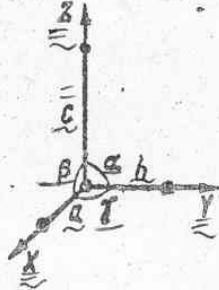
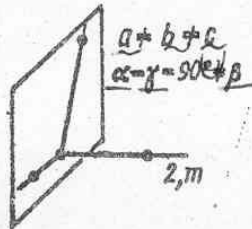


Лекция 5

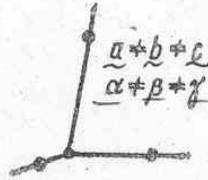
Обозначения



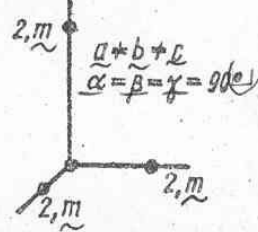
Моноклинная



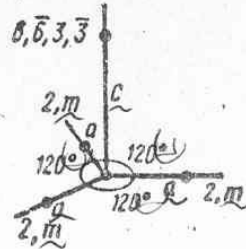
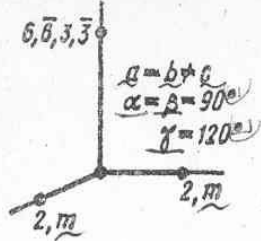
Триклинная



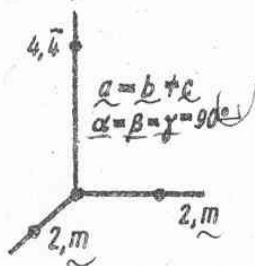
Ромбическая



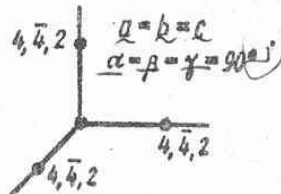
Гексагональная и тригональная


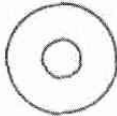

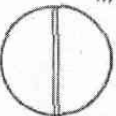
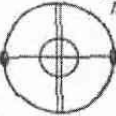

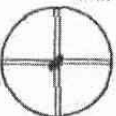
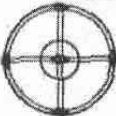

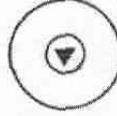

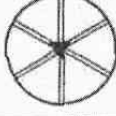
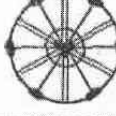
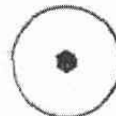
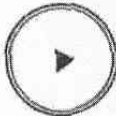
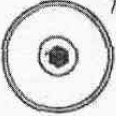
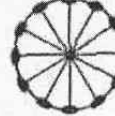
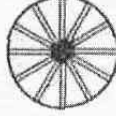

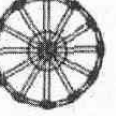
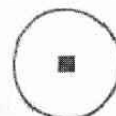
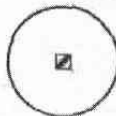
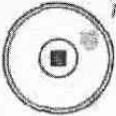
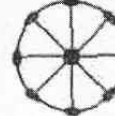
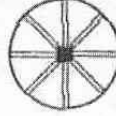
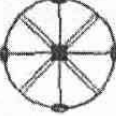
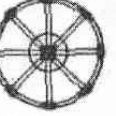


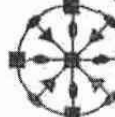




Тетрагональная



Кубическая



К Л А С С						
Примитивный	Инверсионно-примитивный	Центральный	Аксиальный	Планиальный	Инверсионно-планиальный	Аксиально-центральный
1 	$\bar{1}$ 					
			2 	m 		$\frac{2}{m}$ 
			222 	$mm2$ 		mmm 
3 	$\bar{3}$ 		32 	$3m$ 		$\bar{3}m$ 
6 	$\bar{6}$ 	$\frac{6}{m}$ 	622 	$6mm$ 	$\bar{6}m2$ 	$6/mmm$ 
4 	$\bar{4}$ 	$\frac{4}{m}$ 	422 	$4mm$ 	$\bar{4}2m$ 	$4/mmm$ 
23 		$m\bar{3}$ 	432 	$\bar{4}3m$ 		$m\bar{3}m$ 

Стереографические проекции элементов симметрии 32 классов

Классы	Сингония	К Л А С С						
		Примитивный	Инверсионно-примитивный	Центральный	Аксиальный	Плоскостной	Инверсионно-плоскостной	Аксиально-центральный
Низкая	Триклинная	1		$\bar{1}$				
	Моноклинная				2	m		$\frac{2}{m}$
	Ромбическая				222	$m\bar{3}2$		$m\bar{3}m$
Средняя	Тригональная	3		$\bar{3}$	32	$3m$		$\frac{3}{2}m$
	Гексагональная	6	$\bar{6}$	$\frac{6}{m}$	622	$6/m\bar{2}$	$6/m\bar{2}$	$\frac{6}{m}\bar{3}m$
	Тетрагональная	4	$\bar{4}$	$\frac{4}{m}$	422	$4/m\bar{2}$	$4/m\bar{2}$	$\frac{4}{m}\bar{2}m$
Высокая	Кубическая	23		$m\bar{3}$	432	$\bar{4}3m$		$m\bar{3}m$

Комплексы элементов симметрии 32 классов

Сингония	Позиция в символе			Правила установки
	1-я	2-я	3-я	
Триклинная	Только один символ, соответствует любому направлению в кристалле			
Моноклинная	Единственная ось 2 или плоскость m по оси Y (1-я установка) или по оси Z (2-я установка)			
Ромбическая	Оси 2 или плоскость m вдоль X	Оси 2 или плоскость m вдоль Y	Оси 2 или плоскость m вдоль Z	
Тригональная и гексагональная	Главная ось симметрии	Оси 2 или m вдоль X, Y, U	Диагональные оси или пл. m	
Тетрагональная	-	Оси 2 или m вдоль X, Y		
Кубическая	координатные эл. симметрии	Оси 3	Диагональные эл. симметрии	

КЛАССЫ СИММЕТРИИ.

ОБЩИЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И СИСТЕМЫ ОБОЗНАЧЕНИЙ

Классом, или *видом*, *симметрии* какого-либо объекта называют полную совокупность элементов симметрии (иначе говоря, возможных симметричных преобразований) этого объекта. Все многообразие симметрии кристаллических многогранников и их физических свойств описывается 32 классами симметрии (см. таблицы).

Каждый из 32 классов симметрии обозначается специальным символом. Все символы основаны на теоремах о сочетании элементов симметрии.

Формула симметрии состоит из записанных подряд всех элементов симметрии данного объекта. На первом месте принято писать оси симметрии от высших к низшим, на втором - плоскости симметрии, затем центр. Так, формула симметрии куба $3L_44L_36L_29PC$. Хотя в этой громоздкой записи перечислены все элементы симметрии, однако, чтобы ее полностью расшифровать, установив их взаимное расположение, необходимо знать теоремы о сочетании элементов симметрии. Так, например, символ L_44L_25PC означает, что есть пять плоскостей симметрии. По теореме № 4, вдоль оси $4(L_4)$ может проходить лишь четыре плоскости симметрии, а значит, пятая из наличных пяти плоскостей должна отличаться по расположению от остальных четырех; наличие центра симметрии показывает (см. теорему №2а), что эта плоскость перпендикулярна оси 4 , а значит, и остальным четырем плоскостям.

