

Кристаллическая решетка

Кристаллическая решетка (пространственная решетка) – схема, отражающая закономерность (периодичность) расположения материальных частиц (атомов, ионов, молекул) в кристаллической структуре вещества. Периодичность одномерного узора (например, атомного ряда или бордюра) (рис. 1,а) можно описать с помощью одномерной «решетки» – узлового ряда, характеризующегося величиной и направлением трансляционного вектора \vec{T} , связывающего две ближайшие эквивалентные точки. Периодичность двухмерного узора (слоя) описывается двухмерной решеткой – плоской параллелограмматической узловой сеткой (рис. 1,б), построенной на двух непараллельных векторах \vec{T}_a и \vec{T}_b . Вид решетки не зависит от того, какая точка узора принята за исходную. Трехмерная (пространственная) решетка характеризуется тремя некопланарными (не лежащими в одной плоскости) векторами \vec{T}_a , \vec{T}_b и \vec{T}_c . (рис. 1,в), абсолютные величины которых, выраженные в Å (или нанометрах), и углы (α , β , γ) между ними называются параметрами решетки или ее элементарной ячейки). Решетка отражает главную особенность кристаллического тела трехмерную периодичность в расположении эквивалентных материальных частиц, т.е. является своеобразным элементом симметрии структуры кристалла, которым обладает любой кристалл, даже лишенный какой-либо внешней симметрии.

Любая решетка - это параллелепипедальная система, минимальным представителем пространственной которой является параллелепипед повторяемости (ячейка Браве или элементарная ячейка), ребрами которого служат трансляционные векторы \vec{T}_a , \vec{T}_b и \vec{T}_c . Ячейки выполняют все трехмерное пространство без промежутков.

В структурах разных кристаллов можно выделить 7 соответствующих решеток симметрия которых описывается следующими точечными группами:

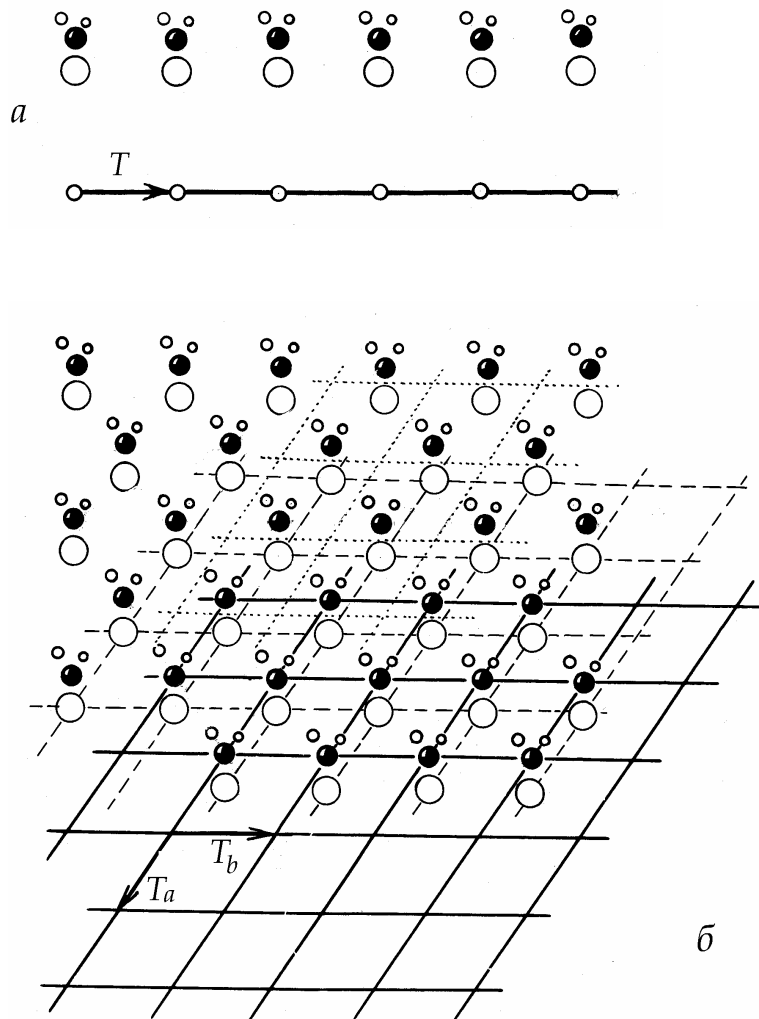
$$\bar{1}, \frac{2}{m}, mmm, \frac{4}{m}, \bar{3}m, \frac{6}{m}, m\bar{3}m.$$

В описание решетки (и ее элементарной ячейки) помимо параметров и точечной группы симметрии входит характеристика всех возможных случаев расположения в ней узлов (см. кристаллическая решетка). Если узлы ячейки расположены только в ее вершинах, т.е. связаны тремя координатными трансляциями \vec{T}_a , \vec{T}_b и \vec{T}_c , то ячейка будет «пустая» – примитивная (P). Ячейки Браве, в которых присутствуют дополнительные узлы, центрирующие их основания (базис), боковые грани, объем либо все грани одновременно,

будут непримитивными и имеют соответствующие названия: базоцентрированная (С) , бокоцентрированная (А или В) – когда зацентрирована пара противоположных боковых граней ячейки), объемноцентрированная (I), дважды объемноцентрированная (ромбоэдрическая) (R) или гранецентрированная (F). Ячейка Браве передает свое название соответствующей пространственной решетке.

