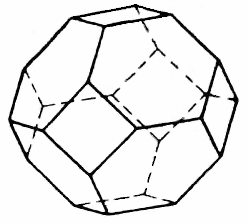
**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД**

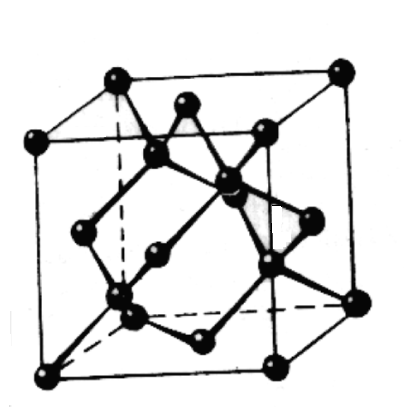
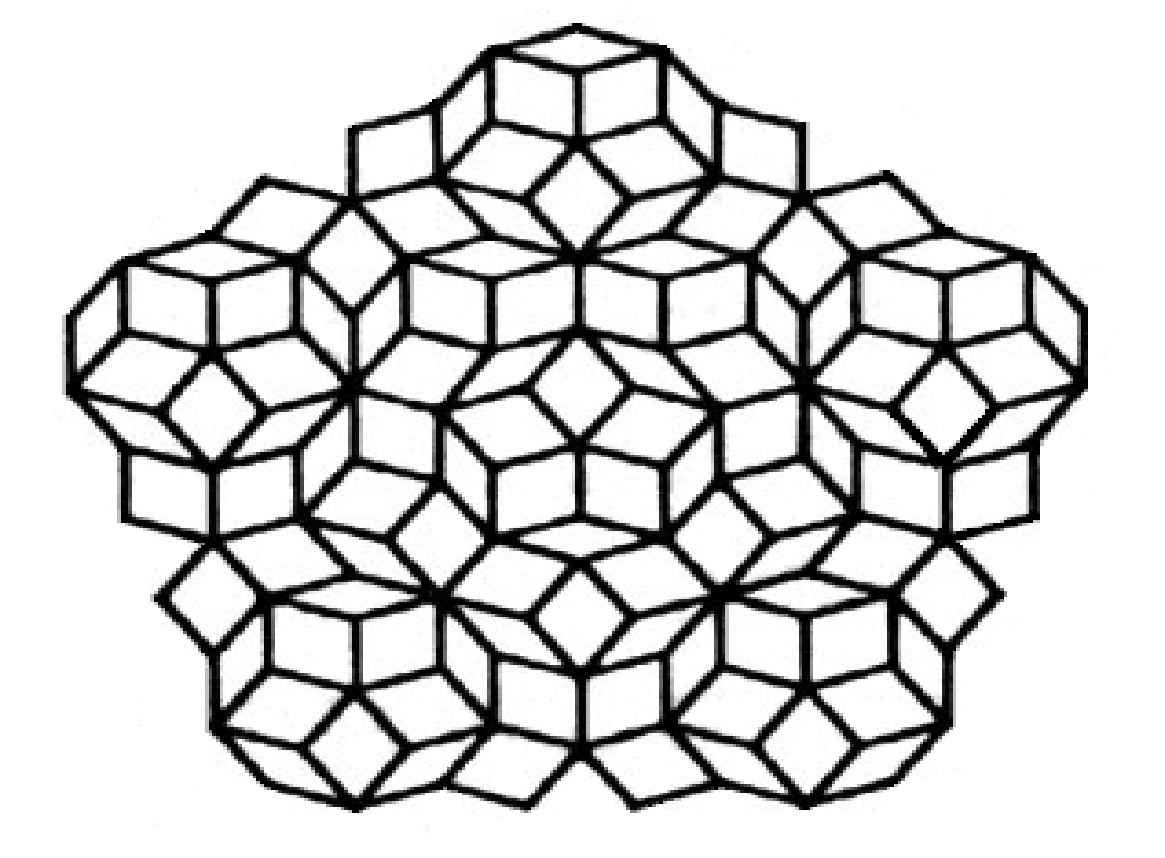
**«ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»**

**МІНІСТЕРСТВА ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**

**КРИСТАЛОХІМІЯ**

Термінологічний словник для студентів освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр» напряму підготовки «Хімія»





Запоріжжя

2023

УДК: 548.3( 03 )

ББК: Г 522 я 2

К 825

Кристалохімія: Термінологічний словник для студентів освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр» напряму підготовки «Хімія» / Уклад.: Синяєва Н.П., Омельянчик Л.О., Луганська О.В. – Запоріжжя: ЗНУ, 2023. – 50 с.

У термінологічному словнику подано 190 основних понять і термінів, засвоєння яких передбачене при вивченні програмного матеріалу дисципліни Кристалохімія ».

Джерельною базою словника є фахова література (наукова, навчально-методична, довідкова). Застосування словника сприятиме підвищенню термінологічної грамотності майбутніх фахівців у галузі хімії, а також дозволить уникнути калькування термінів і понять з російської мови.

Для студентів, викладачів, аспірантів і тих, хто цікавиться питаннями кристалохімії, загальної хімії, неорганічної хімії, квантової хімії та фізичної хімії.

Рецензент *О.В.Маслова*, кандидат фіз.-мат. наук, доцент

Відповідальний за випуск *Л.О.Омельянчик,*  декан біологічного факультету

**СКОРОЧЕННЯ ТА СИМВОЛИ**

ГНУ – гексагональна найщільніша упаковка

ГЦК – гранецентрована кубічна

КП – координаційний поліедр

КНУ – кубічна найщільніша упаковка

КЧ – координаційне число

ОЦК – об’ємноцентрована кубічна упаковка

ПГ – просторова група симетрії

ПСТ – правильна система точок

НКУ – найщільніші кульові упаковки

РФА – рентгенофазовий аналіз

РСА – рентгеноструктурний аналіз

СТ – структурний тип

ТГС – точкова група симетрії

*a, b, c* – довжини вісей координат або ребра (періоди) комірки

***a, b, c*** – базисні вектори системи координат або ґратки (комірки)

*a,\* b\*, c\** – лінійні параметри зворотної ґратки (комірки)

***a,\* b\*, c\**** – базисні вектори зворотної ґратки (комірки)

*d(hkl)* – міжплощинна відстань у сімействі вузлових сіток *(hkl)*

*f(sinθ/λ*) – фактор атомного розсіювання (форм-фактор)

*|F| або F(hkl)|* – модуль структурного фактора (структурна амплітуда)

*h, k, l* – індекси Міллера грані кристала або вузлової сітки

*m, n, p* – індекси вузла або вузлового ряду ґратки (індекси Вейса)

*x, y, z* – відносні координати точки (атома) у структурі

*α, β, γ* – кути між базисними векторами

α\*, β \*, γ – кути між базисними векторами зворотної ґратки

*λ* – довжина хвилі випромінювання

*ρ(xyz)* – електронна щільність кристала

**УКРАЇНСЬКИЙ АЛФАВІТ**



**ПЕРЕДМОВА**

Для вільного володіння усною та письмовою мовою професійного спілкування в дисципліні «Кристалохімія» потрібен значний запас фахової термінології.

Важливим інформаційним джерелом для розділення спеціальних понять є термінологічний словник. Терміни і поняття дозволяють уникнути неточності висловлень, зайвих затрат часу на пояснення. Завдяки його використання суттєво полегшується процес навчання.

«Кристалохімія» як навчальна дисципліна забезпечується поняттями, визначеннями, термінами та методами.

Вільне володіння термінологією даної дисципліни є свідченням глибокого розуміння понять і явищ, показником культури фахового мовлення і професійної компетентності

Доцільність розробки словника пояснюється необхідністю впорядкування відібраної з фахової літератури навчальної, навчально-методичної, довідкової понятійно-термінологічного апарату навчальної дисципліни «Кристалохімія».

При викладанні словника автори дотримувалися точності і коректності, намагалися зробити його максимально зручним у користуванні.

Пропонований словник одномовний (словниковий матеріал подано українською мовою). Терміни і поняття розташовані за алфавітом. Кількість умовних скорочень мінімальна. Структура традиційна: ліворуч – термін (поняття), праворуч – його семантизація.

Вважаємо, що словник буде корисним не тільки студентам, які опановують курс «Кристалохімія», а й викладачам неорганічної хімії, геохімії та ґрунтознавства. Автори радо сприйматимуть побажання щодо удосконалення словника.

**А**

**Абсолютна конфігурація** – просторове місцезнаходження атомів у правій чи лівій формі хіральної молекули. Абсолютна конфігурація будь - якого енантіоморфа відрізняється від його дзеркального зображення, тобто не може бути поєднана з ним. У рентгеноструктурному аналізі абсолютну конфігурацію визначають, використовуючи ефект аномального розсіювання. Уперше цей спосіб використали Й. Бийвут, Г. Пирдеман і Ван Боммель для визначення абсолютної конфігурації аніона d-винної кислоти в кристалі його натрій-рубідієвої солі.

**Абсолютна структура** – просторове місцезнаходження атомів у конкретному нецентросиметричному кристалі і його опис за допомогою параметрів елементарної комірки, ПГ і координат усіх атомів. Абсолютна структура хірального кристала дає змогу розрізняти його ліву та праву форми (енантіоморф), які сумісні один з одним операцією інверсії та описуються однією ПГ, чи двома енантіоморфними групами симетрії. В ахірального ацентричного кристала немає енантіоморфів, але для суміщення структури з її інвертованої копії потрібен зсув чи оберт однієї відносно іншої, тому обидві описуються однією ПГ. У рентгеноструктурному аналізі абсолютну структуру виявляють за допомогою ефекту аномального розсіювання; найчастіше для цього застосовують параметр абсолютної структури.

