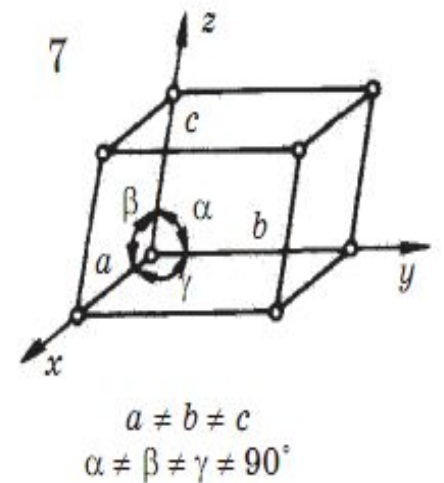
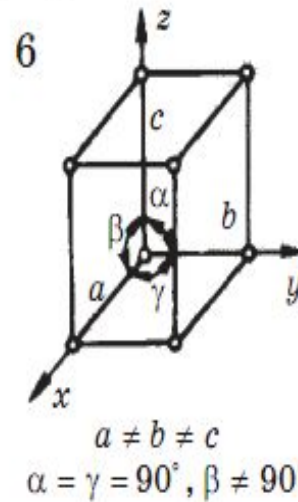
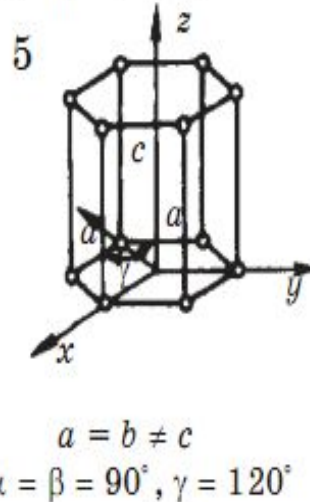
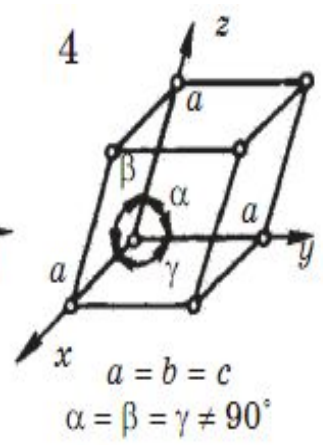
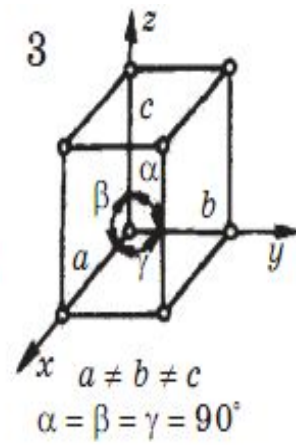
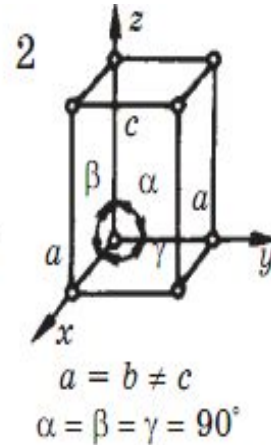
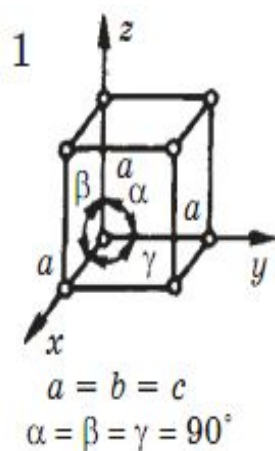


Типы кристаллических решеток (сингонии)

- 1. Кубическая
- 2. Тетрагональная
- 3. Ромбическая
- 4. ромбоэдрическая (тригональная)
- 5. Гексагональная
- 6. Моноклинная
- 7. Триклинная.

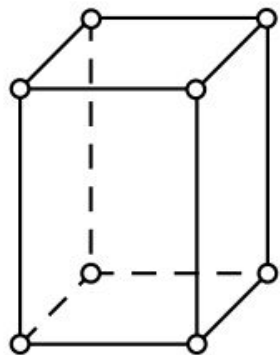


$$\vec{r} = m \vec{a}_0 + n \vec{b}_0 + p \vec{c}_0,$$

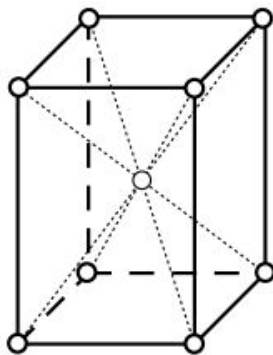
Сингонии и кристаллические системы

Категории	Тип сингонии	Формула в символике Браве
Низшая	Триклинная	$L_1; C$
	Моноклинная	$P; L_2; L_2PC$
	Ромбическая	$L_2^2P; 3L_2; 3L_2^3PC$
Средняя	Тригональная	$L_3; L_3C; L_3^3P; L_3^3L_2; L_3^3L_2^3PC;$
	Тетрагональная	$L_4; L_4PC; L_4^4P; L_4^4L_2; L_4^4L_2^5PC; L_4; L_4^2L_2^2P$
	Гексагональная	$Li_6=L_3^3P; Li_6^3L_2^3P=L_3^3L_2^4P; L_6; L_6PC; L_6^6P; L_6^6L_2;$ $L_6^6L_2^7PC$
Высшая	Кубическая	$4L_3^3L_2; 4L_3^3L_2^3PC; 4L_3^3L_2(3Li_4)^6P; 3L_4^4L_3^6L_2;$ $3L_4^4L_3^6L_2^9PC$

