

Основные виды кристаллических систем

Н. Ашкрофт, Д. Мермин, «Физика твердого тела», (в двух томах)

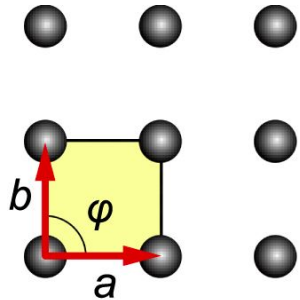
http://aflowlib.org/CrystalDatabase/cubic_lattice.html

<https://www.physics-in-a-nutshell.com/>



Physics in a nutshell

Решетки Бравэ: 2D



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

Square

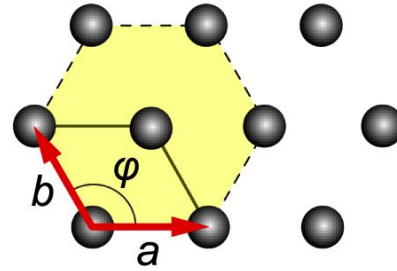
Квадратна



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

Rectangular

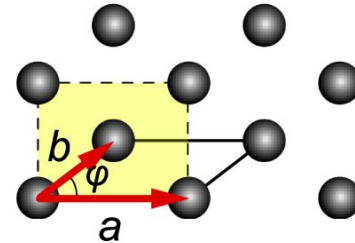
Прямоугольна
я



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

Hexagonal

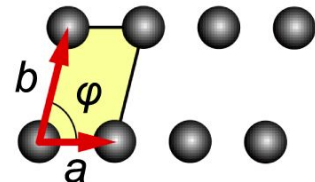
Треугольная
(гексагональная)



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

Centerd Rectangular

Прямоугольная
центрированная



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

Oblique

Моноклинна
я

Решетки Бравэ: 3D

СИНГОНИ

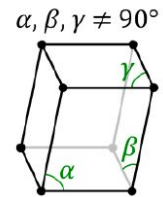
P
Simple/Primitive

I
Body Centered

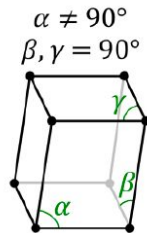
F
Face Centered

C
Base Centered

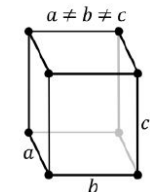
Triclinic



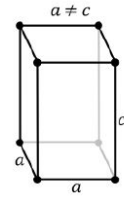
Monoclinic



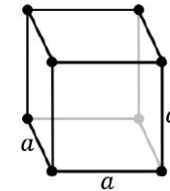
*Ortho-
rhombic*



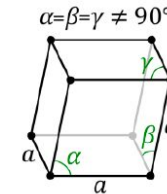
**Tetra-
gonal**



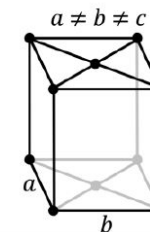
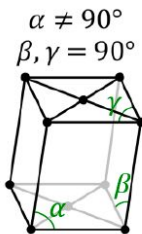
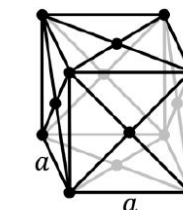
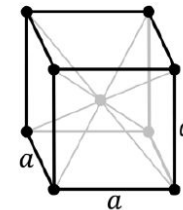
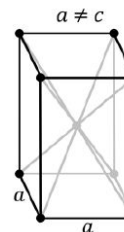
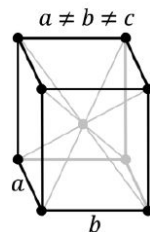
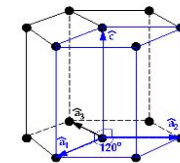
Cubic



*Trigonal/
rhombohedral*



*Hexa-
gonal*



Решетки Бравэ: 3D

СИНГОНИ

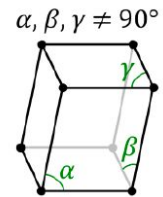
P
Simple/Primitive

I
Body Centered

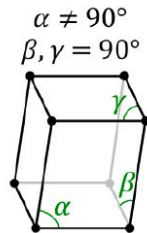
F
Face Centered

C
Base Centered

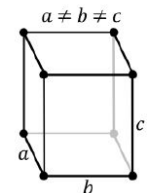
Triclinic



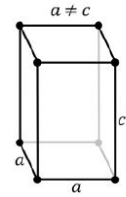
Monoclinic



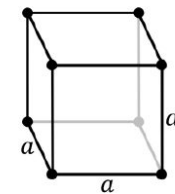
*Ortho-
rhombic*



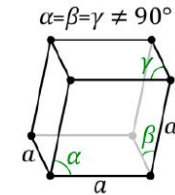
T *Tetra-
gonal*



Cubic



*Trigonal/
rhombohedral*



*Hexa-
gonal*

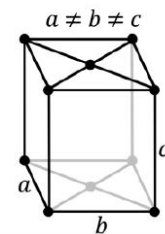
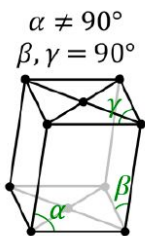
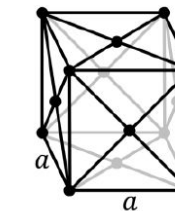
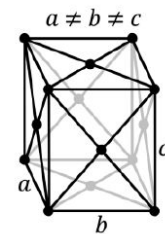
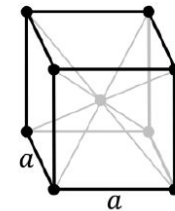
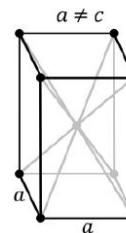
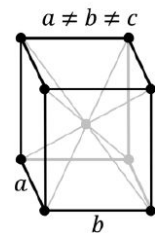
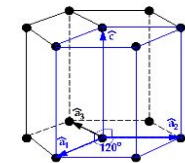