**Алотропія** – існування простих речовин у різних формах, які відрізняються складом та конфігурацією молекули чи кристалічної структури. В більш вузькому сенсі під алотропією розуміють поліморфізм простих речовин. Приклади алотропії дають карбон (алмаз, графіт, карбін, фулерен та ін.), сіре та біле олово, оксиген та озон. Цей термін був запропонований Я. Берцеліусом.

**Аморфне тіло** – однорідне тверде тіло, яке знаходиться в метастабільному стані та характеризується наявністю близького, але відсутністю дальнього порядку. Близький порядок в аморфних тілах можна вивчати спектроскопічними або дифракційними методами, які дають змогу побудувати функцію радіального розподілення атомів, інтервали між максимумами якої відповідають міжатомним відстаням, а площі піків – середній кількості атомів на відповідній дистанції від цього атома. Для аморфних твердих тіл характерні ізотропія властивостей та відсутність точки плавлення. Можуть бути отримані затвердінням рідин або осадженням з газів та розчинів у нерівноважних умовах (швидке охолодження, гартування, висушування гелів тощо), опромінення і пластичною деформацією кристалічних тіл та ін. В аморфний стан (зокрема склоподібний) може бути переведено багато речовин з яскраво вираженим ковалентним зв’язком (Si , SiO2, As2O3), деякі полімери й навіть метали.

**Ангстрем** – це позасистемна одиниця виміру міжатомних відстаней.

1 Å = 10-10 м = 10-8 см = 0,1 нм

Названа на честь шведського фізика-спектроскопіста А.Й. Ангстрема.

**Анізотропія** – це відмінність властивостей об'єкта в різних напрямках. Природна анізотропія – характерна особливість кристалів і деяких органічних рідин (рідких кристалів). Оптичною анізотропією наділені усі кристали, крім кубічних. Незалежність від напрямку та симетрії (ізотропії) у кристалі проявляють тільки скалярні властивості, що виражаються одним числом, наприклад, температурою, густиною.

**Атомні радіуси** – кристалохімічні радіуси атомів, що поєднані металевим зв’язком, одинарним чи ковалентним зв’язком. Приймаються рівними половині найменшої міжатомної (між’ядерної) відстані у простій речовині. Атомні радіуси збільшуються зі збільшенням координаційного числа атома та зменшуються зі збільшенням кратності зв’язку. Відповідно до типу хімічного зв’язку атомні радіуси діляться на металеві радіуси та ковалентні радіуси.

**Атомний фактор розсіювання** – величина, яка характеризується здатністю окремого атома, іона чи атомного ядра когерентно розсіювати рентгенівське випромінювання, електрони або нейтрони.

**Атомні параметри** – це числа, що описують положення базисних атомів у комірці Браве, ступені їх заселеності і величини теплового коливання. Координати атомів вимірюються в системі координат, осі якої паралельні осям комірки, а чисельні значення відповідають часткам лінійних параметрів комірки. Ступінь заселеності позиції вказується часткою заповнення цієї ПСТ одним із сортів атомів, що входять до структури. Ізотропні теплові коливання атомів визначаються одним параметром, анізотропні в загальному випадку – шістьма параметрами. У вираз для структурного фактора F (hkl) атомні параметри входять у вигляді:

fj • gj • exp (-8π2 – uj2 sin2θ / λ2) exp [2πi (hxj + kyj + lzj)]

де fj і gj – атомний фактор розсіювання та заселеність позиції j-го атома, uj2 – середньоквадратична амплітуда його коливань.

**Б**

**Базис**: 1) три некомпланарних вектори, вибраних як одиничні (реперні) вектори координатної системи. 2) Три найкоротших некомпланарних (реперні) вектора кристалічної ґратки. 3) Грань комірки ґратки, перпендикулярна напряму з найвищою симетрією. 4) Горизонтальна грань комірки (зазвичай грань ab). 5) Сукупність координат базисних атомів, що повністю визначають кристалічну структуру.

**Базоцентрована ґратка** –ґратка Браве, коміркою Браве якої є базоцентрована комірка.

**Базоцентрована комірка** –примітивна комірка з двома вузлами ґратки, в якій додаткові вузли розташовані в центрах базисних граней ab. Базоцентрована комірка Браве позначається символом **С**.

**Ближній і дальній порядки** – регулярні за відстанями, орієнтацією та оточенням розташування частинок речовини (атомів, іонів, молекул) у просторі. Регулярність положення частинок у міжатомних масштабах (1-10 Å) називають ближнім порядком, а регулярність на необмежено великих відстанях – дальнім порядком. Наявність ближнього і дальнього порядку зумовлена взаємодією між частинками: чим вона сильніша, тим більше виражений порядок. У газах ближній і дальний порядки відсутні, у рідинах і аморфних тілах є тільки ближній порядок, у кристалах наявні обидва види порядку. В останньому випадку основними ознаками дальнього порядку є кристалічна ґратка і кристалографічна симетрія. У квазікристалі існує некристалографічний (нетрансляційний) дальній порядок. У рідких кристалах дальній порядок спостерігається тільки у взаємному узгодженні орієнтації молекул. Дальній порядок може бути, як в орієнтації електричних диполів (сегнетоелектрики і антисегнетоелектрики), так і магнітних моментів (магнітне упорядкування).

**Бокоцентрована комірка** – непримітивна комірка з двома вузлами ґратки, у якій додаткові вузли розташовані в центрах граней bс або ас. Базоцентрована комірка Браве позначається символами **А** або В відповідно. Обидва різновиди еквівалентні базоцентрованій комірці, але відрізняються «боковим» положенням центрованих граней.

**В**

**Вакансія:** 1) відсутність атомів або іонів в атомній позиції певного структурного типу або конкретної кристалічної структури. В кристалохімії прийнято позначати вакансії символом 􀀀. 2) точковий дефект у кристалі, зумовлений відсутністю атома (іона).

**Валентний взаємозв’язок** – сильний хімічний зв'язок, до якого відносять іонний, ковалентний та металевий зв’язок. Енергії цих зв’язків зазвичай десятки та сотні кДж/моль. Їм протиставляють невалентну взаємодію (слабкий хімічний зв'язок), до якого відносять водневий зв'язок, Ван-дер-Ваальсові сили й специфічні взаємодії.

**Ван-дер-Ваальсові радіуси** – кристалохімічні радіуси, використовувані для вирахування найкоротших міжмолекулярних відстаней. Приймаються рівними половині між'ядерної відстані між найближчими однаковими атомами сусідніх молекул, пов'язаних Ван-дер-Ваальсовими силами. У середньому Ван-дер-Ваальсові радіуси приблизно на 0,8 Å більше відповідних ковалентних радіусів і дають оцінки міжмолекулярних контактів з похибкою не більше 5%.

**Ван-дер-Ваальсові сили** – тип хімічного зв'язку між атомами (іонами) або молекулами, який складається з слабкого електростатичного тяжіння постійних диполів (орієнтаційна взаємодія), постійних і наведених диполів (індукційна взаємодія) та наведених диполів (дисперсійна взаємодія). Енергія такої взаємодії 0,04-0,4 кДж/моль, що на 3-4 порядки менше енергії сильного хімічного зв'язку. Довжини Ван-дер-Ваальсових зв'язків складають близько 2,5-4 Å і зазвичай відповідають сумі Ван-дер-Ваальсових радіусів контактувальних атомів. Ван-дер-Ваальсові сили визначають енергію зчеплення кристалів інертних газів і багатьох молекулярних, ланцюгових і шаруватих кристалів з ковалентними зв'язками в структурній одиниці (Cl2, S8, (С) графіт, SiS2, CdCl2, органічні й координаційні сполуки). Ван-дер-Ваальсовий зв'язок просторово не спрямований (сферично симетричний) і ненасичений, що призводить до прагнення кожного атома в молекулі або іншому ковалентно пов'язаному структурному фрагменті (ланцюга, шарі) взаємодіяти з максимальним числом атомів іншого фрагмента.

**Вектор трансляції** – це вектор, який відповідає одній з трансляцій ґратки. Якщо такий вектор з’єднує два вузли ґратки m1n1p1 та m2n2p2 , то він дорівнює:

R= (m2-m1) a + (n2-n1) b + (p2-p1) c,

де a, b, c – базисні вектори ґратки.

**Вектори ґратки** – три обраних (базисних) некомпланарних вектора ґратки, що визначають комірку ґратки.

**Векторні параметри кристалів** – фізичні параметри кристалів, які описуються трьома компонентами вектора. Симетрія векторних характеристик збігається із симетрією конусу. До векторних параметрів відносяться сила, твердість, піроефект та ін.

**Величина симетрії** – кількість точок, на які ділиться точка при її виході з приватної позиції ПСТ до спільної, що дорівнює порядку ТГС відповідної симетрії положення цієї точки.

**Вид симетрії** – сукупність закритих елементів симетрії, які відповідають точковій групі. У кристалографії вид симетрії – найбільш часто використовуваний синонім кристалографічного класу.

