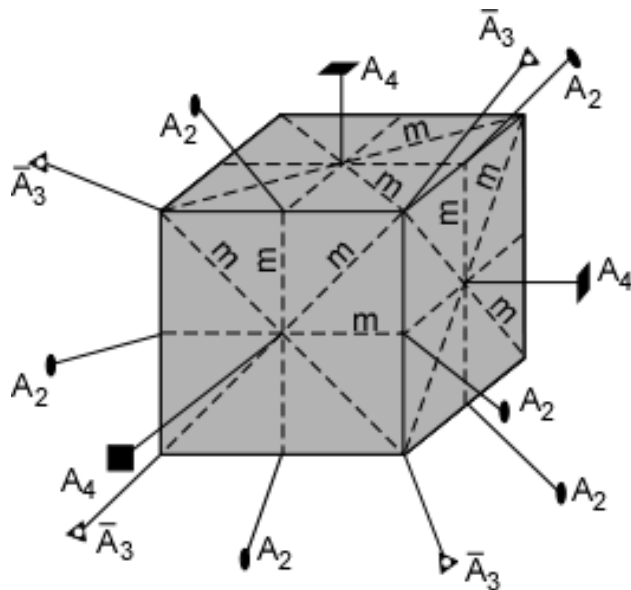


Лекція 5

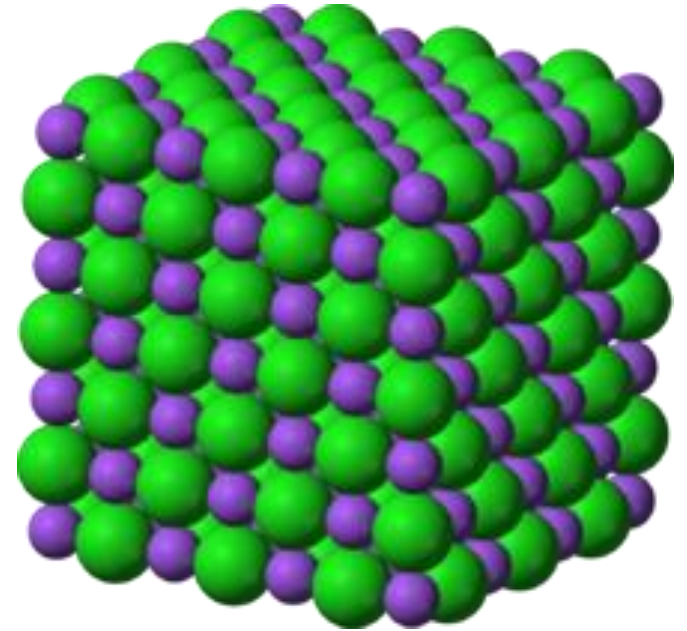
КРИСТАЛОГРАФІЧНІ СИСТЕМИ (СИНГОНІЇ)



$3A_4, 6A_2, 4\bar{A}_3, 9m, i$
 $4/m\bar{3}2/m$

Елементарна комірка кристалу

Елементарна комірка кристала —
одинична комірка (паралелепіпед),
об'єм якої кратний об'ємові
примітивного паралелепіпеда.

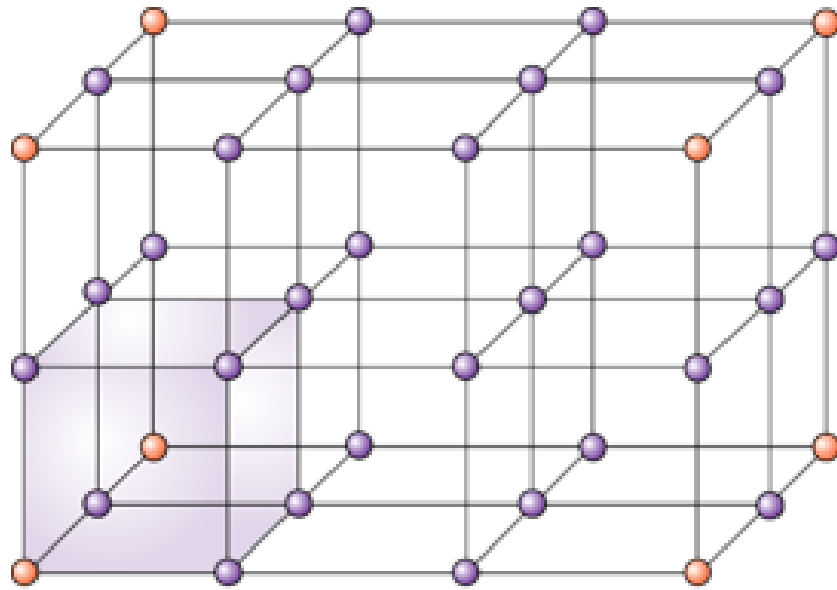


Структура кристалу NaCl
(кухонна сіль)

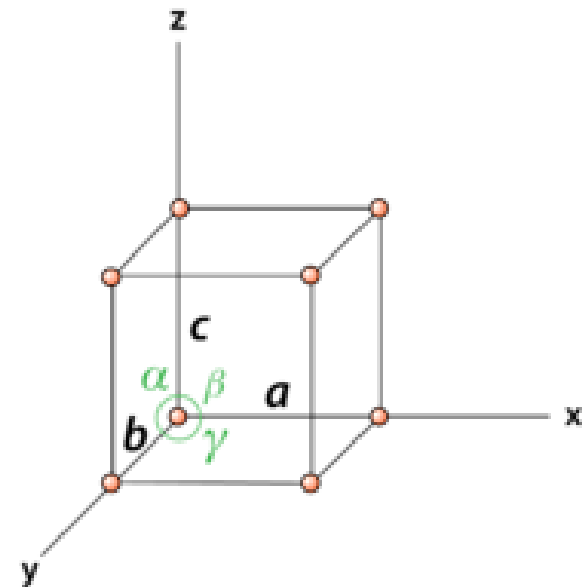
Елементна комірка

Елементна комірка - це найменша повторювана одиниця, що має повну симетрію кристалічної структури.

Характеризується величинами **ребер** (a , b , c), які збігаються з осями кристалів певної установки, і величинами **кутів** між цими ребрами (α , β , γ).