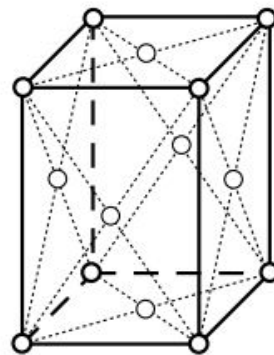
Типы кристаллических решеток



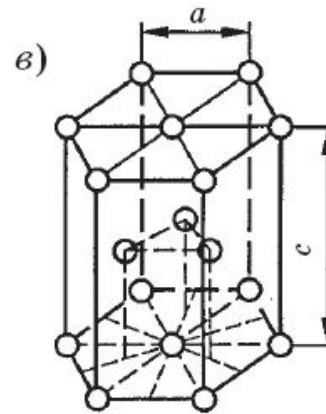
P-тип



I-тип

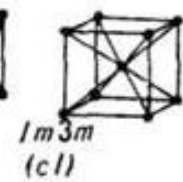
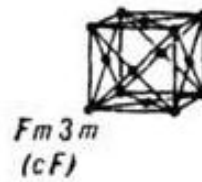
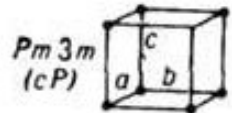
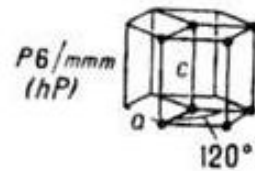
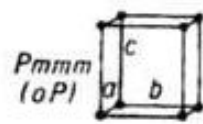
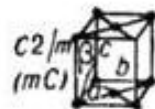
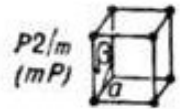
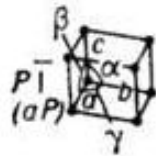


F-тип

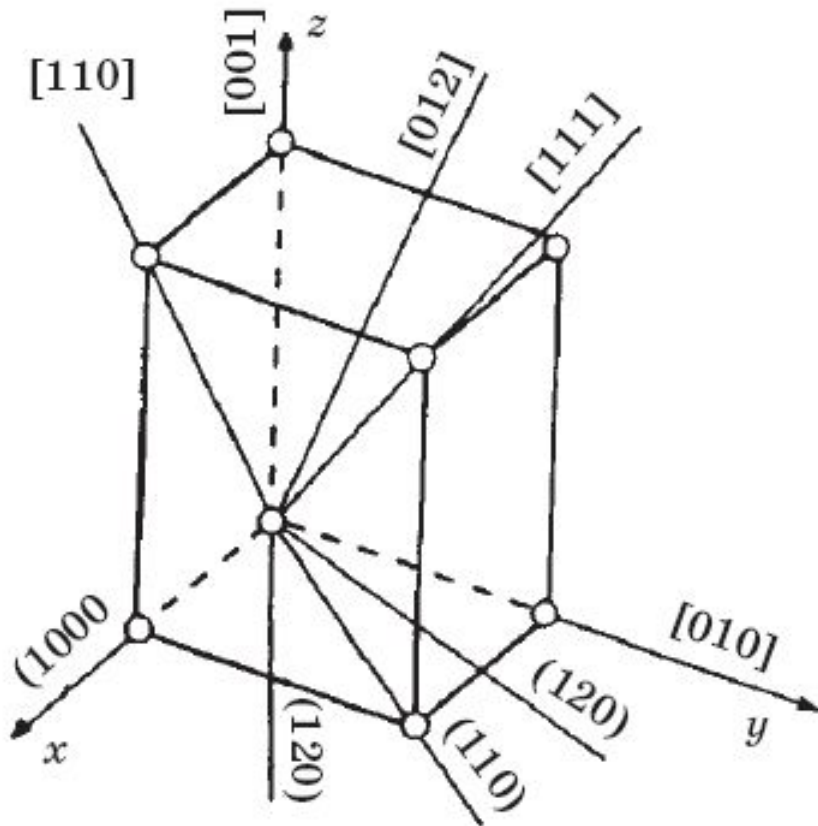


- Прimitivesкая
- Объемно-центрированная (ОЦК)
- Гранецентрированная (ГЦК)
- Гексагональная плотноупакованная (ГПУ)