**Вісь симетрії** –елемент симетрії, геометричним образом якого є пряма, навколо якої відбувається оберт на кут 3600/n (проста вісь симетрії або поворотна вісь), доповнений у випадку складних осей симетрії інверсією в одній з точок прямої (інверсійно-поворотна вісь), відображенням у перпендикулярній їй площині (дзеркально-поворотна вісь) або зрушенням уздовж прямої на дробову частину трансляції ґратки (гвинтова вісь). Позитивним напрямком повороту прийнятий поворот проти годинникової стрілки.

**Відкрита операція симетрії** – операція симетрії, яка не залишає нерухомою жодну точку фігури, що характерно тільки для нескінченних фігур. Перетворення координат точки має вигляд: r'= r0 + Ur, де r0 – постійний для цього перетворення вектор, r і r' – початковий і перетворений радіус-вектори відповідно, Ur – фіксована для цієї відкритої операції симетрії ортогональна матриця. До відкритих операцій симетрії II роду належить ковзальне відображення (див. Площина ковзального відображення).

**Власна симетрія групи атомів** – симетрія зв’язаної групи атомів у кристалі. Симетрія координаційного поліедра визначається симетрією позиції центрального атома. Симетрія іона або молекули визначається симетрією позиції їхнього центру тяжіння. Симетрія молекул або іонів у кристалі зазвичай нижча їхньої симетрії у вільному стані (наприклад, у газі) і є її кристалографічною підгрупою. Позиційна симетрія атомного угруповання в кристалі може бути вищою за його ідеальну симетрію тоді як така група орієнтаційно не упорядкована і додаткові елементи симетрії зв’язують одну орієнтацію молекули або іона з іншою.

**Вузол ґратки** – одна з точок кристалічного простору, геометрично і фізично еквівалентних (гомологічних) довільно обраній точці кристалу. Взаємне розташування таких точок відповідає кристалічній гратці, яка визначається радіус-вектором:

***R*** *= m****a*** *+ n****b*** *+ p****c***

де ***a****,* ***b****,* ***c***– вектори ґратки, а *m, n, p* – цілі числа, що називаються індексами вузла ґратки.

Ці числа, записані у формі [[*mnp*]] або просто *mnp*, називають символом вузла. Для гексагональної і тригональної сингоній іноді символи вузлів записують чотирма індексами [*mnqp*], де *q* = -*m – n*, що відповідає чотиривісній системі координат з трьома еквівалентними і розташованими під кутом 120о одна до одної осями в базисній площині. Положення вузла ґратки відповідає можливій вершині кристала.

**Вузлова сітка (вузлова площина)** – сукупність вузлів ґратки, розташованих в одній площині. Положення вузлової сітки можна визначити трьома вузлами ґратки або рівнянням *hx + ky + lz = N,* де *h, k, l* – взаємно прості цілі числа, звані індексами Міллера сітки (площини), *x, y, z* – координати точки площини, виражені в частках ребер комірки ґратки *a, b, c*. Індекси сітки, укладені в круглі дужки, називають символом вузлової сітки (*hkl*), який відповідає сімейству паралельних вузлових сіток, що проведені через різні вузли ґратки і відрізняються цілочисловою сталою ***N***. Кожне сімейство (*hkl*) характеризується своєю відстанню між сусідніми площинами – міжплощинною відстанню *d* (*hkl*). Сімейству вузлових сіток (*hkl*) відповідає перпендикулярний до нього вектор зворотної ґратки *H = ha\* + kb\* + lc\*,* довжина якого дорівнює міжплощинній відстані. Форма вузлової сітки повністю задається двома вузловими рядами з найкоротшими трансляціями a і b. Останні визначають примітивний паралелограм з вузлів сітки (елементарну комірку сітки), площа якого дорівнює S = *absin γ*, де *γ* – кут між вузловими рядами. Кількість вузлів сітки на одиницю її площі (величина, зворотна S) називають ретикулярною густиною сітки. Сукупність симетрично еквівалентних вузлових сіток (кристалографічних площин, граней кристала) позначають символом {*hkl*}. Для гексагональної і тригональної сингоній іноді символи вузлових сіток записують чотирма індексами (*hkil*), причому *i = -h – k*, що відповідає чотиривісьовій системі координат з трьома еквівалентними та розташованими під кутом 120о одна до одної осями в базисній площині. Вузлова сітка паралельна можливій грані кристала.

**Вузловий ряд (вузлова пряма)** – сукупність вузлів ґратки, розташованих на одній прямій. Характеризується вектором (трансляцією ряду), що з'єднує два сусідніх вузли ряду, і зміщеним у початку координат:

*R = ma + nb + pc*

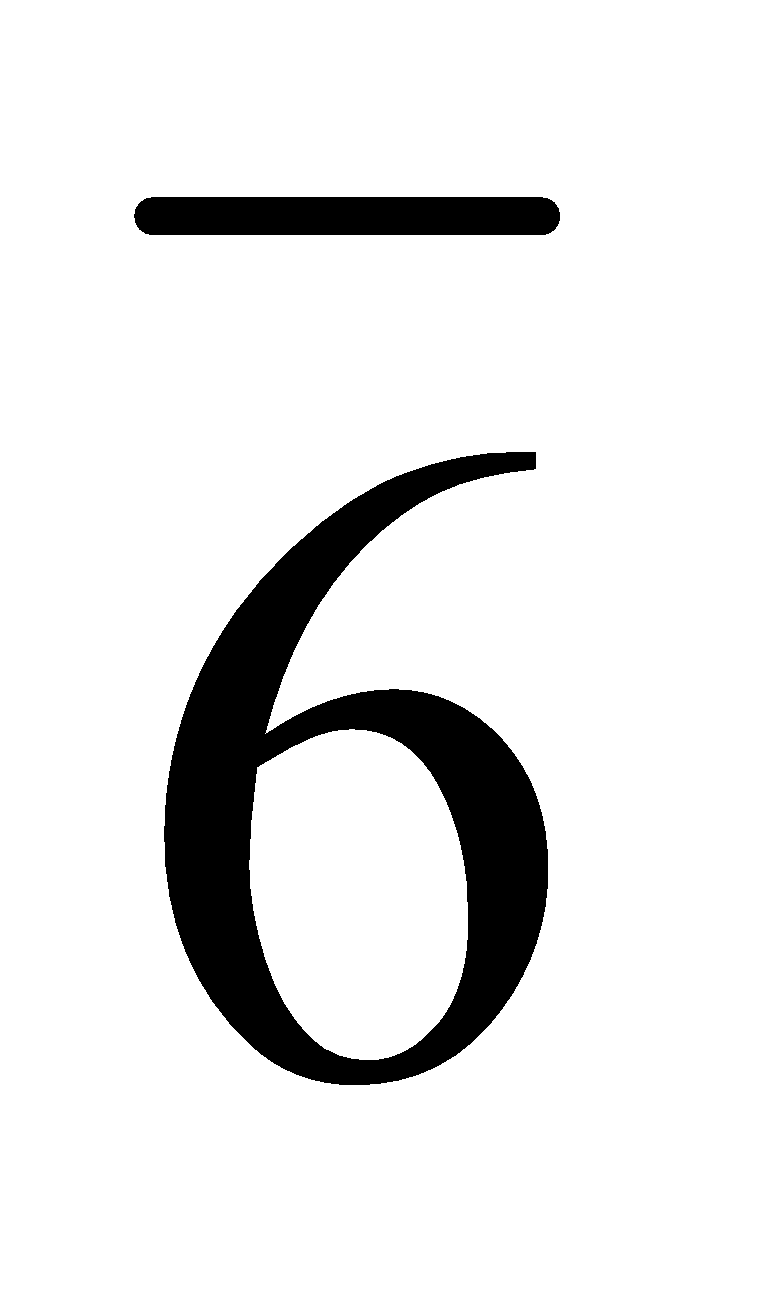
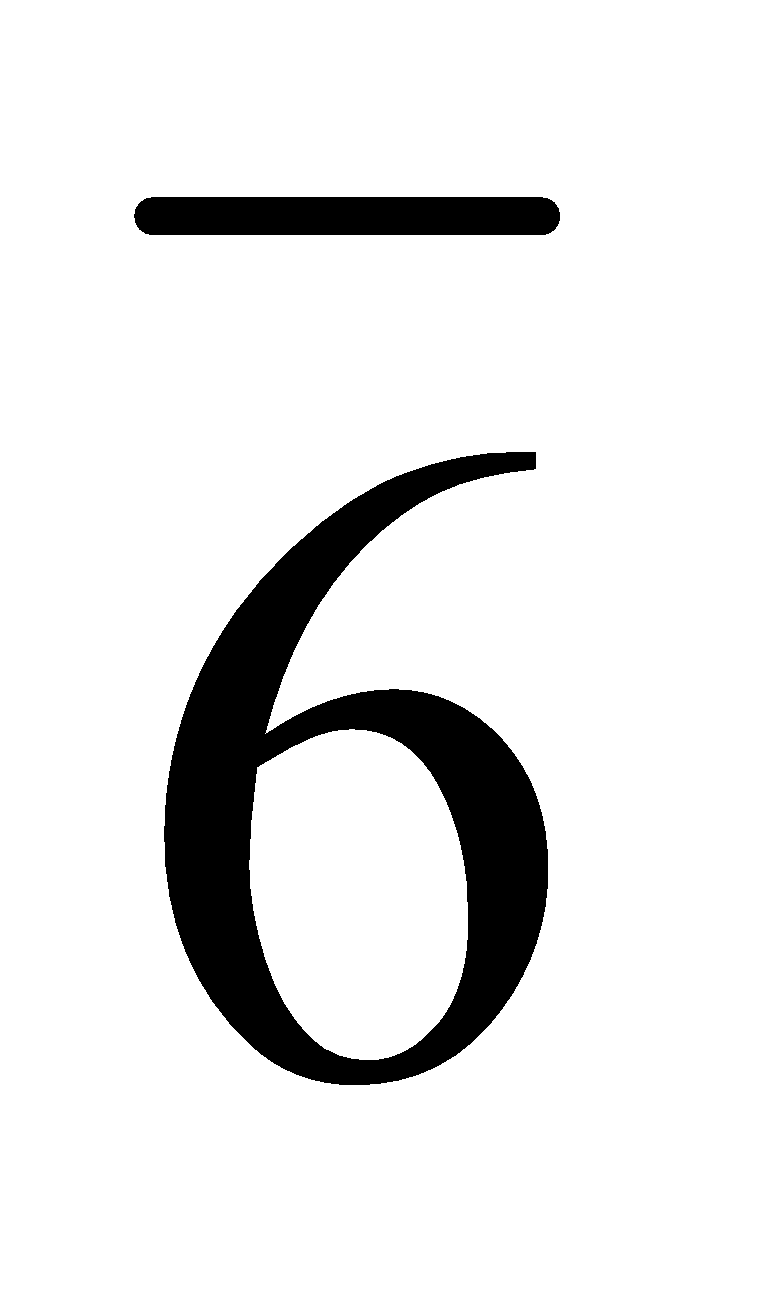
де *a, b, c* – вектори ґратки, а *m, n, p* – цілі числа, названі індексами ряду.