Схема зон Бриллюэна

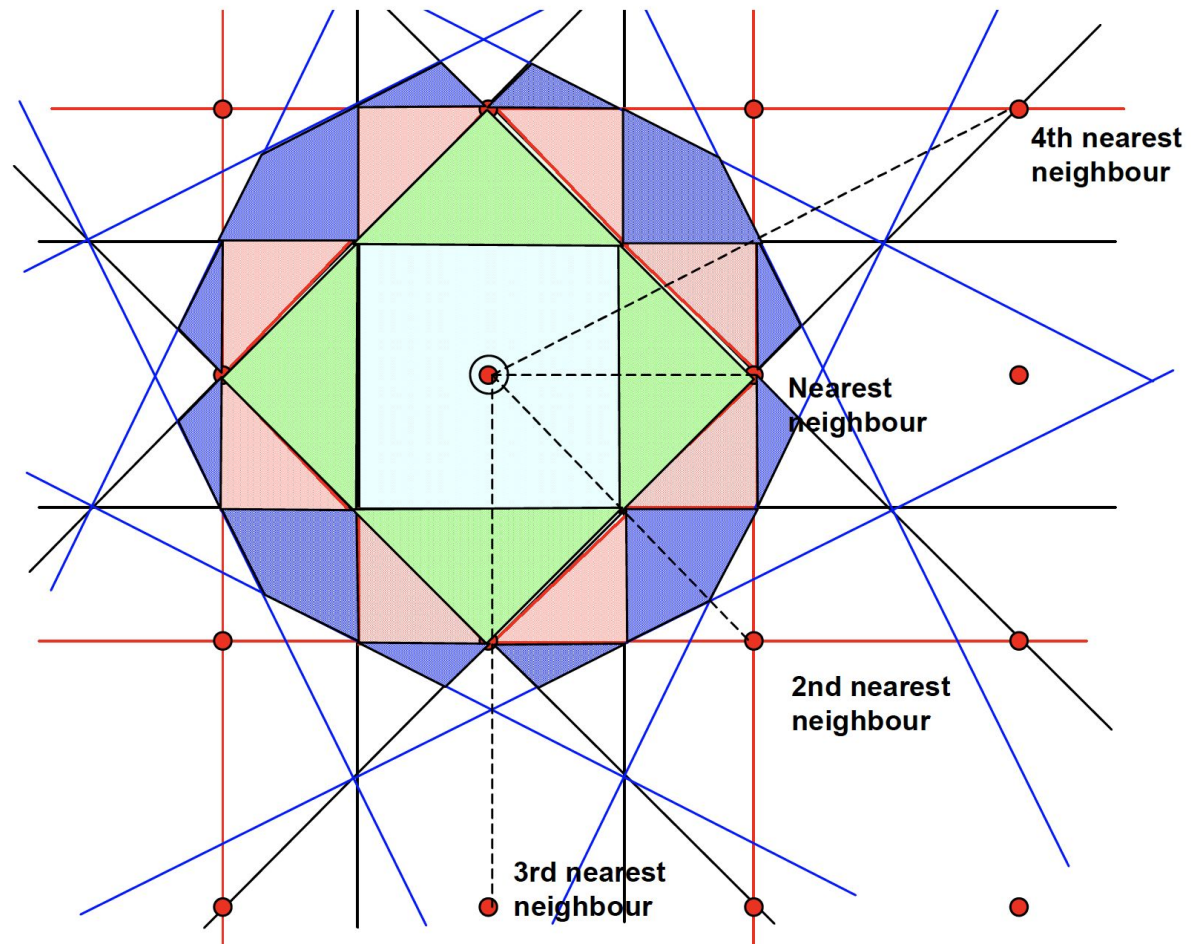
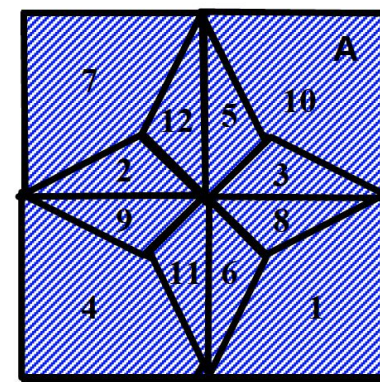
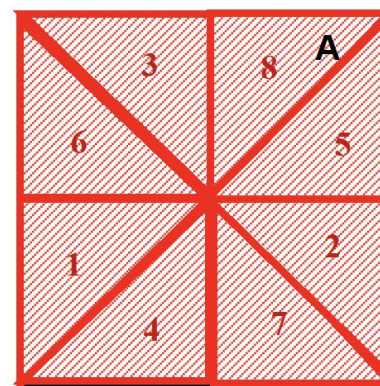
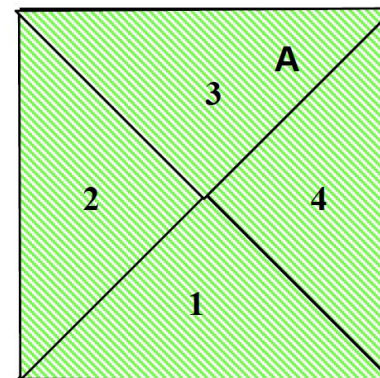
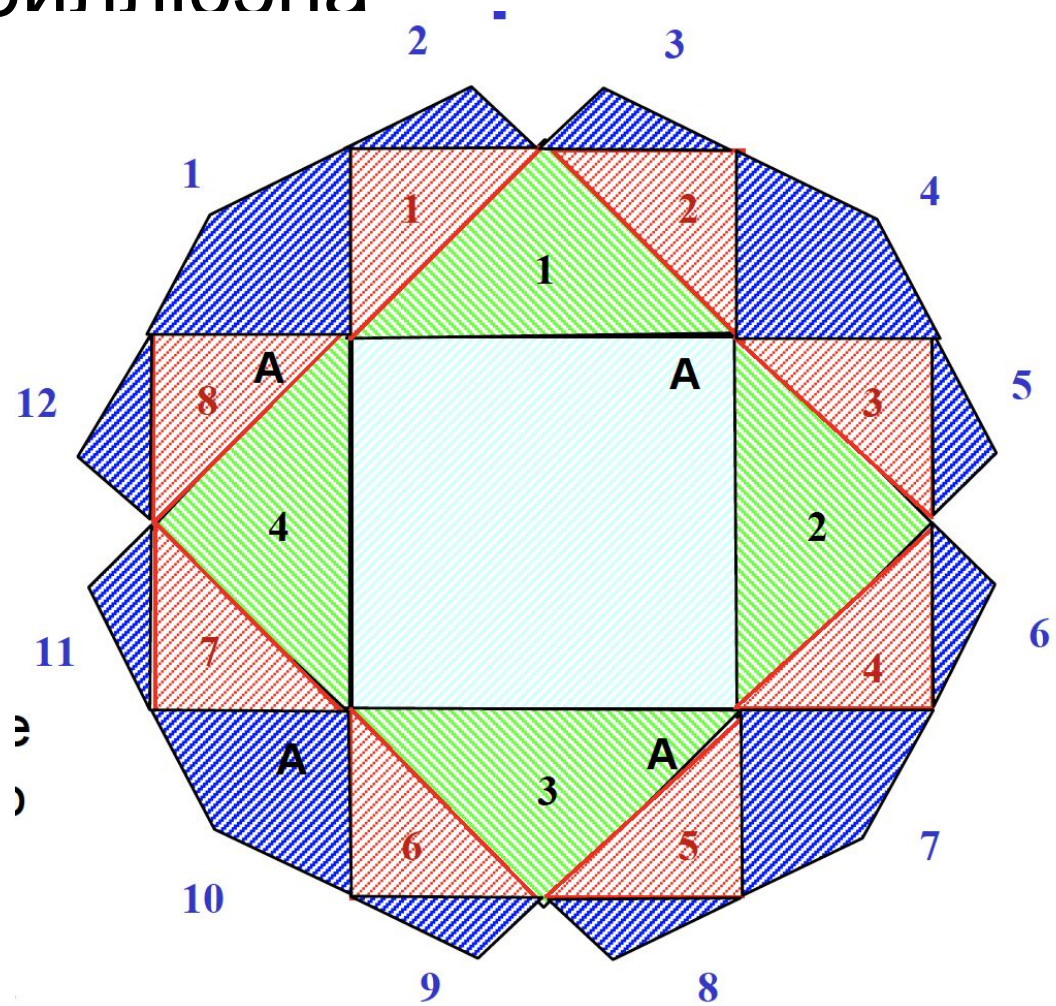
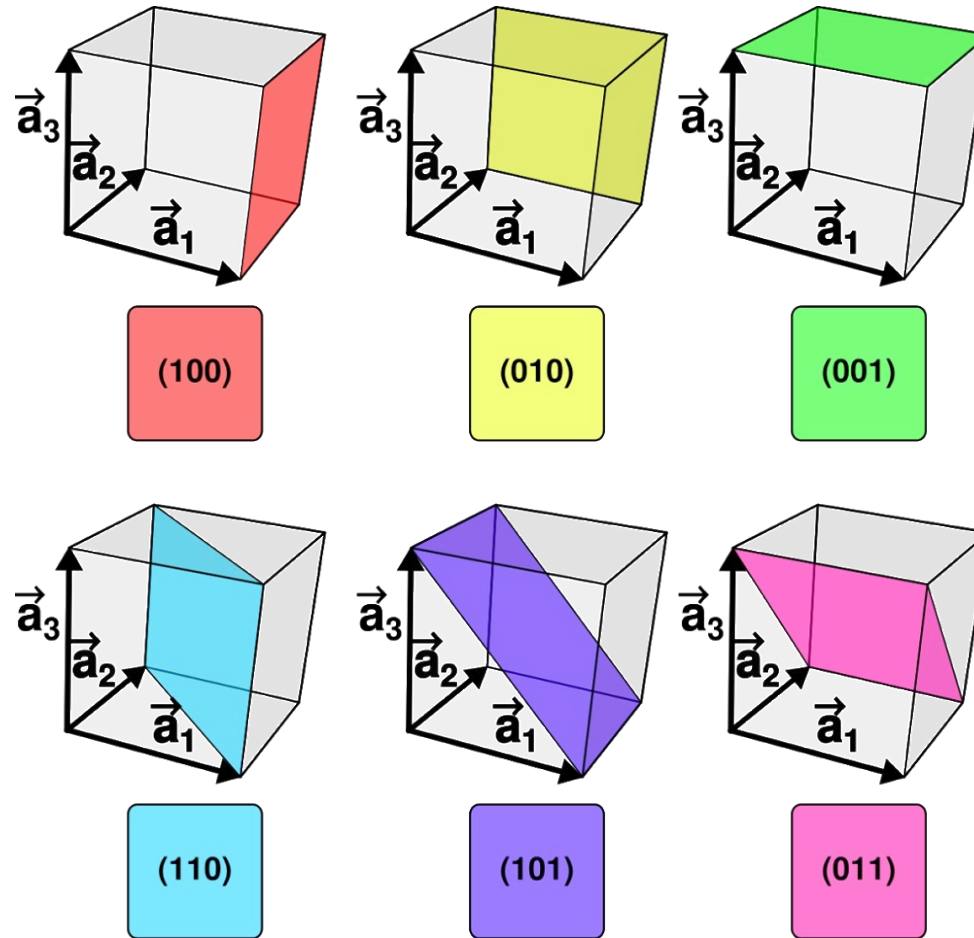


Схема зон Бриллюэна

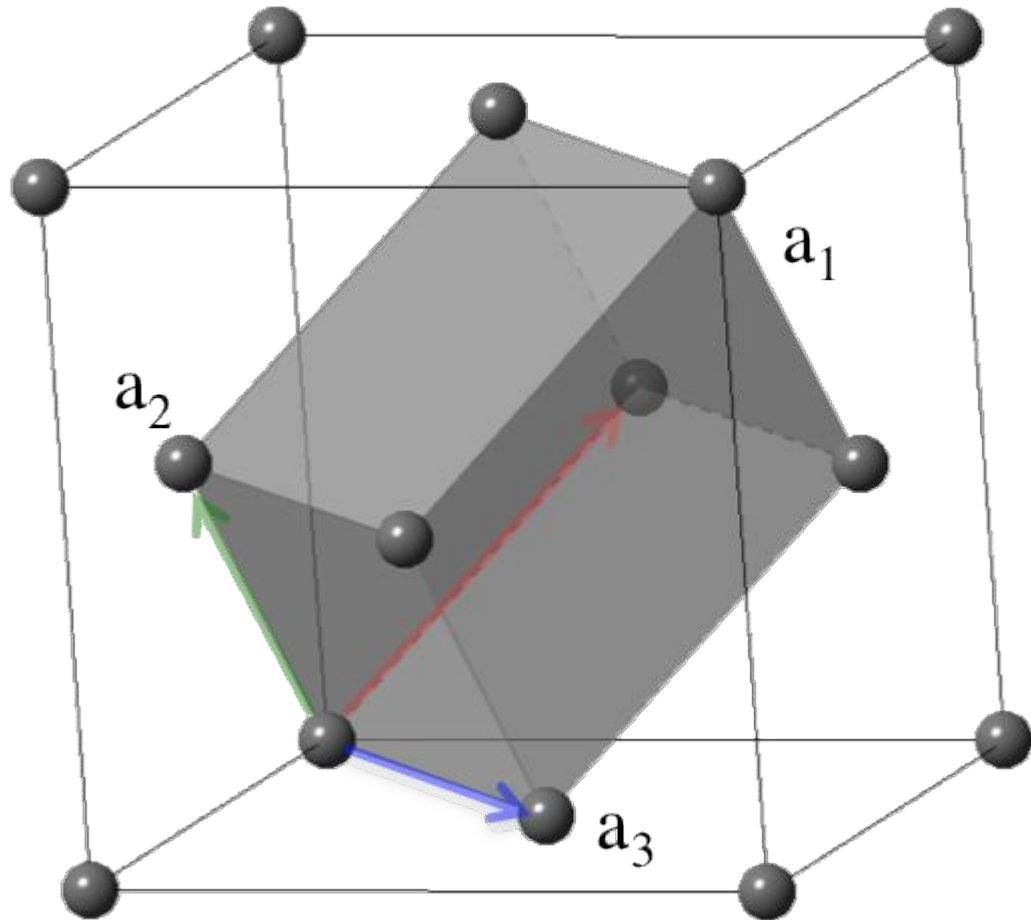


Кристаллографические плоскости



Гранецентрированная куб. решётка (ГЦК)

Face centered cubic (fcc)

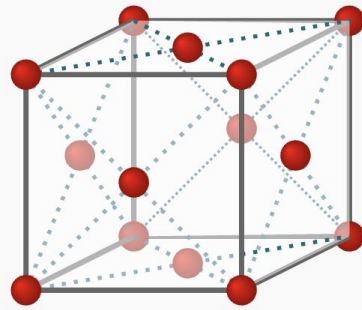


$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} \hat{y} + \frac{a}{2} \hat{z}$$
$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} \hat{x} + \frac{a}{2} \hat{z}$$
$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2} \hat{x} + \frac{a}{2} \hat{y}$$

$$V = \frac{a^3}{4}$$

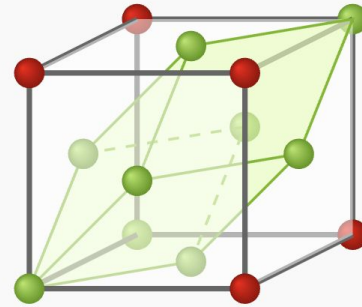
Гранецентрированная куб. решётка (ГЦК)

Face centered cubic (fcc)