Международные (интернациональные) символы классов симметрии гораздо компактнее, и по написанию символа можно установить взаимное расположение элементов симметрии, если знать теоремы о сочетании элементов симметрии и правила установки каждой системы. В международном символе данного класса пишутся не все, а только основные, или так называемые порождающие элементы симметрии, а «порожденные» элементы симметрии, которые можно вывести из сочетаний порождающих элементов, не пишутся. В качестве порождающих элементов симметрии предпочтение отдается плоскостям.

В международной символике приняты следующие обозначения:

n - ось симметрии n -го порядка;

n - инверсионная ось симметрии n -го порядка;

m - плоскость симметрии;

nm - ось симметрии n -го порядка и n плоскостей симметрии, проходящих вдоль нее;
 n/m - ось симметрии n -го порядка и перпендикулярная ей плоскость симметрии;
 $n2$ - ось симметрии n -го порядка и n осей 2-го порядка, ей перпендикулярных;
 $n/m\bar{m}$ - ось симметрии n -го порядка и плоскости m , параллельные и перпендикулярные ей
(n и m могут иметь значения 1, 2, 3, 4, 6).

При пользовании международной символикой совершенно необходимо, всегда иметь в виду теоремы о сочетании элементов симметрии. Так, в символе nm , где буква m , не отделенная чертой от n , означает, что плоскость m проходит вдоль оси n -го порядка, согласно теореме № 4 подразумевается, что общее число продольных плоскостей должно быть n . В символе n/m , где m под чертой означает, что единственная плоскость m перпендикулярна оси n , по теореме № 2 подразумевается, что если n четное, то кроме оси n плоскости имеется еще и центр симметрии. Символ $n2$ означает, что имеется ось 2, перпендикулярная оси n , а из теоремы № 3 следует, что число этих осей равно n , где n — порядок оси.

При записи или чтении международного символа чрезвычайно важно соблюдать правила кристаллографической установки и порядок записи: смысл цифры или буквы, означающей элемент симметрии, зависит от того, на какой позиции в символе она поставлена. Правила записи международных символов точечных групп и правила кристаллографической установки сведены в таблице.

В международной символике различают «координатные» элементы симметрии, которые проходят вдоль координатных плоскостей, и «диагональные» — по биссектрисам углов между ними.

В символах веек классов», средней категории на первой позиции стоит главная ось симметрии, на второй — координатные элементы симметрии, на третьей - диагональные. Например, символ $4mm$ означает: имеется ось 4-го порядка (ось Z), две координатные плоскости симметрии (XOZ и YOZ) и две плоскости симметрии, проходящие тоже через ось Z и через биссектрисы углов между осями X и Y . Этот символ можно записать и сокращенно: $4mm = 4m$, потому что из теоремы № 4 ясно, что если есть плоскость вдоль оси 4, то таких плоскостей четыре.

Разделение на координатные и диагональные элементы симметрии оказывается очень полезным при записи символов пространственных групп.

В международном символе точечной группы для кристаллов высшей й категории (кубической сингонии) цифра 3 на второй позиции условно символизирует четыре оси 3-го порядка, проходящие по биссектрисам координатных углов, в отличие от цифры 5 на первом месте, символизирующей одну, единичную ось 3-го порядка в кристаллах тригональной сингонии. Оси симметрии 4 в кубической сингонии всегда совпадают с осями координат. Оси симметрии 2 и плоскости m могут быть координатными или диагональными. Если число осей 2 или плоскостей m равно трем, то это элементы координатные, если их шесть, то они диагональные. Наконец, если их девять, то из них три являются координатными элементами, а шесть - диагональными. В качестве координатных и диагональных элементов симметрии пишутся преимущественно плоскости, а оси симметрии включаются в символ только в случаях, если нет плоскостей.

Например, символ $m\bar{3}$ расшифровывается так: четыре оси 3 по биссектрисам координатных углов и три координатные плоскости симметрии; по теореме № 1, на пересечениях плоскостей появляются три оси 2, а по теореме № 2, на их пересечении добавляется центр. Таким образом, $m\bar{3}=3L24L33PC$. Сравним с символом $m\bar{3}$ символ $3m$: цифра 3, стоящая на первой позиции, означает единственную главную ось симметрии 3-го порядка, т.е. принадлежат тригональной сингонии. Буква m , стоящая вслед за этой цифрой, означает три плоскости симметрии, проходящие вдоль оси: $3m=L33P$.

На этом примере видно, что перестановка буквы или цифры в символе с одной позиции на другую полностью меняет смысл символа.

СИМВОЛЫ ШЕНФЛИСА

В кристаллографической и физической литературе, в частности в оптике и физике полупроводников, продолжают часто пользоваться символами Шенфлиса (1891 г). которые сейчас уже не являются общепринятыми. Символика Шенфлиса для обозначения 32 классов очень проста и логична (однако неудобна для обозначения пространственных групп).

Применяются следую. обозначения:

C - одна ось симметрии; **D** - ось симметрии и оси 2, перпендикулярные ей.

Единственная ось всегда считается вертикальной. Если осей несколько, то вертикальной считается ось высшего порядка.

Индексы *v*, *h* и *d* обозначают добавленные к вертикальной оси плоскости симметрии соответственно: *v* - вертикальные, *h* - горизонтальные, *d* - диагональные;

T - набор осей симметрии кубического тетраэдра; **O** - набор осей симметрии кубического октаэдра.

Пользуясь этими обозначениями и теоремами о сочетании элементов симметрии, записываем:

C_n - одна вертикальная полярная ось порядка *n*; **C_{nv}** - одна вертикальная полярная ось порядка *n* и *n* плоскостей симметрии, проходящих вдоль нее;

C_{nh} - одна ось порядка *n* (неполярная) и плоскость симметрии, ей перпендикулярная;

D_n - одна вертикальная ось порядка *n* и *n* осей 2-го порядка, перпендикулярных ей;

D_{nh} - одна вертикальная ось *n*-го порядка, *n* плоскостей вдоль нее и плоскость симметрии, ей перпендикулярная;

S_n - одна вертикальная зеркально-поворотная ось порядка *n* (иногда применяют знак **C_{ni}** где *i* - знак инверсионной оси):

$$S_1 = (\bar{2}); S_2 = C_i = (\bar{1}); S_3 = C_{6i} = (\bar{6}); S_4 = (\bar{4}); S_6 = C_{3i} = (\bar{3});$$

V=D₂ - сочетание трех взаимно перпендикулярных осей 2-го порядка;

V_h=D_{2h} - три взаимно перпендикулярные оси 2-го порядка и плоскости, перпендикулярные каждой из этих осей;

V_d=D_{2d} - три взаимно перпендикулярные оси 2-го порядка и диагональные, плоскости;