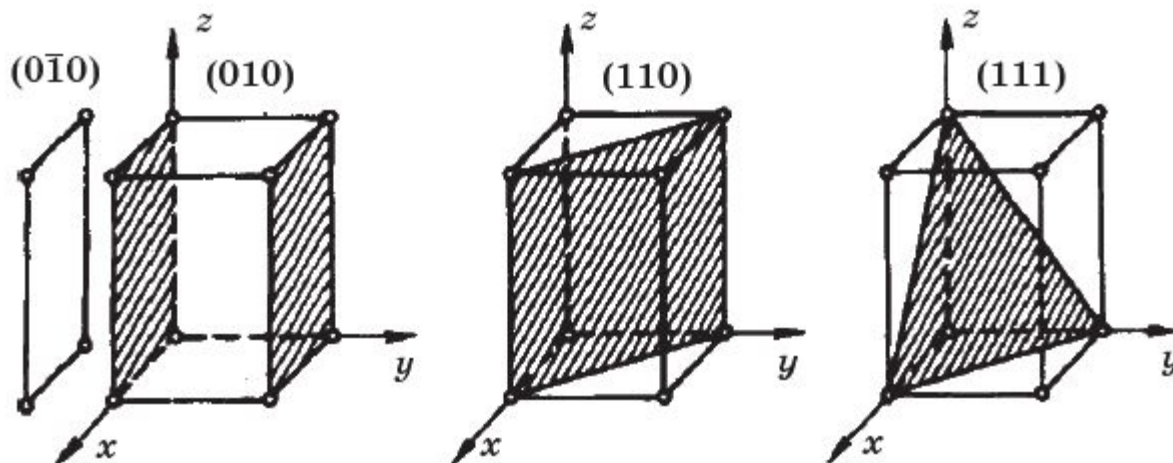
Решетки Браве



Кристаллографические направления и плоскости

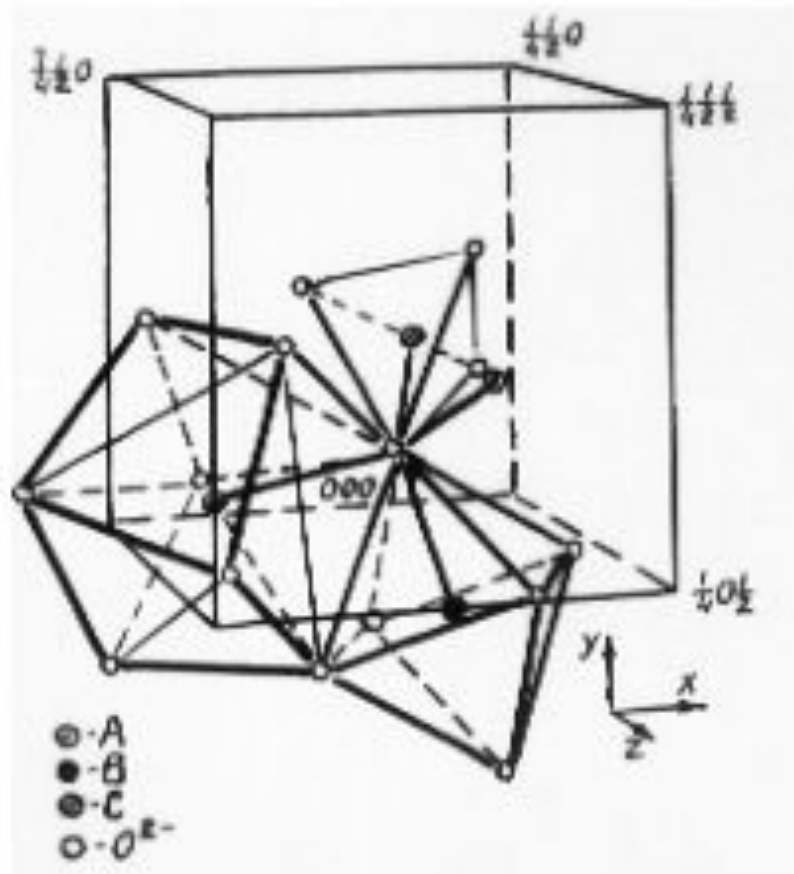


Обозначение кристаллографических плоскостей



m n p - $h=1/m$ $k=1/n$ $l=1/p$

Расположение позиций ионов в гранате $A_3B_2C_3O_{12}$



Группы структурных типов

A – элементы;

B – соединения типа AB (например, NaCl, CsI);

C – соединения типа AB₂ (CaF₂, TiO₂);

D - соединения типа A_nB_m (Al₂O₃);

E – соединения, образованные больше, чем двумя сортами атомов без радикалов или комплексных ионов (например, CuFeS);

F – структуры соединений с двух- или трехатомными ионами (KCNS, NaHF₂);

G – соединения с четырехатомными ионами (CaCO₃, NaClO₃);

H – соединения с пятиатомными ионами (CaSO₄·2H₂O, CaWO₄);

L – сплавы;

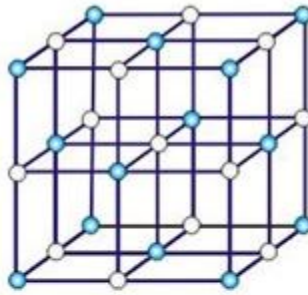
S – силикаты. (гранаты A₃B₂(SiO₄)₃)

Основные структурные типы

- **Структура Меди** Au, Ag, Ni, Al, Pb. Твердые растворы Ag-Au, Cu-Au, Соединения типа AuSb, Au₂Bi, Au₂Pb. Ячейка ГЦК . 4 атома на ячейку.
- **Структура Вольфрама** хром, ванадий, молибден, ниобий, тантал, -кобальт, -железо, титан, цирконий, гафний, щелочные элементы — литий, натрий, калий, рубидий, цезий, щелочноземельные — кальций, стронций, барий, актиниды — уран, нептуний, плутоний. Ячейка ОЦК , 2 атома на ячейку.

