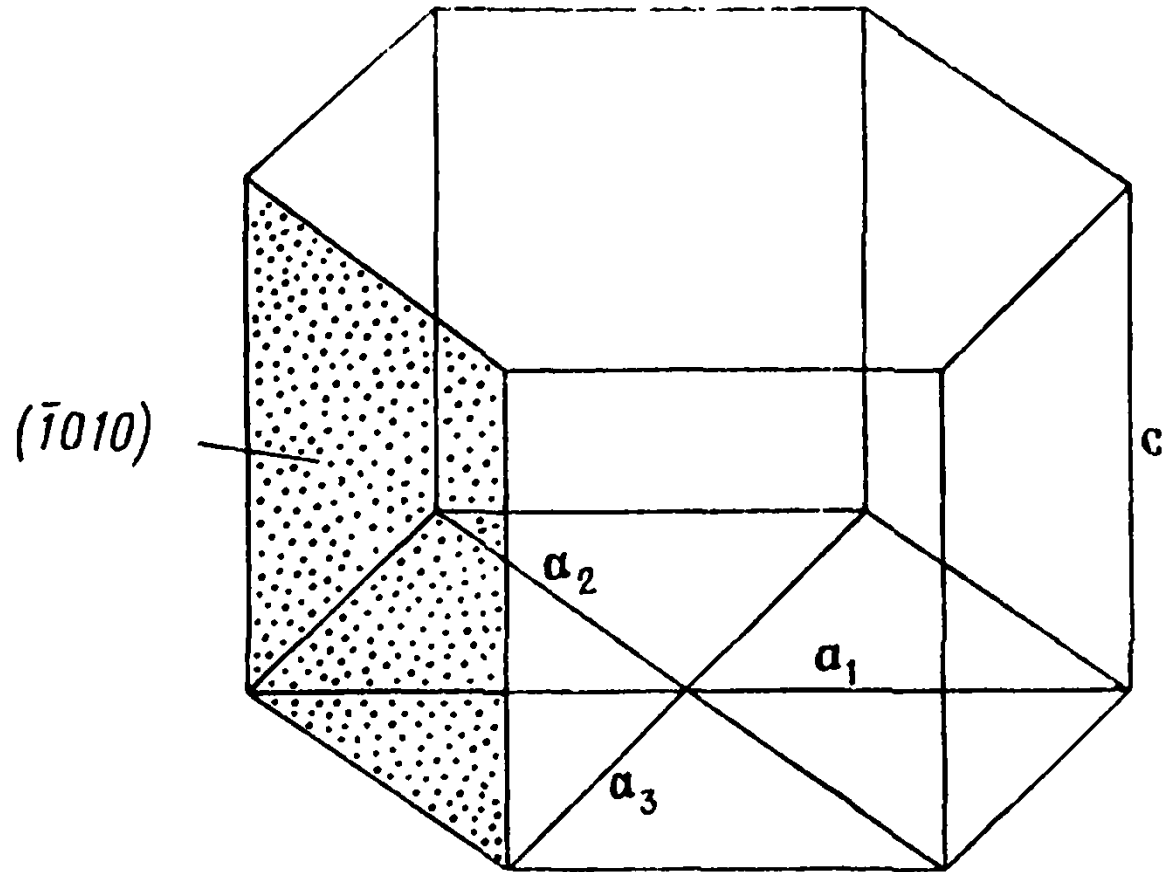
Построение

- Выбирается произвольный узел решетки Бравэ и соединяется со всеми ближайшими соседними узлами.
- Через середины этих отрезков проводим перпендикулярные отрезкам плоскости.
- Ограниченная плоскостями область наименьшего объема будет являться ячейкой Вагнера — Зейтца.



а – двумерный случай (заштрихованная область),
б – для объемноцентрированной кубической ячейки,
в – для гранецентрированной кубической ячейки

Наиболее естественная элементарная ячейка для гексагональных и тригональных кристаллов



ПАРАМЕТРЫ РЕШЕТКИ

Период решетки – расстояние между центрами двух соседних частиц (атомов, ионов) в элементарной ячейке решетки.

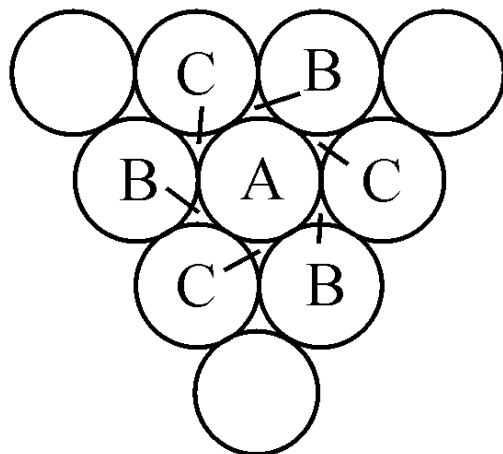
Энергия кристаллической решетки – энергия, выделяющаяся при образовании кристалла из ионов, атомов или других частиц, образующих кристалл, когда исходное состояние этих частиц газообразное (зависят температура плавления, модуль упругости, прочность, твердость и др.)

Координационное число – количество атомов, находящихся на наиболее близком и равном расстоянии от любого выбранного атома в решетке.

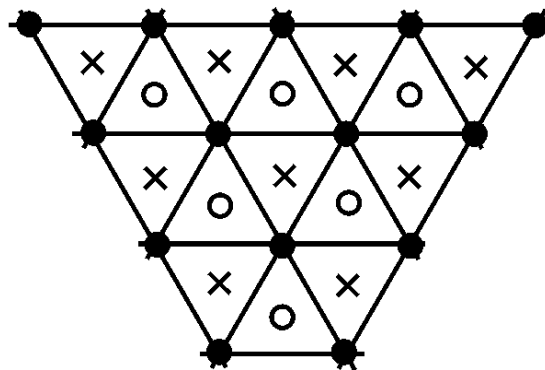
Базис решетки – количество атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку решетки.