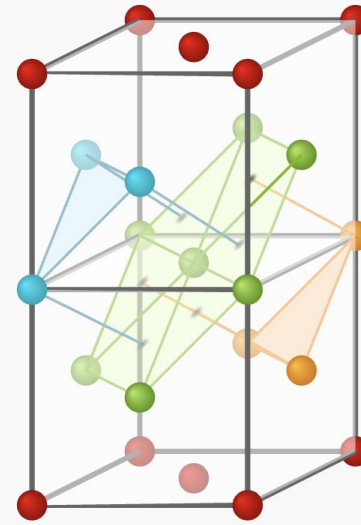
(a)

conventional
unit cell



(b)

primitive
unit cell



(c)

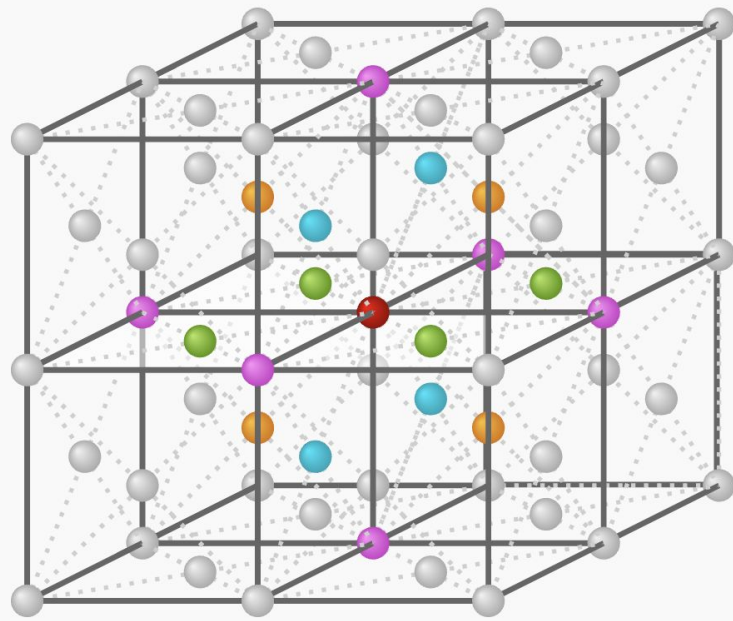
hexagonal
structure

Гранецентрированная куб. решётка (ГЦК) Face centered cubic (fcc)

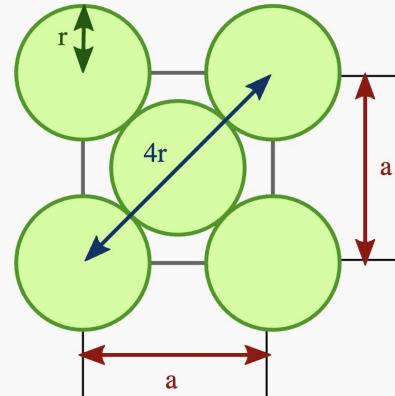
<https://www.physics-in-a-nutshell.com/media/content/solid-state-physics/fcc-unit-cell-wigner-seitz-cell.ogg>

Гранецентрированная куб. решётка (ГЦК)

Face centered cubic (fcc)

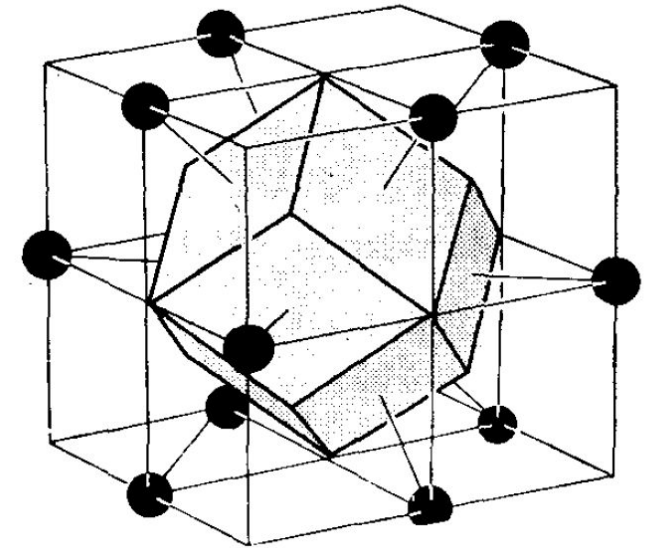


- reference point
- ● ● 12 nearest neighbours
- 6 next-nearest neighbours



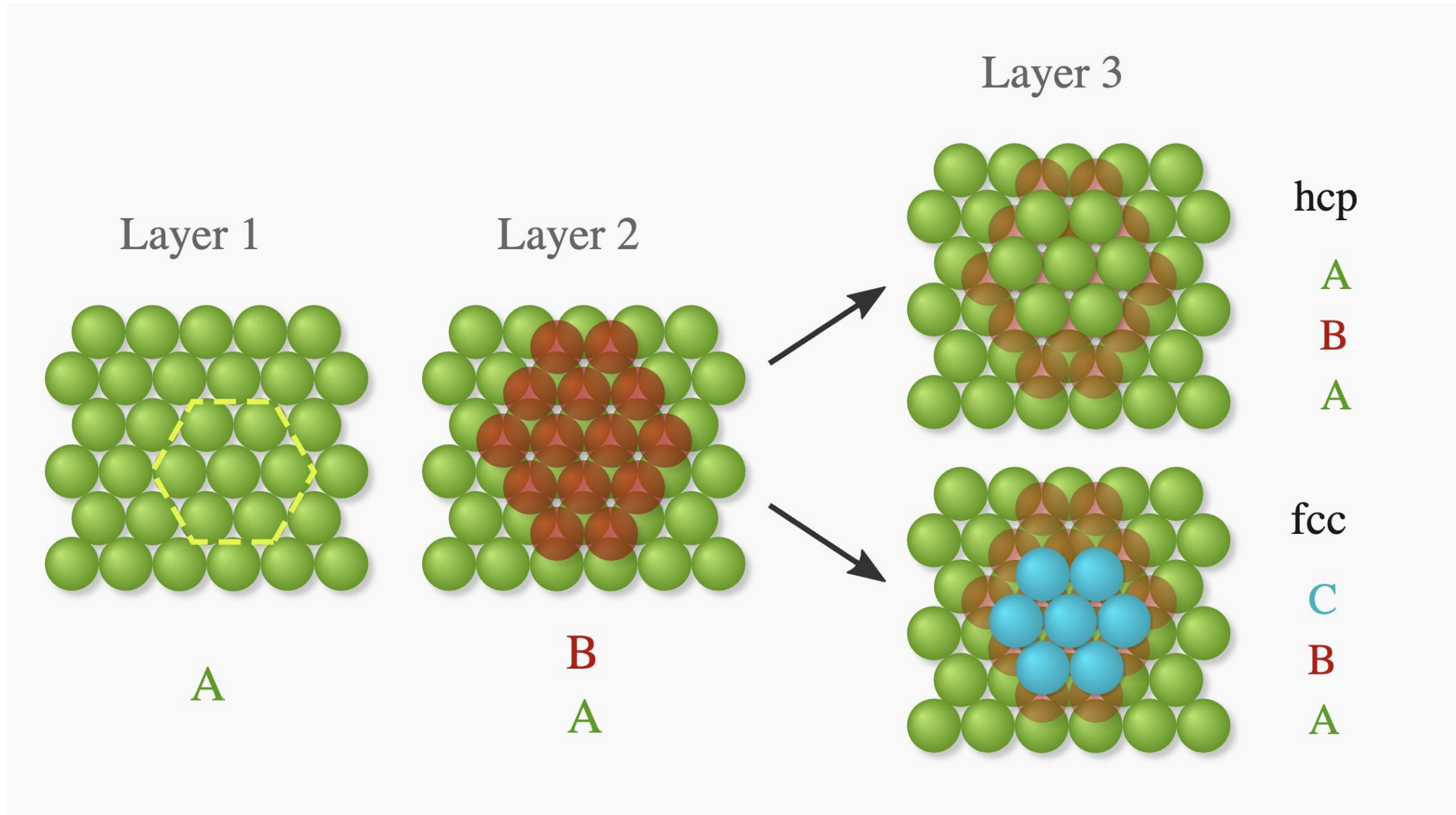
Координационное число
12

Плотность упаковки для сфер ~
74%



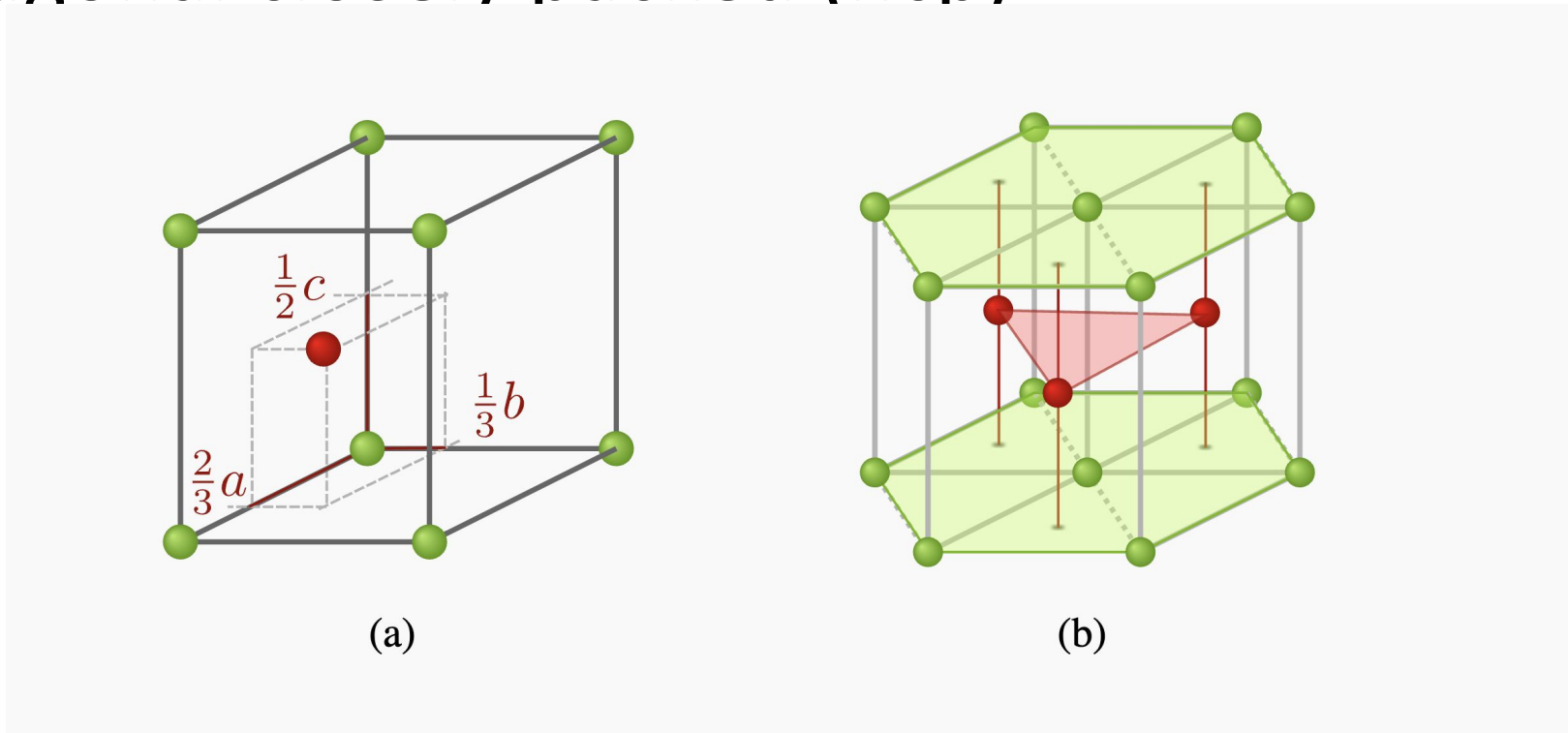
Ромбический
додекаэдр

Плотнупакованные решетки



Гексагональная плотноупакованная решетка (гпу)