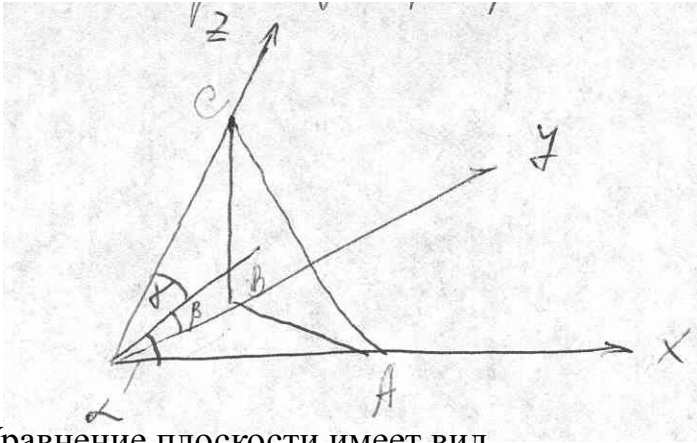
T_d - оси симметрии тетраэдра и диагональные плоскости;

T_h - оси симметрии тетраэдра и координатные плоскости;

O_h - оси симметрии октаэдра и координатные плоскости.

Координатная геометрия

Плоскость ABC пересекает оси X, Y, Z соответственно в точках A, B, C. x, y, z – координаты точки, в которой её пересекает перпендикуляр P.



$$p = x \cos \alpha + y \cos \beta + z \cos \gamma$$

$$1 = \frac{x}{\frac{p}{\cos \alpha}} + \frac{y}{\frac{p}{\cos \beta}} + \frac{z}{\frac{p}{\cos \gamma}}$$

$$A \cos \alpha = B \cos \beta = C \cos \gamma = p$$

$$A = \frac{p}{\cos \alpha}; \quad B = \frac{p}{\cos \beta}; \quad C = \frac{p}{\cos \gamma}$$

Уравнение плоскости имеет вид

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

Уравнение плоскости, параллельной данной, по проходящей через начало координат, будет

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 0$$

Кристаллографическая плоскость с миллеровскими индексами (hkl) отсекает на осях координат отрезки, пропорциональные, $a/h, b/k, c/l$, поэтому

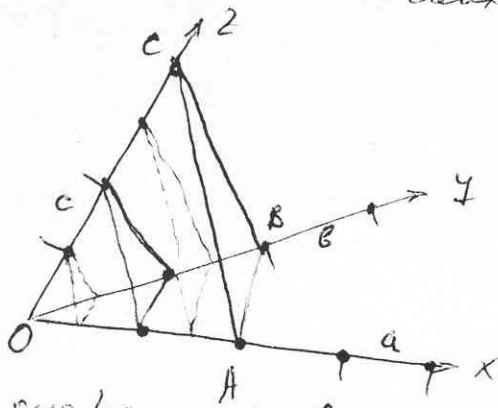
$$\frac{a}{h} \cos \alpha = \frac{b}{k} \cos \beta = \frac{c}{l} \cos \gamma = 1$$

Это уравнение справедливо для всех кристаллографических систем и называется уравнением нормали. В кристаллах с ортогональными осями всегда справедливо соотношение

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$$

Координатная геометрия

Плоскость решетки образуют бесконечное свойство равноотстоящих друг от друга плоскостей, которые в совокупности проходят через все узлы решетки. Расстояние между отдельными плоскостями этого семейства определяется только периодами решетки и осевыми углами, а углы между различными плоскостями определяются только осевыми углами и величинами отношений трансляций (периодов решетки).

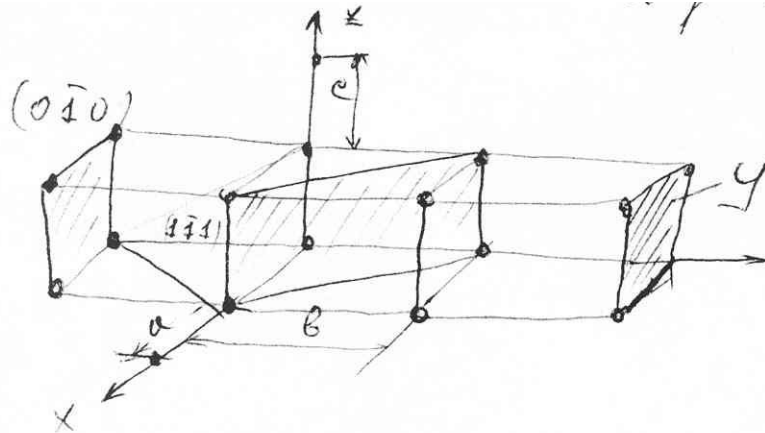


Введем кристаллографическое обозначение для различных семейств плоскостей решетки. Пусть какая-либо плоскость пересекает выбранные оси x , y , z соответственно в точках A , B , C . Выразим отрезки, отсекаемые на осях этой плоскостью, через периоды решетки.

$$A=ma; \quad B=nb; \quad C=pc.$$

Возьмем числа, обратные m , n , p , приведем их к общему знаменателю и отбросим общий множитель. Полученные после этих операций величины называют индексами Миллера данного семейства плоскостей решетки.

Плоскость Y отсекает отрезки $\infty=m$; $2b=n$; $\infty=p$. Обратные величины $0:\frac{1}{2}:0$ или $(0 \ 1 \ 0)$



Причина, по которой обычно пользуются индексами Миллера, состоит в том, что эти индексы сильно упрощают некоторые расчеты привычислениях.

Уравнение плоскости имеет вид:

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

Введем величины h' , k' , l' , определяется равенствами:

$$A = \frac{a}{h'}; B = \frac{b}{k'}; C = \frac{c}{l'}$$

$$\frac{h'x}{a} + \frac{k'y}{b} + \frac{l'z}{c} = 1$$

Если плоскость проходит через начало координат, то вместо 1 будет 0.

Если в h' , k' , l' освободится от дробей, то получим (где m – совокупность одинаковых плоскостей)

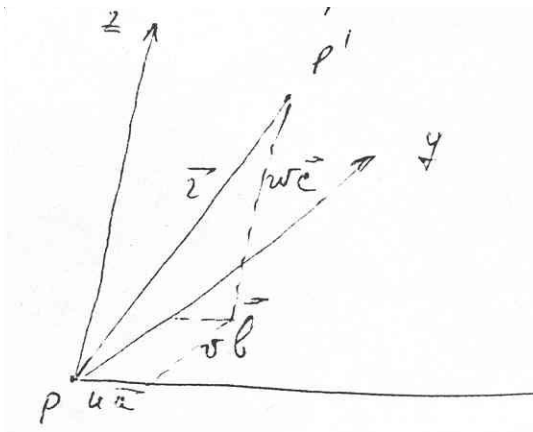
$$\frac{hx}{a} + \frac{ky}{b} + \frac{lz}{c} = 0;$$

