

# Структура кристалів

Андрій Жугаєвич (azh@lanl.gov)

30 квітня 2012 р.

1	Вступ . . . . .	1
1.1	Номенклатура кристалічних структур . . . . .	1
1.2	Задання кристалічної структури . . . . .	1
1.3	Характеристики кристалічних структур . . . . .	2
1.4	Гексагональні щільноупаковані структури . . . . .	2
2	Елементи квантової хімії . . . . .	3
2.1	Типи зв'язку . . . . .	3
2.2	Ковалентний зв'язок . . . . .	4
2.3	Гібридизація орбіталей . . . . .	5
3	Принципи будови кристалів . . . . .	7
3.1	Основні закономірності будови кристалів . . . . .	7
3.2	Кристали з ковалентним зв'язком . . . . .	7
3.3	Кристали з металічним зв'язком . . . . .	7
3.4	Іонні кристали . . . . .	7
3.5	Молекулярні кристали . . . . .	8
4	Приклади кристалічних структур . . . . .	8
4.1	Кристалічні структури одноелементних речовин . . . . .	8
	Література . . . . .	9

## §1. Вступ

### 1.1. Номенклатура кристалічних структур

В силу нескінченної кількості різних типів кристалічних структур немає і єдиної системи їх позначень. Найпростішим є використання загальноприйнятих назв або *прототипів*, наприклад, Cu має кубічну гра-  
нецентровану ґратку, Si — ґратку типу алмазу, GaAs — ґратку типу сфалериту. Найпоширеніші в природі кристалічні структури описані в системі так званих *структурних типів* (Strukturbericht). Символ структурного типу складається з типу хімічної формули (A — елементи, B — сполуки виду AB, C — сполуки AB<sub>2</sub>, D — сполуки A<sub>n</sub>B<sub>m</sub>, E-K — складніші сполуки, L — сплави, O — органіка, S — силікати) і порядкового номера для цього типу. Наприклад, структурні типи згаданих вище кристалів такі: Cu — A1, Si — A4, GaAs — B3. Часто використовують так званий *символ Пірсона*: тип ґратки Браве і кількість атомів на елементарну комірку Браве, наприклад, Cu — cF4, Si — cF8, GaAs — cF8, проте сам по собі він дає дуже обмежену інформацію.

### 1.2. Задання кристалічної структури

Найтривіальнішим способом однозначної специфікації кристалу є задання примітивної комірки і розташування атомів у ній. Інформативнішим є визначення наступного набору: 1) просторова група; 2) незалежні параметри ґратки Браве; 3) положення атомів у формі позицій Уайкофа (так званий *елементарний фрагмент* кристалу). Наприклад,

- Cu — Fm $\bar{3}$ m,  $a = 3.615$  Å, [Cu (4a)];
- Si — Fd $\bar{3}$ m,  $a = 5.431$  Å, [Si (8a)] (початок відліку в точці інверсії<sup>1</sup>);
- GaAs — F $\bar{4}$ 3m,  $a = 5.653$  Å, [Ga (4a), As (4c)].

<sup>1</sup>Для деяких груп з неоднозначним вибором елементарної комірки треба фіксувати вибір останньої.