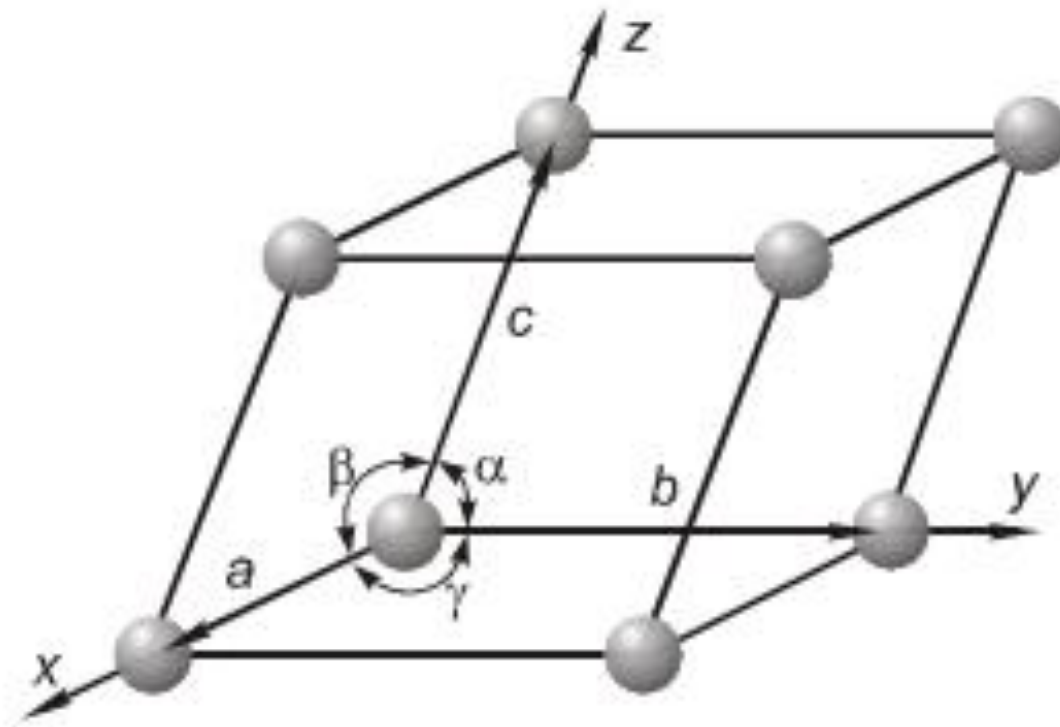
Crystal Lattice



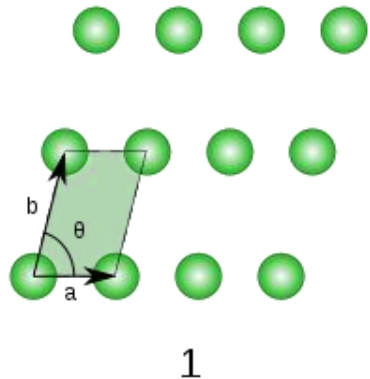
Unit Cell

Елементарна комірка кристалічної структури

Кожну елементарну комірку характеризують шість параметрів:
трансляційні одиничні вектори a , b , c і кути між ними α , β , γ

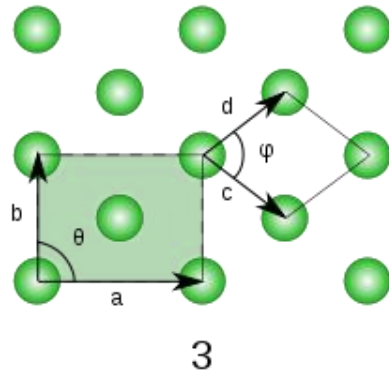
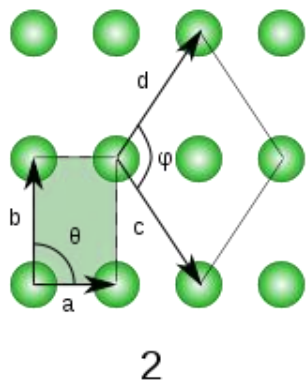


a , b , c - лінійні параметри; α , β , γ - кутові параметри



$$|a| \neq |b|, \theta \neq 90^\circ$$

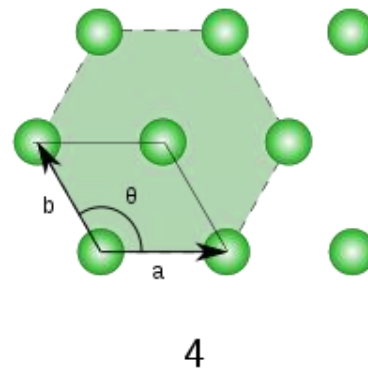
m



$$|a| \neq |b|, \theta = 90^\circ$$

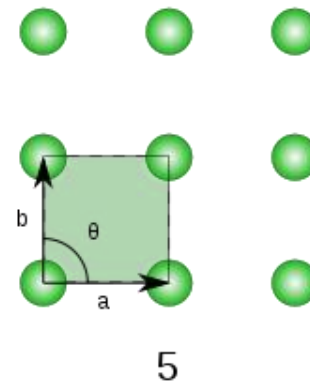
$$|c| = |d|, \varphi \neq 90^\circ$$

o



$$|a| = |b|, \theta = 120^\circ$$

h



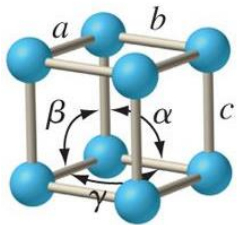
$$|a| = |b|, \theta = 90^\circ$$

t

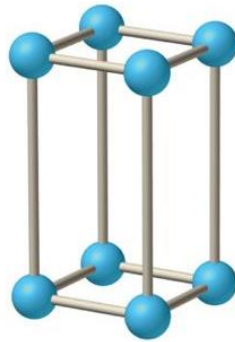
1 - коса (моноклінна), 2 - прямокутна (орторомбічна), 3 - центрована прямокутна (орторомбічна), 4 - гексагональна, і 5 - квадратна (тетрагональна).

7 кристалічних систем

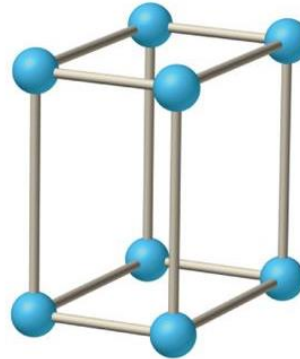
Всі тривимірні кристали належать до однієї з 7 кристалічних систем:



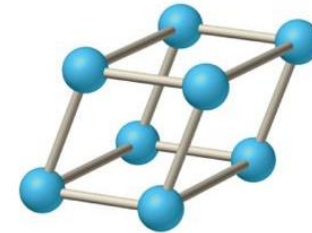
Simple cubic
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



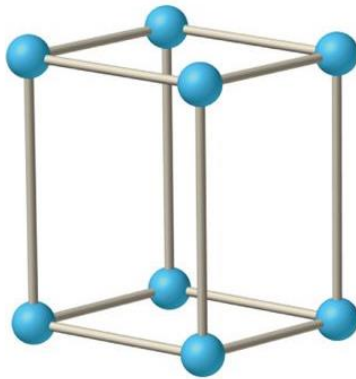
Tetragonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



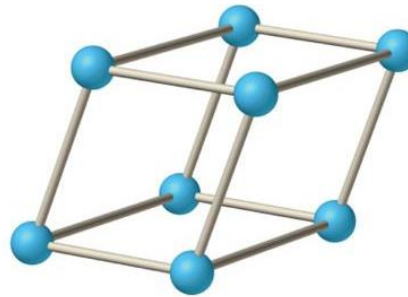
Orthorhombic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



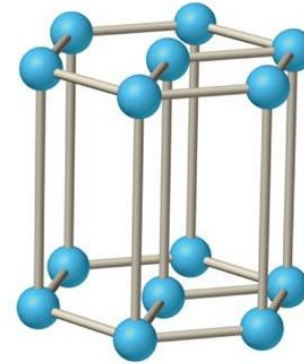
Rhombohedral
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



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



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



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

The 7 Crystal Systems

Crystal System	Lengths	Angles
cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
trigonal	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$

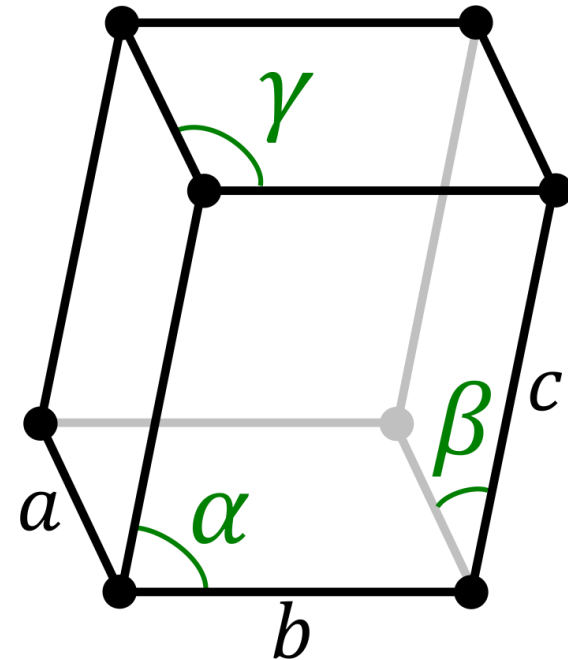
Триклінна сингонія ($a \neq b \neq c$ and $\alpha \neq \beta \neq \gamma$) (паралелепіпед)

Триклінна сингонія — це найпростіший тип кристалічної ґратки.