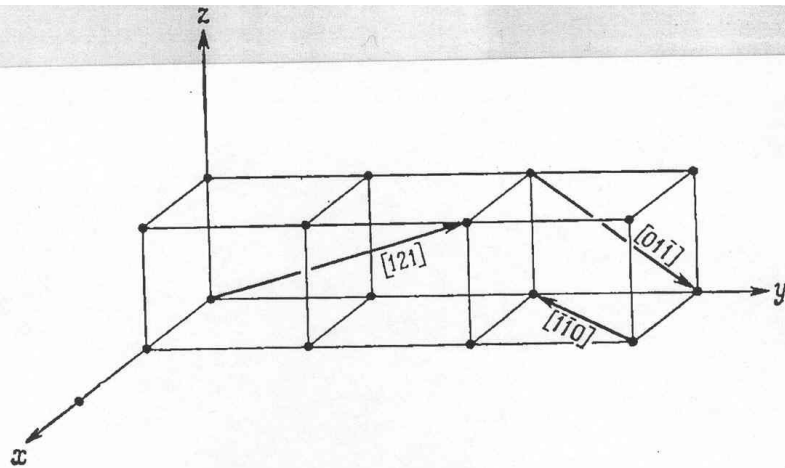
При правильном выборе элементарной ячейки малые значения индексов (hkl) соответствуют далеко отстоящим друг от друга плоскостям с высокой плотностью узлов решетки.

Определим направление. Выразим вектор r соединяющий две точки в кристалле через трансляции вдоль осей x , y , z .

$$\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

Выбранное направление обозначается $[uvw]$ всегда в целых числах, не содержащих общего множителя..





Индексы некоторых направлений в решетке.

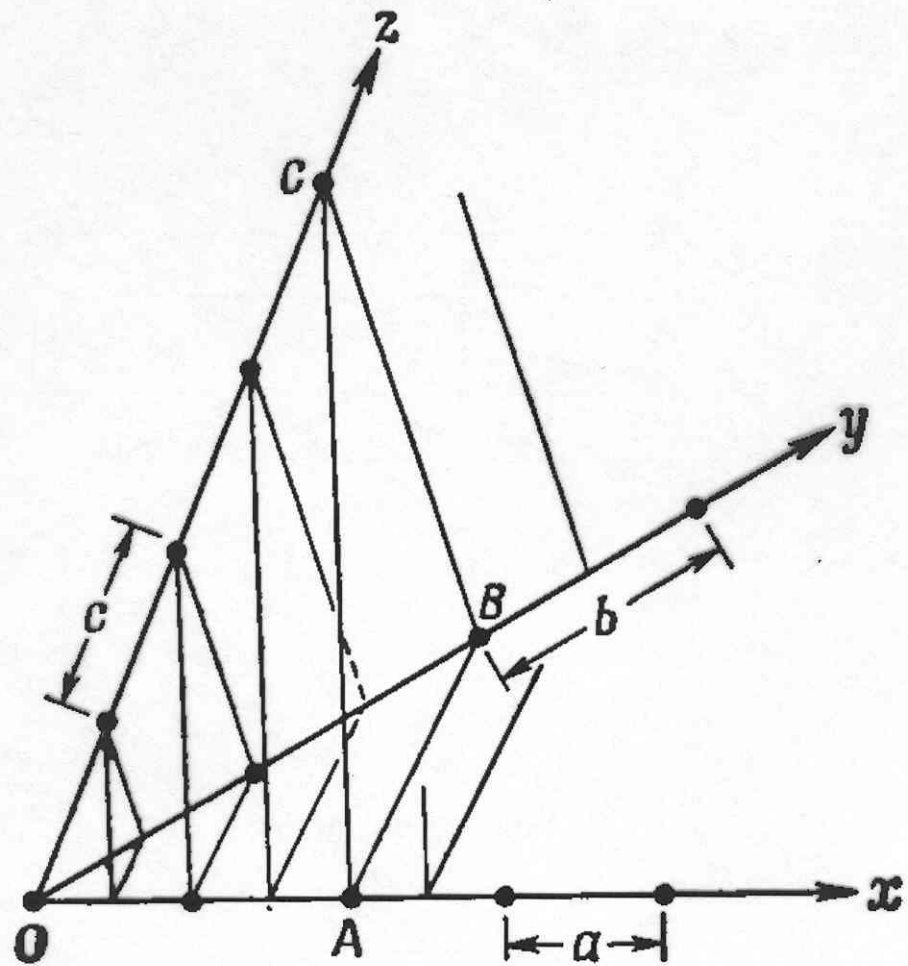
$$u = k_1 l_2 - l_1 k_2,$$

$$v = l_1 h_2 - h_1 l_2,$$

$$w = h_1 k_2 - k_1 h_2.$$

$$\frac{h_1 x}{a} + \frac{k_1 y}{b} + \frac{l_1 z}{c} = 0$$

$$\frac{h_2 x}{a} + \frac{k_2 y}{b} + \frac{l_2 z}{c} = 0$$



К выводу плоскостей решетки.
 a , b , c – периоды решетки.

Зоны и правило зон

Любые две плоскости решетки пересекаются вдоль прямой линии. Эта линия, которая лежит в обеих плоскостях, называется осью зоны. Часто множество важных плоскостей кристалла лежит в одной и той же зоне. Например, плоскости (100), (0-10) и (110) все параллельны направлению [001], т.е. принадлежат зоне [001], поскольку это общее направление, лежащее во всех этих плоскостях. Перпендикуляры ко всем этим плоскостям перпендикулярны и к [001].

Если даны индексы каких либо двух плоскостей, скажем (h_1, k_1, l_1) и (h_2, k_2, l_2) , то индексы зоны, в которой они лежат, даются выражениями

$$\begin{aligned} u &= k_1 l_2 - l_1 k_2 \\ v &= l_1 h_2 - h_1 l_2 \\ \omega &= h_1 k_2 - k_1 h_2 \end{aligned} \quad (*)$$

Уравнение прямой, проходящей через начало координат параллельно направлению $[uvw]$, имеет вид

$$\frac{x}{ua} = \frac{y}{vb} = \frac{z}{\omega c}$$

Уравнения плоскостей, проходящих через начало координат параллельно плоскостям с миллеровскими индексами (h_1, k_1, l_1) и (h_2, k_2, l_2) имеют вид

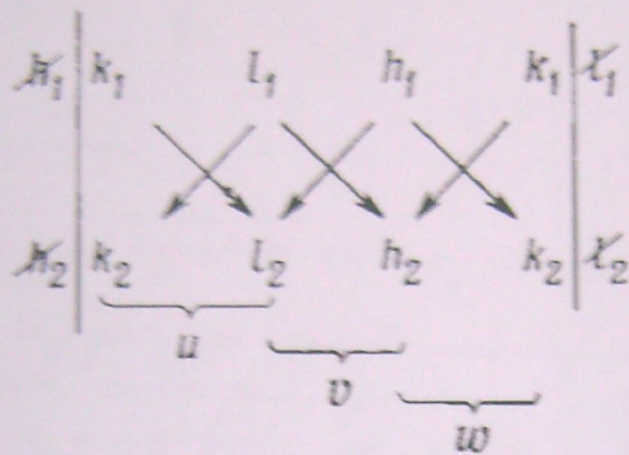
$$\frac{h_1 x}{a} + \frac{k_1 y}{b} + \frac{l_1 z}{c} = 0 \quad \frac{h_2 x}{a} + \frac{k_2 y}{b} + \frac{l_2 z}{c} = 0.$$