Коэффициент компактности η решетки определяется отношением объема, занимаемого атомами V_a , ко всему объему решетки V_p , т. е. $\eta = V_a / V_p$.

ПРИНЦИП ПЛОТНОЙ УПАКОВКИ АТОМОВ



а

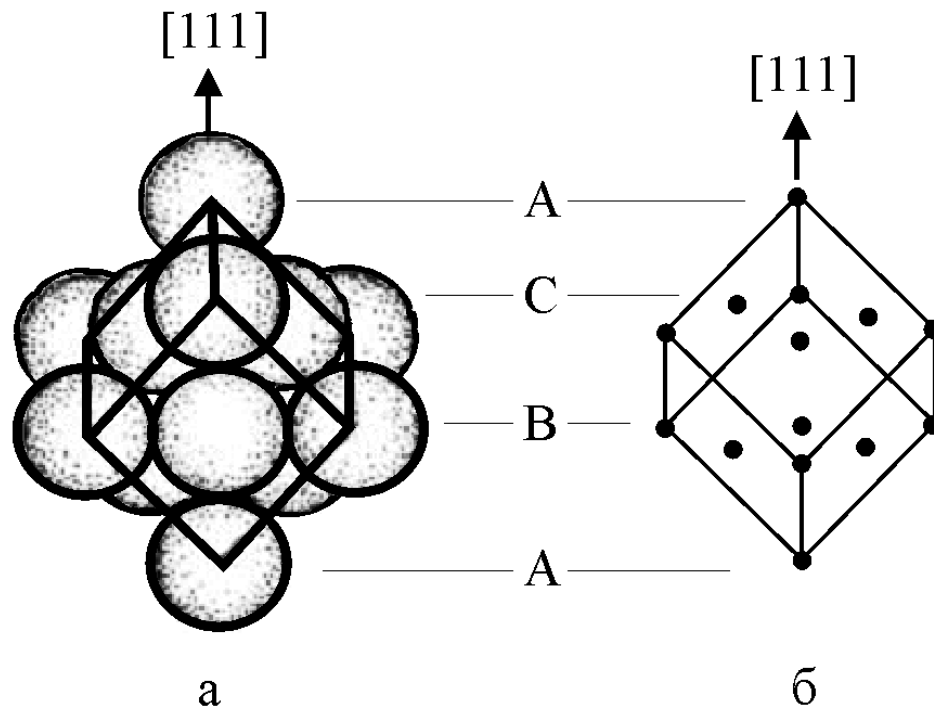
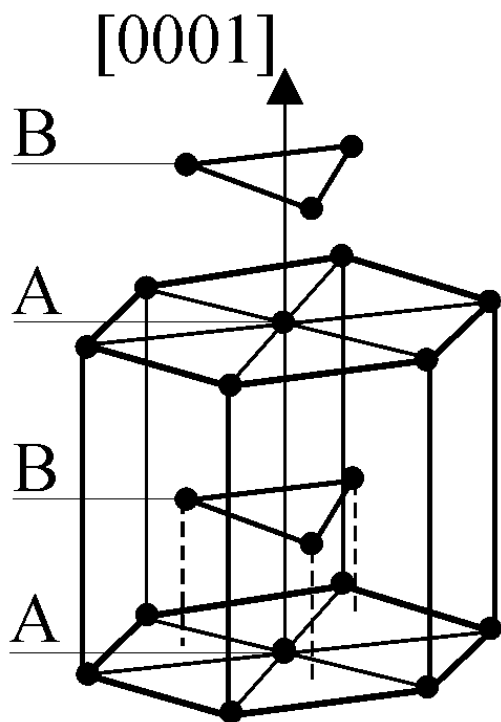


б

а – плоский слой шаров одинакового радиуса;

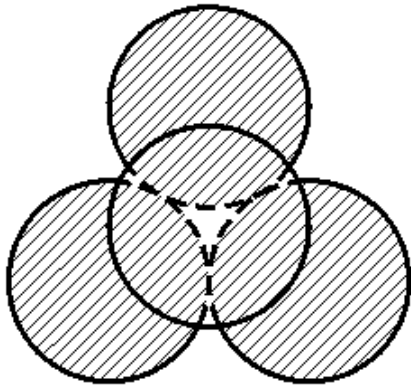
б – тот же слой, представленный в виде сетки, узлами которой являются центры треугольных пустот, образуемых шарами А

ПЛОТНЕЙШАЯ ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ И ПЛОТНЕЙШАЯ КУБИЧЕСКАЯ УПАКОВКИ АТОМОВ

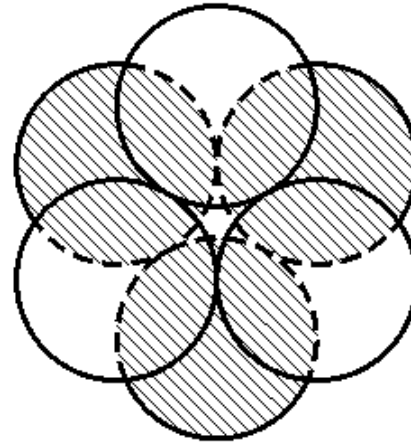


а – упаковка шаров в ГЦК структуре;
б – кубическая гранецентрированная
элементарная ячейка

УПАКОВКА АТОМОВ



а



б



Пустоты в плотной упаковке шаров:

а – тетраэдрическая;