У кристалах триклінної сингонії всі 3 кути між ребрами елементарного паралелепіпеда просторової ґратки косі.

В них всі напрями є одиничними, і вони або зовсім не мають елементів симетрії, або в них існує лише центр симетрії (C).

Константи: $a \neq b \neq c$ and $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$.



Ґратка Браве
триклінної сингонії



An example of the
triclinic crystals,
Мікроклін
 KAlSi_3O_8

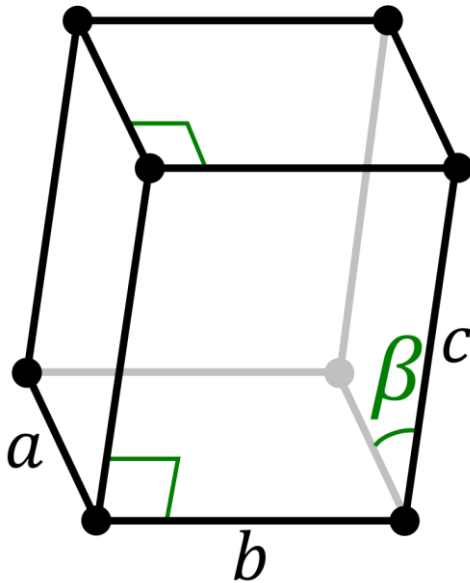


Бірюза
 $\text{CuAl}_6(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

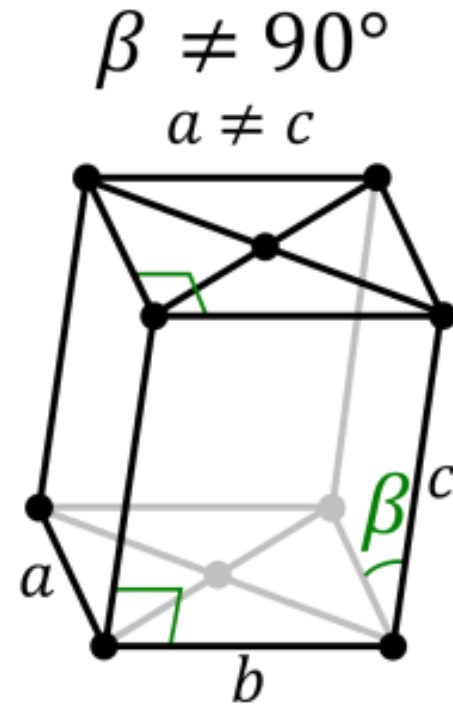
Моноклінна сингонія

(призма з паралелограмом в основі)

Цей тип сингонії характеризується трьома різними за довжиною базовими векторами й двома прямими кутами. Тобто, елементарна комірка — похилий паралелепіпед із прямокутником в основі.



Примітивна моноклінна сингонія



Моноклінна центрована сингонія



Приклад моноклінної сингонії. Ортоклаз $K[AlSi_3O_8]$.

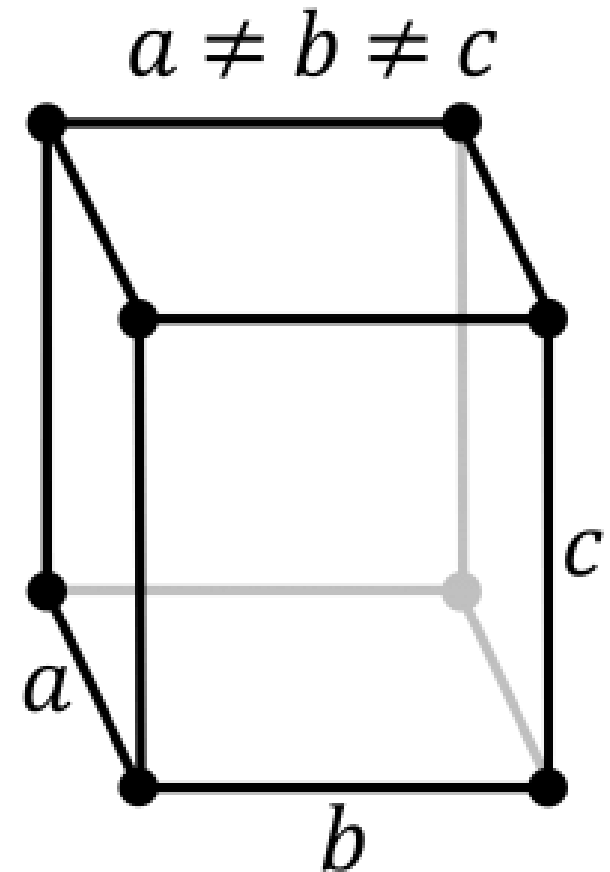
Ромбічна сингонія або ортогональна сингонія

(Прямокутний паралелепіпед)

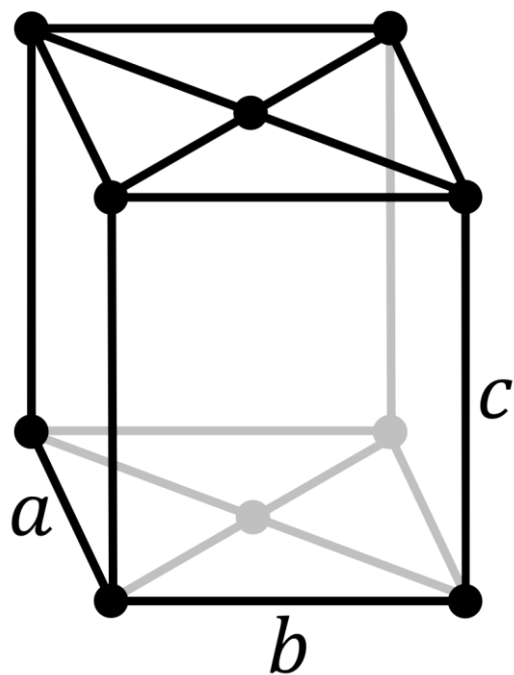
Три базисні вектори різної довжини перпендикулярні один до одного.

Існують різні довжини.

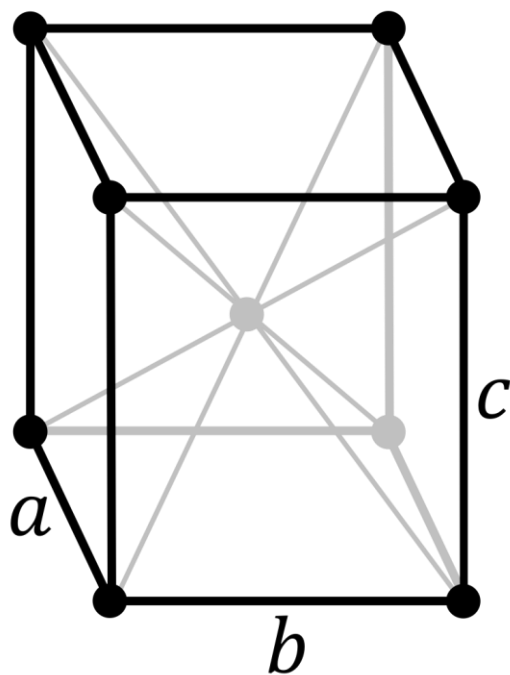
На основі їх ромбічної структури орторомбічна система включає різні кристалічні форми, а саме піраміди, подвійні піраміди, ромбічні піраміди та пінакоїди.