Все 14 типов пространственных решеток выведены в 1848 г. французским ученым О. Браве, что подчеркнуто их названием – «решетки Браве», «ячейки Браве» (см. табл.)

Ошибочно смешивать термины «кристаллическая решетка» и «кристаллическая структура», ибо первый является одним из элементов симметрии, с помощью которых можно описать симметрию кристаллической структуры. Одну и ту же решетку могут иметь кристаллы совершенно разных соединений. Например, структуры алмаза С, галита NaCl, сфалерита ZnS и многие другие (рис. 2) имеют одинаковую кубическую гранецентрированную решетку (F).



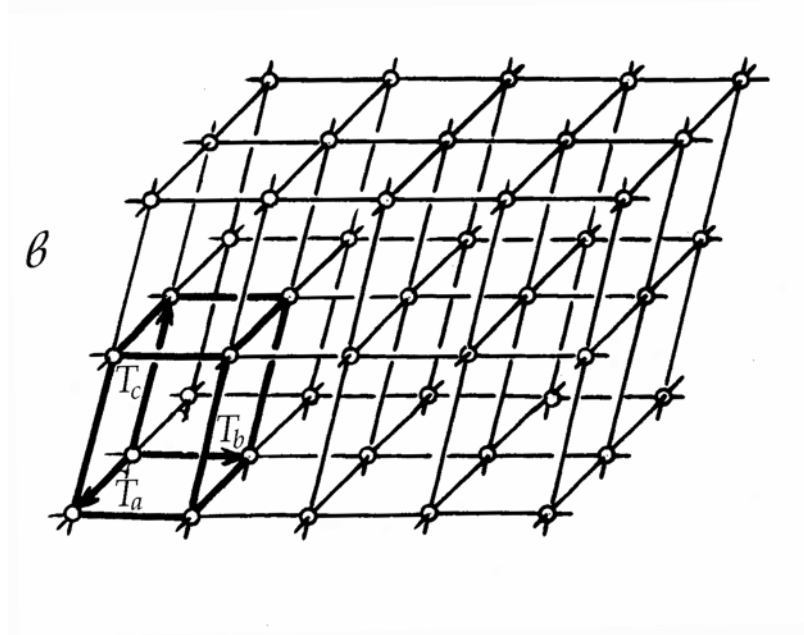


Рис. 1. Одномерный бесконечный узор и его «решетка» – узловой ряд (а); двухмерный бесконечный узор и его решетка – плоская узловая сетка (б); трехмерная пространственная решетка с выделенным параллелепипедом повторяемости – ячейкой Браве (в).

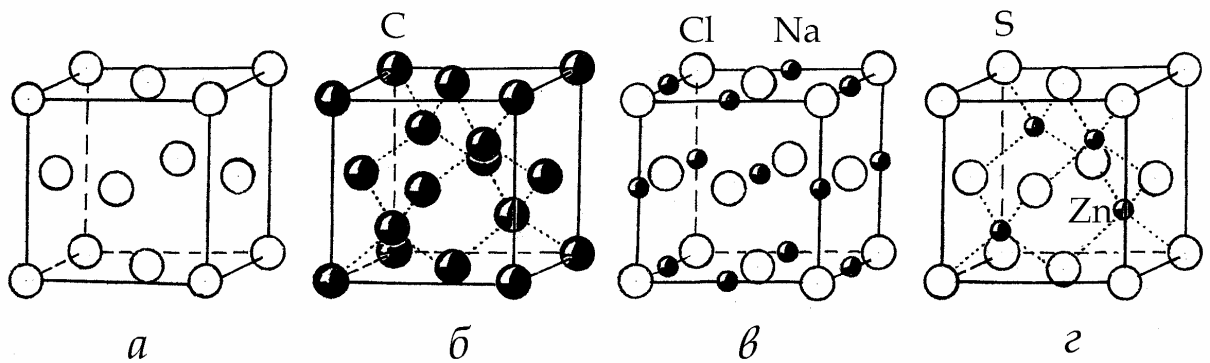


Рис. 2. Кристаллические структуры, построенные по закону одной и той же кубической пространственной F-решетки (а): алмаза (б), галенита (в) и сфалерита (г).

Текст подготовлен Егоровым-Тисменко Ю.К.