

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИПОВ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РЕШЕТКИ И ЕЕ ЭЛЕМЕНТОВ

Цель работы: определение типов кристаллических решеток и элементов, их характеризующих.

Материалы и оборудование: макеты кристаллических решеток, линейки измерительные.

Пространственная решетка представляет собой систему точек, расположенных в вершинах равных, параллельно ориентированных и смежных по граням параллелепипедов, заполняющих пространство. Узлы пространственной решетки располагаются в одной плоскости в виде геометрически правильной плоской сетки, которая представляет собой совокупность узлов. Узлы находятся в вершинах системы равных, параллельно ориентированных параллелограммов (рис. 14).

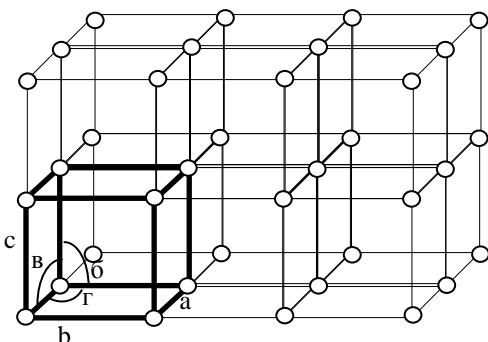


Рис. 14. Пространственная решетка с элементарной ячейкой

Элементарные параллелепипеды, совокупность которых образует пространственную решетку, называются ее *элементарными ячейками*.

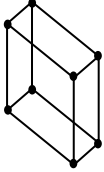
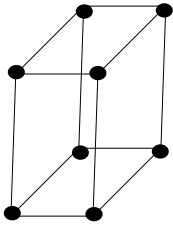
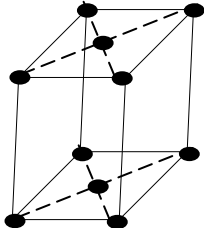
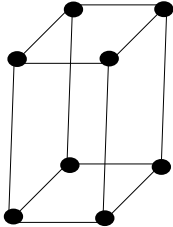
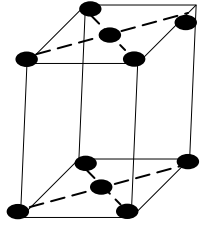
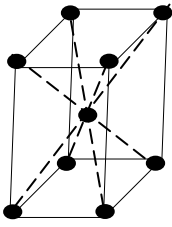
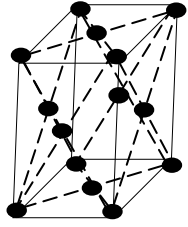
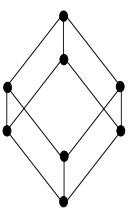
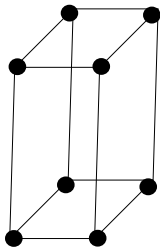
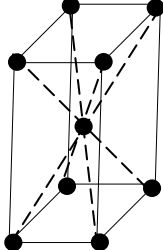
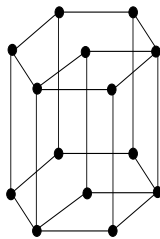
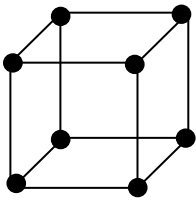
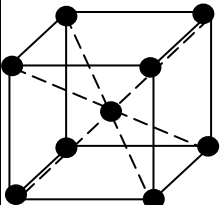
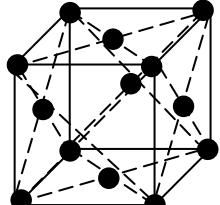
Три угла между направлениями, принимаемыми за основные оси (α , β , γ) и три отрезка (a , b , c) расстояний между узлами вдоль этих осей, называются параметрами ячейки. Характеристика параметров элементарной ячейки для кристаллов различных сингоний были приведены в табл. 2.

Начало координат, т.е. вершину элементарного параллелепипеда пространственной решетки, можно представить себе в любой точке кристаллической структуры, но обычно его помещают в центрах тяжести тех материальных частиц (атомов, ионов, молекул), которые являются узлами пространственной решетки.

Французский ученый О. Браве доказал, что существует четырнадцать типов пространственных решеток, элементарные ячейки которых подразделяются соответственно по семи сингониям. Эти ячейки бывают примитивными (P), все узлы которых расположены только в вершинах элементарного параллелепипеда, и сложные – узлы размещены не только в вершинах элементарных ячеек, но и на гранях, ребрах и в объеме (табл. 3).

Таблица 3

14 типов решеток Браве

Сингония	Тип решетки Браве			
	P	C	I	F
Триклинная				
Моноклинная				
Ромбическая				
Тригональная (ромбоэдрическая)				
Тетрагональная				
Гексагональная				
Кубическая				

Четырнадцать типов решеток Браве отражают все возможные симметричные расположения точек в пространстве. Сложные ячейки бывают гранецентрированными (F), базоцентрированными (C) и объемноцентрированными (J).