Hexagonal closely packed (hcp)

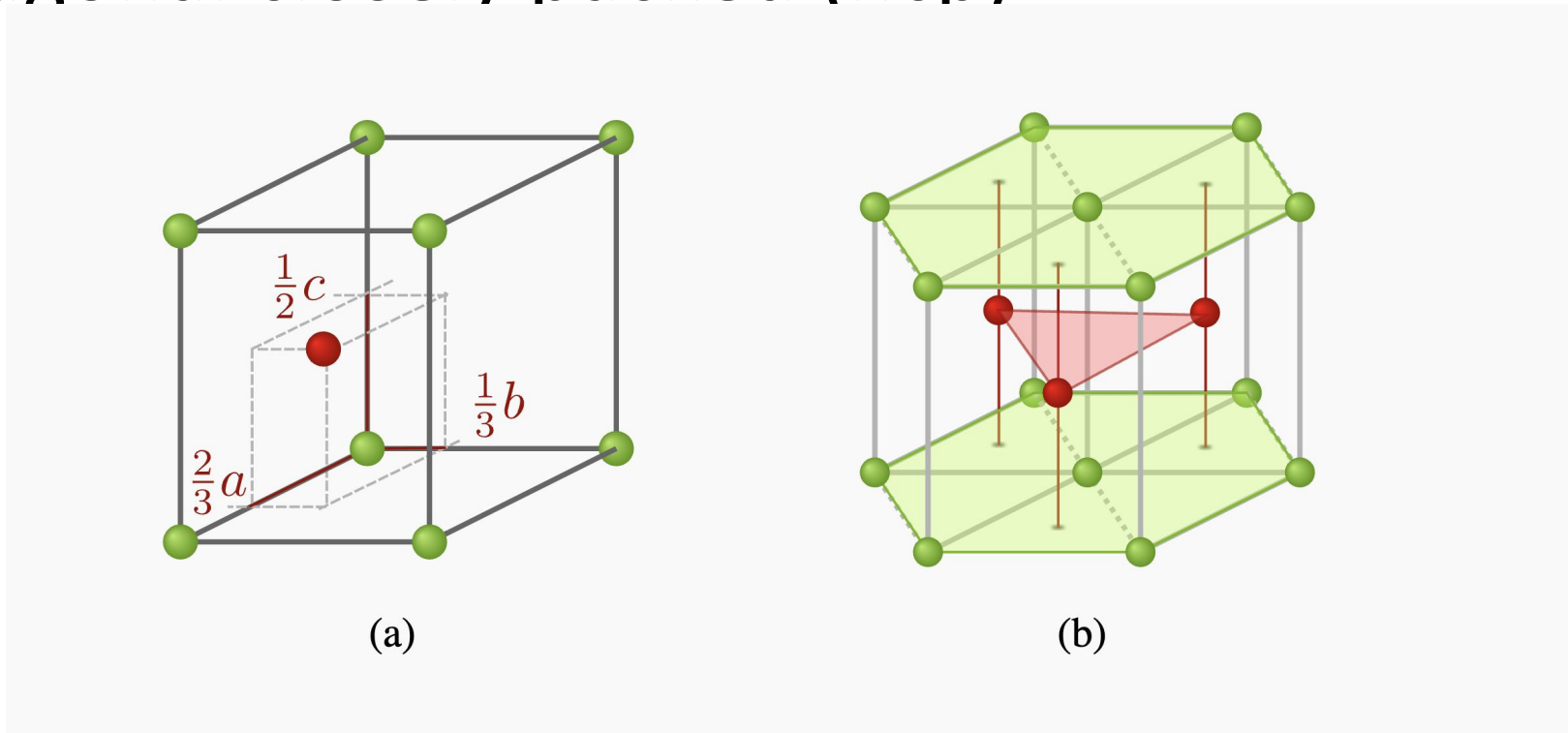


$(c/a)^2 = 8/3$ Плотная упаковка

Плотность упаковки для сфер ~ 74%

Гексагональная плотноупакованная решетка (гпу)

Hexagonal closely packed (hcp)

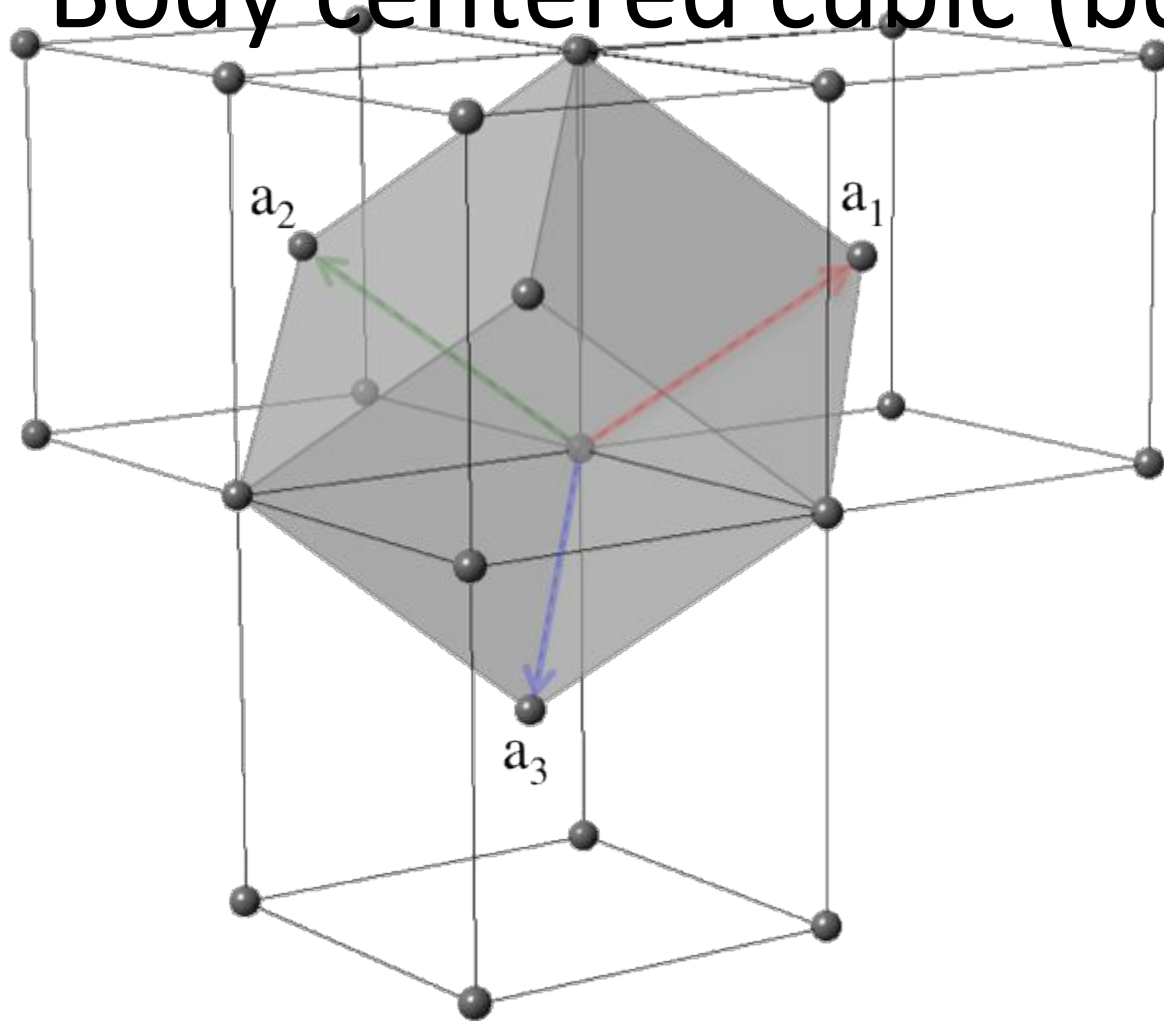


$(c/a)^2 = 8/3$ Плотная
упаковка

Плотность упаковки для сфер ~
74%

Объемноцентрированная решетка (ОЦК)

Body centered cubic (bcc)



$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= -\frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{y}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{z}} \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} - \frac{a}{2}\hat{\mathbf{y}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{z}} \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{y}} - \frac{a}{2}\hat{\mathbf{z}},\end{aligned}$$