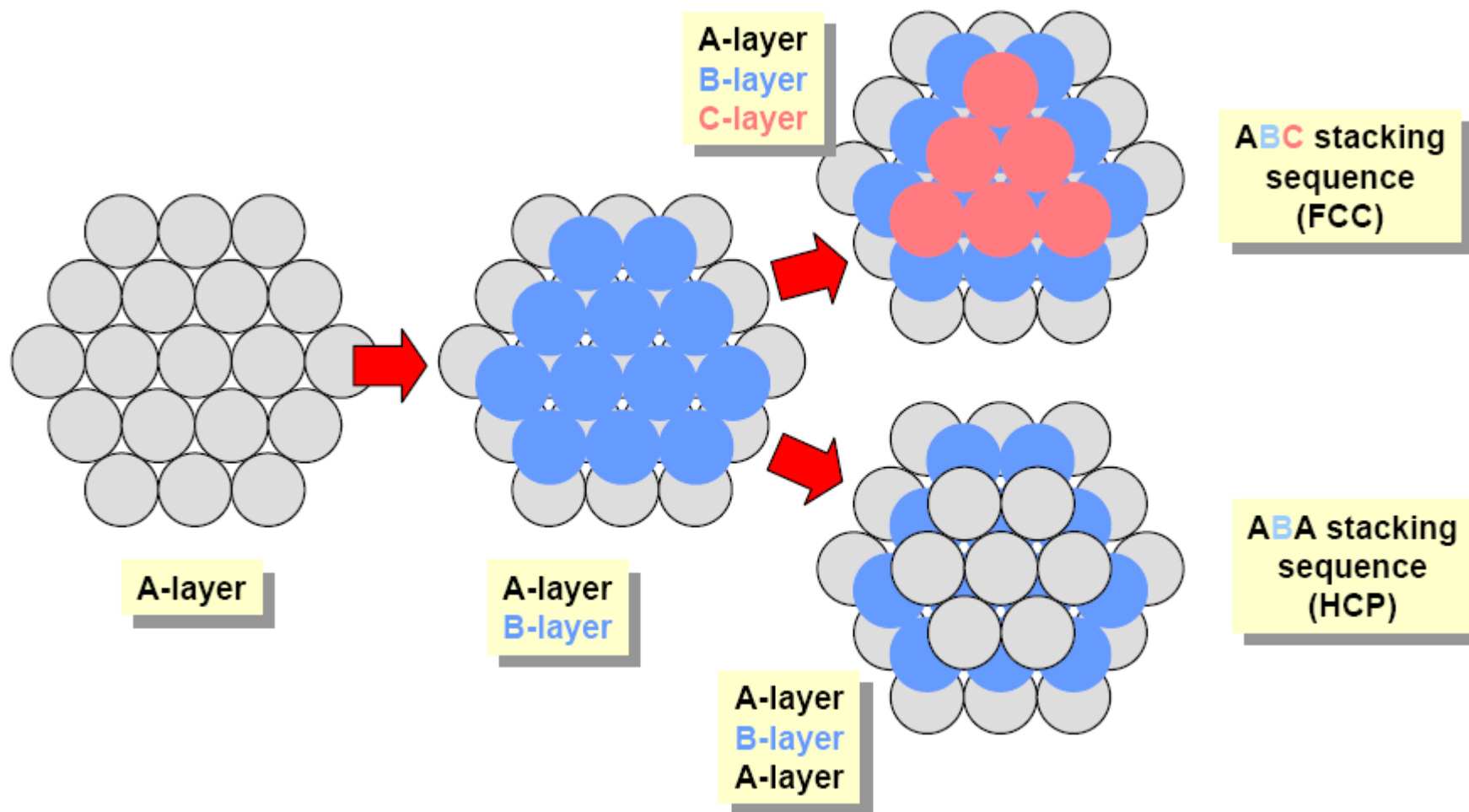
б – октаэдрическая пустоты (шары нижнего слоя заштрихованы)

Коэффициент упаковки – доля пространства, занимаемого атомами элементарной ячейки от объема ячейки:

$$\eta = \frac{V_{ат} \cdot n_{ат}}{V_{яч}}$$

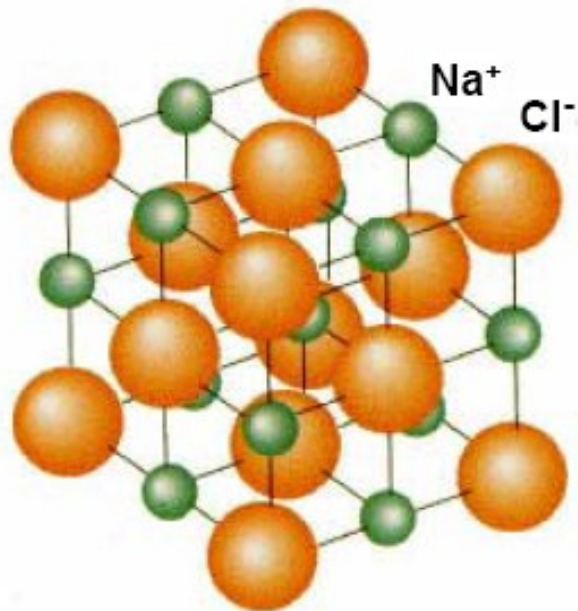
$V_{ат}$ – объем атома; $n_{ат}$ – количество атомов, приходящихся на элементарную ячейку; $V_{яч}$ – объем элементарной ячейки

ПЛОТНОУПАКОВАННЫЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ



ПРОСТЫЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

Структура хлористого натрия.



Пространственной решеткой является гранецентрированная кубическая, а базис состоит из иона Na^+ с координатами 000 и иона хлора Cl^- – с координатами $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$.

Коэффициент упаковки $\eta=52,3\%$

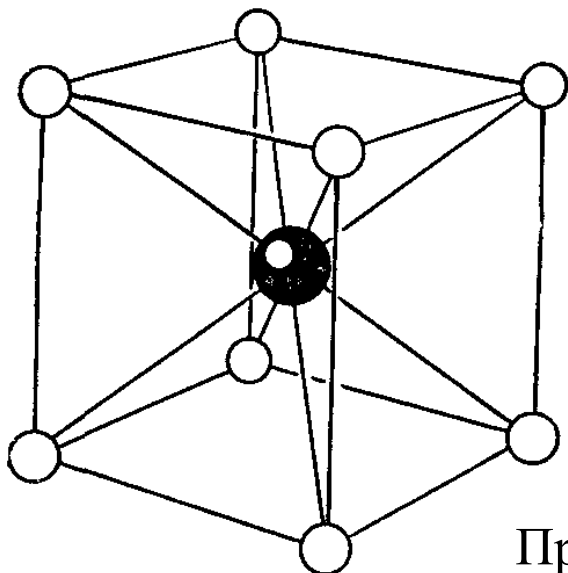
Период ячейки $a=5,65 \text{ \AA}$

Представители кристаллов, имеющих структуру типа NaCl:

$\eta=52,3$
 $a=5,64$

Кристалл	$a, \text{ \AA}$	Кристалл	$a, \text{ \AA}$
LiH	4,08	AgBr	5,77
NaCl	5,63	MgO	4,20
KCl	6,29	MnO	4,43
PbS	5,92	KBr	6,59

Структура хлористого цезия.