Для определения структуры кристаллов необходимо определить количество атомов каждого химического элемента, приходящегося на одну элементарную ячейку – число формульных единиц (Z). Такой подсчет возможен на пространственных моделях кристаллов. Начало координат при подсчете обычно совмещают с центром того или иного атома или с центром координационного многогранника, хотя любая точка в объеме структуры может быть с этой целью принята за исходную. Количество атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку, легко определяется на основании данных, приведенных на рис. 15.

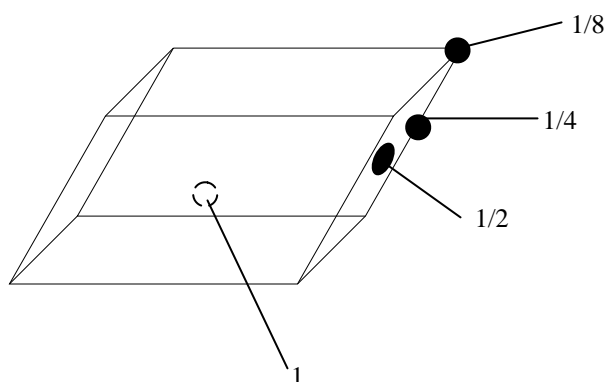


Рис. 15. Подсчет количества атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку

Элементы симметрии кристаллических многогранников, как отмечалось ранее в лабораторных работах № 1 и № 2, описываются с помощью таких элементов симметрии, как оси симметрии, плоскости симметрии и инверсионные оси. Поскольку кристаллическая решетка подразумевается бесконечной (из-за чрезвычайно малых расстояний между атомами по сравнению с величиной кристалла), то и элементы ее симметрии повторяются бесконечно. К открытым элементам симметрии относятся:

- 1) трансляции;
- 2) винтовые оси симметрии;
- 3) плоскости скользящего отражения.

Трансляция (T) – поступательный перенос некоторого расположения (системы точек, линий фигуры, атомов и т.д.), при котором это расположение совмещается само собой. Направления, при перемещении вдоль которых на определенный отрезок (шаг трансляции) происходит совмещение, называются осями переносов или осями трансляции. Наличие трансляций – наиболее характерное свойство расположения атомов в кристалле. Их величину и направление характеризуют с помощью вектора, который также называется трансляцией.

При перемещении вектора параллельно самому себе в его концах оказываются совершенно одинаковые точки.

Винтовые оси симметрии – сложные оси. При симметрических преобразованиях вдоль винтовых осей совмещение точек осуществляется их перемещением на определенный отрезок вдоль оси и одновременно поворотом на угол $360^\circ/n$, где n может быть равно 2, 3, 4 или 6. Кристаллические решетки могут обладать, таким образом, винтовыми осями второго, третьего, четвертого и шестого порядков и различаться при этом по величине трансляции.

Винтовые оси обозначают $2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$. Здесь частное от деления малой цифры на большую даст величину поступания t вдоль оси по отношению к элементарной трансляции T структуры в направлении, параллельном данной оси. Различают правые и левые винтовые оси. Винтовая ось называется правой, если вращение вокруг нее происходит по часовой стрелке, и левой, если поворот производится против часовой стрелки.

Двойная винтовая ось 2_1 – действие ее сводится к повороту на 180° с последующим переносом вдоль нее на половину элементарной трансляции. Отсюда понятно обозначение этой оси – 2_1 . Двойная винтовая ось одновременной является и правой, и левой, так как повороты вокруг нее на 180° и вправо и влево приводят к тождественному результату (рис. 16, А).

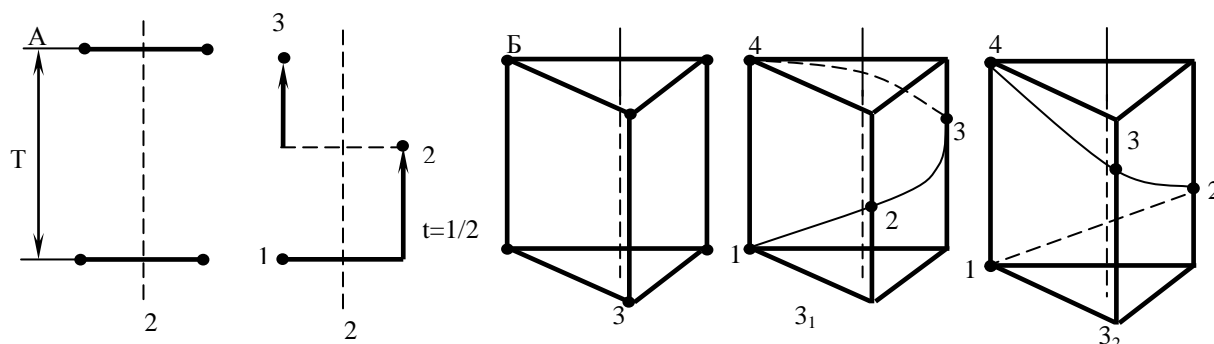


Рис. 16. Поворотные оси симметрии:

А – двойная 2 (а) и двойная винтовая 2_1 (б); Б – тройная 3 (а) и тройные винтовые оси – правая 3_1 (б) и левая 3_2 (в).