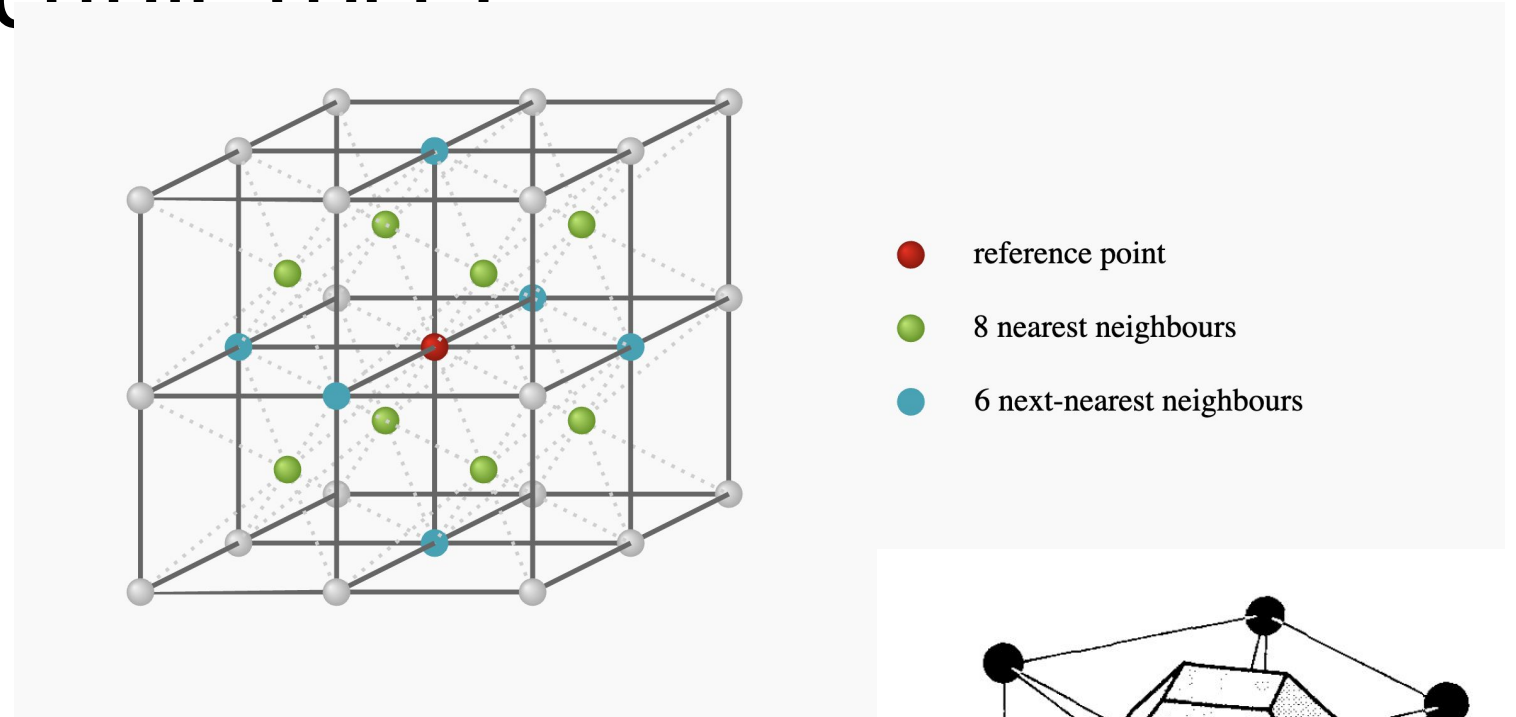
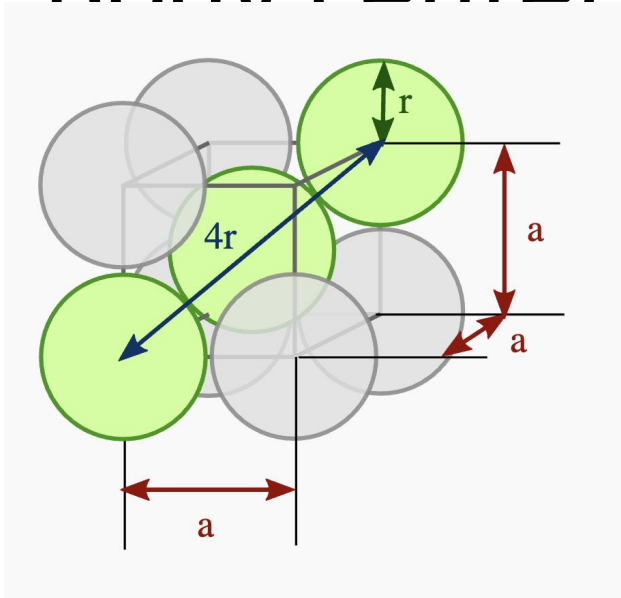
$$V = \frac{a^3}{2}$$

Объемноцентрированная решетка (ОЦК) Body centered cubic (bcc)

<https://www.physics-in-a-nutshell.com/media/content/solid-state-physics/bcc-unit-cell-wigner-seitz-cell.ogg>

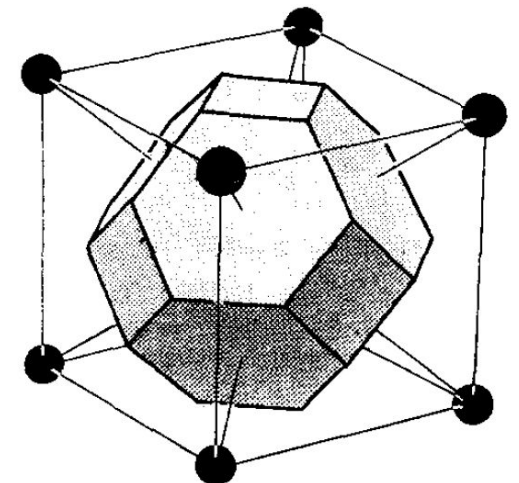
Объемноцентрированная решетка (ОЦК)

Body centered cubic (bcc)