Індекси ряду, укладені в квадратні дужки, називають символом вузлового ряду [*mnp*], що відповідає сімейству паралельних вузлових рядів, проведених з різних вузлів ґратки. Для спрощення запису символу ряду прийнято вибирати найближчий до початку координат вузол [[*mnp*]], тому індекси ряду – взаємно прості числа. Сукупність симетрично еквівалентних вузлових рядів (кристалографічних напрямків, граней кристала) позначають символом [*mnp*]. Для гексагональної і тригональної сингоній іноді символи вузлових рядів записують чотирма індексами [*mnqp*], причому *q = -m - n*, що відповідає чотиривіcьовій системі координат з трьома еквівалентними і розташованими під кутом 120о одна до одної осями в базисній площині. Вузловий ряд паралельний можливому ребру кристала.

**Водневий зв'язок** – особливий тип хімічного зв'язку типу XH...Y, проміжний між ковалентним зв'язком та іонним зв'язком, у якому атом водню, пов'язаний з електронегативним атомом X (X = C, N, O, S, Hal), притягається до неподіленої електронної пари іншого електронегативного атома Y (Y = N, O, S, Hal). Водневий зв'язок можна розглядати як окремий випадок трицентрового координаційного зв'язку. Найбільш сильні водневі зв'язки знайдені в симетричному іоні (FHF) – (відстань FH= 1,13 Å, енергія зв'язку 113 кДж/моль), у воді несиметричні водневі зв'язки OH...O мають середню довжину 2,76 Å при енергії зв'язку 19 кДж/моль. Розрізняють внутрішні міжмолекулярні водневі зв'язки, які зазвичай лінійні і характерні для гідратів, солей амонію, гідроксидів, неорганічних і органічних кислот, спиртів, амінів, білків, ДНК й інших гідрогеновмісних сполук.

**Г**

**Гвинтова вісь** – відкритий елемент симетрії, який позначають міжнародним символом np – пряма, навколо якої здійснюється оберт на кут 3600/n (n – порядок гвинтової осі) і подальший зсув уздовж паралельної їй трансляції t на величину t/p (1 ≤ p ≤ n-1). Для кристалів n = 2, 3, 4, 6, де t – трансляція комірки Браве. Гвинтові осі вищих порядків можуть бути енантіоморфними (правими і лівими), для правої осі позитивним напрямом повороту прийнятий оберт проти годинникової стрілки. Енантіоморфними є осі 31 і 32, 41 і 43, 61 і 65, 62 і 63 (праві осі вказані першими), осі 42 і 63 нейтральні.

**Гексагональна сингонія** – кристалографічний тип кристала (структури), що характеризується наявністю осі шостого порядку. Кристали, що належать до гексагональної сингонії, мають примітивну комірку Браве з параметрами a = b ≠ c, α = β = 90o, γ = 120o (вісь 6-го порядку || с) і відносяться до семи ТГС (6, **, 6/m, 622, 6mm, **m2, 6/mmm) та двадцяти семи ПГ. Зважаючи на таку ж форму комірки Браве у тригональних (ромбоедричних) кристалів, їх іноді також відносять до гексагональної сингонії, виділяючи тригональну та гексагональну підсингонії.

**Гоніометр** – прилад для точного визначення кутів між гранями кристала, у якому зазвичай передбачені його оберти навколо двох або трьох осей. В основному використовуються два типи гоніометрів: оптичні (вимірюють кути відбиття пучка світла від різних граней кристала) і рентгенівські (вимірюють кути рентгенівських дифракційних відбиттів від вузлових сіток кристала).

**Гранецентрована ґратка** – ґратка Браве, комірка якої є гранецентрована комірка.

**Гранецентрована комірка** – непримітивна комірка з чотирма вузлами ґратки, у якій додаткові вузли знаходяться в центрах усіх граней (ab, ac та bc). Позначається літерою **F**.

**Група симетрії** – повна сукупність операцій симетрії, які суміщають цю симетричну фігуру з нею самою. У структурній хімії, кристалографії та кристалохімії в основному користуються точковими групами симетрії і просторовими групами симетрії; для симетрії кристалів характерні кристалографічні групи симетрії (точкові і просторові), сумісні з симетрією кристалічної ґратки. Максимальну кількість точок, розмножених усіма операціями симетрії групи, називають порядком групи симетрії (для ПГ їх відносять до однієї комірки Браве). Підмножини операцій симетрії цієї групи також утворюють групи симетрії, які називають підгрупами. Порядок підгрупи є дільником порядку групи (теорема Лагранжа). Групи симетрії ділять на категорії, а кристалографічні групи симетрії – на сингонії. Симетрію колінеарних магнетиків і двійників описують групами антисиметрії.

**Гомодесмічна структура** – кристалічна структура, у якій всі атоми пов'язані хімічними зв'язками одного типу. Як правило, у таких кристалах наявні симетрично еквівалентні атоми (одноатомні іони) одного або двох сортів, що складають координаційну структуру. Приклади: С (алмаз), NaCl, SiO2.

**Гомологічний ряд** – дискретна послідовність споріднених за будовою молекул або кристалів, кожна з яких відрізняється від попередньої величиною однотипного структурного фрагмента (кінцевої або протяжної в одному або двох вимірах групи атомів). У неорганічній (немолекулярній) кристалохімії гомологічними, зазвичай, називають ряд структур, утворених з вихідних структур родоначальників за рахунок упорядкування дефектів, за типом кристалографічного зсуву або структур (фаз) проростання. Приклади гомологічних рядів: молекули граничних вуглеводнів CnH2n+2, PrnO2n-2 (упорядкування кисневих дефектів у СТ флюориту CaF2), MonO3n-1 (фази кристалографічного зсуву на основі СТ ReO3), фази Раддлсдена-Поппера   
An + 1BnO3n +1 (A = Ba, Sr, Ca ...; B = Ti, Zr, Hf ...) з проростанням СТ NaCl та перовскиту CaTiO3.

**Ґ**

**Ґратка** – нескінченна множина математичних точок (вузлів ґратки) в тривимірному просторі, що відповідає векторному рівнянню *R = ma + nb + pc*, де *m, n, p* – цілі числа, *a, b, c* – три некомпланарні вектори, що виходять з початку координат. Вектори *a, b, c* називають векторами переносу або трансляціями, а їхні модулі – періодами ідентичності ґратки. Решітку також можна задати шістьма скалярними параметрами ґратки. Паралелепіпед, побудований на векторах *a, b, c*, називають паралелепіпедом повторюваності ґратки. Складниками ґратки є її вузли, вузлові ряди і вузлові сітки. Ідея ґратки кристала була вперше введена в кристалографію англійським ученим У.Х. Волластоном у 1813 р. і остаточно затвердилась після робіт французького математика О. Браве в 1848 р.

**Д**

**Дефект** – будь-яке відхилення від ідеальної структури як мікро-, так і макроскопічних масштабів. Можуть бути притаманні самій кристалічній структурі або утворюються в процесі кристалізації, при введенні домішок або під впливом теплових, механічних, радіаційних, електричних, магнітних та інших впливів. Розрізняють точкові, лінійні, поверхневі (плоскі) і об'ємні дефекти. Найпростіші точкові дефекти – вакансії, домішкові і міжвузельні атоми. Найбільш відомі лінійні дефекти – дислокації і площини кристалографічного зсуву. До поверхневих дефектів відносять дефекти упаковки, межі двійників, доменів та ін., до об'ємних дефектів – скупчення вакансій, пори, домішкові включення та ін.

**Дефектна структура** – кристалічна структура, у якій є дефектні (містять вакансії) атомні позиції. Дефектні структури характерні для нестехіометричних фаз і твердих розчинів типу впровадження або віднімання, а також твердих електролітів. Термін «дефектна структура» запропонований Л. В. Штроком у 1936 р.