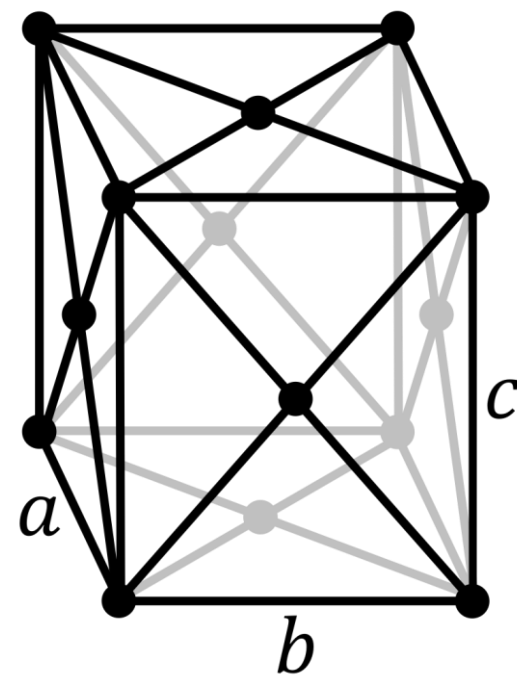
Крім простої ромбічної ґратки Браве, існують ще три інші:
з центрованою основою, об'ємноцентрована, гранецентрована



Ромбічна центрована



**Ромбічна
об'ємноцентрована**



**Ромбічна
гранецентрована**



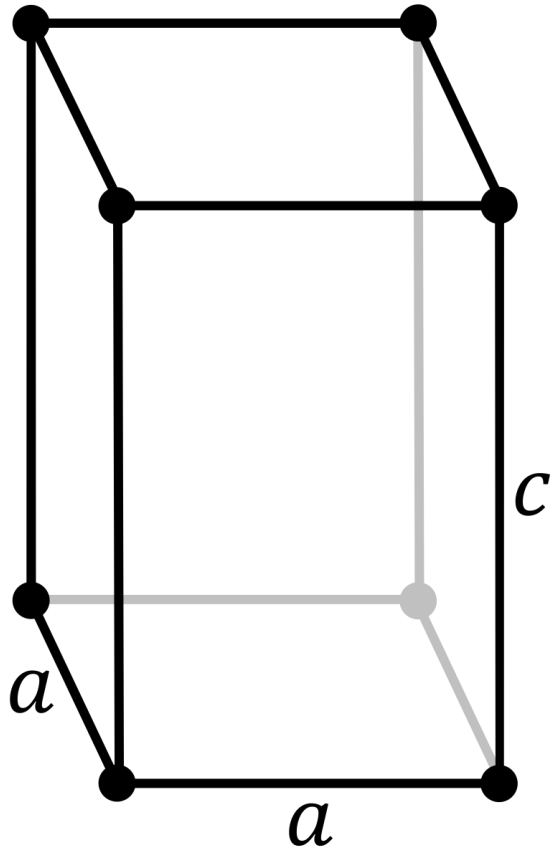
**Самородна сірка на
Арагоніті і целестині**



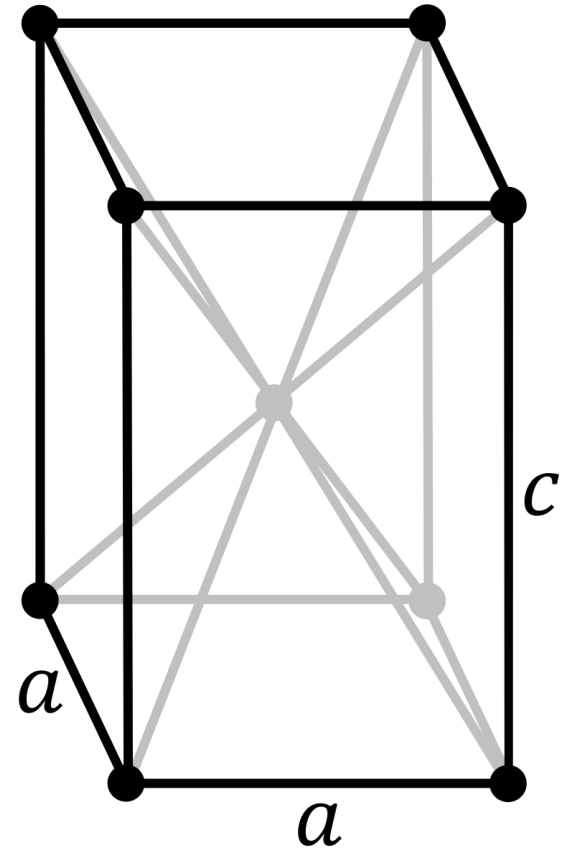
Барит

Тетрагональна сингонія

(Прямокутний паралелепіпед з квадратом в основі)



Примітивна тетрагональна сингонія



Центрована тетрагональна сингонія



Халькопірит,
мідний колчедан CuFeS_2



Блискучий
кристал
циркону, що
сидить на
засмаглої
матриці
кальциту з
району Гілгіт
Пакистану



Шеєліт CaWO_4

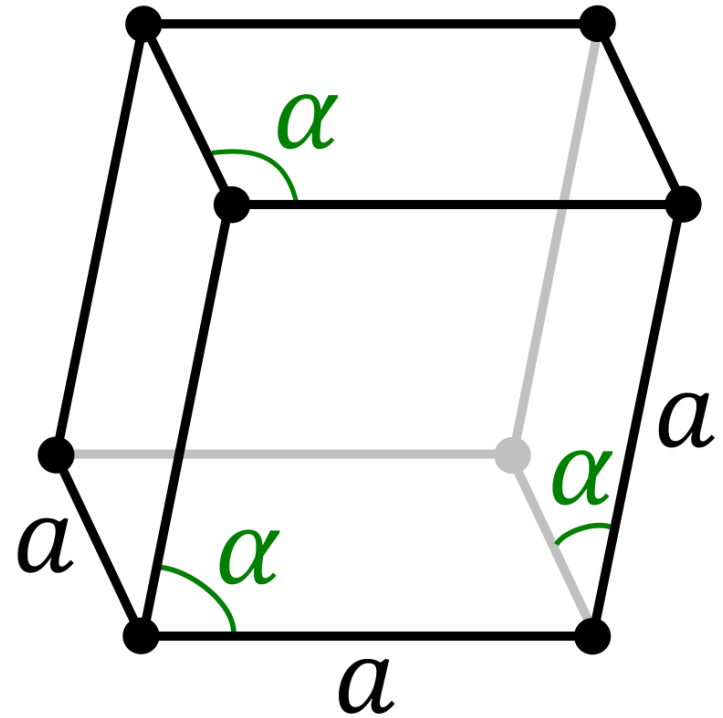
Тригональна сингонія або ромбоєдрична

(Рівносторонній паралелепіпед -ромбоєдр)

Усі три базисні вектори рівні за довжиною, але не перпендикулярні один до одного.

$$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$$

Кути та вісь у тригональній системі подібні до гексагональних систем. У основі гексагональної системи (розпереріз призми) буде шість сторін. У тригональній системі (поперечний переріз основи) буде три сторони. Кристалічні форми в тригональній системі включають тристоронні піраміди, Скаленоедр і Ромбоєдри. Деякі типові приклади включають рубін, кварц, кальцит, агат, яшму, очей тигра тощо.





