

Кристаллы в трех измерениях

Трехмерные решетки Бравэ и кристаллические структуры.

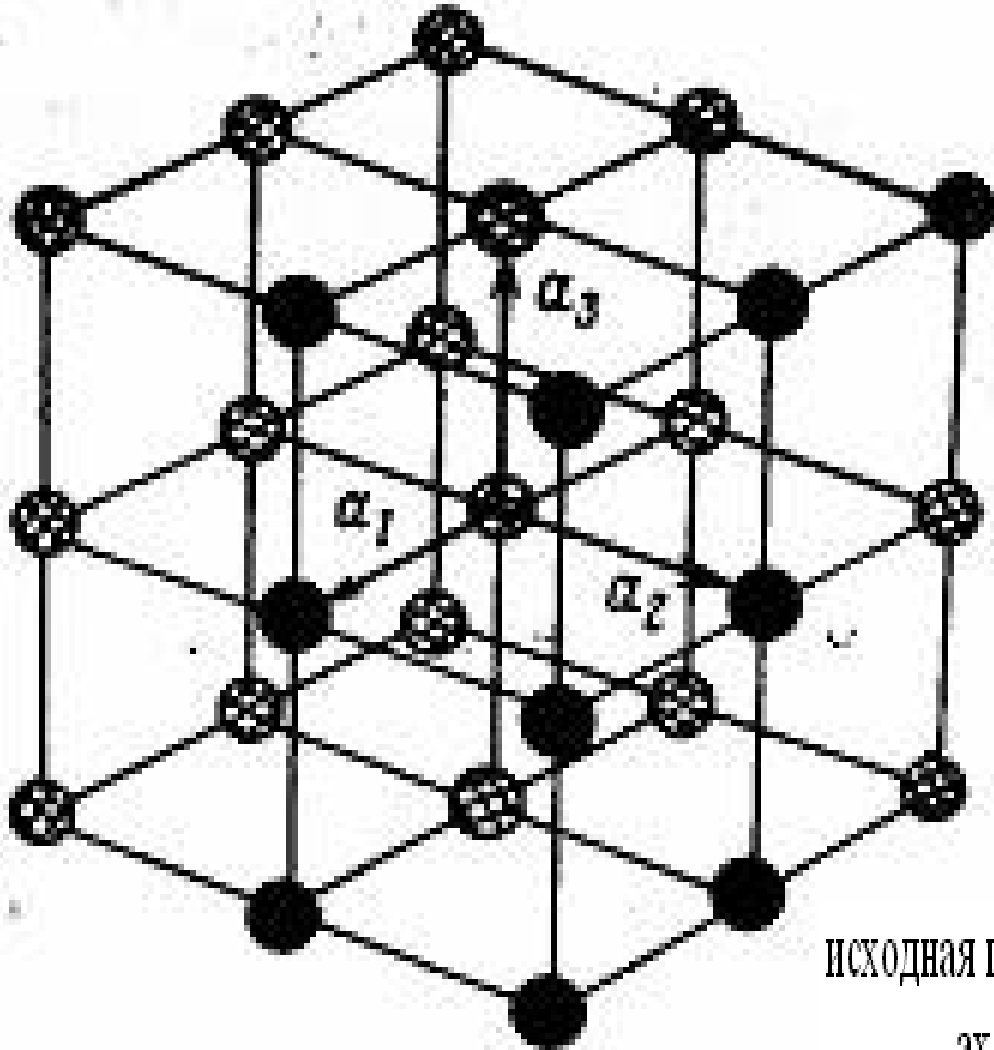
Напомним, 2-го определения РБ состоит в следующем: трехмерная РБ образована точками с радиус-векторами \vec{R} вида $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$

Где $\vec{a}_1 \vec{a}_2 \vec{a}_3$ любые три вектора, не лежащие все в одной плоскости, $n_1 n_2 n_3$ все возможные целые числа ($<0, 0, >0$). Поэтому чтобы достигнуть точки $\sum n_i \vec{a}_i$ необходимо проделать $|n_i|$ шагов длиной $|\vec{a}_i|$ в направлении $i=1,2,3$. Векторы \vec{a}_i наз. Основными векторами. Существует недостатки у этого определения: 1) Выбор тройки основных векторов для решетки Бравэ неоднозначен.