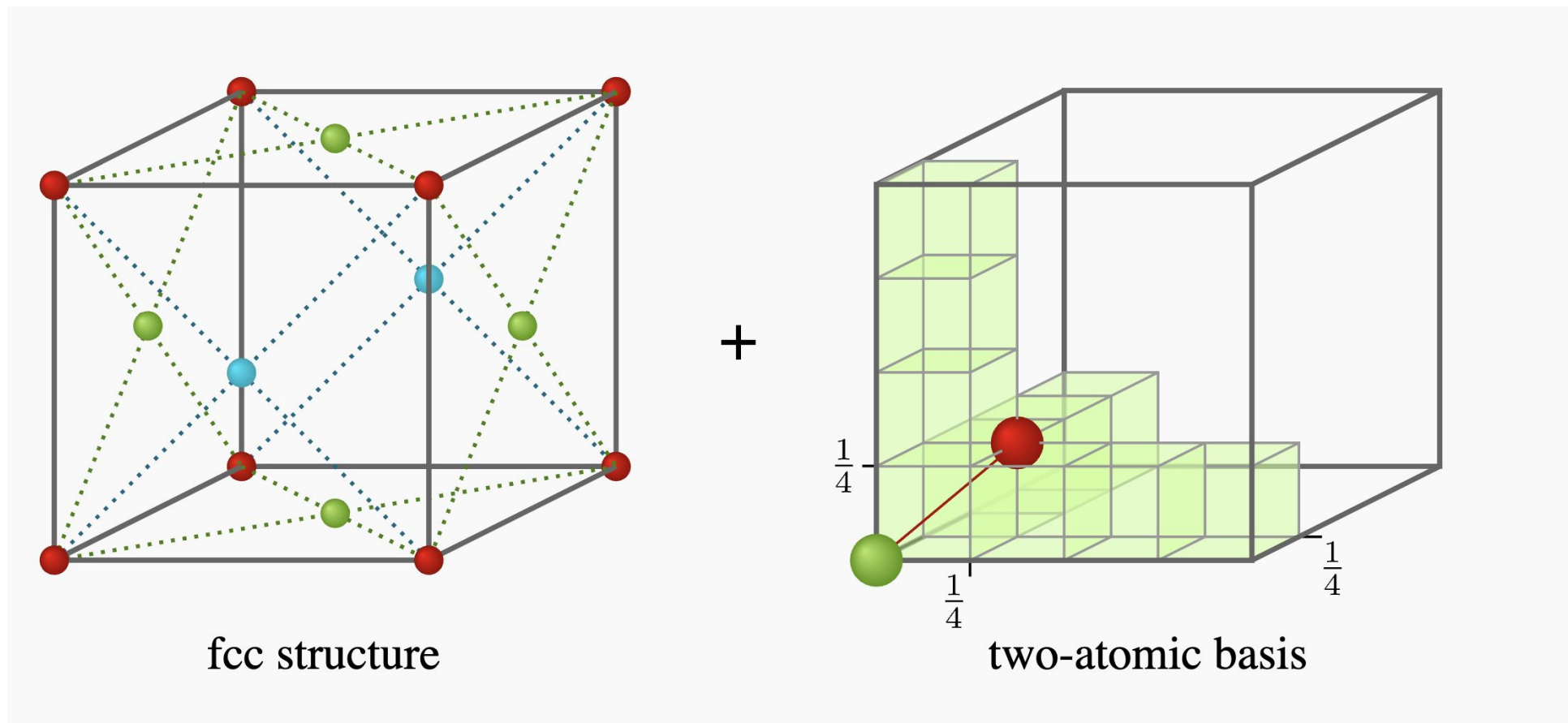


Плотность упаковки для сфер ~
68%

Вигнера-
Зейтца



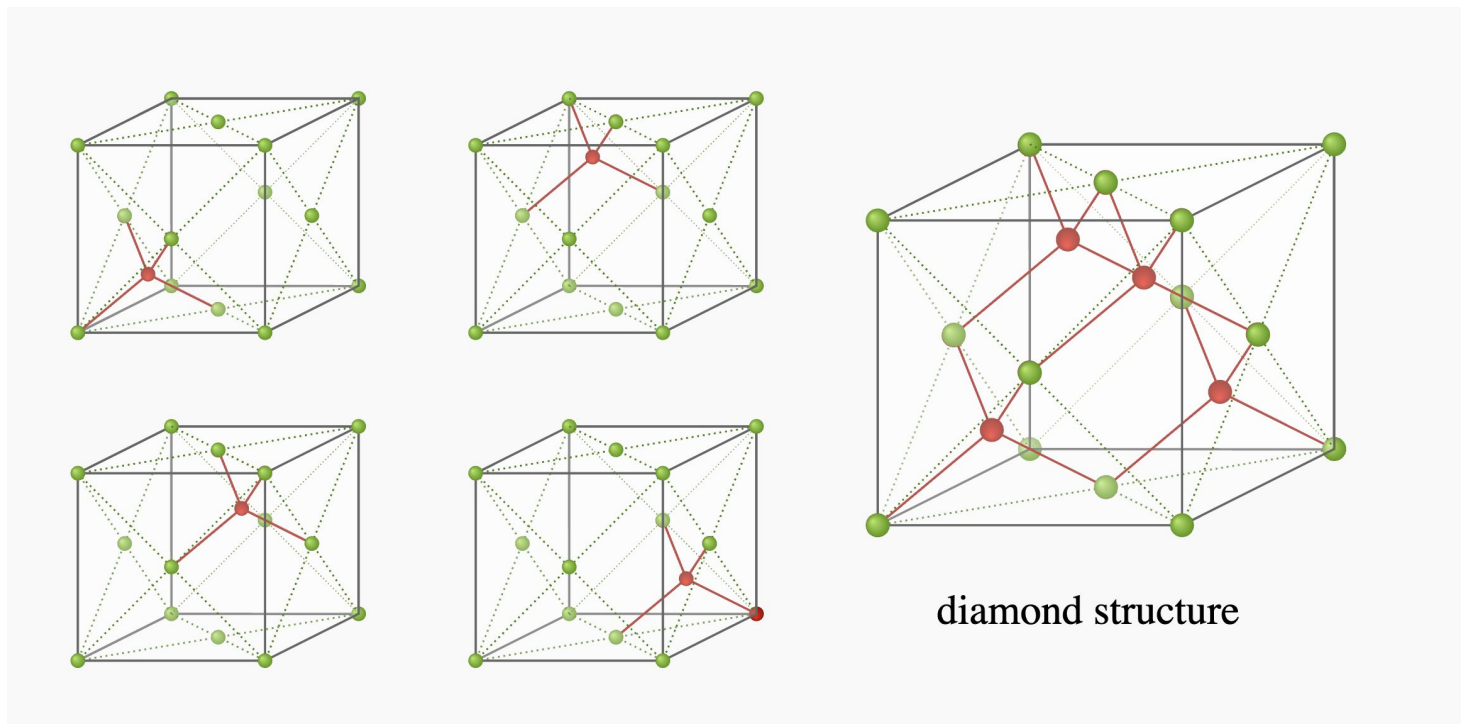
Алмазная структура Diamond structure



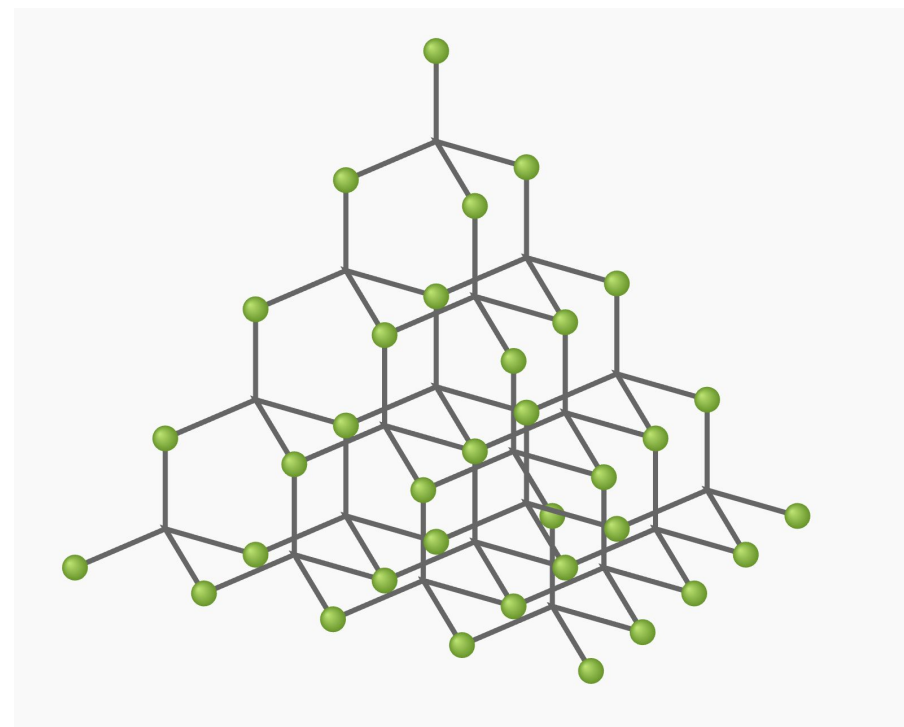
Вложенные друг в друга ГЦК со смещением на $\frac{1}{4}$
(1,1,1)

Алмазная структура

Diamond structure



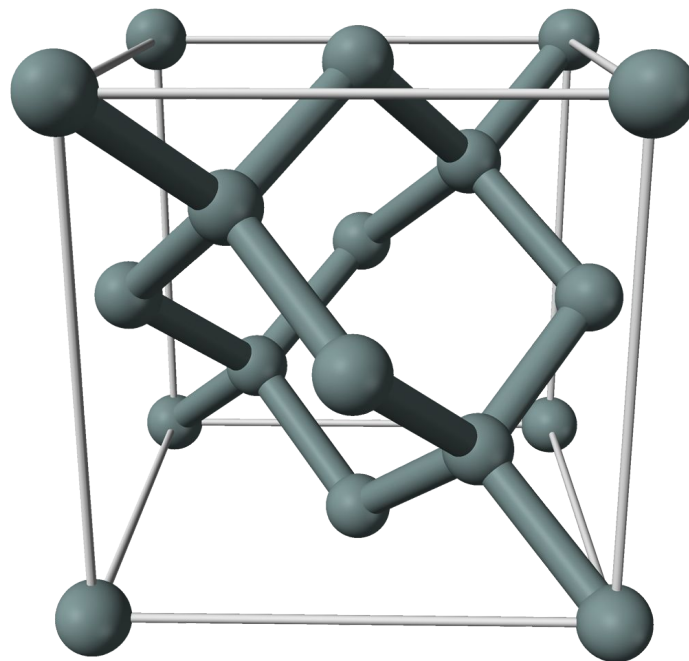
Вложенные друг в друга ГЦК со смещение на $\frac{1}{4}$
(1,1,1)



Плотность упаковки для
сфер $\sim 34\%$
Координационное число
4

Алмазная структура

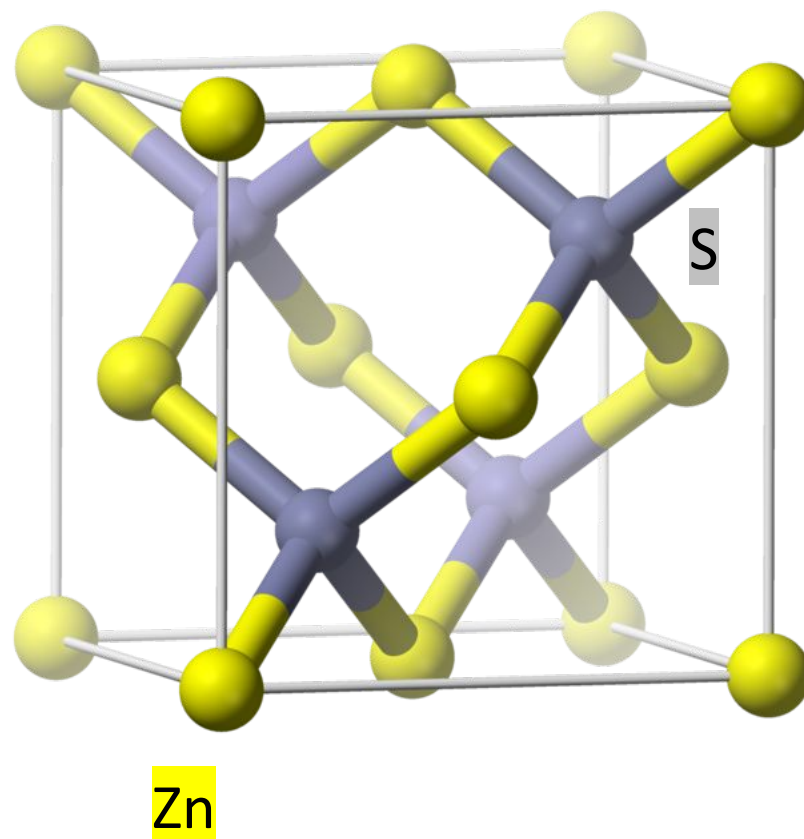
Diamond structure



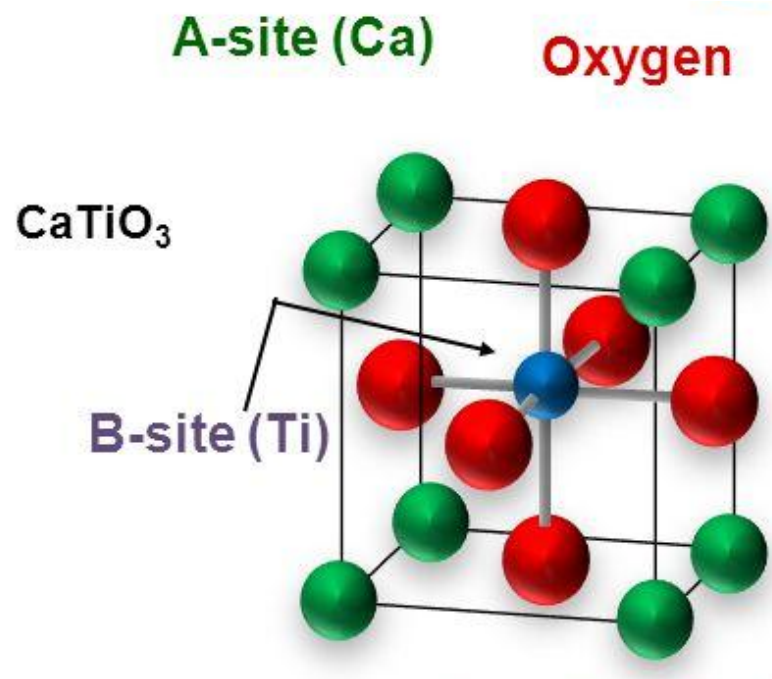
C

Цинковая обманка

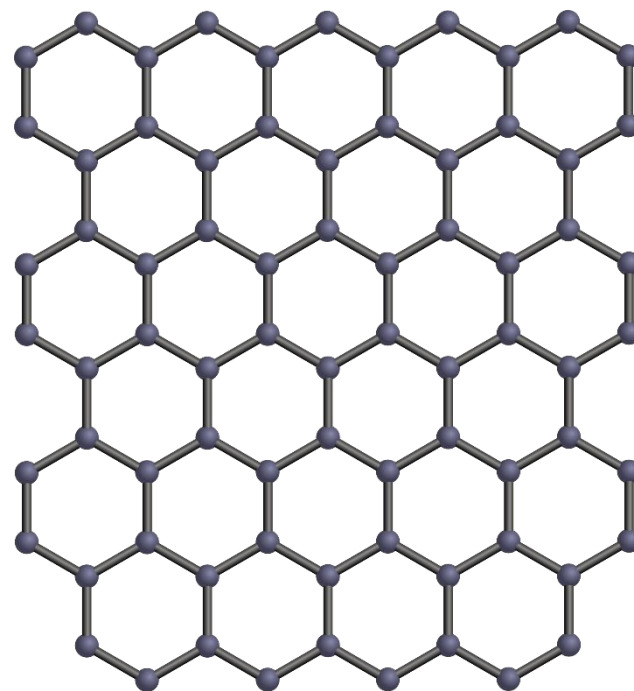
Zinc Blend structure



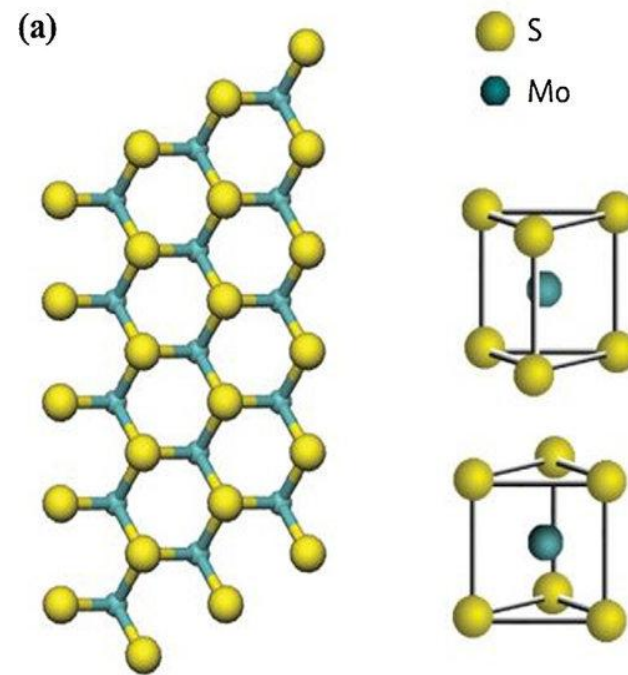
Другие материалы



Перовскит
CaTiO₃
Кубическая



Графен
Гексагональная
2D



Монослой MoS₂
Ромбоэдрическ
ая

Основные материалы

Элементы с гексагональной плотноупакованной кристаллической структурой

Таблица 4.1
Элементы с моноатомной гранецентрированной кубической кристаллической структурой