Кварц SiO_2



Доломіт



Корунд



тригональний гематит

Гексагональна сингонія

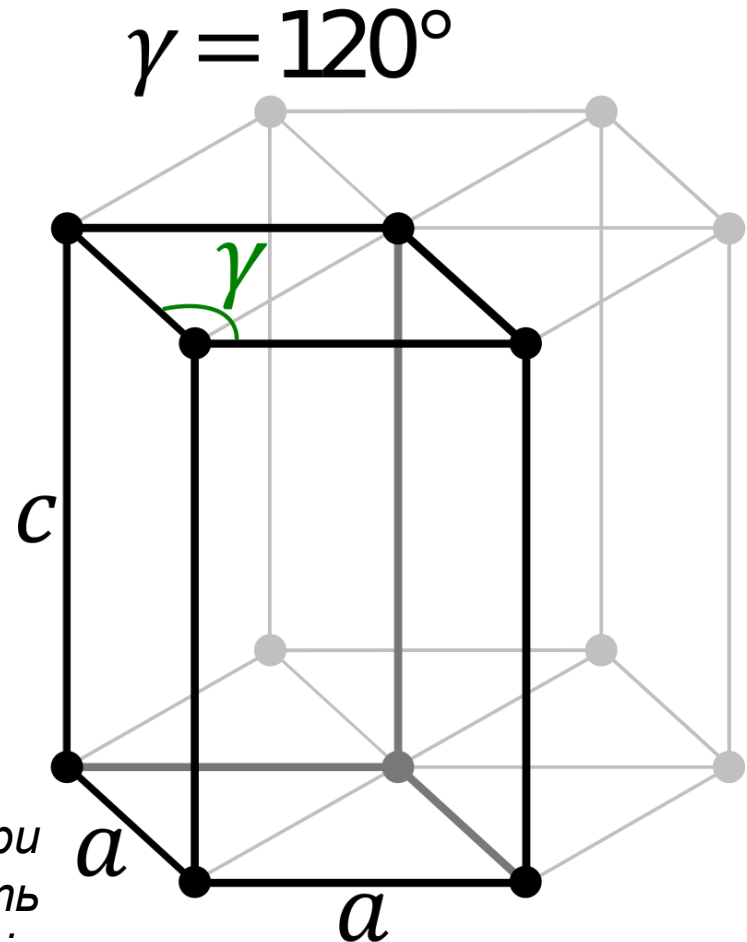
(призма з основою правильного центрованого шестикутника)

Елементарна ґратка має в основі правильний шестикутник із атомом у центрі. Інша вісь перпендикулярна до основи.

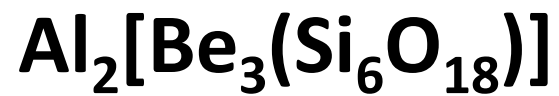
Утворюється при щільній упаковці сферичних куль.

Її елементарна комірка будується на трьох базових векторах (трансляціях), два з яких рівні по довжині і утворюють кут 120° , а третій їм перпендикулярний і відрізняється від них по довжині. Таким чином, форма комірки визначається двома параметрами: довжинами базових векторів a і c .

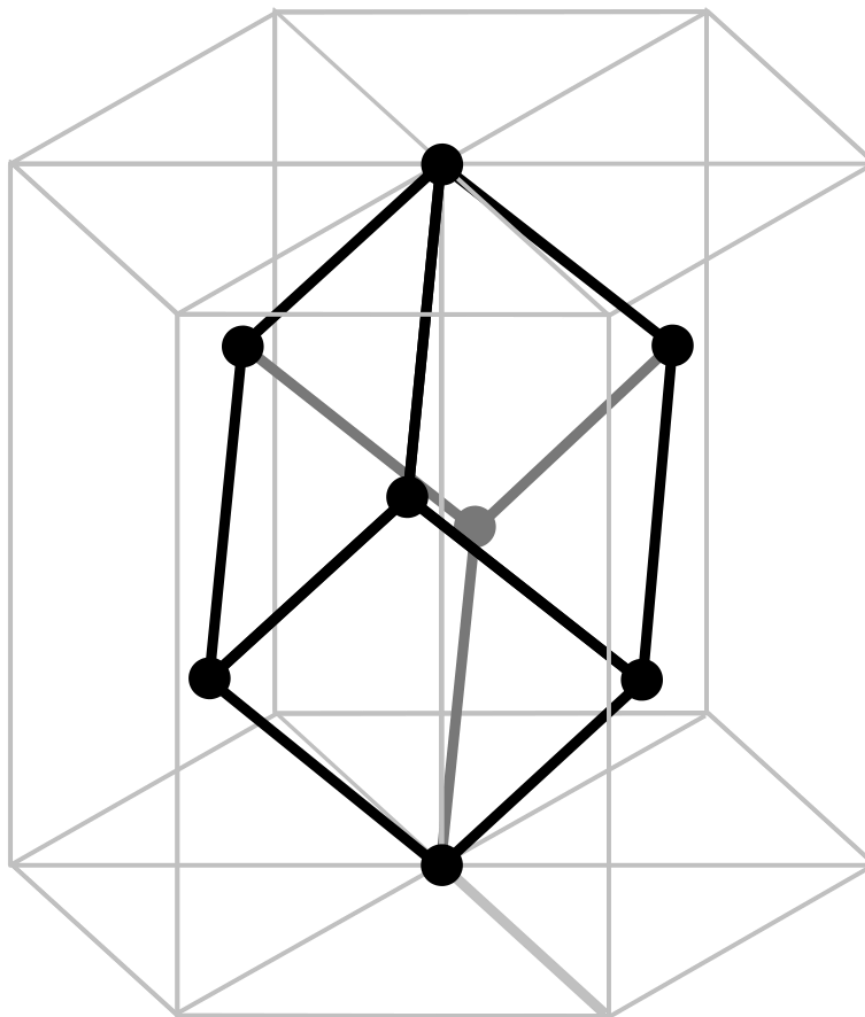
У гексагональній сингонії три елементарних комірки утворюють правильну призму на шестигранній основі.