2) Трудно показать существуют ли эти тройки векторов.

На рис. приведем простую кубическую решетку Бравэ.

Простая кубическая решетка (simple cubic)



исходная простая кубическая решетка порождается основными
 a_1, a_2, a_3 ,

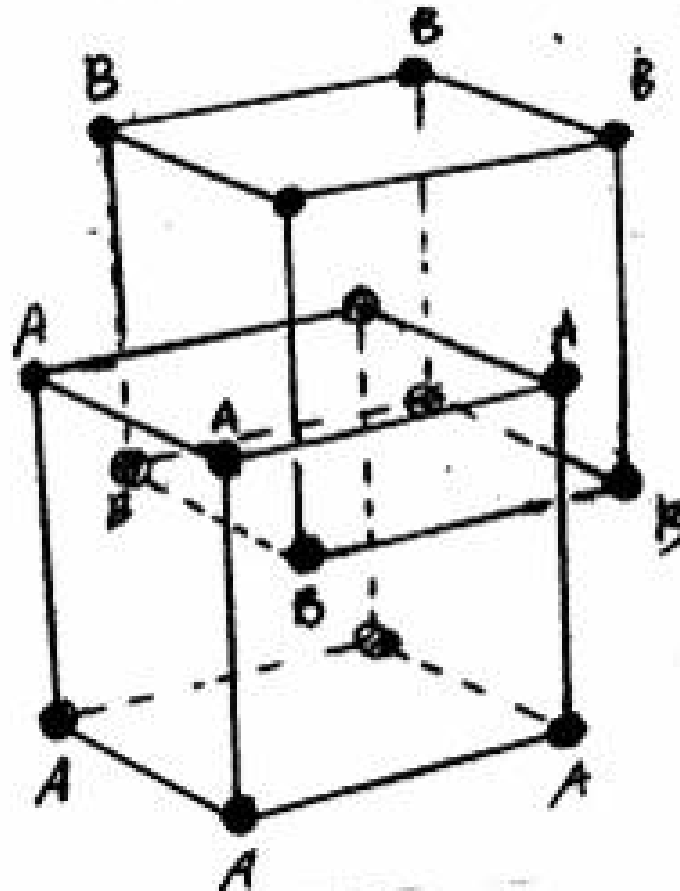
х, у- и z - три ортогональных единичных вектора, то в качес

ОЦК – объемно-центрированная кубическая решетка, которая получается, если к простой кубической решетке с узлами в точках А добавим углы В, расположенные в центре каждого из малых кубов.

Всякую центральную точку В можно рассматривать как угловую точку куба второй простой кубической решетки.