**Дзеркально-поворотна вісь** – закритий елемент симетрії, що позначається за Шенфлісом **Sn** – пряма, навколо якої здійснюється оберт проти годинникової стрілки на кут φ = 3600/n (n – порядок дзеркально-поворотної осі) з подальшим відображенням у фіксованій дзеркальній площині, перпендикулярній осі. Будь-якій дзеркальноповоротній осі з елементарним кутом оберту φ еквівалентна відповідна інверсійна вісь з кутом оберту 3600 , тому обидва ці види складних осей симетрії взаємозамінні.

**Дислокація** – лінійний дефект у кристалі, який спотворює правильне розташування кристалографічних площин. Дислокації відрізняються від інших дефектів у певній лінії, що пронизує кристал. Найпростішими видами дислокації є крайова та гвинтова. В ідеальному кристалі сусідні кристали кристалографічної площини паралельні, але якщо одна з них обривається, усередині кристалу виникає крайова дислокація, край «зайвої» на півплощині, є її віссю. Гвинтову дислокацію можна уявити як результат зсуву на період ґратки однієї частини кристала відносно іншої вздовж деякої напівплощини паралельної її краю, яка визначає роль осі дислокації. Між граничними типами крайової та гвинтової дислокації можливі будь-які проміжні, у яких лінія дислокації не обов’язково пряма: вона може становити собою довільну пласку або просторову криву. Дислокації можна безпосередньо бачити за допомогою електронної мікроскопії високої роздільної здатності.

**Дифрактограма** – картина розсіювання (дифракції) випромінювання від різних об'єктів, отримана фотографічно (на плівці або фотопластинці) або за допомогою лічильників квантів чи елементарних частинок. Зазвичай дифрактограми є двовимірними і показують залежність інтенсивності розсіяного випромінювання від кута. Найчастіше термін «дифрактограми» застосовується до рентгенограми, отриманої на дифрактометрі (зазвичай порошковому).

**Дифрактометр** – прилад для вимірювання інтенсивності дифрагованого випромінювання залежно від напряму (кута дифракції). При проведенні структурного аналізу зазвичай вимірюють дифракційні відбиття від кристалів або порошків на монохроматичному випромінюванні при різних взаємних положеннях зразка і детектора випромінювання (див. нейтронографія, рентгенографія, електронографія). Перший дифрактометр (рентгенівський спектрометр) сконструйований У.Г. Бреггом та У.Л. Бреггом.

**Дифракційні методи** – методи дослідження мікроструктури речовини, засновані на вивченні кутового розподілу інтенсивності розсіяного (дифрагованого) ним випромінювання. Умова дифракції – сумірність довжини хвилі випромінювання λ з відстанями між центрами розсіювання (атомами), тобто вона повинна бути близько 1 Å. Розташування дифракційних максимумів і їхня інтенсивність однозначно пов'язані із структурою речовини і її хімічним складом.

**Досконалий ізоморфізм** – властивість речовин утворювати неорганічні тверді розчини, що можливо тільки за умови їхньої ізоструктурності. Приклади таких речовин : Ag і Au, KBr і RbBr, гроссуляр Ca3Al2(SiO4)3 і андрадит Ca3Fe2(SiO4)3. Якщо змішуваність речовин обмежена, то відзначають, що ізоморфізм недосконалий. Однак різниця між досконалим і недосконалим ізоморфізмом не абсолютна . Наприклад, при кімнатній температурі NaCl і KCl майже не розчинні один в одному, а вище 500◦ С вони утворюють безперервні тверді розчини.

**Е**

**Електронна мікроскопія** – метод отримання зображень мікрооб'єктів (мікроструктури) за допомогою пучка прискорених електронів, сфокусованих електромагнітними лінзами у вакуумі. Найбільш поширені просвічувальні і сканувальні електронні мікроскопи. У просвічувальному мікроскопі вивчають зразки товщиною 100-500 Å з роздільною здатністю до 2-10 Å, що дозволяє безпосередньо спостерігати положення атомів у твердих тілах.

**Електронографія** – один з дифракційних методів дослідження будови речовини, заснований на вивченні розсіювання (дифракції) речовиною монохроматичного пучка електронів електростатичним потенціалом кристалу.

**Електронегативність** – кількісна характеристика (позначається – **χ** ) властивостей зв’язаного атома притягувати до себе електрони. Поняття електронегативності (ЕН) атомів введено американським фізико-хіміком Л. Полінгом у 1930 р., який запропонував першу шкалу ЕН, що охоплює значення від 0,7 для атомів цезію до 4,0 для атомів фтору. Американський фізик Р. Міллікен у 1934 р. дав найбільш просте визначення ЕН як величини, рівній півсумі першого потенціалу іонізації і спорідненості до електрона: χ=(*I+ F)/2.* ЕН атому залежить від його валентного стану, ступеню окислення, типу сполуки, координаційного числа, природи лігандів та складових оточення атома в молекулярній системі тощо.

**Елемент симетрії** – геометричний образ операції симетрії, що самопоєднується при її виконанні. У тривимірному просторі елементи симетрії становлять собою точки (центр інверсії, особливі точки інверсійних осей), прямі (осі симетрії) або площини (площини симетрії). Аналогічно відповідним операціям симетрії розрізняють: 1) елементи симетрії I роду, які пов'язують конгруентні фігури, 2) елементи симетрії II роду, які пов'язують енантіоморфні (дзеркально-рівні) фігури. Порядок елемента симетрії дорівнює порядку відповідної операції симетрії. Якщо елемент симетрії залишає нерухомою хоча б одну точку симетричної фігури, то його називають закритим елементом симетрії, в іншому випадку це відкритий елемент симетрії. Відкриті елементи симетрії характерні тільки для нескінченних фігур.

**Елементарна комірка (елементарний паралелепіпед):** 1) комірка ґратки, побудована на трьох найкоротших (базисних) некомпланарних векторах кристалічної ґратки. Така комірка завжди є примітивною (не містить інших вузлів ґратки, крім тих, що знаходяться у вершинах). 2) одна з комірок ґратки (зазвичай примітивна комірка або комірка Браве), обрана в якості базисної.

**Елементарні трансляції** – найкоротші (основні, базисні) некомпланарні трансляції ґратки. На цих трансляціях побудована елементарна комірка.

**Енантіоморф (енантіомер)** – права чи ліва форма хіральної фігури, наприклад, молекули або кристала (див. Енантіоморфізм, Хіральність).

**Енантіоморфізм** – властивість фігури існувати в двох дзеркально рівних, але не сумісних накладенням (правої і лівої) формах, те ж, що і хіральність. Необхідна умова енантіоморфізму – відсутність у фігури елементів симетрії II роду. Енантіоморфізм хімічних речовин був відкритий Л. Пастером на прикладі кристалів 2,3- дигідроксибутандіової кислоти (винної) у 1848 р.

**Енантіоморфні групи симетрії** – просторові групи симетрії, що відрізняються набором енантіоморфних (правих і лівих) гвинтових осей і відповідають симетрії хіральних (енантіоморфних) кристалічних структур. Відомо 11 пар енантіоморфних ПГ: P31 і P32, P3112 і P3212, P3121 і P3221, P41 і P43, P4122 і P4322, P41212 і P43212, P61 і P65, P62 і P64, P6122 і P6522, P6222 і P6422, P4132 і P4332.

**Енергія іонної ґратки** – енергія утворення іонного кристала з нескінченно розрідженого газу іонів. У потенційну енергію іонного кристала основний внесок здійснює електростатична взаємодія і сили відштовхування. У цьому наближенні, згідно з рівнянням Борна-Майера, енергія ґратки дорівнює  *U= -a / R + b*exp (*-R / ρ*), де *R* – найкоротша відстань катіон-аніон, перший член виражає енергію електростатичного тяжіння, а другий – сил відштовхування. Перший член обчислюють за законом Кулона, враховуючи як тяжіння катіон-аніон, так і відштовхування катіон-катіон (або аніон-аніон) на різних відстанях від центрального іона. У кристалі, що складається з катіонів з зарядом z + і аніонів з зарядом z-, остаточний вираз для кулонівського члена має вигляд *-Az + z-e2NА / R*, де A – постійна Маделунга, e – заряд електрона, NА – число Авогадро. Параметр ρ визначають з даних зі стисненості кристала, b – з умови мінімуму енергії кристала *(∂U / ∂R) = 0* при рівноважній відстані *Ro: Az + z-e2N / R02* – *(b / ρ*) exp (-R0 / ρ) = 0, звідки b = (Az + z-e2Nρ / R02) exp (R0/ρ). Остаточний вираз для енергії іонної ґратки приймає вигляд:

*U = -Az + z-e2N / R0 (1 - ρ / R0*)

Найбільший внесок до потенційної енергії дає кулонівський член, енергія відштовхування становить 10-15% загальної енергії. У більш точних виразах для енергії ґратки враховують Ван-дер-Ваальсові взаємодії (менше 10% загальної енергії) і енергію нульових коливань (не більше 1% загальної енергії), вклади яких протилежні за знаком. Експериментально енергії іонних ґраток визначають за циклом Борна-Габера. Розрахунки добре узгоджуються з експериментом тільки для іонних кристалів (наприклад, для лужних галогенідів), і значно погіршуються з ростом ковалентності зв'язку. Теоретичні величини енергії ґраток деяких сполук (кДж/моль) наведені в дужках: NaCl – 765 (775), CsCl – 651 (652), AgI – 896 (795), CaF2 – 2613 (2604), CdI2 – 2412 (1997).