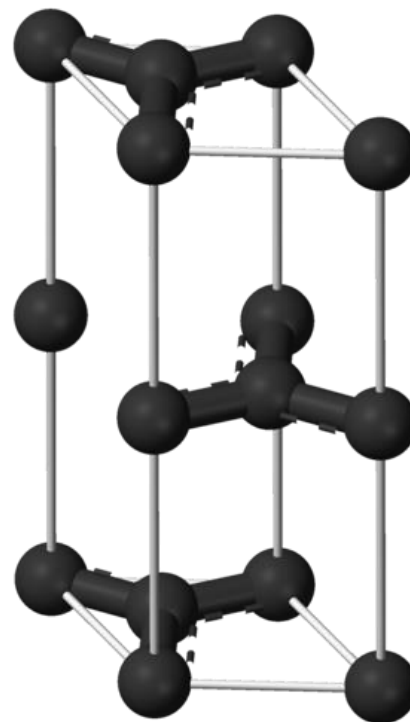
гексагональный берил



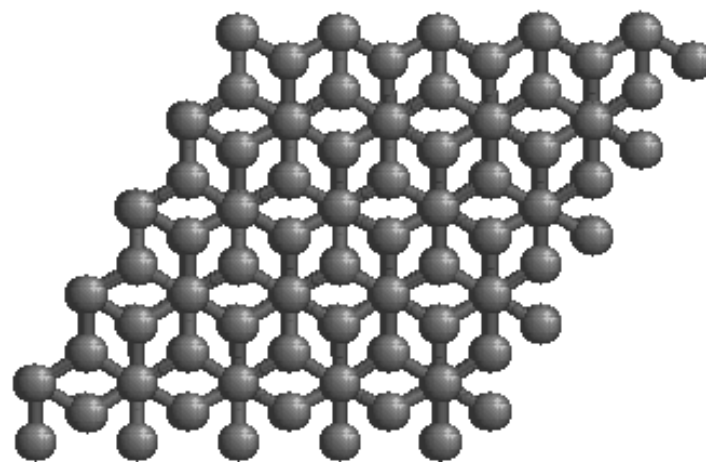
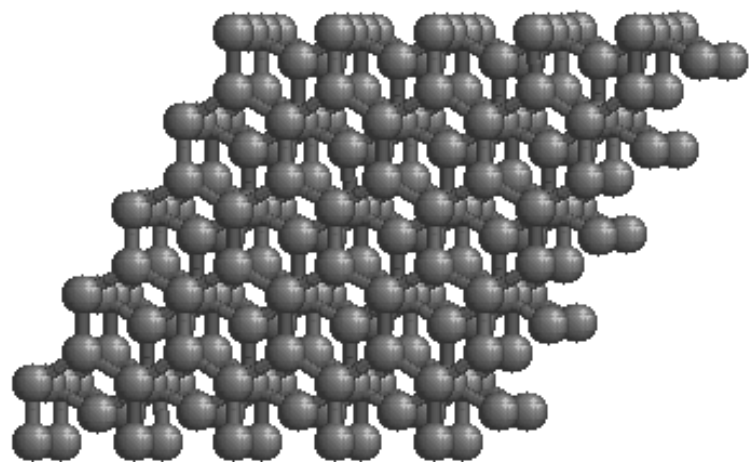
Співвідношення між двома установками для ромбоедричної решітки



графіт



Graphite's unit cell



Обертальні графітові стереограми

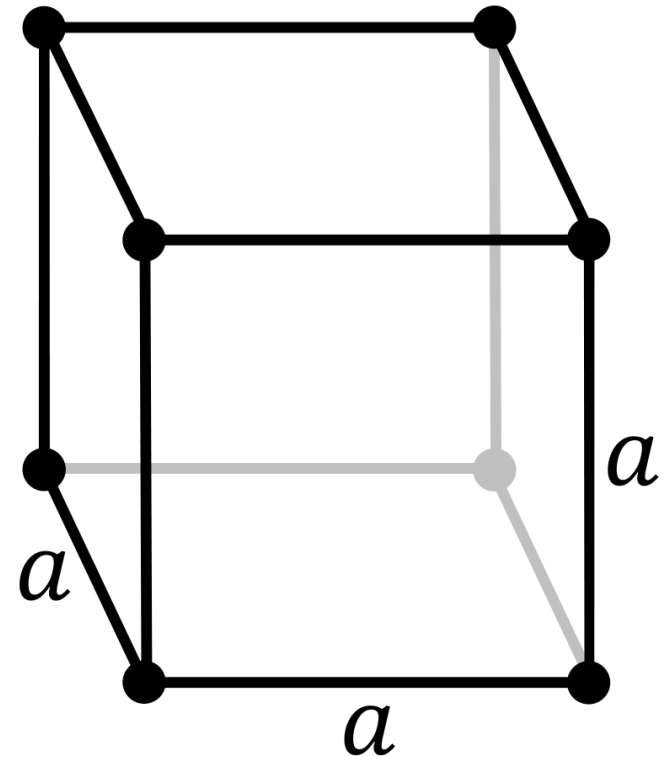
Кубічна сингонія

(куб)

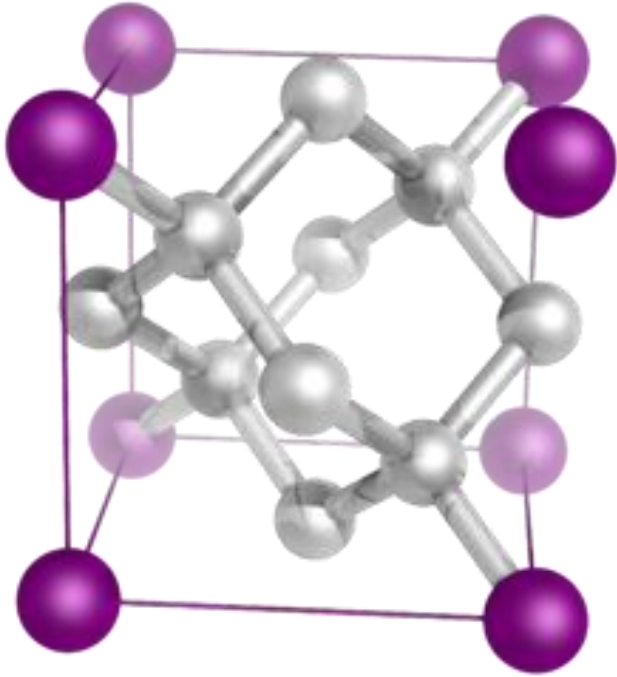
Елементарна комірка кристала кубічної сингонії визначається трьома векторами рівної довжини a , перпендикулярними один одному. Об'єм комірки дорівнює a^3 .

Кристалічна сингонія найвищої симетрії.
Усі три базисні вектори рівні й перпендикулярні між собою.

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



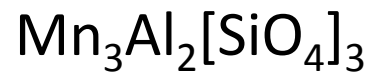
Приклади кубічної структури



Структура алмазу.



кубічний спесартин



Гратки Браве

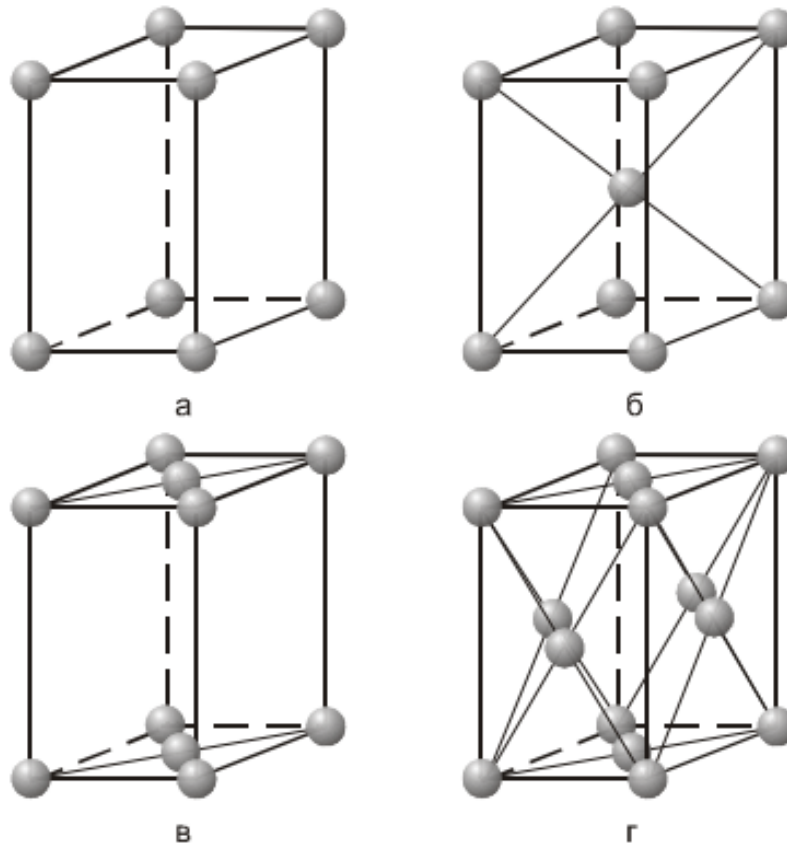
Базуючись на аналізі симетрії кристалів, Браве встановив, що всі існуючі кристалічні структури в тривимірному просторі можуть бути описані **чотирнадцятьма комірками**, котрі є трансляційними, тобто при переміщенні їх вздовж певних векторних напрямків відтворюється вся структура.



