

Запорізький національний університет



Кристалохімія. Лекція 6.



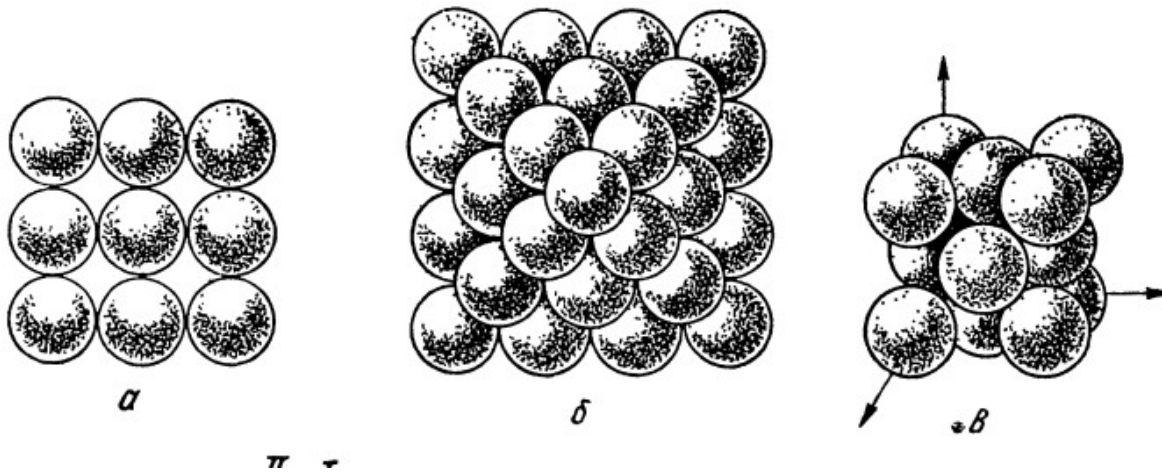
Запоріжжя 2024.

Тема 2. Засоби зображення атомного складу кристала в термінах щільових кульових упаковок. Координаційні поліедри.

- Вступ в теорію найщільніших кульових упаковок.
- Коефіцієнт щільності упаковки для ГЦК та ОЦК.
- Типи пустот найщільніших упаковках.
- Геометрична границя стійкості структур з різними КЧ

Вступ в теорію найщільніших кульових упаковок.