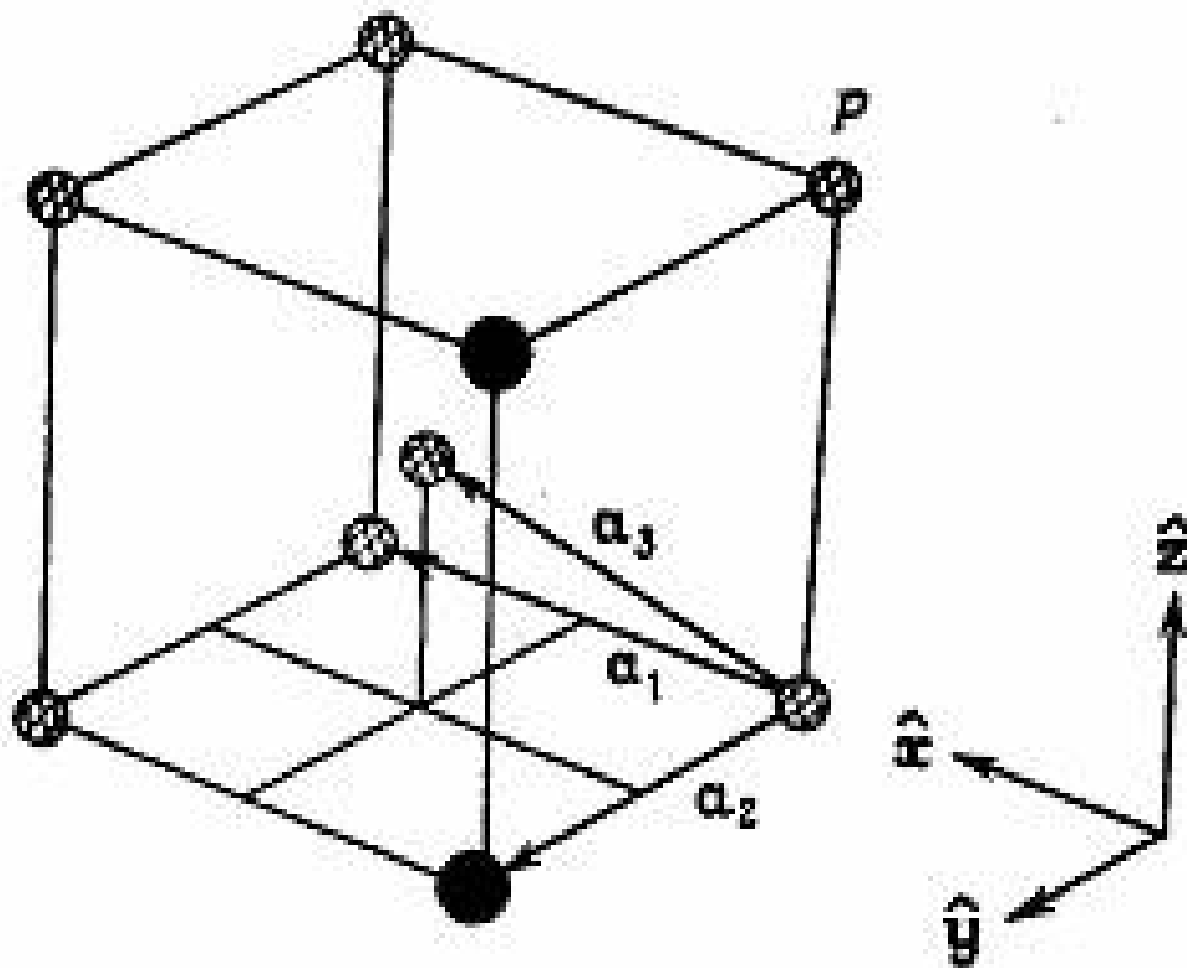
В этой новой решетке угловые точки А представляют центральные точки. Поэтому все точки решетки имеют одинаковые окружения и ОЦК решетка является

решеткой Бравэ.



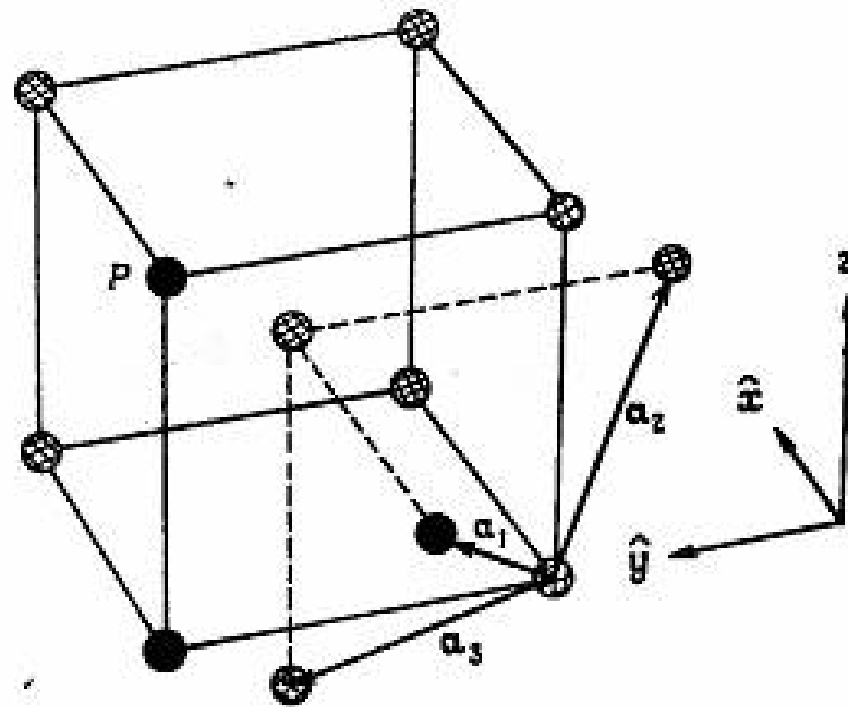
Векторов для о. ц. к. решетки можно выбрать векторы