**Енергія ґратки** – енергія утворення кристала з нескінченно розрідженого газу атомів, іонів або молекул. До потенційної енергії іонного кристала (див. Енергія іонної ґратки) основний внесок роблять електростатична взаємодія і сили відштовхування, в енергію звичайного молекулярного кристала (без водневих та інших сильних міжмолекулярних зв'язків) – Ван-дер-Ваальсові взаємодії і відштовхування. Енергії утворення ковалентних кристалів з атомів можна вираховувати за допомогою методу молекулярних орбіталей або інших наближених квантово-хімічних методів. Енергії зчеплення деяких кристалів (кДж/моль) відповідно дорівнюють NaCl – 765, ZnS – 3570, Cl2 – 25, CH4 – 10, Ne – 2, Na – 110, C (графіт) – 710.

**Еталон (стандарт)** – кристалічна речовина з точно відомими параметрами ґратки, положення ліній якої використовують для усунення систематичних помилок у виміряних кутах віддзеркалення 2*θ* на порошковій рентгенограмі. Стандартну речовину або знімають окремо до або після експозиції досліджуваного зразка (зовнішній еталон), або додають у сам зразок (внутрішній еталон). Для еталонів зазвичай використовують хімічно стійкі речовини з високою температурою плавлення, високою розсіювальною здатністю і високосиметричною структурою з невеликою коміркою (для зйомки в малих кутах 2*θ* необхідні еталони з великими періодами комірки). Найбільш часто в якості еталонів використовують високочисті Si, Ge, α-Al2O3 (корунд), α-SiO2 (кварц), а також деякі метали.

**З**

**Закон Гаюї** – один з найважливіших законів кристалохімії, сформульований французьким ученим Р. Ж. Гаюї в 1784 р. що складає основу кристалохімії: кожній хімічній сполуці повинна відповідати своя кристалічна форма.

**Закон сталості двогранних кутів** – перший основний емпіричний закон геометричної кристалографії: кути між відповідними гранями кристалів однієї і тієї ж речовини постійні при певній температурі й тиску. Цей закон відкрито на основі кристалів кварцу SiO2 і гематиту Fe2O3 датським ученим Н. Стеноном у 1669 р. і остаточно затверджений на основі вимірів великої кількості кристалів та мінералів французьким кристалографом Ж.Б. Роме де Лілем у 1783 р.

**Закрита операція симетрії** – операція симетрії, що залишає нерухомою хоча б одну (особливу або інваріантну) точку симетричної фігури. Якщо вибрати початок координат в особливій точці, то перетворення координат точки матиме вигляд r '= Ur, де r і r' – вихідний і перетворений радіус-вектори відповідно, Ur – фіксована для цієї закритої операції симетрії ортогональна матриця. До закритих операцій симетрії I роду відносяться оберт навколо простих осей симетрії (поворотних осей), а закритими операціями симетрії II роду є інверсія, дзеркальне відображення і оберти навколо складних.

**Закритий елемент симетрії** – елемент симетрії, що відповідає закритій операції симетрії.

**Зона кристала** –сукупність вузлових сіток кристала які паралельні цьому вузловому ряду.

**І**

**Ідеальна структура** –математичний образ усередненого за часом і простором регулярного розташування атомів у кристалі, що відповідає середньостатистичним максимумам електронної або ядерної густини кристала і описане набором атомних позицій, кристалічною ґраткою і однією з 230 просторових груп симетрії. Різні аспекти ідеальної структури розглядають у рамках різних моделей структури. Локальні (зазвичай макроскопічні) відхилення від ідеальної структури відповідають реальній структурі. Експериментально ідеальну структуру визначають методами структурного аналізу.

**Ізоморфізм** – розуміють кілька явищ: 1) подібність кристалічних форм; 2) здатність ізоструктурних речовин утворювати необмежені (досконалий ізоморфізм) або обмежені (недосконалий ізоморфізм) тверді розчини; 3) здатність матеріальних частинок (атомів, іонів, молекул) заміщатись іншими матеріальними частинками в кристалічних структурах; 4) здатність речовин утворювати змішані кристали з тим або тим ступенем упорядкування компонентів (тверді розчини, аномальний ізоморфізм тощо). Явища ізоморфізму зазвичай вивчають за допомогою методів фізико-хімічного аналізу, рентгенографії і рентгеноструктурного аналізу. Відкритий німецьким хіміком і кристалографом Е. Мітчерліхом у 1819 р. на прикладі кристалів KH2PO4, KH2AsO4 і NH4H2PO4 і спочатку ставився до близькості кристалічних форм і здатності утворення твердих розчинів.

**Ізоструктурність** – належність порівнюваних кристалічних структур до одного структурного типу при близькості типу хімічного зв'язку (як правило, з можливістю утворення між ними твердих розчинів). Ізоструктурність є необхідною вимогою утворення неперервних твердих розчинів, в іншому випадку розчинність може бути тільки обмежена. Зміна складу твердих розчинів і нестехиометричних сполук в галузі гомогенності відбувається без зміни структурного типу, але при обов’язковій наявності одного з видів позиційного безпорядку.

**Ізоструктурний ряд** – ряд, який становлять ізоструктурні прості речовини або хімічні сполуки (зазвичай він вибудовується в порядку закономірної зміни складу). Приклади: тверді Ne, Ar, Kr, Xe утворюють ряд ізоструктурних простих речовин типу ГЦК; галогеніди лужних металів (крім CsCl, CsBr, CsI) утворюють ізоструктурні ряди сполук типу NaCl; карбонати MCO3 (M = Mg, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Ca, Cd) дають ізоструктурні ряди сполук типу кальциту CaCO3.

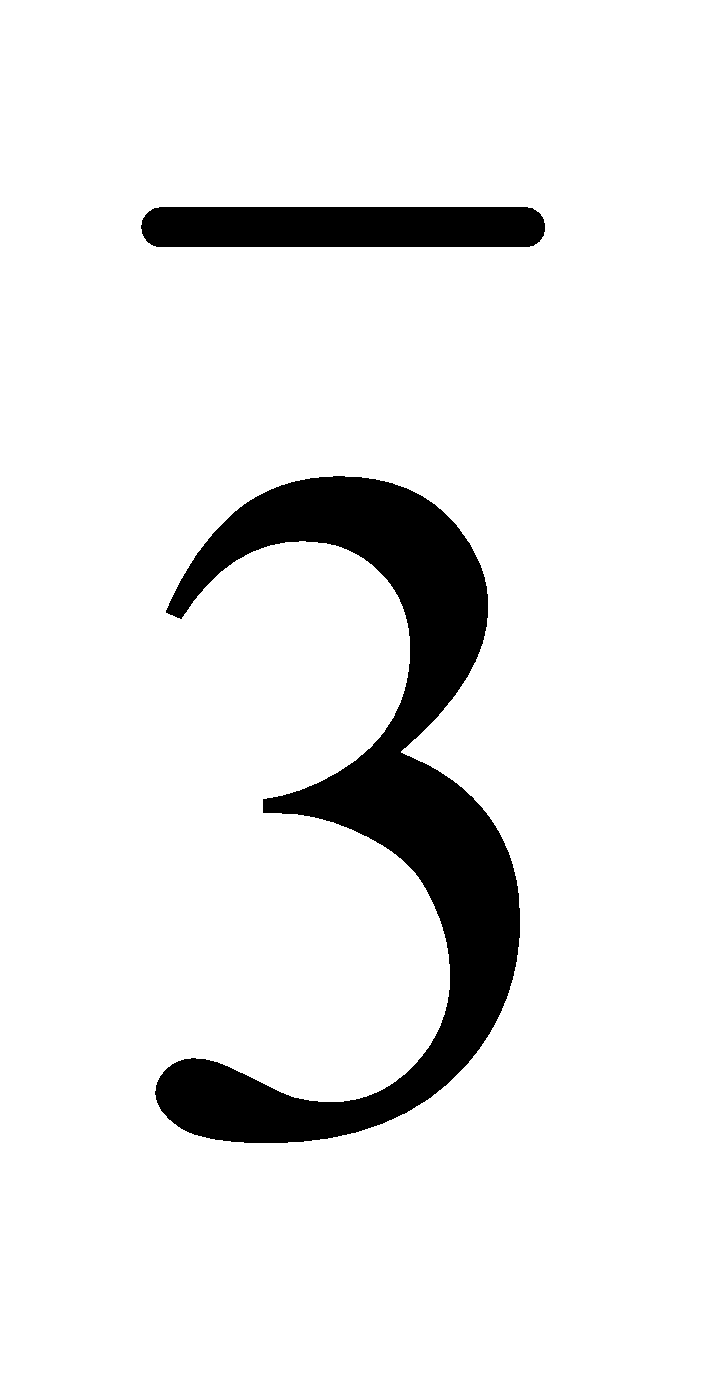
**Ізотипія (ізотипність**) – належність порівнюваних кристалічних структур до одного структурного типу при істотній відмінності в них ступенів окислення атомів або типу хімічного зв'язку. З цієї точки зору ізотипні (але не ізоструктурні) будуть твердий Xe і Cu типу ГЦК, NaCl і TiC. Формально ізотипними слід вважати CaF2 і Li2O, які подібні за структурою, але протилежні за положенням катіонів та аніонів.

**Ізотропія** – однаковість властивостей об'єкта в різних напрямках. Ізотропія будь-яких властивостей характерна для газів, рідин, аморфних і полікристалічних тіл, але не кристалів, які відрізняються анізотропією. Кристал може проявляти ізотропію або щодо скалярних властивостей або в разі його особливої симетрії: так, кубічним кристалам властива ізотропія електро- і теплопровідності, теплового розширення, оптична ізотропія.