Уравнения линии пересечения этих двух плоскостей получается исключением сначала x , затем z из этих двух уравнений, что дает

$$\frac{x}{a(k_1 l_2 - l_1 k_2)} = \frac{y}{b(l_1 h_2 - h_1 l_2)} = \frac{z}{c(h_1 k_2 - k_1 h_2)} = 0$$

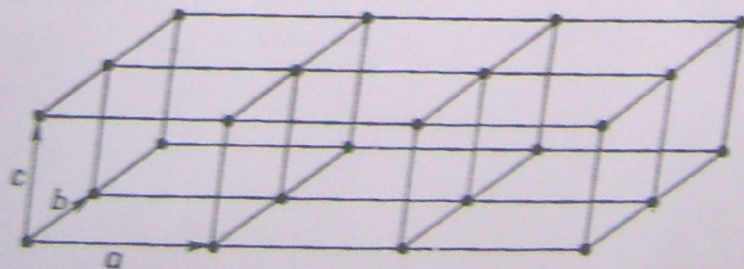
Это уравнение прямой, которая проходит через начало координат, т.к. оно удовлетворяет значениям $x=y=z=0$. Пусть теперь прямая проходит через точку с координатами $ua, vb, \omega c$. Если мы подставим эти значения вместо x, y и z , то получим (*).

Существует мнемоническое правило для запоминания порядка букв и индексов

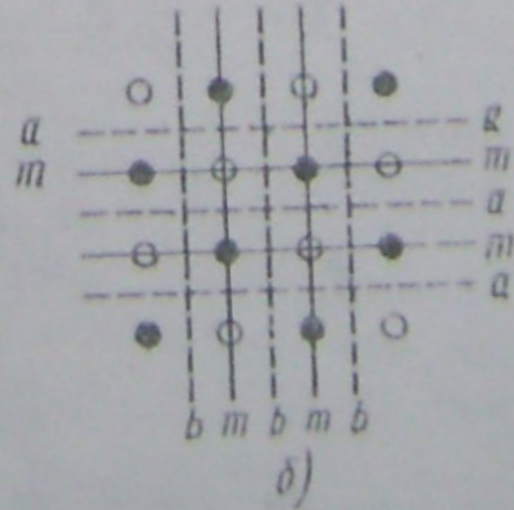
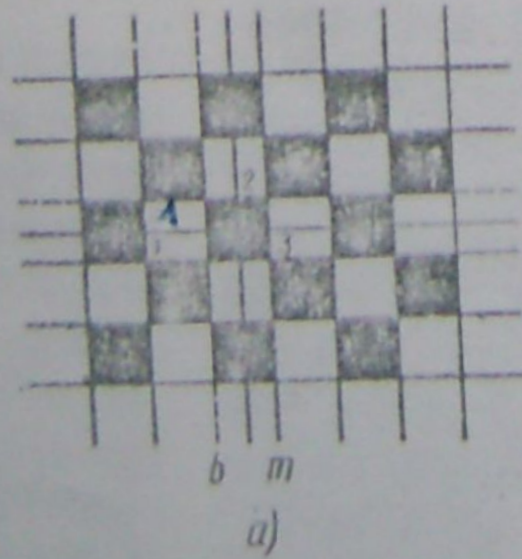


$$hu + kv + lw = 0.$$

$$\mathbf{r} = ua + vb + wc$$



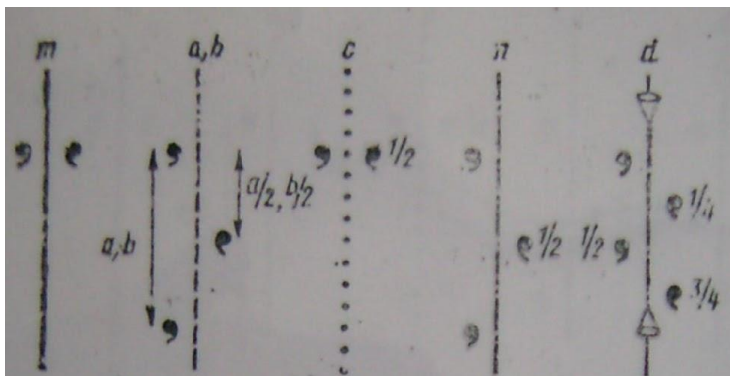
Трансляционная симметрия кристалла.



99

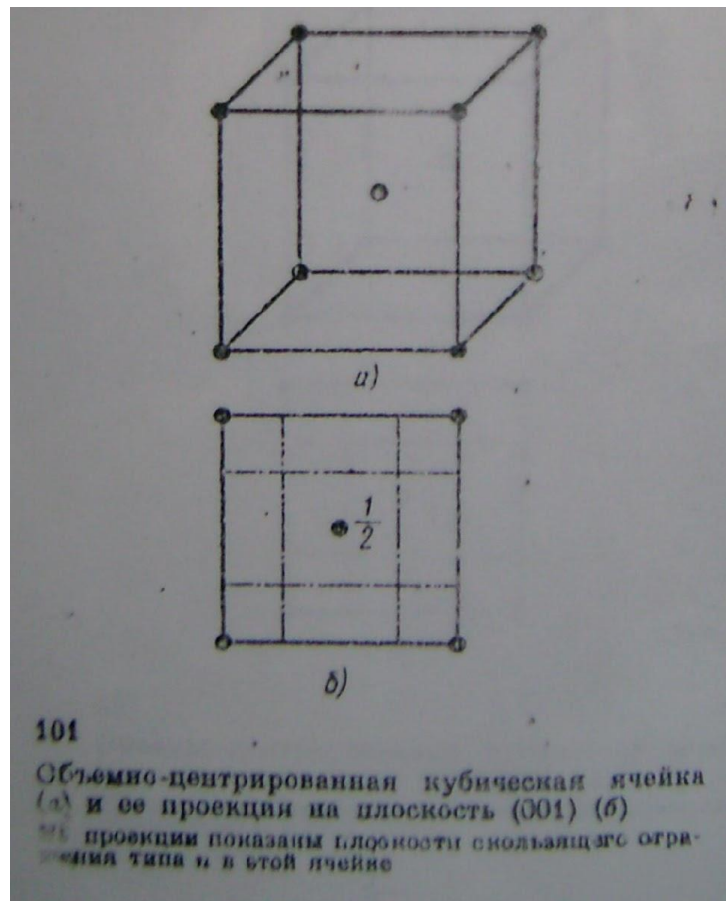
Плоскости симметрии m и плоскости скользящего отражения a , b :