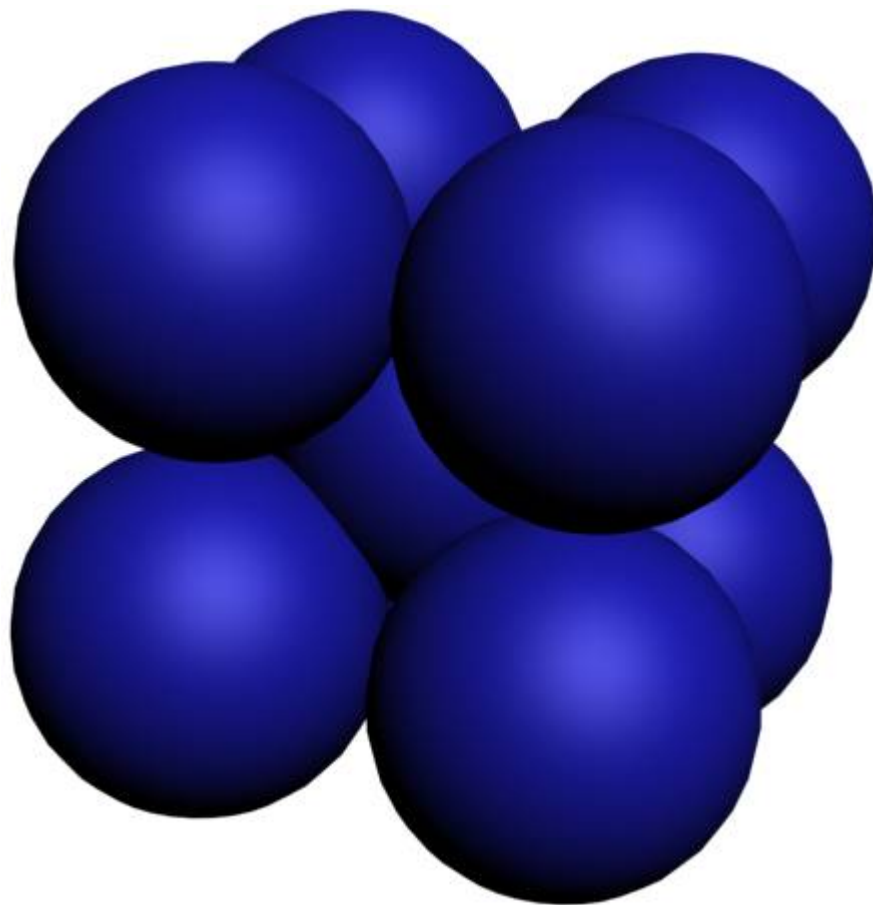
$$a_1 = ax, \quad a_2 = ay, \quad a_3 = a/2 (x+y+z)$$



Существует и более симметричный набор:

$$a_1 = a/2 (x+y+z), \quad a_2 = a/2 (x+y-z), \quad a_3 = a/2 (x+y-z)$$



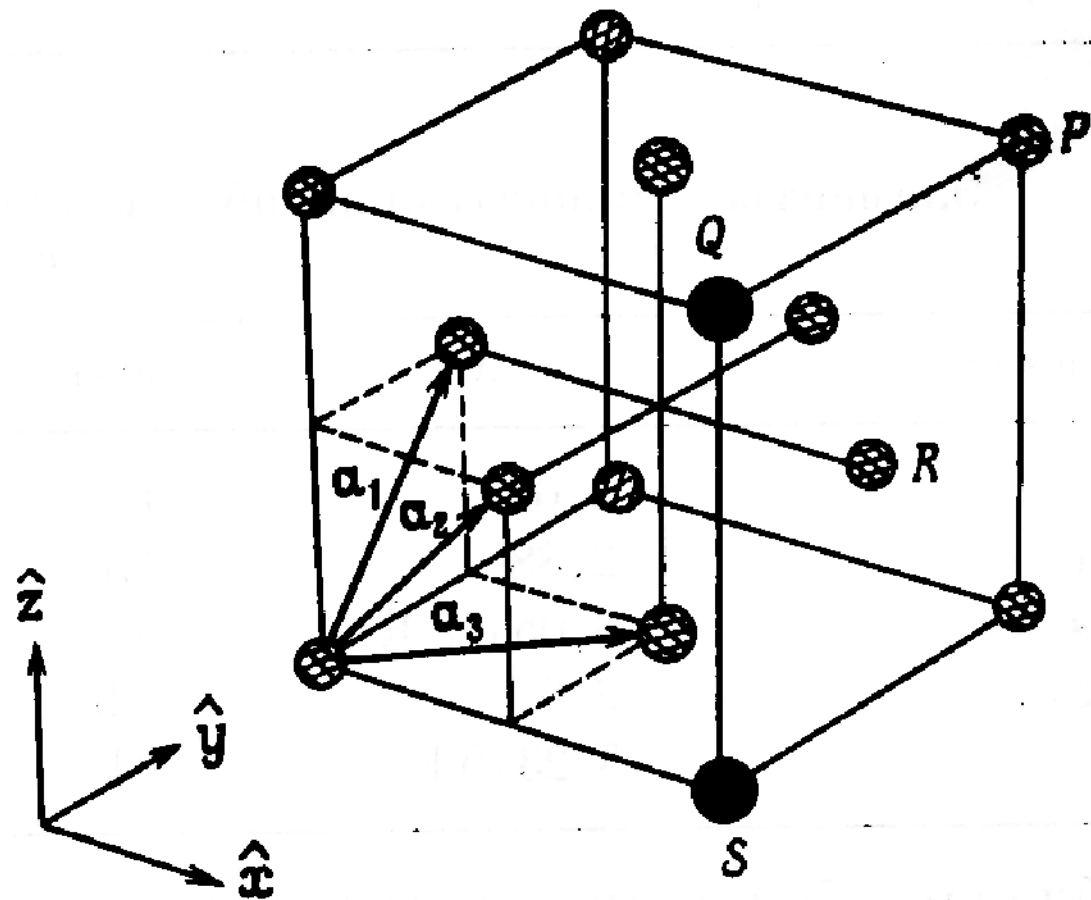


Элементарные ячейки ОЦК-решетки,

Элементы с ОЦК структурой

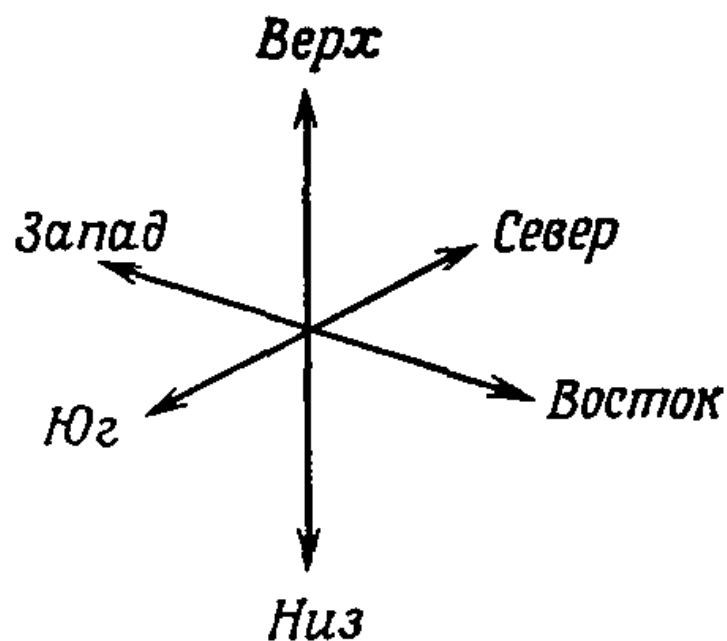
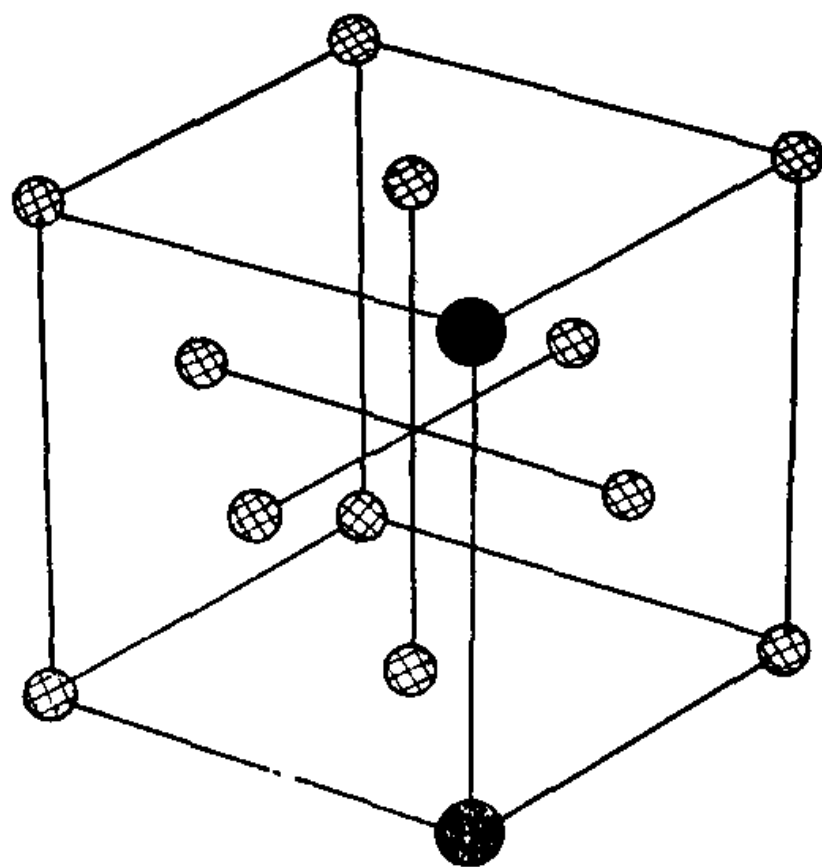
	$a, \text{\AA}$		$a, \text{\AA}$		$a, \text{\AA}$
Ba	5.02	Li	3.49 (78k)	Ta	3.31
Cr	2.88	Mo	3.15	Te	3.88
Cs	6.05(75 K)	Na	4.23(5 K)	V	3.02
Fe	2.87	Nb	3.30	W	3.16
K	5.23(5 K)	Rb	5.39 (5 K)		

Гранецентрированная кубическая (ГЦК, г. ц. к.) решетка Браве (Face Centered Cubic, FCC, fcc)



Тройка
основных
векторов для
ГЦК решетки
Браве

Симметричный набор основных векторов для г. ц. к. решетки имеет вид

$$a_1 = a/2 (x+z), \quad a_2 = a/2 (z+x), \quad a_3 = a/2 (x+y)$$


Некоторые точки г.ц.к. решетки Бравэ

Ячейка ГЦК структуры



Элементы с моноатомной гранецентрированной кубической кристаллической структурой

Элемент	a , Å	Элемент	a , Å	Элемент	a , Å
Ar	5,26 (4,2 K)	Ir	3,84	Pt	3,92
Ag	4,09	Kr	5,72 (58 K)	δ -Pu	4,64
Al	4,05	La	5,30	Rh	3,80
Au	4,08	Ne	4,43 (4,2 K)	Sc	4,54
Ca	5,58	Ni	3,52	Sr	6,08
Ce	5,16	Pb	4,95	Th	5,08
β -Co	3,55	Pd	3,89	Xe (58 K)	6,20
Cu	3,61	Pr	5,16	Yb	5,49