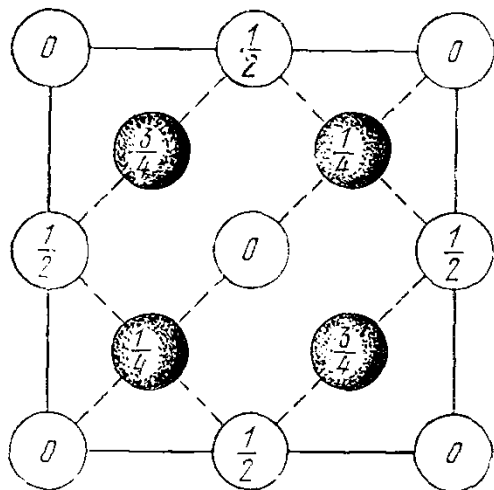
В структуре хлористого цезия на элементарную ячейку приходится одна молекула.

Базис содержит один атом Cs с координатами 000 и один атом хлора с координатами $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$.

Представители кристаллов, имеющих структуру типа CsCl:

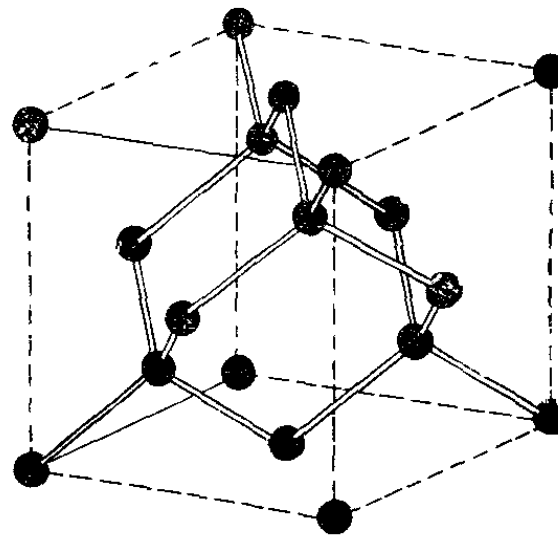
Кристалл	а, А	К риста.тл	а, А
CsCl	4,11	CuZn (В-латунь)	2,91
TlBr	3,97	AgMg	3,28
ТП	4,20	LiHg	3,29
NH ₄ Cl	3,87	AlNi	2,88
CuPd	2,99	BsCu	2,70

Структура алмаза.



Расположение атомов в элементарной кубической ячейке алмаза (проекция на грань куба)

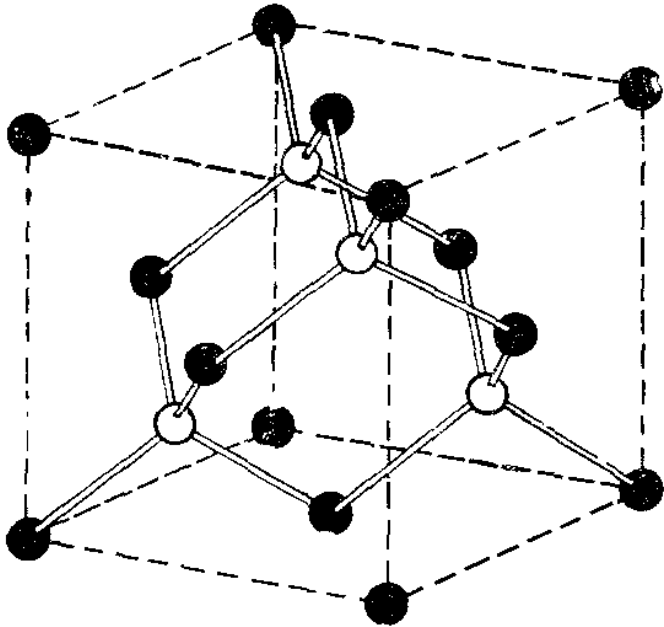
Значения дробей указывают высоту атомов над базисной плоскостью (за единицу длины принято ребро куба)



Кристаллическая структура алмаза, показывающая тетраэдрическое расположение связей

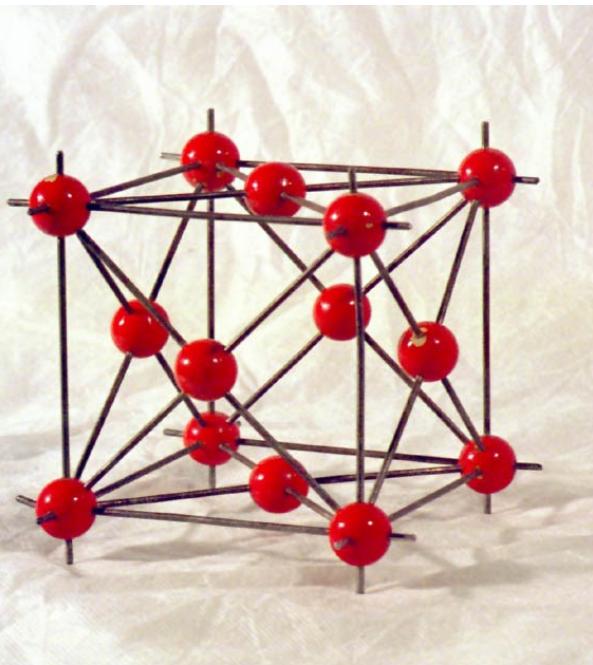
Базис состоит из двух одинаковых атомов, имеющих координаты 000 и $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$.