Огюст Браве́ (1811— 1863) — французький фізик і один із засновників кристалографії.

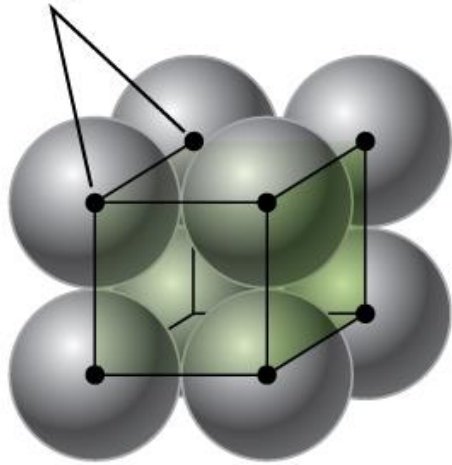
Започаткував геометричну теорію структури кристалів: він знайшов (1848) основні види просторових ґраток і висловив гіпотезу про те, що вони збудовані із закономірно розташованих у просторі точок.

За характером розташування атомів у комірці запропоновано одну примітивну (позначається буквою P) і три складні комірки з додатковими вузлами в центрі об'єму або в центрі граней комірки. Це об'ємноцентрована (тип I), базоцентрована (тип C) та гранецентрована (тип F). Названі комірки для ромбічної сингонії наведено на рис.:



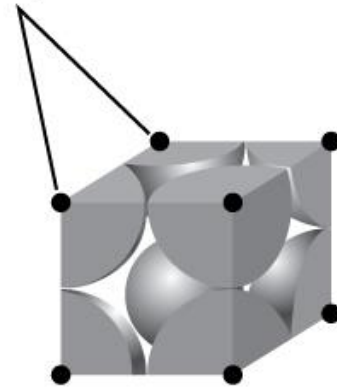
а - примітивна комірка (тип P); б – об'ємноцентрована (тип I);
в - базоцентрована (тип C); г - гранецентрована (тип F)

Lattice points

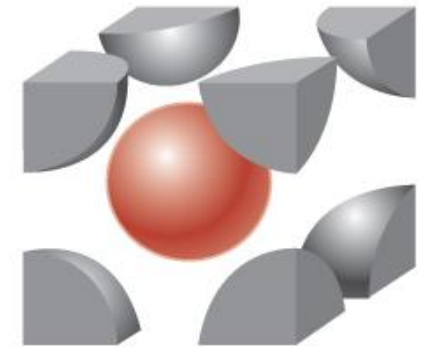
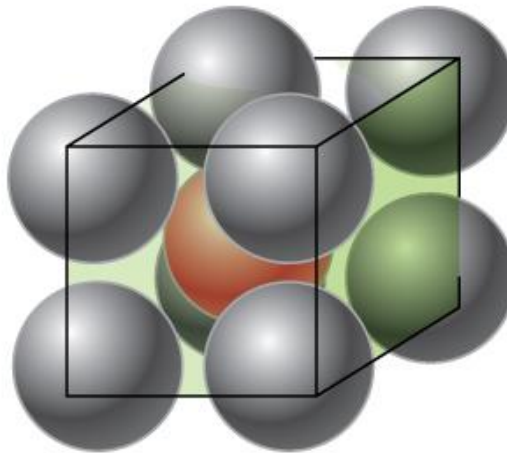
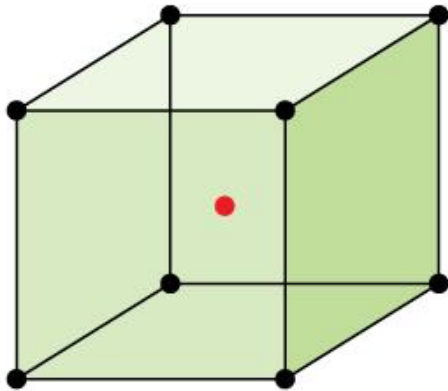


Simple cubic lattice cell

Lattice points

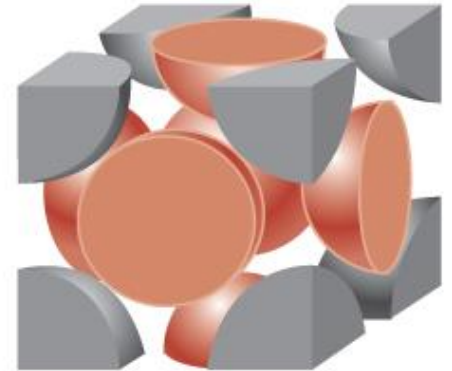
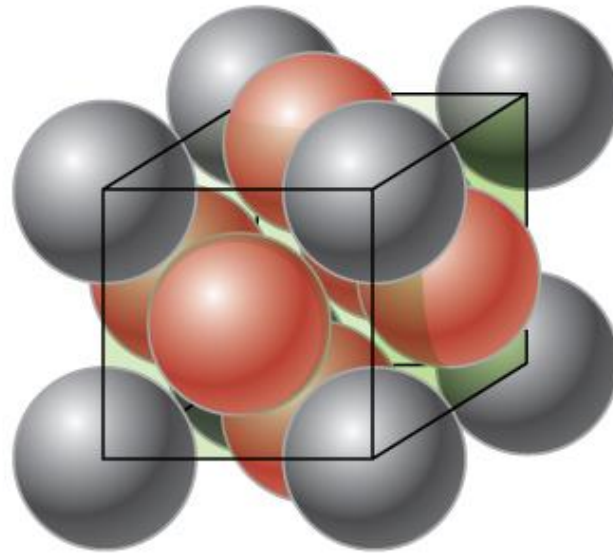
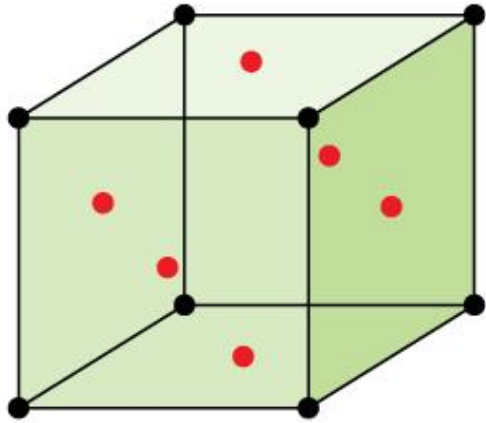