Два типи найпростіших шарових упаковок.
Кубічна та гексагональна

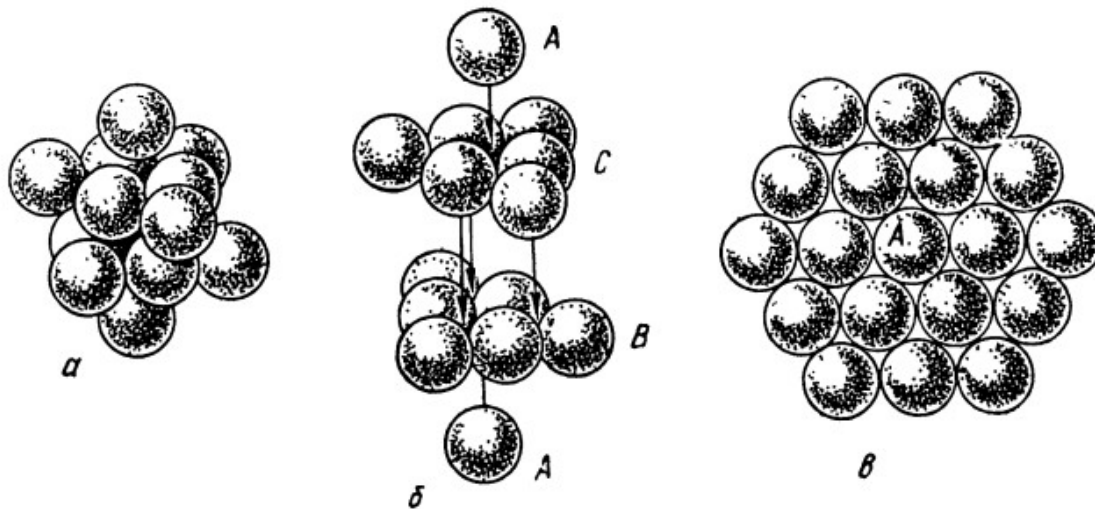


F- гранецентрована кубічна решітка Браве

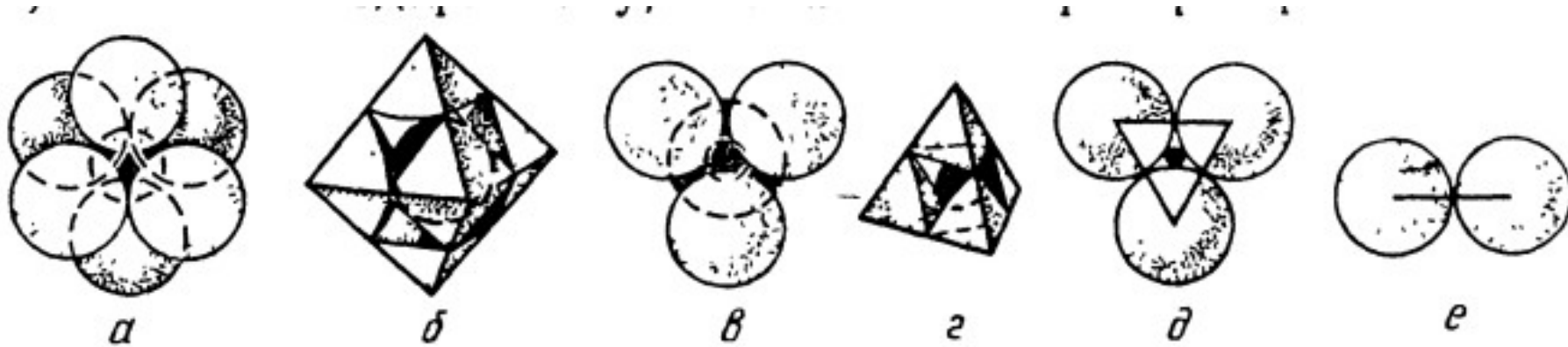
Вступ в теорію найщільніших кульових упаковок.

Два типи найпростіших шарових упаковок.

Кубічна та гексагональна

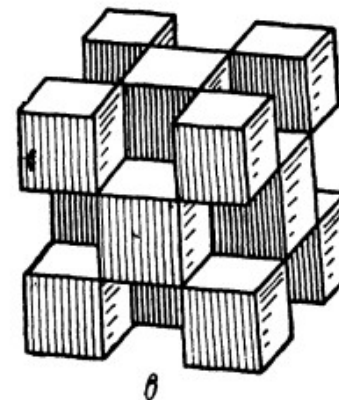
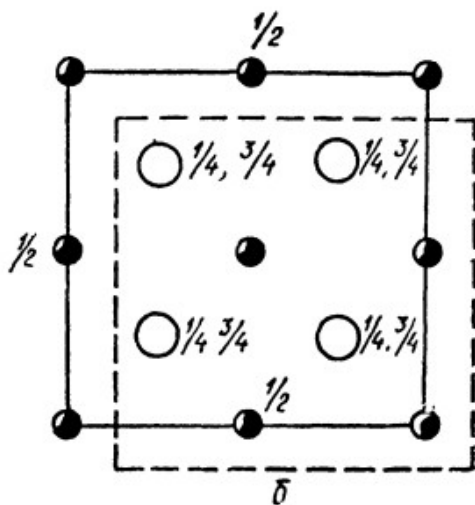
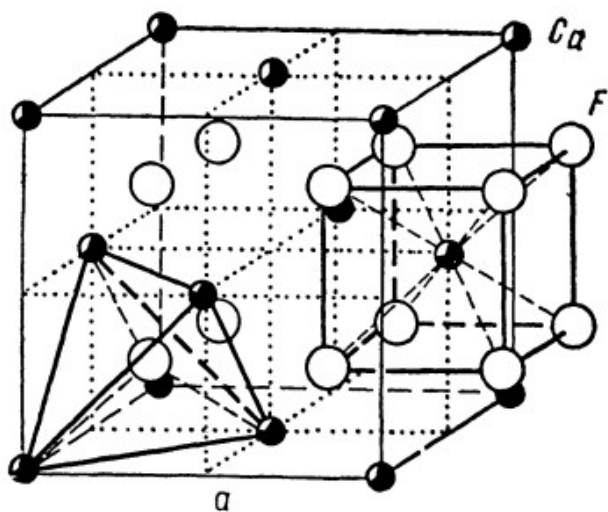


Вступ в теорію найщільніших кульових упаковок.



Генезис пустот у найщільніших упаковках

Вступ в теорію найщільніших кульових упаковок.



Структура Флюорита CaF₂

Вступ в теорію найщільніших кульових упаковок.

Закон 12 сусідів.

Координаційний поліедр можна отримати, якщо поєднати лініями центри атомів найближчого оточення певного атому.

Координаційне число – число найближчих сусідів данного атома..

КЧ	12	6	4	3	2
КП	кубооктаедр, октаедр, тетраедр, трикутник, гантель				

КЧ	12	8	6	4
КП	ікосаедр, куб, тригональна призма, квадрат та інше			

Вступ в теорію найщільніших кульових упаковок.

Координаційна сфера – найближче оточення атому у кристлі.

$$\delta = \sum_{i=1}^{\nu} \Delta d_i^2 / (\nu - 1),$$

ν — КЧ,

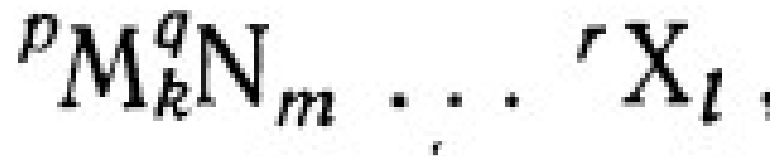
Δd_i — Відстань між реальним та ідеальною вершиною КП.

$\Delta \theta_i$ — Можна також використовувати Відхилення валентних кутів.

Вступ в теорію найщільніших кульових упаковок.

Координаційна сфера – найближче оточення атому у кристлі.

$$k \text{ КЧ}(M) = l \text{ КЧ}(X).$$



$$pk + qm + \dots = rl.$$