Кубическая модификация структуры сульфида цинка.

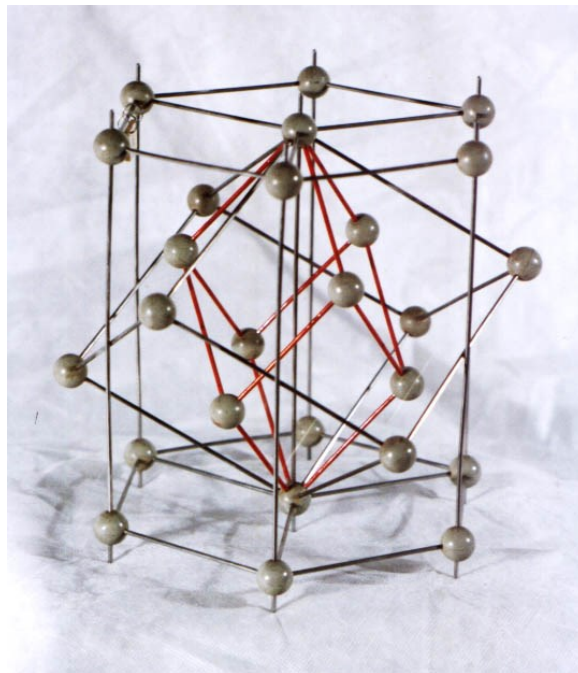


Пространственная решетка – гранецентрированная кубическая. Элементарная ячейка содержит четыре молекулы ZnS . Вокруг каждого атома на разном расстоянии от него имеется четыре атома другого сорта, размещенных в узлах правильного тетраэдра.

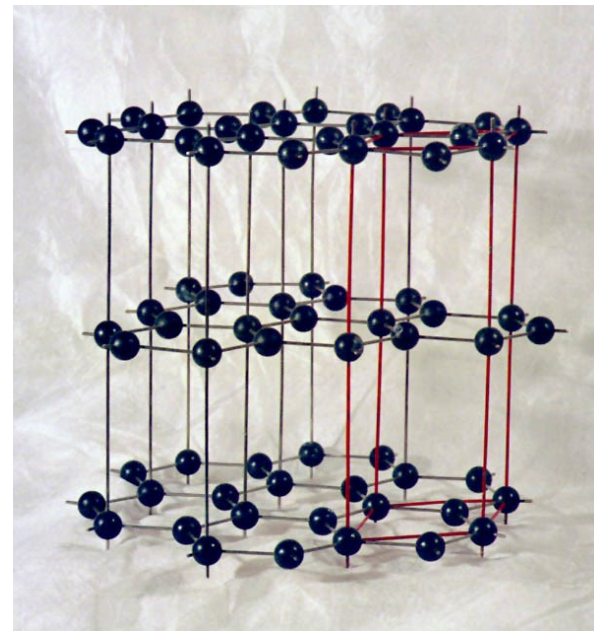
Медь (Cu)



Hg

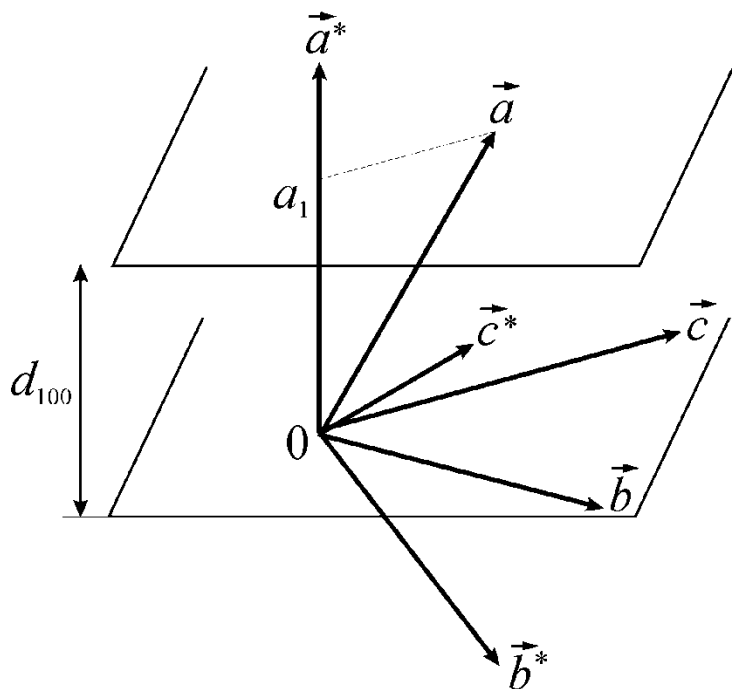


Графит



ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА

Обратная решетка представляет собой удобную абстракцию, позволяющую математически просто описать условия протекания того или иного явления в твердом кристаллическом теле.



Семейство плоскостей, параллельных векторам \mathbf{b} и \mathbf{c} (плоскости (100), можно изобразить точкой на конце вектора \mathbf{a}^* , перпендикулярного к этим плоскостям.