a —в узоре шахматной доски; b —в плоской сетке структуры NaCl



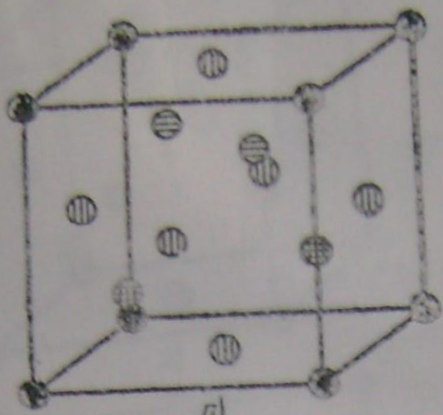
100

Действие плоскостей симметрии m и плоскостей скользящего отражения a, b, c, n, d

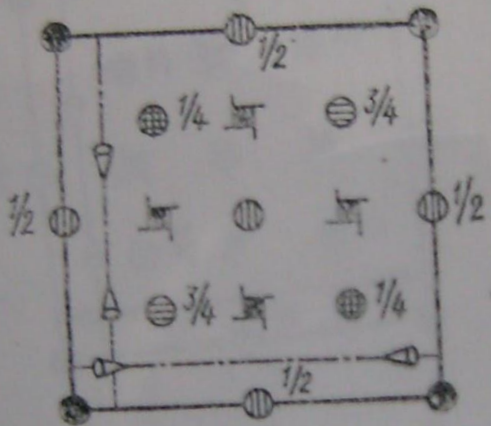


101

Объемно-центрированная кубическая ячейка (а) и ее проекция на плоскость (001) (б)
 ее проекция показаны плоскости скользящего отражения типа n в этой ячейке



a)



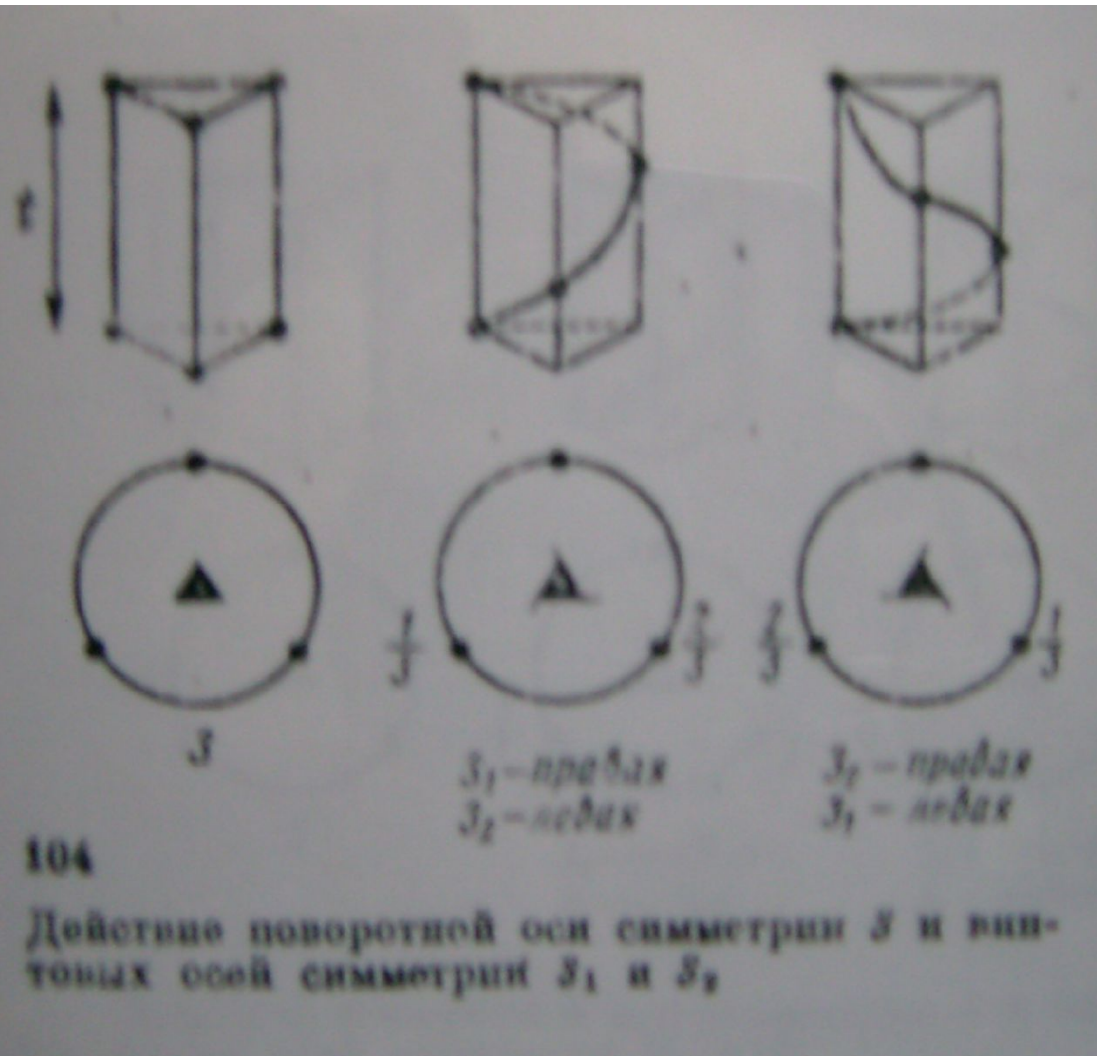
б)