Действие тройной оси (3_1) состоит в повороте на 120° и последующем переносе на $1/3$ элементарной трансляции (рис 16, Б).

Плоскость скользящего отражения – сочетание трансляции с отражением, т.е. скользящее отражение состоит из параллельного переноса и зеркального отражения: узел отражается плоскостью симметрии и одновременно перемещается на расстояние, равное периоду идентичности в направлении трансляции.

Действие плоскостей скользящего отражения легко можно понять на примере узора шахматной доски, представив его себе бесконечным. Плоскость скользящего отражения здесь проходит вдоль линии aa . Чтобы совместить квадраты 1 и 2 (рис. 17), надо первый перенести параллельно самому себе на

место нижележащего черного квадрата и затем отразить в плоскости, перпендикулярной рисунку, проходящей вдоль линии aa . При этом совместится весь узор доски, Такие же плоскости будут проходить и вдоль линии a_1a_1 , bb , b_1b_1 .

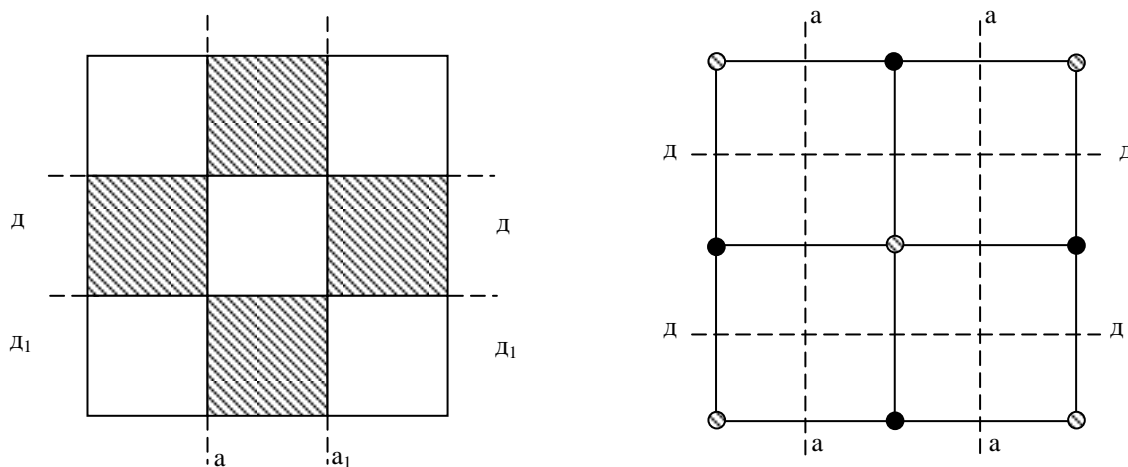


Рис. 17. Плоскости скользящего отражения

А – плоскости типов a и b – на узоре шахматной доски; Б – плоскости a и b на сетке куба элементарной ячейки NaCl.

Для пространственных решеток также определяются *координационные числа (КЧ)* по кислороду – числа ближайших атомов (ионов), окружающих центральный атом (ион). Устойчивость того или иного типа координации в структуре определяется таким их взаимным расположением, которое исключает соприкосновение одинаковых и, стало быть, одноименно заряженных ионов. Вокруг большого центрального катиона легко располагаются без взаимного соприкосновения большее число анионов, чем вокруг малого.

При описании структуры в дополнение к числовой характеристике ближайшего окружения каждого атома – координационному числу – следует указать и геометрическую – форму координационного полиэдра (КП), т.е. описать фигуру, внутри которой находится данный атом, а в вершинах – атомы-соседи. Такая дополнительная характеристика необходима потому, что одному и тому же координационному числу могут отвечать разные координационные полиэдры.

2. Порядок выполнения работы

Определить тип предлагаемой к изучению пространственной решетки.

Выполнить ее схематический рисунок, где обозначить координаты узлов и индексы сеток.

Выбрать элементарную ячейку на плоской сетке, а затем и в объеме решетки, соблюдая следующие условия:

- элементарная ячейка должна обладать симметрией всей решетки;
- объем ячейки должен быть минимальный;

– должны быть кратчайшие трансляции по ребрам ячейки и максимальное число прямых углов и равных сторон (первое условие важнее второго, второе важнее третьего).

Определить координационное число и форму координационного полиэдра.

Определить число формульных единиц, приходящихся на одну элементарную ячейку.

Установить индексы сеток пространственной решетки.

Найти простые и трансляционные (сложные) элементы и симметрии пространственной решетки.

Контрольные вопросы

1. Назовите элементы пространственной решетки.
2. Что такое элементарная ячейка? Назовите их типы и параметры для различных сингоний.
3. Перечислите типы решеток Браве.
4. Как определяется число формульных единиц, приходящихся на одну элементарную ячейку?
5. Какие элементы симметрии пространственной решетки являются сложными? Дайте их определение.
6. Что такое винтовые оси симметрии и каких типов они бывают?
7. Что определяет координационное число? Какими параметрами ионов оно определяется?
8. Назовите координационные числа и соответствующие им координационные полиэдры.