Длина этого вектора = величине, обратной соответствующему межплоскостному расстоянию

$$d_{100} = |Oa_1|$$

Длина вектора \mathbf{a}^* - из условия:

$$a^* \cdot |Oa_1| = 1$$

$$(\vec{a} \vec{a}) = 1; \quad (\vec{a} \vec{b}) = 0; \quad (\vec{a} \vec{c}) = 0$$

$$(\vec{b} \vec{a}) = 0; \quad (\vec{b} \vec{b}) = 1; \quad (\vec{b} \vec{c}) = 0;$$

$$(\vec{c} \vec{a}) = 0; \quad (\vec{c} \vec{b}) = 0; \quad (\vec{c} \vec{c}) = 1.$$

ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА

По аналогии с прямой кристаллической решеткой можем теперь определить нормаль к плоскости (hkl) как *точку* в элементарной ячейке, заданной векторами \underline{a}^* , \underline{b}^* и \underline{c}^* , где

$$\underline{a}^* = 2\pi \cdot \frac{[\underline{b} \times \underline{c}]}{\underline{a} \cdot [\underline{b} \times \underline{c}]} \quad \text{ортогонален к } \underline{b} \text{ и } \underline{c}$$

$$\underline{b}^* = 2\pi \cdot \frac{[\underline{c} \times \underline{a}]}{\underline{a} \cdot [\underline{b} \times \underline{c}]} \quad \text{ортогонален к } \underline{c} \text{ и } \underline{a}$$

$$\underline{c}^* = 2\pi \cdot \frac{[\underline{a} \times \underline{b}]}{\underline{a} \cdot [\underline{b} \times \underline{c}]} \quad \text{ортогонален к } \underline{a} \text{ и } \underline{b}$$

Из этих определений следует, что:

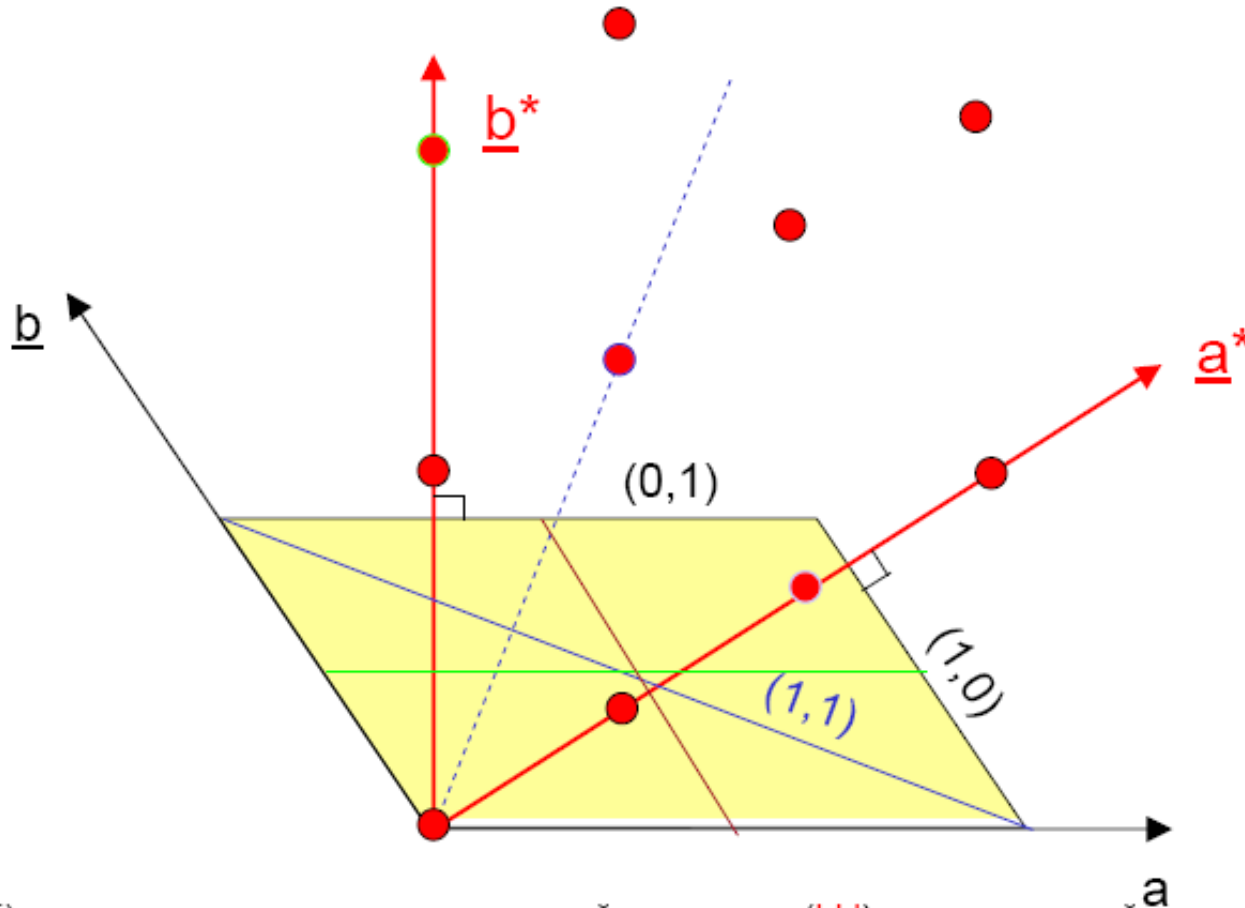
$$\underline{a}^* \cdot \underline{b} = 0 \quad \underline{a}^* \cdot \underline{c} = 0 \quad \underline{a}^* \cdot \underline{a} = 2\pi$$

$$\underline{b}^* \cdot \underline{c} = 0 \quad \underline{b}^* \cdot \underline{a} = 0 \quad \underline{b}^* \cdot \underline{b} = 2\pi$$

$$\underline{c}^* \cdot \underline{a} = 0 \quad \underline{c}^* \cdot \underline{b} = 0 \quad \underline{c}^* \cdot \underline{c} = 2\pi$$

Решетка, построенная на элементарных векторах трансляций \underline{a}^* , \underline{b}^* и \underline{c}^* , называется **Обратной Решеткой**, а \underline{a}^* , \underline{b}^* и \underline{c}^* *векторами обратной решетки*