**Інверсійна вісь (інверсійно-поворотна вісь)** – закритий елемент симетрії, що позначається за Германом-Могеном n – пряма, навколо якої здійснюється поворот на кут φ = 360о/n (n – порядок інверсійної осі) з подальшою інверсією в фіксованій точці (особливій точці) прямій. Позитивним напрямком повороту прийнятий поворот проти годинникової стрілки. Інверсійна вісь з елементарним кутом повороту φ еквівалентна дзеркально-поворотній осі з кутом повороту 360о, тому обидва ці види складних осей симетрії взаємозамінні.

**Індекси кристалографії** – трійки цілих чисел, які визначають положення вузлів, вузлових рядів (прямих направлень) і вузлових сіток (площин) кристалічних ґраток.

**Індекси Браве - Міллера** – зрідка використовуваний спеціальний випадок індексів Міллера для гексагональної й тригональної сингонії, коли символи вузлових сіток записуються чотирма індексами (hkil), де i = -h – k, що відповідає чотирьохосній системі координат з 3 еквівалентними й розташованими під кутом 120о одна до одної осями в базисній площині. Індекси отримали назву на честь О. Браве, який модифікував індекси Міллера.

**Індекси Міллера** – позначення межі кристала або вузлової сітки (кристалографічної площини) трійкою цілих чисел h, k, l, що входять у рівняння площини (або сімейства площин) у кристалографічній системі координат: hx + ky + lz = N. Символ грані або площини записують як (hkl, причому в разі негативного індексу мінус ставлять не перед його числовим значенням, а над ним, наприклад (** 01). Сімейство паралельних площин (hkl) ділить ребра a, b, c комірки відповідно на h, k і l частин. Нульовий індекс означає паралельність площини відповідному ребру. Індекси запропоновані англійським вченим У. Міллером 1839 р.

**Інтернаціональні таблиці з кристалографії** – довідкове керівництво з кристалографії і структурного аналізу, що видається Міжнародною спілкою кристалографії ("International Union of Crystallography", IUCr). Включає дані з ґраткової кристалографії (одно, двох- і тривимірні ґратки, комірки Браве, координатні системи, сингонії, перетворених систем координат), кристалографічних груп симетрії (у тому числі тривимірних ТГС і ПГ), рентгенівської кристалографії (класи Лауе, систематичні згасання, таблиці структурних факторів тощо) та інші таблиці математичних, фізичних і хімічних величин.

**Іонний зв'язок** – тип хімічного зв'язку, зумовлений переносом валентних електронів з одного атома на інший з утворенням позитивних і негативних іонів і електростатичною (кулонівською) взаємодією між ними. Іонний зв'язок можна розглядати як граничний випадок полярного ковалентного зв'язку між атомами, який значно відрізняється електронегативністю. Іонний зв'язок просторово не спрямований (сферично симетричний) і не насичений, що призводить до прагнення кожного іона оточити себе максимальною кількістю іонів протилежного знака. Іонний зв'язок характерний для сполук типових металів (наприклад, лужних) і типових неметалів (наприклад, галогенів), що утворюють іонні кристали, у яких іони мають відносно високі КЧ = 6, 8 і вище. Довжини іонних зв'язків складають близько 1,5-3,5 Å і зазвичай відповідають сумі радіусів іонів ,що взаємодіють. Енергії іонних зв'язків (кДж/моль) - CsH (170), NaCl (410), LiF (570).

**Іонні кристали** – кристали, основною силою зчеплення яких є іонний зв'язок. Структурні одиниці іонного кристала – катіони і аніони, які можуть бути одноатомними (як в структурі NaCl) або багатоатомними. В останньому випадку допускається, що іони, які складають кристал, можуть бути як кінцевими (солі амонію, нітрати, сульфати, карбонати та ін.), так і нескінченними: ланцюговими, шаруватими і каркасними (наприклад, борати, силікати).

**Іонні радіуси** – кристалохімічні радіуси одноатомних і деяких багатоатомних (NH4+, OH- та ін.) іонів, що дозволяють наближено оцінювати міжатомні (між'ядерні) відстані в іонних кристалах і в ряді ковалентних структур. Іонні радіуси можна визначити, виходячи з деяких незалежно знайдених опорних радіусів (наприклад, кисню, фтору) або за відстанями від центрів іонів до мінімумів електронної густини в кристалі. Іонні радіуси збільшуються із зростанням КЧ і атомного номера іона всередині однієї підгрупи Періодичної системи, а також із зменшенням ступеня окислення атома. Для ізозарядних катіонів лантаноїдів і актиноїдів при збільшенні атомного номера іонні радіуси зменшуються (лантаноїдне та актиноїдне стиснення). Перша система іонних радіусів запропонована У.Л. Бреггом у   
1920 р., нині найбільш уживаними є іонні радіуси за Р.Д. Шенноном.

**К**

**Каркасні структури** – гетеродесмічна структура, у якій основною структурною одиницею є нескінченна тривимірна сітка (каркас) найбільш міцно пов'язаних атомів. Каркасні структури зазвичай містять позакаркасні атоми або атомні групи (перовскити CaTiO3, цеоліти), а за відсутності таких будуються з нерівноцінних хімічних зв'язків (AlPO4, звичайний лід). У рідкісних випадках каркасні структури складаються з двох і більше взаємопроникнених каркасів (Cu2O, лід-VI).

**Квазікристали** – тверді тіла (зазвичай сплави) з високою симетрією і дальнім порядком, що не мають кристалічної ґратки. Квазікристали мають високий ступінь упорядкованості з некристалографічними осями симетрії 5-го, 8-го, 10-го, 12-го й інших порядків, але не мають тривимірної періодичності. Двовимірною геометричною моделлю впорядкування атомів у квазікристалів з віссю 5-го порядку є мозаїка Пенроуза, складена з двох видів ромбів з гострими кутами в 36 і 72о (рис. 1). Квазікристали можуть розглядатись як високосиметрічні icommensurate структури, що описуються тривимірними проекціями шестимірних ґраток. Квазікристали вперше отримані в системі Al-Mn Д. Шехтманом та ін. при надшвидкому охолодженні розплавів.