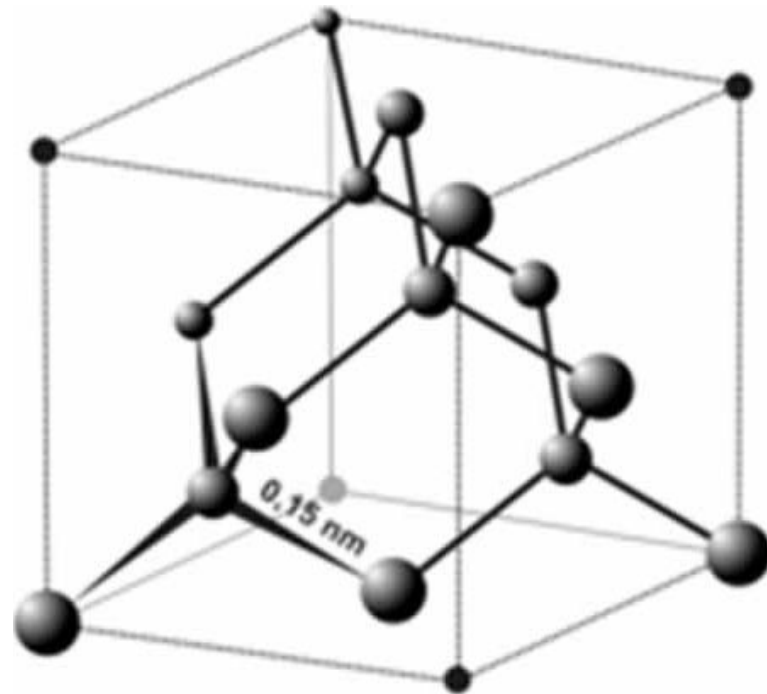
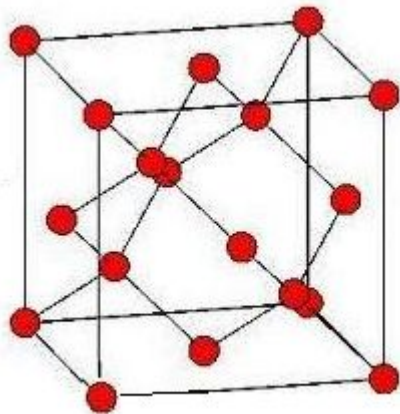
Основные структурные типы

- **Структура каменной соли** галогениды щелочных металлов (LiF, LiCl, NaF, RbF, RbCl), оксиды переходных металлов (TiO, MnO, FeO, NiO), нитриды и карбиды переходных подгрупп Ti и V, галоиды серебра AgCl, AgBr, AgI, сульфиды и селениды свинца и теллура, полупроводниковые соединения группы AIVBVI (GeTe, SnTe, PbS, PbSe, PbTe). Структура – 2 ГЦК сдвинутые относительно друг друга.



Основные структурные типы

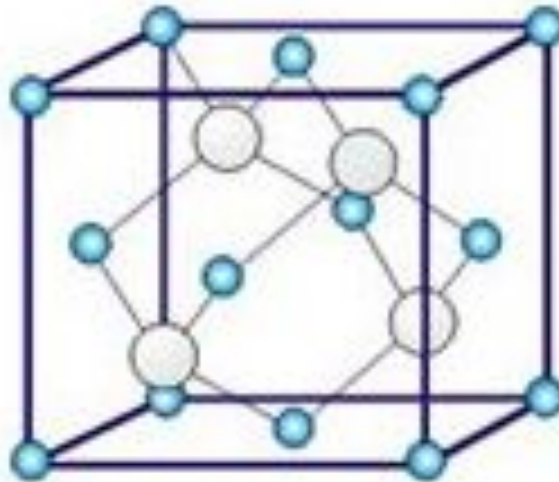
- **Структурный тип алмаза** — элементарные полупроводники — германий, кремний, серое олово. Ячейка ГЦК



Основные структурные типы

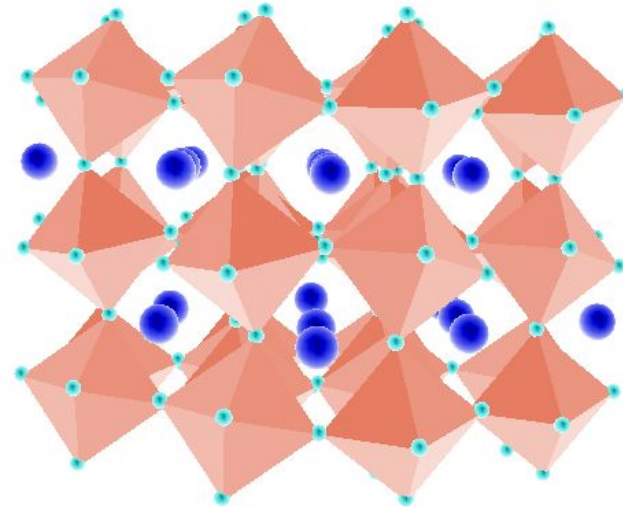
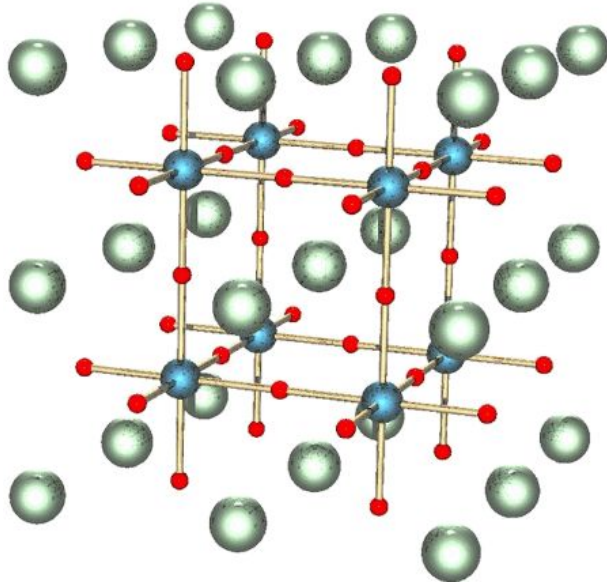
- **Структурный тип сфалерита и вюрцита (цинковой обманки)**