ПОСТРОЕНИЕ ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ

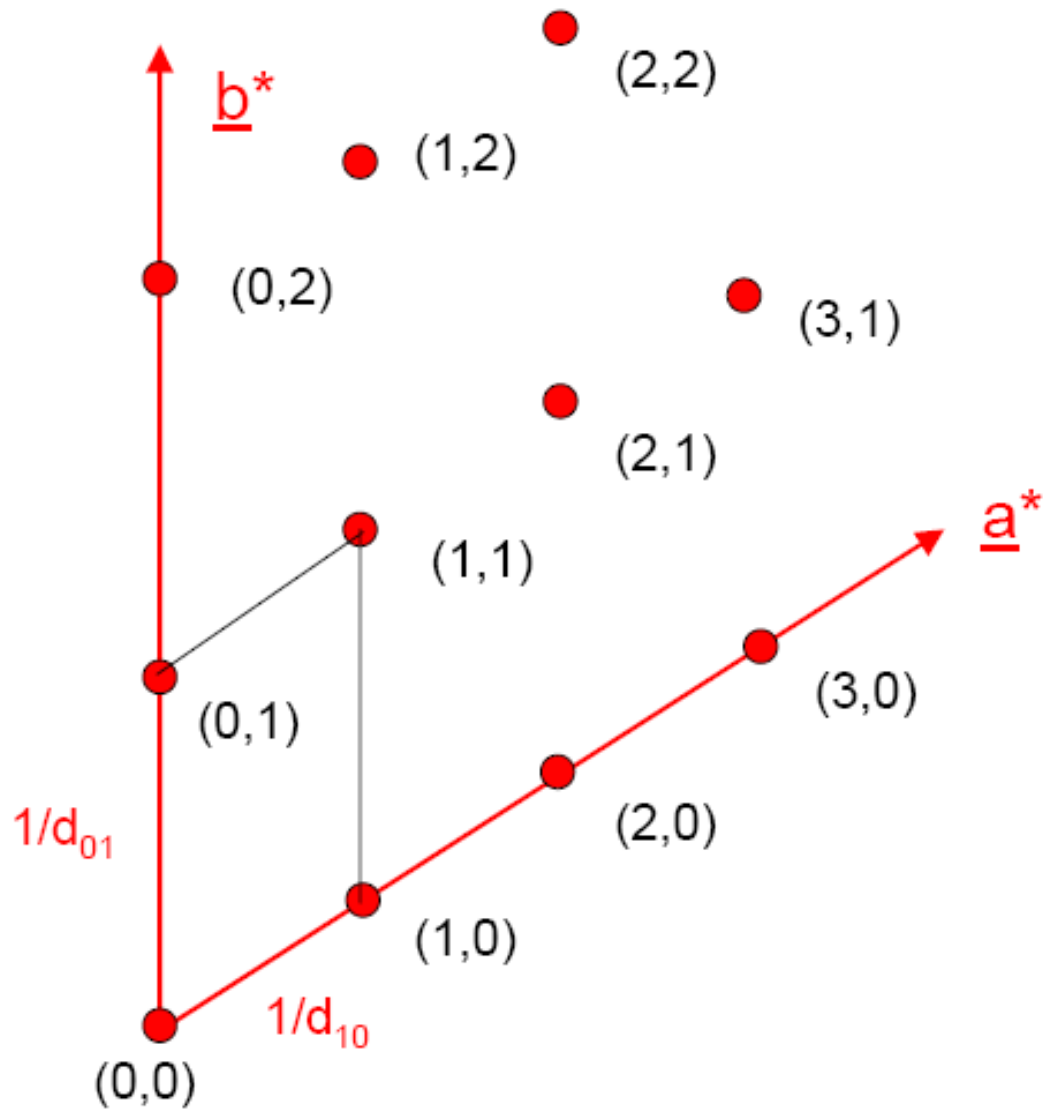


(i) проводим перпендикуляр к каждой плоскости (hkl) из узла прямой решетки, выбранного как начало координат

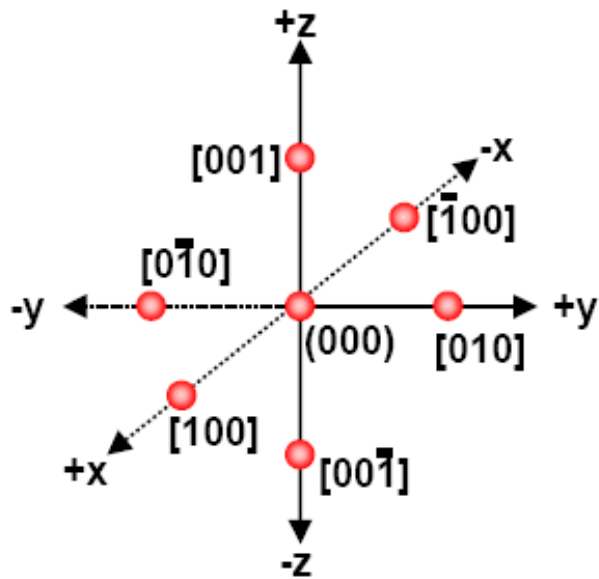
(ii) На линии перпендикуляра ставим точку на расстоянии $1/d_{hkl}$ от начала координат

Таким образом, кристаллографические плоскости могут быть заданы как набор точек в обратном пространстве

ПОСТРОЕНИЕ ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ

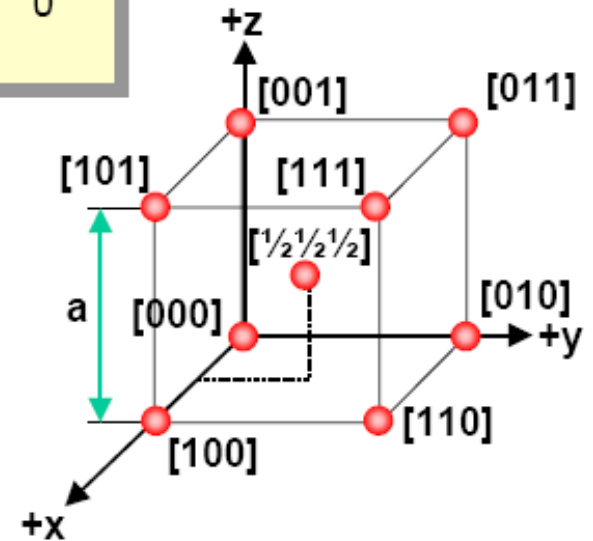
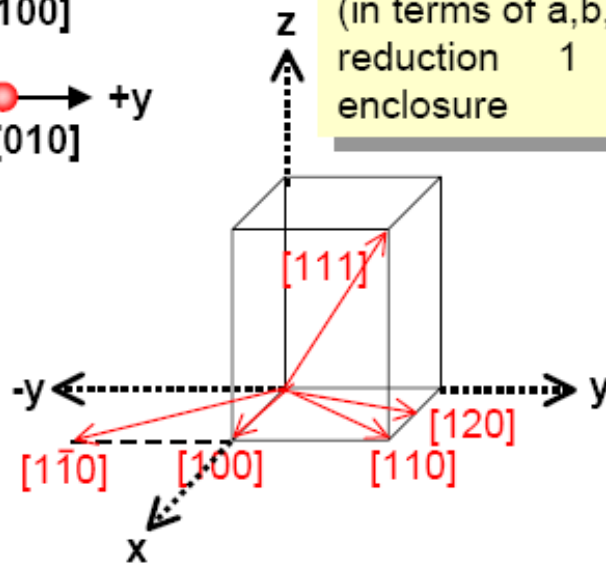


КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ НАПРАВЛЕНИЯ И УЗЛЫ РЕШЕТКИ



indices of a $[120]$ direction

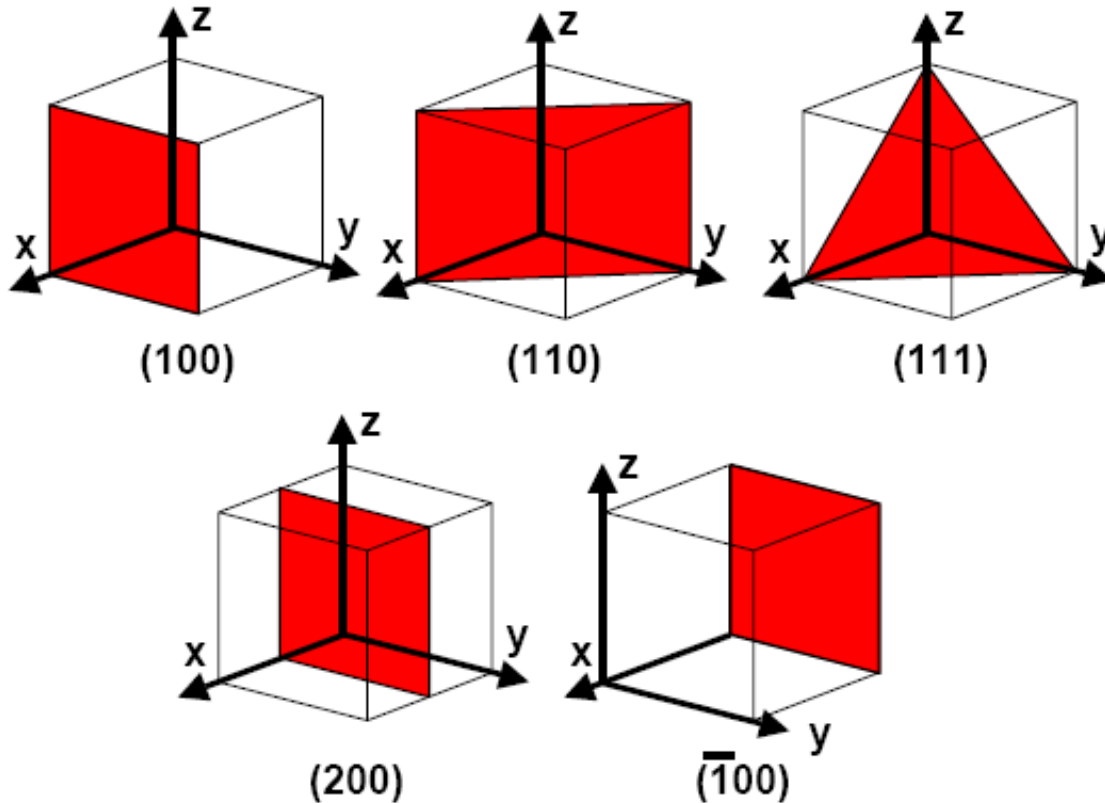
	x	y	z
projections	$a/2$	b	$0c$
projections	$1/2$	1	0
(in terms of a, b, c)			
reduction	1	2	0
enclosure	$[120]$		



- crystallographic directions
 $[uvw]$: u, v , and w intergers correspond to the reduced projections along the x, y , and z axes.

- lattice points

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПЛОСКОСТИ



Miller indices of a (200) plane

intercepts	0,5	∞	∞
reciprocals	2	0	0
reductions	not necessary		
enclosure	(200)		

Miller indices of a $(\bar{1}00)$ plane

intercepts	-1	∞	∞
reciprocals	-1	0	0
reductions	not necessary		
enclosure	$(\bar{1}00)$		

A "family" of (hkl) : $\{hkl\}$
 e.g., in cubic crystals, $\{100\}$:
 (100) , (010) , (001)
 $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$

• crystallographic plane - Miller indices (hkl)

Orbitals participating in hybridization	Type of hybridization	Number of bonding electron pairs	Number of non-bonding electron pairs	Composition of molecules	Geometric shape of molecules	Examples
s, p	sp	2	0	AB ₂	linear	BeCl ₂ , CO ₂ , C ₂ H ₂
s, p, p	sp ²	3	0	AB ₃	triangular	BCl ₃ , SO ₃ , C ₂ H ₄
		2	1	AB ₂	angular	O ₃ , SO ₂
s, p, p, p	sp ³	4	0	AB ₄	tetrahedral	CH ₄ , SnBr ₄
		3	1	AB ₃	pyramidal (trigonal pyramid)	NH ₃ , PCl ₃
		2	2	AB ₂	angular	H ₂ O
s, p, p, p, d	sp ³ d	5	0	AB ₅	trigonal bipyramidal	PCl ₅
s, p, p, p, d, d	sp ³ d ²	6	0	AB ₆	octahedral	SF ₆