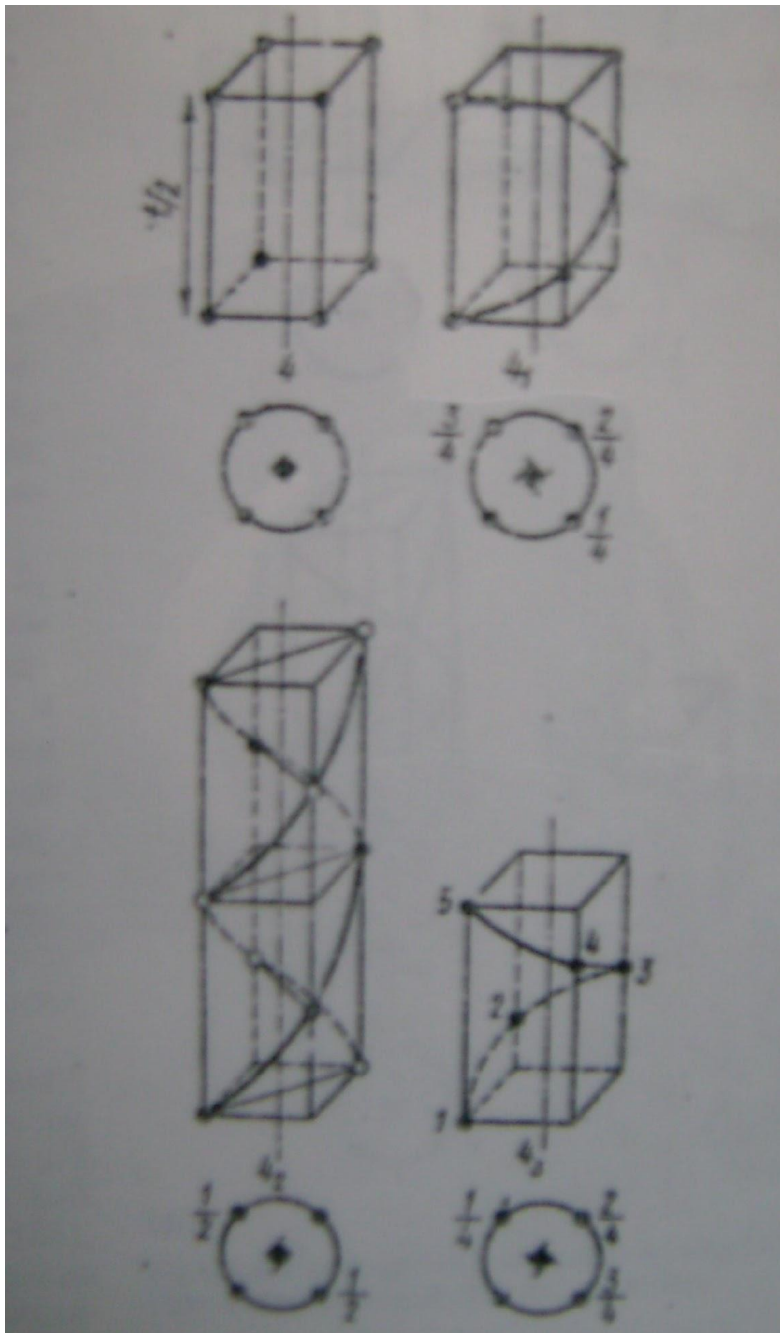
● - 1 ⊙ - 2 ⊗ - 3 ⊖ - 4

Элементарная ячейка структуры алмаза (а) и ее проекция на плоскость (001) (б)
 Для простоты на чертеже показаны только две плоскости σ ; такие же плоскости, параллельные этим, проходят через каждые $1/4$ параметра ячейки
 Разными кружками обозначены одинаковые атомы, находящиеся: 1—в вершинах ячейки, 2—в центрах граней, 3—в центрах пары квадрантов на высоте $1/4$, 4—в центрах противоположной пары квадрантов на высоте $3/4$

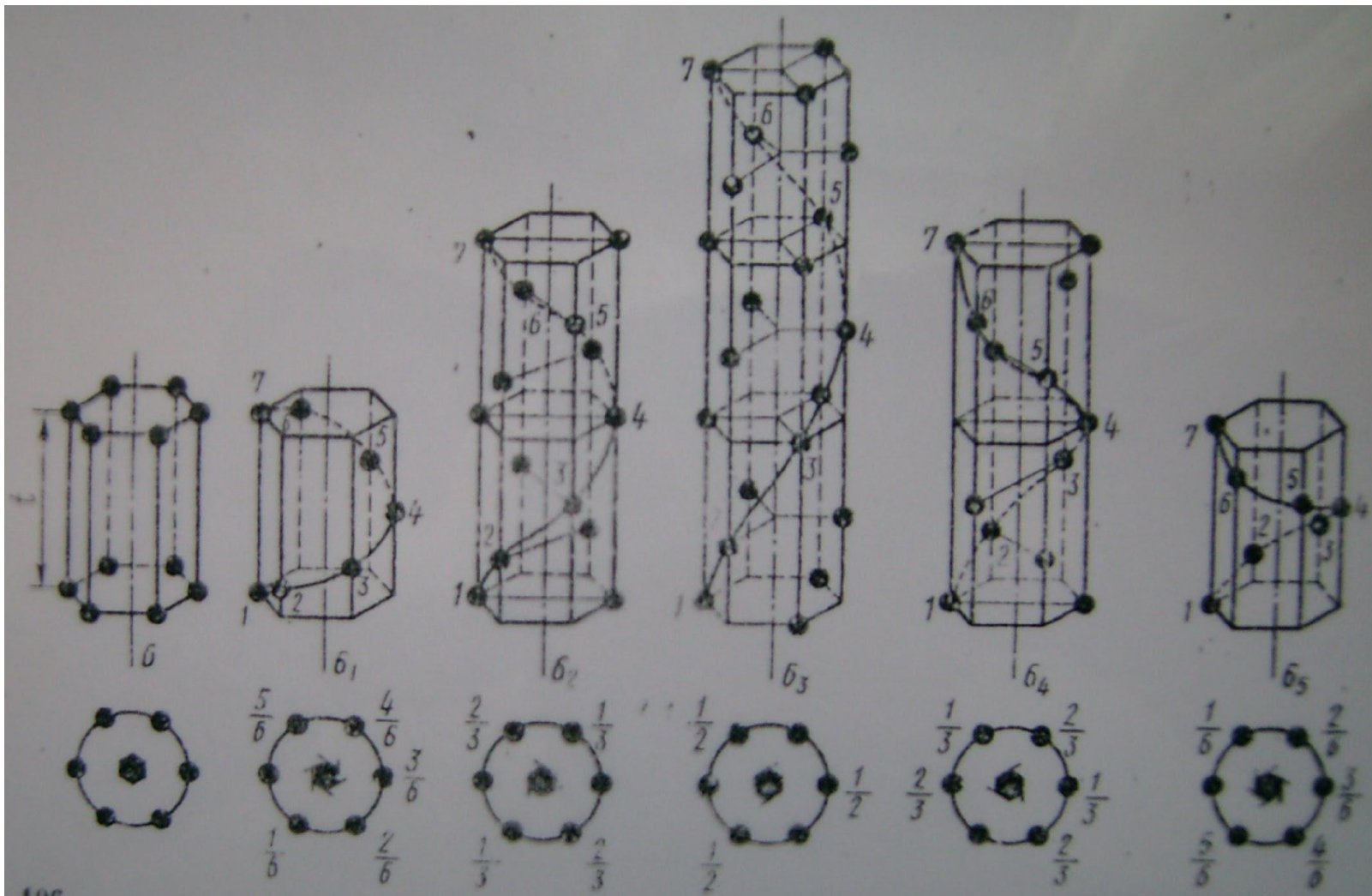


Действие поворотной оси симметрии 2 и винтовой оси симметрии 2_1 , расположенных:
 а — в плоскости чертежа; б — перпендикулярно плоскости чертежа





Действие поворотной оси симметрии
и винтовых осей симметрии 4_1 , 4_2 и 4_3



Действие поворотной оси симметрии C_6 и винтовых осей симметрии $C_6^1, C_6^2, C_6^3, C_6^4, C_6^5$

Теоремы о сочетании элементов симметрии структур

При сочетании элементов симметрии бесконечных структур точно так же два элемента симметрии (порождающие) приводят к появлению третьего элемента симметрии (порожденного). Полный набор элементов симметрии структуры составляет пространственную, или Федоровскую, группу симметрии. Всего имеется 230 пространственных групп симметрии. Они выводятся на основании теорем о сочетании элементов симметрии.