8 corners



Body-centered cubic structure

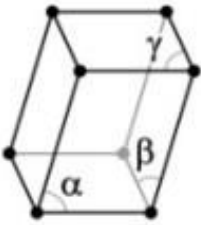
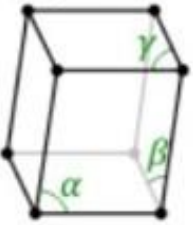
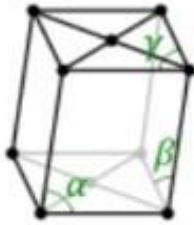
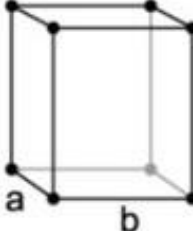
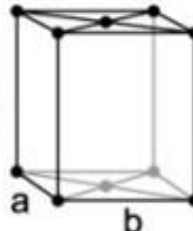
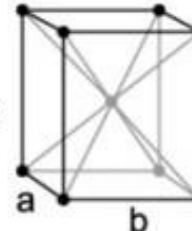
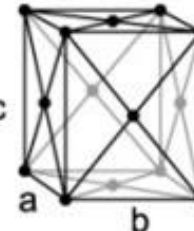
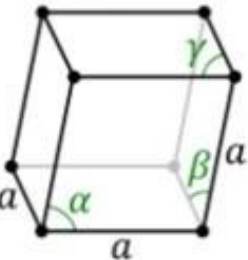
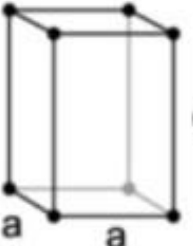
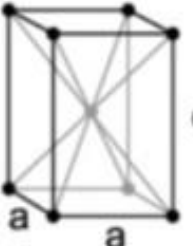
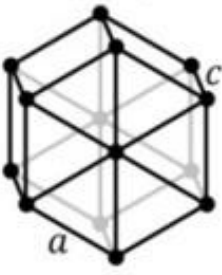
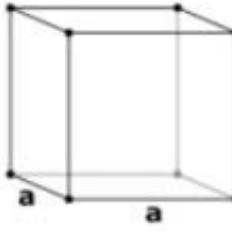
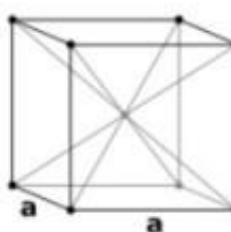
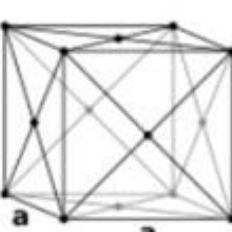
In a body-centered cubic structure, atoms in a specific layer do not touch each other. Each atom touches four atoms in the layer above it and four atoms in the layer below it.



Face-centered cubic structure

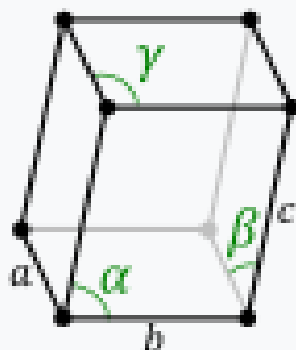
A face-centered cubic (FCC) solid has atoms at the corners and, as the name implies, at the centers of the faces of its unit cells.

14 елементарних комірок Браве

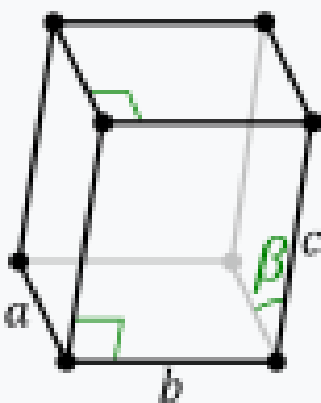
<p>$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$</p> 	<p>$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$</p>  <p>Centered</p>	<p>$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$</p>  <p>Simple</p>	<p>$a \neq b \neq c$</p>  <p>Simple</p>  <p>Base Centered</p>  <p>Face Centered</p>  <p>Body Centered</p>			
<p>Triclinic</p>	<p>Monoclinic</p>		<p>Orthorhombic</p>			
<p>$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$</p> 	<p>$a \neq c$</p>  <p>Simple</p>	<p>$a \neq c$</p>  <p>Body Centered</p>	<p>$a \neq c$</p> 	<p>$a = b = c$</p>  <p>Simple</p>  <p>Body Centered</p>  <p>Face Centered</p>		
<p>Rhombohedral</p>	<p>Tetragonal</p>		<p>Hexagonal</p>	<p>Cubic (or isometric)</p>		

**Кристалічні системи
(Сингонія)**

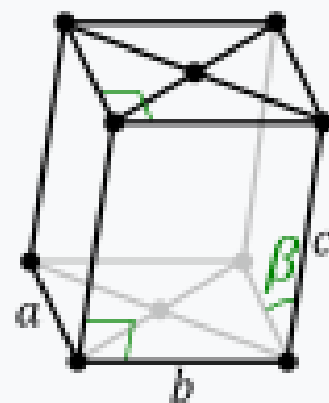
триклінна



моноклінна

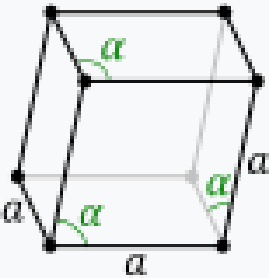
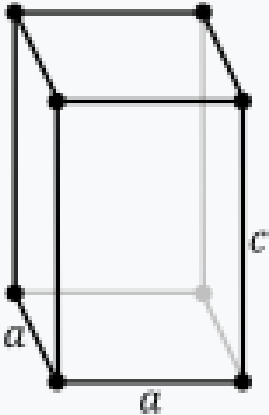
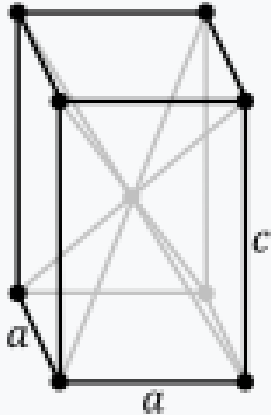
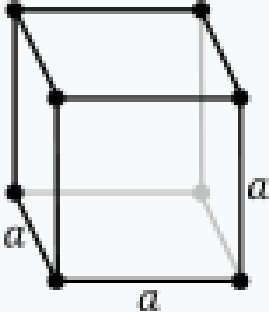
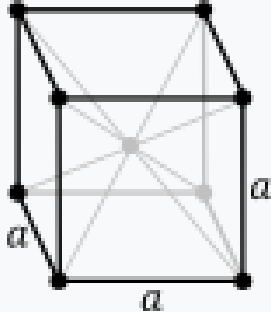
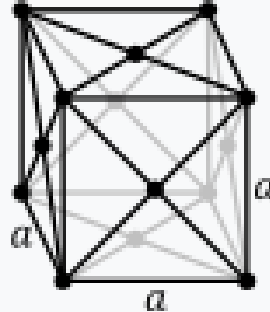


базоцентрирована



	примітивна	базоцентрирована	об'ємноцентрирована	гранецентрована
ромбічна				



<p>тригональна</p>			
<p>тетрагональна</p>	<p>примітивна</p>	<p>об'ємноцентрована</p>	
			
<p>кубічна</p>	<p>примітивна</p>	<p>об'ємноцентрована</p>	<p>гранецентрована</p>
			

Основні параметри кристалічних ґраток:

- ✓ **період або параметр ґратки** дорівнює довжині ребра ґратки у напрямі головних осей кристалічної ґратки;
- ✓ **координаційне число (K)** характеризує щільність пакування ґратки, визначає кількість найближчих і рівновіддалених атомів у певній кристалічній ґратці;
- ✓ **базис** — це кількість атомів (іонів), що належать до однієї ґратки;
- ✓ **атомний радіус** — це половина відстані між центрами найближчих атомів у кристалічній ґратці певної кристалічної системи;
- ✓ **коефіцієнт компактності** — це відношення об'єму, що займають атоми (іони), до всього об'єму ґратки даного типу.