AIII BV (GaAs, InAs, GaP, InP, InSb, AlN, BN) , AII BVI (CdS, CdSe, ZnSe, HgSe, CdTe, ZnTe, HgTe)



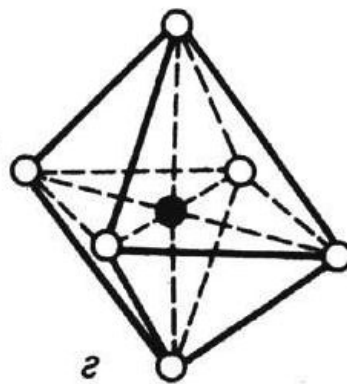
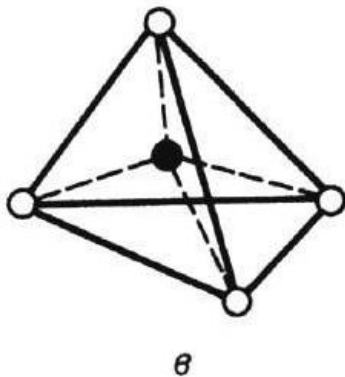
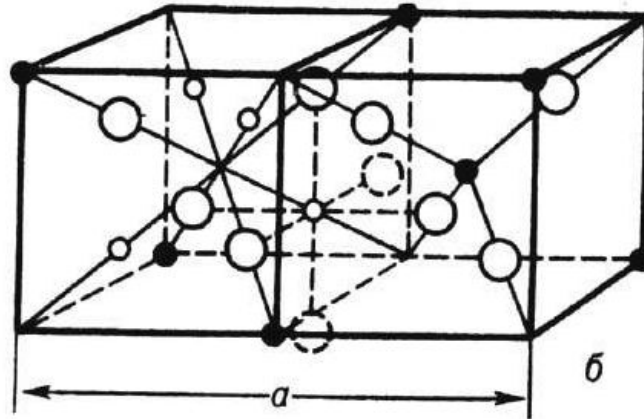
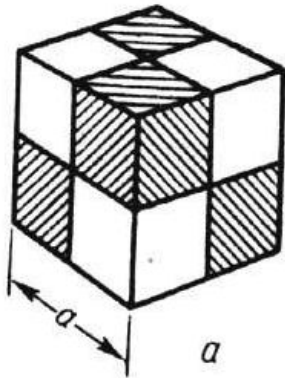
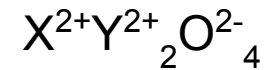
Основные структурные типы

- Структурный тип перовскита ABX_3 $CaTiO_3$ $BaTiO_3$, $CaZrO_3$, $PbTiO_3$



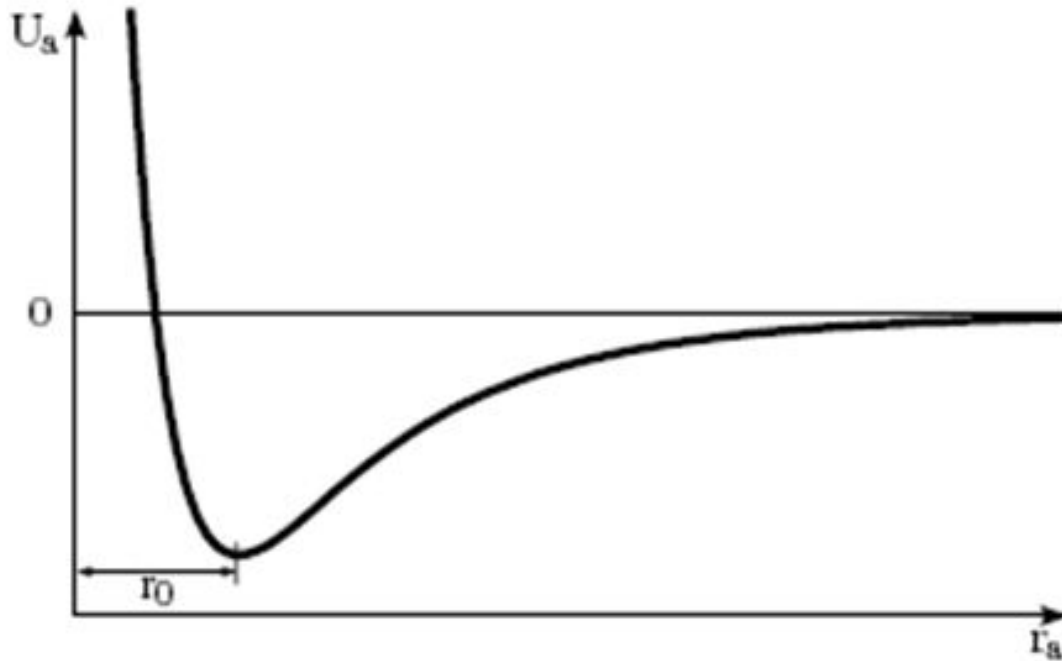
Основные структурные типы

Структурный тип шпинели



- X (Mg²⁺, Mn²⁺, Fe²⁺, Ni²⁺, Zn²⁺)
- Y — трехвалентные ионы (Al³⁺, V³⁺, Cr³⁺, Mn³⁺)
- ГЦК-решетка
- Фериты