Элемент	<i>a</i> , Å	Элемент	<i>a</i> , Å	Элемент	<i>a</i> , Å
Ag	5,26 (4,2 K)	Ir	3,84	Pt	3,92
Al	4,05	Kr	5,72 (58 K)	δ-Pu	4,64
Au	4,08	La	5,30	Rh	3,80
Ca	5,58	Ne	4,43 (4,2 K)	Sc	4,54
Ce	5,16	Ni	3,52	Sr	6,08
β-Co	3,55	Pb	4,95	Th	5,08
Cu	3,61	Pd	3,89	Xe (58 K)	6,20
		Pr	5,16	Yb	5,49

Данные табл. 4.1–4.7 взяты из справочника Уикоффа [1]. В большинстве случаев приведены данные для комнатной температуры и нормального атмосферного давления. Для элементов, существующих во многих модификациях, указана их стабильная форма (формы) при комнатной температуре. Более детальную информацию, точные значения постоянных решетки и ссылки на литературу можно найти в справочнике [1].

Таблица 4.2

Элементы с моноатомной объемноцентрированной кубической кристаллической структурой

Элемент	<i>a</i> , Å	Элемент	<i>a</i> , Å	Элемент	<i>a</i> , Å
Ba	5,02	Li	3,49 (78 K)	Ta	3,31
Cr	2,88	Mo	3,15	Tl	3,88
Cs	6,05 (78 K)	Na	4,23 (5 K)	V	3,02
Fe	2,87	Nb	3,30	W	3,16
K	5,23 (5 K)	Rb	5,59 (5 K)		

Н. Ашкрофт, Д. Мермин, «Физика твердого тела», (в двух томах)

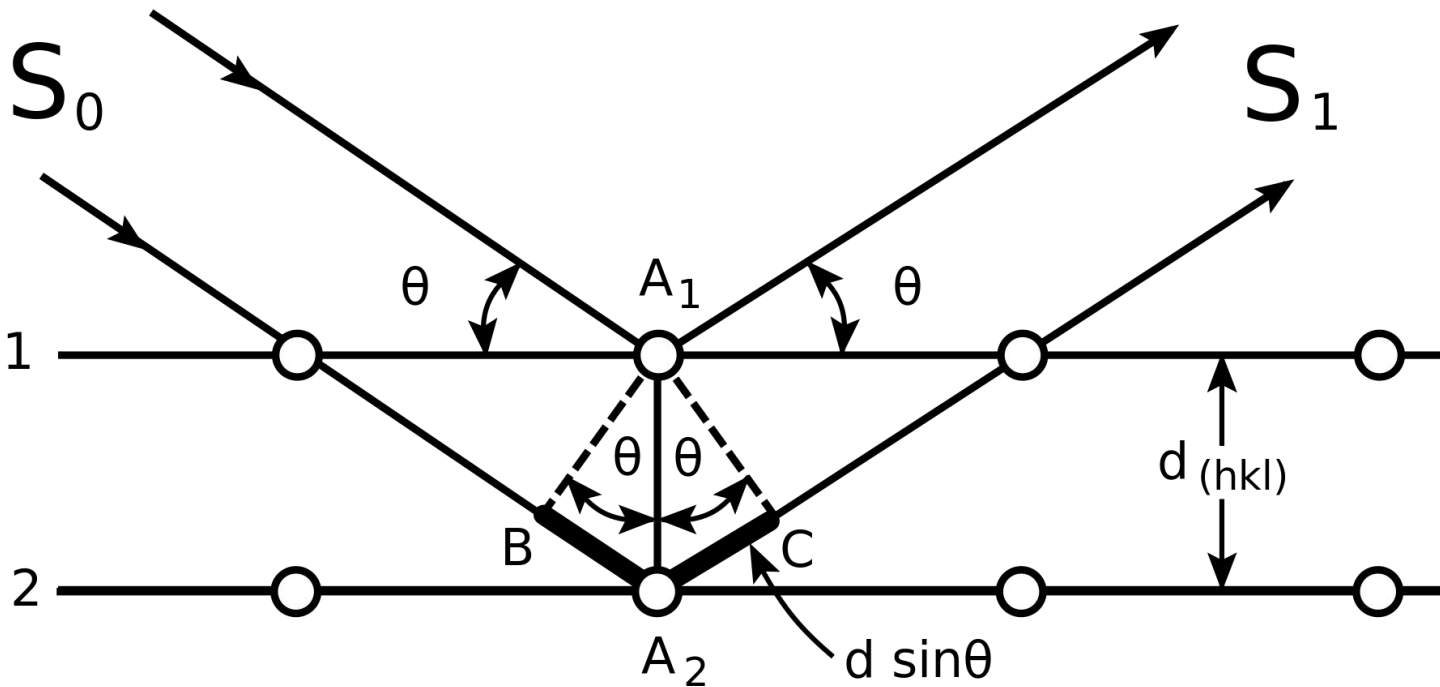
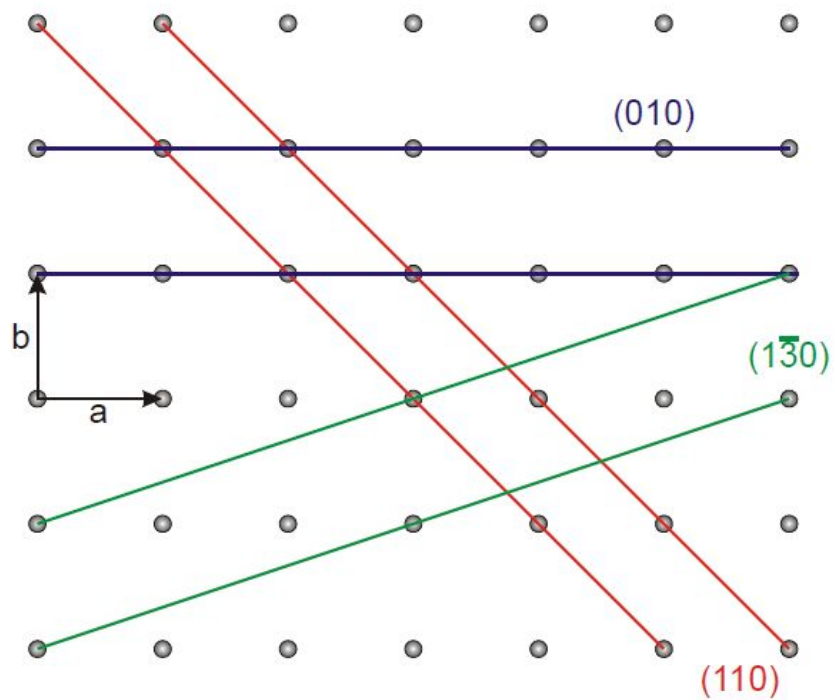
Элемент	<i>a</i> , Å	<i>c</i>	<i>c/a</i>	Элемент	<i>a</i> , Å	<i>c</i>	<i>c/a</i>
Be	2,29	3,58	1,56	Os	2,74	4,32	1,58
Cd	2,98	5,62	1,89	Pr	3,67	5,92	1,61
Ce	3,65	5,96	1,63	Re	2,76	4,46	1,62
α-Co	2,51	4,07	1,62	Ru	2,70	4,28	1,59
Dy	3,59	5,65	1,57	Sc	3,31	5,27	1,59
Er	3,56	5,59	1,57	Tb	3,60	5,69	1,58
Gd	3,64	5,78	1,59	Ti	2,95	4,69	1,59
He (2K)	3,57	5,83	1,63	Tl	3,46	5,53	1,60
Hf	3,20	5,06	1,58	Tu	3,54	5,55	1,57
Ho	3,58	5,62	1,57	Y	3,65	5,73	1,57
La	3,75	6,07	1,62	Zn	2,66	4,95	1,86
Lu	3,50	5,55	1,59	Zr	3,23	5,15	1,59
Mg	3,21	5,21	1,62				
Nd	3,66	5,90	1,61	«Идеал»	—	—	1,63

Таблица 4.7

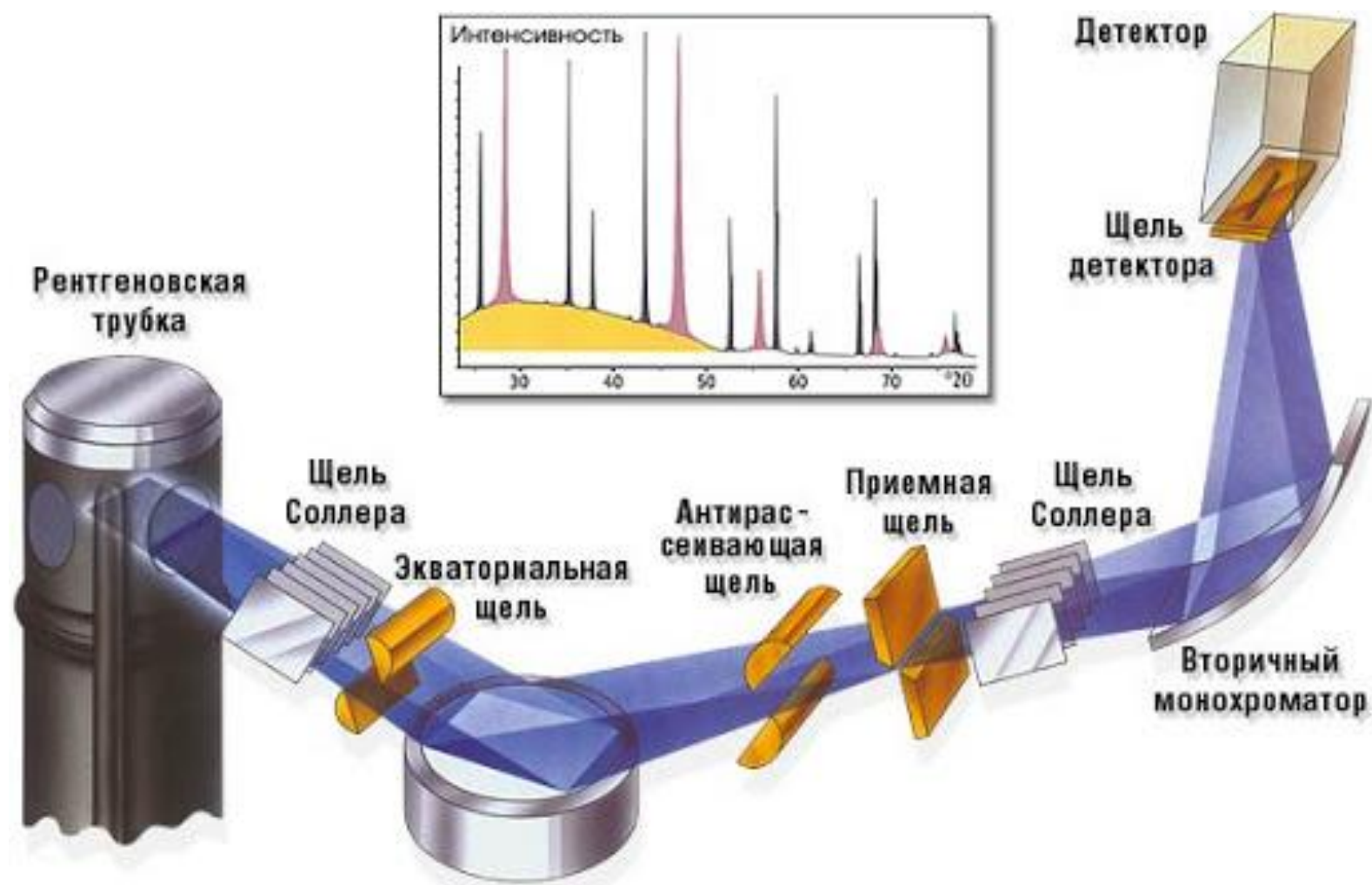
Некоторые соединения со структурой цинковой обманки