Теорема 1. Последовательное отражение в двух параллельных плоскостях симметрии равносильно трансляции на параметру $t=2a$, где a – расстояние между плоскостями.

Теорема 1а. (обратная) Любую трансляцию можно заменить отражением в двух параллельных плоскостях, отстоящих друг от друга на расстоянии $a=t/2$, где t – параметр трансляции.

Теорема 2. Плоскость симметрии и перпендикулярная ей трансляция с параметром t порождают новые вставки плоскости симметрии, параллельные ей по типу и отстоящие от нее на расстоянии $t/2$.

Теорема 3. Плоскость симметрии m и трансляция t , составляющая с плоскостью угол α , порождают плоскость скользящего отражения, параллельную порождающей плоскости и отстоящую от нее в сторону трансляции на $1/2t\sin\alpha$. Величина скольжения вдоль порожденной плоскости равна $t\cos\alpha$.

Теорема 4. Отражение в двух пересекающихся плоскостях симметрии можно заменить вращением вокруг оси симметрии, совпадающей с линией пересечения этих плоскостей. Угол поворота вокруг этой оси равен удвоенному углу между плоскостями.

Теорема 4а. (обратная) Ось симметрии, простую или винтовую, можно заменить парой плоскостей симметрии, простых или скользящего отражения, пересекающихся под углом, соответствующим порядку оси.

Теорема 5. Трансляция, перпендикулярная оси симметрии, порождают такую же ось симметрии на $t/2$ в направлении трансляции.

Пространственные группы симметрии

Пространственной группой симметрии называется совокупность всех возможных элементов симметрии кристаллической структуры.

Из пространственной группы симметрии кристалла легко получить его точечную группу. Для этого надо мысленно уничтожить все трансляции, т.е. плоскости ск. отражения превратить в зеркальные, винтовые оси – в поворотные и все оставшиеся элементы симметрии перенести, чтобы они пересекались в одной точке.

Правила записи символа пространственной группы

Сингония	Позиция в символе			
	1-я	2-я	3-я	4-я
Триклинная	Тип решетки Бравэ	Имеющийся элемент симметрии	—	—
Моноклинная		Ось 2 или 2_1 и плоскость, ей перпендикулярная	—	—
Ромбическая		Плоскость перпендикулярная или ось параллельная		
Тригональная и гексагональная		оси X	оси Y	оси Z
Тетрагональная		Ось высшего порядка и плоскость, ей перпендикулярная	Координатная плоскость или ось	Диагональная плоскость или ось
Кубическая		Координатная плоскость или ось	3	Диагональная плоскость или ось

Элементы кристаллохимии

Кристаллохимия изучает связь структуры кристаллов с их физико-химическими свойствами. Различие и многообразие кристаллических структур зависит от их химической природы веществ, от размеров атомов или ионов, от сил связи между ними.

Атомные и ионные связи

Под эффективным радиусом атома (иона) понимают радиус сферы его действия. Он зависит от заполненности электронных оболочек, но не равен радиусу наружной орбиты. Определяют экспериментально по рентгеновским измерениям межплоскостных расстояний и вычисляют теоретически на основе квантово-механических представлений. Для определения эф. радиуса атомы (ионы) представляют как жесткие шары, так что расстояние между их центрами равно сумме их радиусов.

Размеры ионов подчиняются следующим закономерностям:

1. Внутри вертикального ряда периодической системы радиусы ионов с одинаковым зарядом увеличиваются, поскольку растет число электронных оболочек. Так, например,

	Li	Na	K	Rb	Cs
А	1,56	1,86	2,23	2,36	2,55

2. Для одного и того же элемента ионный радиус увеличивается по мере увеличения отрицательного заряда и уменьшается по мере увеличения положительного заряда. Радиус аниона больше радиуса катиона из-за избытка электронов. Например,

<i>Fe</i>	<i>Fe²⁺</i>	<i>Fe³⁺</i>	<i>Si⁴⁻</i>	<i>Si</i>	<i>Si⁴⁺</i>
1,26	0,80	0,67	1,98	1,18	0,40

3. Размер атомов и ионов следует периодичности системы М, исключение составляет элементы от лантана (N57) до лютеция (N71), для которых радиусы атомов не растут, а сжимаются (лантаноидное сжатие) и актиноидное сжатие, начиная от актиния (N89).

Координационное число, координационный многогранник

Координационное число – число ближайших, однотипных соседних атомов (ионов) в кристаллической структуре. Если центры таких элементов соединить друг с другом, то получим координационный многогранник. Он не связан с внешней формой кристалла и не соответствует ей.

Для алмаза к.ч. – 4, к.м. - тетраэдр

В кристалле каменной соли
к.ч. – 6, к.м. – октаэдр.

Координационные многогранники
к.ч. – 2, к.м. – линейный

к.ч. – 3, к.м. – треугольник

к.ч. – 4, к.м. – тетраэдр.

В структуре CaCl_2 к.ч. – 8, к.м. – куб.

The image contains several hand-drawn diagrams. At the top left is a 3D cube representing a crystal lattice with atoms at the corners and centers of edges. Below it is a 2D square diagram with atoms at the corners and midpoints of each side, labeled with 1/2. In the center is a linear arrangement of three atoms. To the right of the linear diagram is a triangle with an atom at its center. Below the triangle is another tetrahedron with an atom at its center. At the bottom left is a square diagram with atoms at the corners and midpoints of each side, labeled with 1/2 and 3/4. At the bottom right is a cube with an atom at its center.

Число атомов в ячейке. Определение стехиометрической формулы вещества

В кристаллической структуре положение частиц вещества совпадает с узлами решетки, либо частицы располагаются вокруг узлов симметрическими группами. Определение химической (стехиометрической) ф-лы вещества основано на подсчете числа атомов каждого сорта, приходящихся на одну элементарную ячейку.

Число структурных единиц (Z) показывает, сколько надо взять атомов (молекул) данного хим. соед., чтобы построить одну элементарную ячейку. Так, для кристаллов типа АВ (NaCl) на одну ячейку приходится по 4 атома А и В, следовательно $Z=4$. Z всегда больше 1 и целочисленное.

Для CsCl $Z=2$.

Плотнейшие упаковки частиц в структуре

Для устойчивости кр. Структуры требуется минимум её энергии. Одним из факторов, уменьшающим энергично, является максим. Сближение структурных единиц, их плотнейшая упаковка, т.е. к.ч. должно быть максимальным. Коэф. Компактности

$$K = \frac{\text{объем шаров}}{\text{общий объем}}$$

Плотнейшие упаковки две – двухслойные АВАВАВ **ГПУ**

трехслойные АВСАВС **ГЦК**

Коэф. К у них равен 74,05% (~3/4 объема). Для ОЦК К=68%.

Известны ст-ры с многослойной плотнейшей упаковкой, состоящей из многих слоев (политиния).

Л.Полинг предложил изображать структуры не шарами а координационными многогранниками, к-ые получается при соединении прямыми линиями центров анионов, окружающих катион. Число вершин многогранника равно к.ч. катиона, а пространственное расположение многогранников наглядно показывает узор распределения катионов.