Типы связей в кристаллах

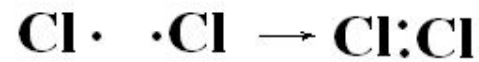


$$U_a = \frac{\alpha}{r_a^n} + \frac{\beta}{r_a^m},$$

Типы связей в кристаллах.

- Ионная
- Ковалентная
- Ван-дер-вальсова
- металлическая

$$U = -\frac{AZ_1Z_2e^2}{r} + \frac{B}{r^n},$$



$$\Delta U = -\hbar\omega_0 \frac{a^2}{2r^6} = -\frac{a}{r^6},$$

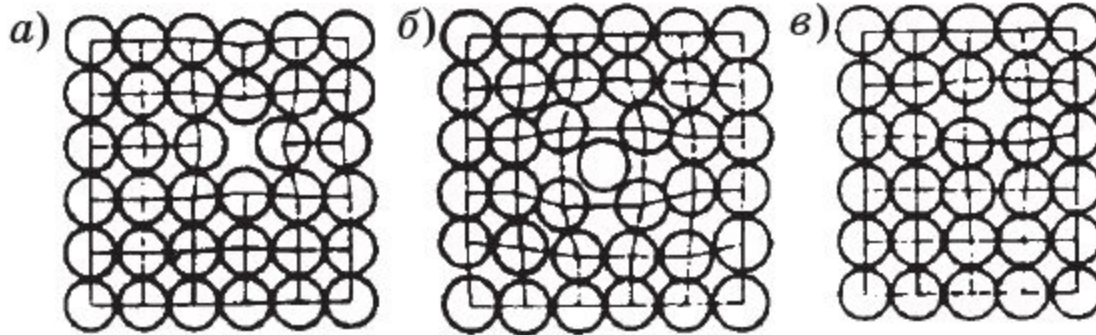
Дефекты в кристаллах

Дефект – это нарушение идеальной структуры кристалла.
Классификация дефектов (по Ван-Бюрену).

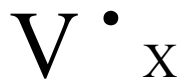
- Нульмерные (точечные) дефекты – вакансии, межузельные атомы, примесные атомы, антиструктурные дефекты и т.д.
- Одномерные (линейные) дефекты – цепочки точечных дефектов, дислокации, дисклинации.
- Двумерные (поверхностные) дефекты – дефекты упаковки, границы блоков мозаики, двойников, зерен, межфазные границы, поверхность кристалла.
- Трёхмерные (объёмные) дефекты – поры, включения второй фазы.

Точечные дефекты в кристаллах

- По Шотки $V'_A + V^\bullet_X$
- По Френкелю $A^\bullet_I + V'_X$
 $X'_I + V^\bullet_A$
- Замещения примесным атомом B^x_A
- Внедрения примесного атома



Обозначения дефектов по Креггеру-Винку



$$F=U-TS - \min$$

$$C_N^n = \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

$$\Delta S = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

$$\Delta F = nE - T \Delta S$$

$$n = N \exp(-E/kT)$$

Cu

$E_V = 1 \text{ ЭВ}$ $E_i = 3.4 \text{ ЭВ}$

$T_{пл} = 1356 \text{ К}$

$n_V = 2 \times 10^{-4}$

$n_i = 2 \times 10^{-14}$

Дефекты

$$[V_M^X] = \exp(\Delta S_{III} / k) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_{III}}{k \cdot T}\right)$$