Кристалл	<i>a</i> , Å	Кристалл	<i>a</i> , Å	Кристалл	<i>a</i> , Å
CuF	4,26	ZnS	5,41	AlSb	6,13
CuCl	5,41	ZnSe	5,67	GaP	5,45
CuBr	5,69	ZnTe	6,09	GaAs	5,65
CuI	6,04	CdS	5,82	GaSb	6,12
AgI	6,47	CdTe	6,48	InP	5,87
BeS	4,85	HgS	5,85	InAs	6,04
BeSe	5,07	HgSe	6,08	InSb	6,48
BeTe	5,54	HgTe	6,43	SiC	4,35
MnS (красн.)	5,60	AlP	5,45		
M Se	5,82	AlAs	5,62		

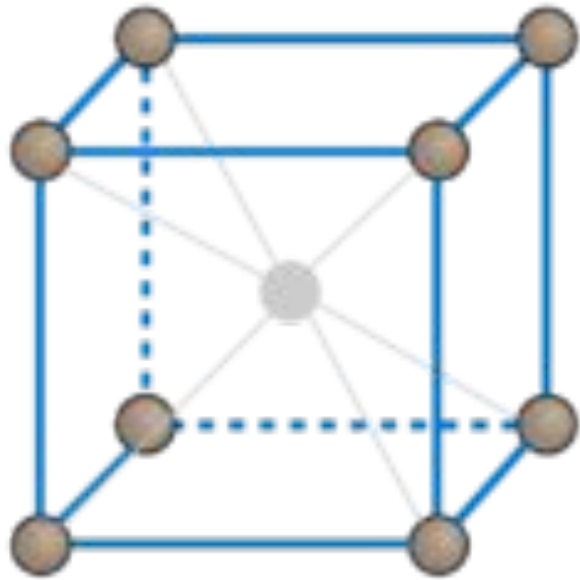
Дифрактометрия



Дифрактометр

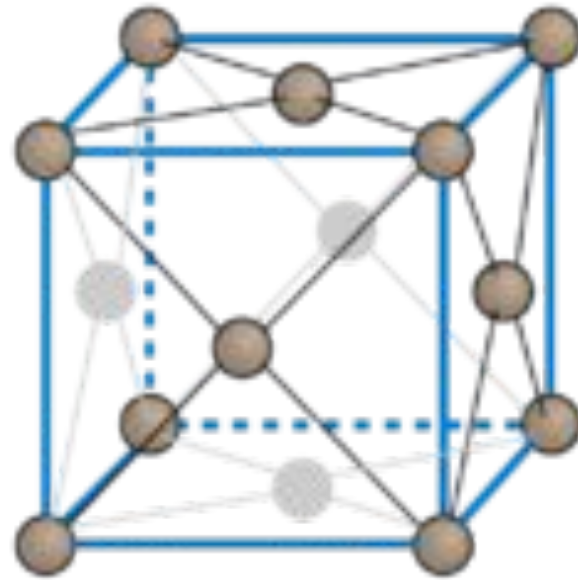


Металлы



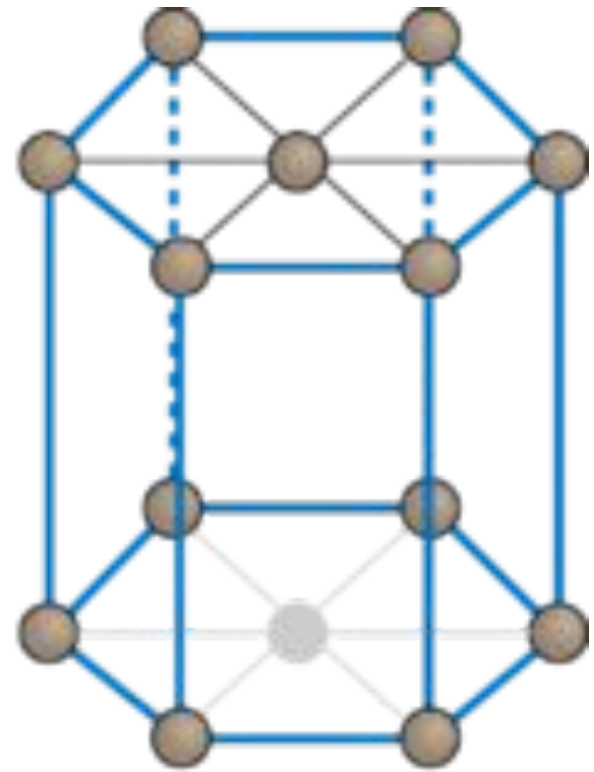
Cubic body centered (bcc)

Fe, V, Nb, Cr



Cubic face centered (fcc)

Al, Ni, Ag, Cu, Au



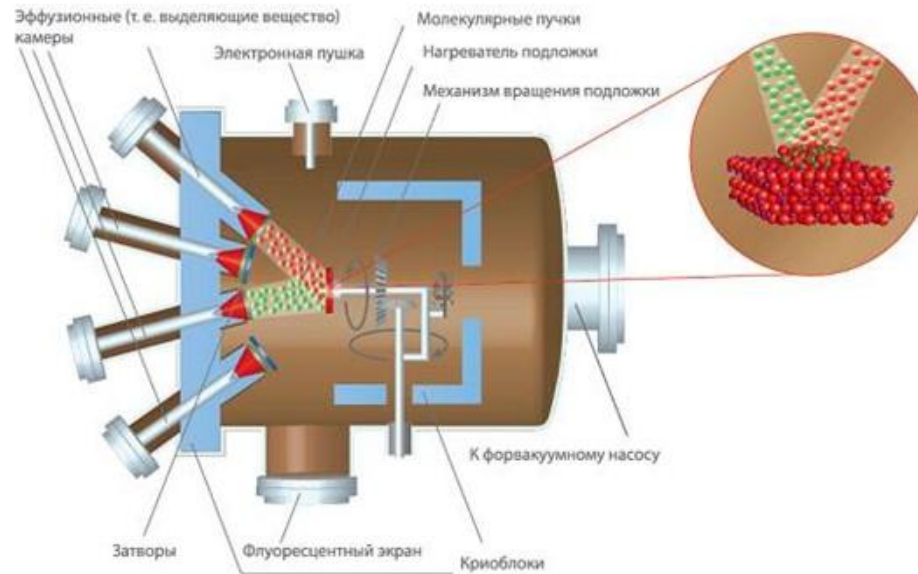
Hexagonal

Ti, Zn, Mg, Cd

Рост кристаллов



Кристаллизация
из
растворов



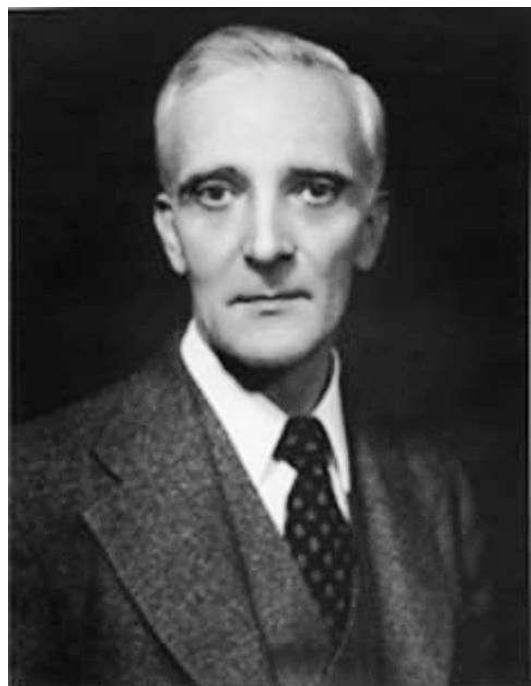
Молекулярно-
пучковая
эпитаксия



Химическое
осаждение
из газовой фазы



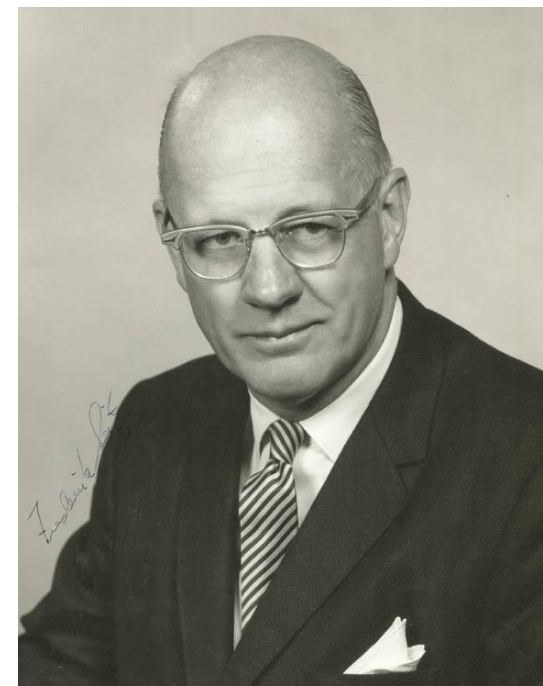
Огюст
Браве
(1811-1863)



Леон
Бриллюэн
(1889-1969)



Юджин
Вигнер
(1902-1995)



Фредерик
Зейтц
(1911-2008)