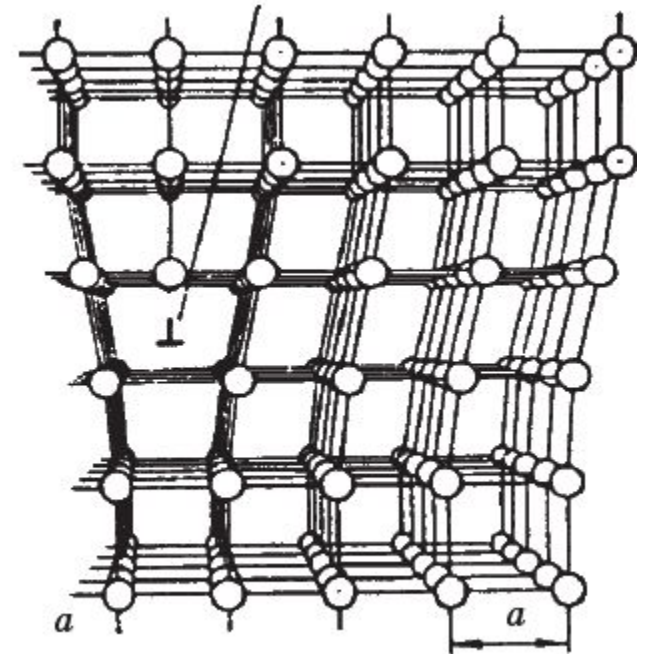
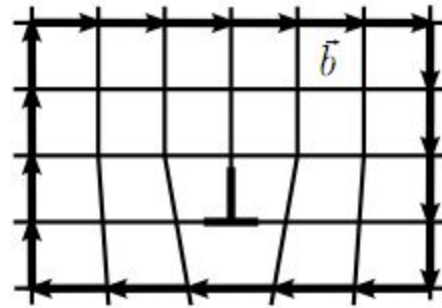
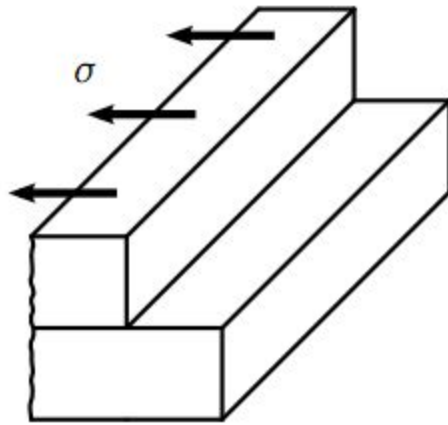
дефектность по Шоттки

$$[V'_A] = [V^{\bullet}_X] = \exp(\Delta S_{III} / 2k) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_{III}}{2k \cdot T}\right)$$

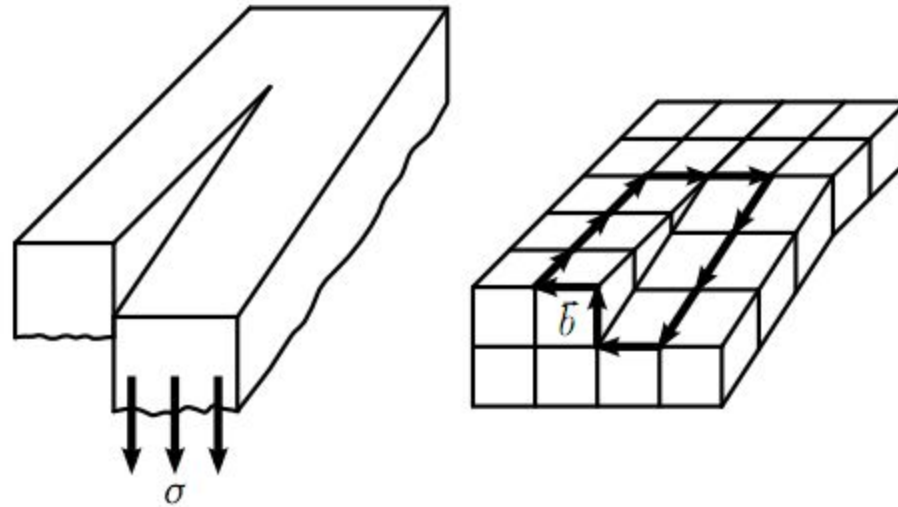
Дефектность по Френкелю:
в катионной подрешётке

$$[A^{\bullet}_i] = [V'_A] = \exp(\Delta S_{\Phi} / 2k) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_{\Phi}}{2k \cdot T}\right)$$

Краевые (линейные) дислокации



Винтовые дислокации



$$\gamma = \frac{1}{2} G \varepsilon^2,$$

где G — модуль сдвига, ε — деформация

$$E_d = G b^2 l_d$$

$V^2 > V_1^2 + V_2^2$ - произвольное расщепление

$V^2 < V_1^2 + V_2^2$ - объединение

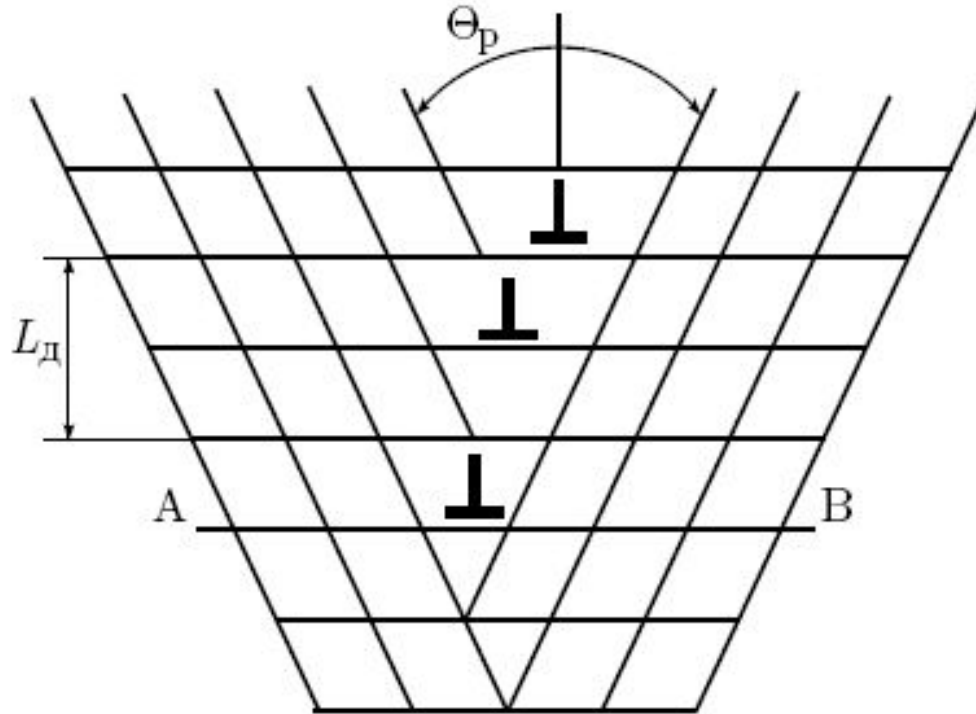
$V^2 = V_1^2 + V_2^2$ - индифферентны $E = 10^{-9}$ Дж./см

Поверхностные дефекты

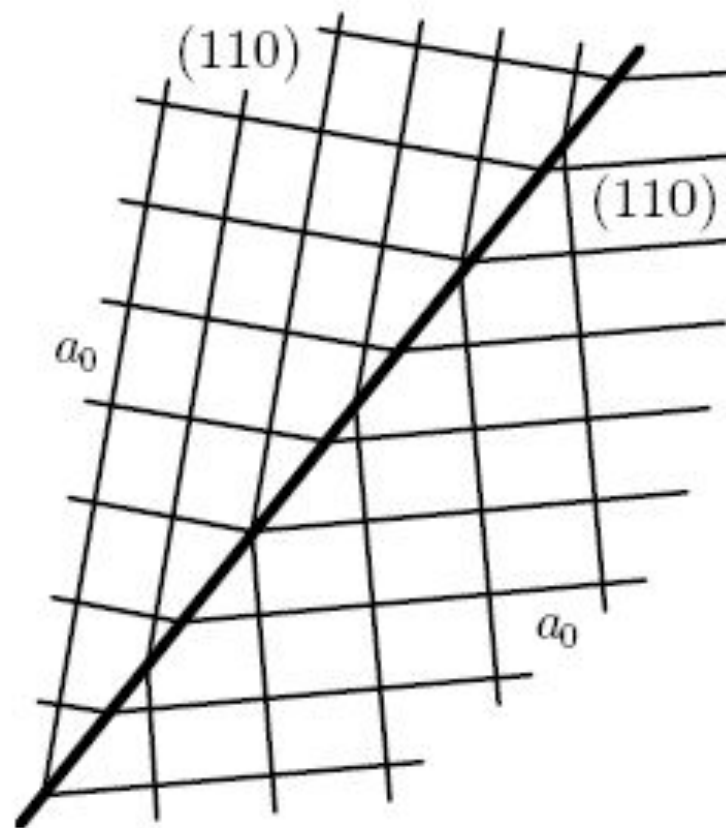
- Блоки
- Двойники
- Дефекты упаковки
 - Границы зерен

Блоки

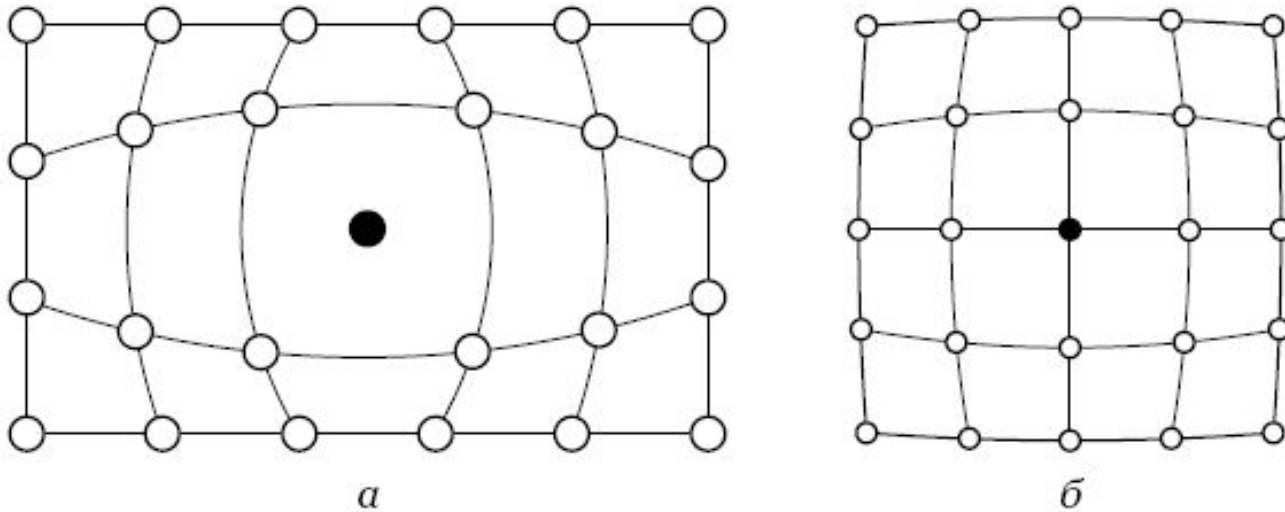
Разориентация от нескольких секунд до нескольких минут.



ДВОЙНИКИ



Химические дефекты



- Вхождение молибдена в кристалл АИГ при выращивании методом Стокбаргера-Бриджмена.