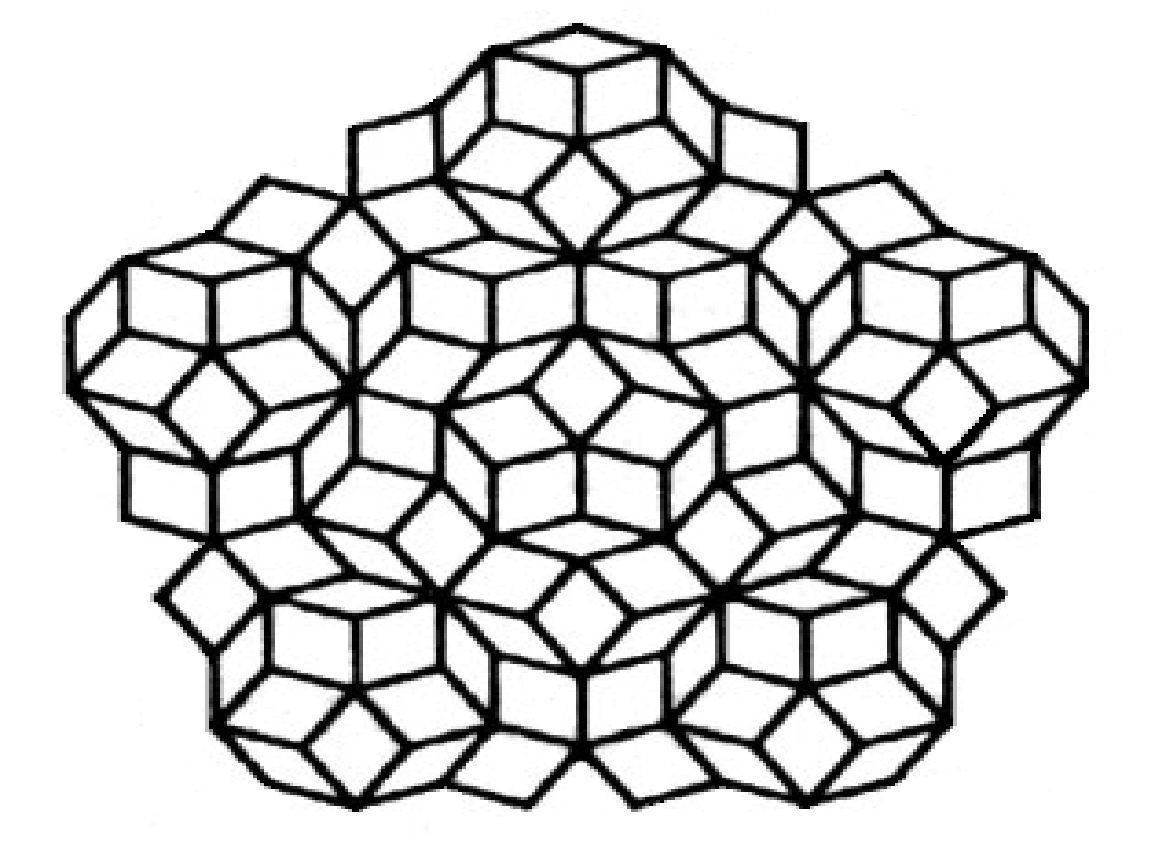


Рисунок 1. Фрагмент нескінченної двомірної сітки Пенроуза

**Ковалентний зв'язок (гомеополярний зв'язок)** – тип хімічного зв'язку між двома атомами, що виникає при усуспільненні належних їм валентних електронів. кількість усуспільнених електронних пар називають кратністю зв'язку. При створенні ковалентного зв'язку між однаковими атомами електрони, що зв'язують, рівною мірою належать обом атомам (неполярний зв'язок), якщо ж атоми різні, то електрони зв'язку зміщені в бік більш електронегативного атома (полярний зв'язок). Найважливіші властивості ковалентного зв'язку – насичуваність (існування межі кількості зв'язків) і просторова спрямованість, що визначають низькі координаційні числа (зазвичай КЧ = 1-6) у ковалентних сполуках. Ковалентний зв'язок характерний для сполук неметалів (Cl2, S8, BN, H2O, SiS2, PCl3, HNO3, органічні та інші молекули), сполук неметалів і металів з низькою електропозитивністю або з високими ступенями окислення (BeO, HgS, BiBr3, OsO4, VOCl3), а також координаційних сполук (зв'язок, близький до ковалентного зв'язку метал-ліганд називають донорно-акцепторним). У деяких сполуках (борани, π-комплекси, кластери) ковалентний зв'язок здійснюється більш ніж двома атомами (багатоцентровий зв'язок). Довжини ковалентних зв'язків лежать у межах 0,7-4,3 Å і зазвичай відповідають сумі ковалентних радіусів пов'язаних атомів. Енергії одинарних ковалентних зв'язків (кДж/моль) у молекулах такі: Cs2 (38), Cl2 (240), H2 (430).

**Ковалентні кристали** –кристали, усі атоми яких сполучені ковалентними зв'язками або побудовані з ковалентно зв’язаними структурними одиницями, зчеплених Ван-дер-Ваальсовими силами. Найбільш численну групу ковалентних кристалів складають молекулярні кристали, характерні для більшості органічних і координаційних сполук. В неорганічних ковалентних кристалах частіше зустрічаються полімерні мотиви структур: координаційні (вюрцит і сфалерит ZnS), каркасні (пірит FeS2), шаруваті (CdI2), ланцюгові (сірий селен, HgO).

**Ковалентні радіуси** – кристалохімічні радіуси атомів у сполуках неметалів (і деяких металів) з ковалентним зв'язком визначаються як половина довжини одинарного хімічного зв'язку Х-Х. Залежать від типу гібридизації, збільшуються з ростом координаційного числа атома і зменшуються при зростанні кратності зв'язку. Ковалентний радіус для подвійного зв'язку скорочується порівняно з одинарним зв'язком на 12-14%, для потрійного – на 20-22%.

**Комірка ґратки** – це паралелепіпед (паралелепіпед повторюваності), побудований на трьох обраних некомпланарних векторах ґратки (вектори комірки). Для будь-якої ґратки існує нескінченна кількість способів вибору таких паралелепіпедів, які діляться на два типи: примітивні комірки (вузли ґратки знаходяться тільки в її вершинах) і непримітивні комірки (центровані, з додатковими вузлами). Найбільш часто в якості базисних комірок ґратки вибирають примітивні комірки, побудовані на трьох найкоротших некомпланарних векторах (елементарна комірка) або комірки найменшого об’єму, що відповідають симетрії ґратки (комірки Браве).

**Комірка Браве** – комірка ґратки (паралелепіпед повторюваності), вибрана згідно з принципом, запропонованим французьким математиком Браве в 1848 р.: комірка повинна відповідати симетрії ґратки, мати максимальну кількість прямих кутів і мінімальний об’єм. Усього виділяють 14 ґраток Браве, з яких 6 є примітивними, а 8 – непримітивними (центрованими). Ребра комірки Браве зазвичай паралельні особливим напрямкам кристала; таким чином, форма такої комірки відповідає сингонії кристала (табл. 1 та 2).

Таблиця 1. Типи центрування комірок Браве

| **Тип комірки** | **Кількість вузлів у комірці** | **Координати вузлів** | **Позначення** |
| --- | --- | --- | --- |
| Примітивна | 1 | 0 0 0 | *P* |
| Базоцентрована  (бокоцентрована) | 2 | 0 0 0; 1/2 1/2 0  (0 1/2 1/2, 1/2 0 1/2) | *C*  (*A*, *B*) |
| Об’ємноцентрована | 2 | 0 0 0; 1/2 1/2 1/2 | *I* |
| Ромбоедрична | 3 | 0 0 0; 1/3 2/3 2/3;  2/3 1/3 1/3 | *R* |
| Гранецентрована | 4 | 0 0 0; 0 1/2 1/2;  1/2 0 1/2; 1/2 1/2 0 | *F* |

Таблиця 2. Розподілення комірок Браве за сингоніями

| Сингонія | **Осі симетрії** | **Комірки Браве** | **Параметри комірки** |
| --- | --- | --- | --- |
| Триклінна (*a*) | Вісь 1-го порядку | *P* | *a* ≠ *b* ≠ *c,* α ≠ β ≠ γ |
| Моноклінна (*m*) | Подвійна вісь ⊥ *b* | *P*, *C* | *a* ≠ *b*≠ *c,* α = γ = 90o ≠ β |
| Ромбічна (*o*) | Три ⊥ подвійні осі || *a*, *b*, *c* | *P*, *I*, *C* (*A*), *F* | *a* ≠ *b* ≠ *c,* α = β = γ = 90o |
| Тетрагональна (*t*) | Четвертинна вісь || *с* | *P*, *I* | *a = b* ≠ *c,* α = β = γ = 90o |
| Гексагональна (*h*)  Тригональна  (Ромбоедрична) | Шестинна вісь || *с*  Потрійна вісь || *c* | *P*  *P*, *R*  (*R*) | *a = b* ≠ *c,*  α = β = 90o, γ = 120o  (*a = b = c,* α = β = γ ≠ 90o) |
| Кубічна (*c*) | 4 потрійні осі вздовж об’ємних діагоналей куба | *P*, *I*, *F* | *a = b = c,* α = β = γ = 90o |

**Координаційне число (КЧ)** – число найближчих до цього певного атома сусідніх атомів (лігандів) у кристалічній структурі або молекулі, зазвичай пов'язаних з ним хімічними зв'язками. Сукупність таких сусідів утворює першу координаційну сферу. Значення КЧ може коливатися в інтервалі від 1 до 18 (іноді й більше). Низькі КЧ (зазвичай 1-6) характерні для молекул і ковалентних кристалів, в іонних кристалах, кристалах інертних газів, металах і інтерметалідах найбільш часто трапляються КЧ = 6, 8, 12 і 14. Поняття середнього координаційного числа (воно може бути нецілочисельне) використовується при описі структур рідин і аморфних тіл.

**Кристал** – тверде тіло, що відрізняється наявністю як ближнього, так і дальнього порядку (див. ближній і дальній порядок). Кристали – рівноважна форма твердого стану речовини. Для кристалів характерні анізотропія властивостей і здатність самоогрануватись при своєму утворенні, яке є вираженням його регулярної кристалічної структури, побудованої на основі кристалічної ґратки і кристалографічної симетрії.

**Кристаліти** – дрібні монокристалічні зерна (зазвичай розмірами 10-6 -10-2 мм), що складають металеві злитки, гірські породи, мінерали, полікристали.

**Кристалічна ґратка** – тривимірно-періодичне просторове розташування матеріальних частинок (атомів, іонів, молекул), що складають кристал. Формально-математичним виразом кристалічної ґратки є ґратка кристала.

**Кристалічна структура** – конкретне просторове розташування атомів у кристалі. Як правило, це розташування усереднено за часом і простором і відповідає середньостатистичним максимумам електронної або ядерної густини кристала. Ідеалізована математична форма розташування атомів у кристалі, описана набором атомних позицій у рамках кристалічної ґратки і однією з 230 просторових груп симетрії, відповідає ідеальній структурі. Розрізняють повністю впорядковані структури, у яких кожна позиція атома решти заселена атомами одного сорту, і розпорядковані структури, де наявні атомні позиції, які не повністю заселені односортними атомами. Різні аспекти кристалічної структури розглядають у рамках різних моделей структури. Локальні особливості мікроструктури кристала відповідають реальній структурі. Експериментально кристалічну структуру визначають методами структурного аналізу.

**Кристалографічна група симетрії** – група симетрії, сумісна з симетрією кристалічної ґратки. У відповідності з цим у кристалографічній групі можуть бути наявними осі симетрії тільки 1-го, 2-го, 3-го, 4-го та 6-го порядків. Кристалографічні групи діляться на точкові (групи симетрії зовнішньої форми кристалів, кристалографічні класи) і просторові групи симетрії.

**Кристалографічна площина** – площина у кристалі, яка паралельна до однієї з вузлових сіток, тому має тотожні цій сітці (вузловій площині) індекси Міллера.

**Кристалографічна симетрія** – симетрія, яка характерна для кристалів, тобто задовольняє вимоги кристалічної ґратки. Відповідно до цього до кристалографічних елементів симетрії відносяться центр інверсії, осі симетрії 2-го, 3-го, 4-го та 6-го порядків і площини симетрії. Кристалографічними групами симетрії є 32 кристалографічних класи і 230 просторових груп симетрії.

**Кристалографічні індекси** – трійки цілих чисел, що визначають положення вузлів, вузлових рядів (прямих, напрямів) і вузлових сіток (площин) кристалічної ґратки щодо осей кристалографічної координатної системи. Для гексагональної і тригональній сингонії іноді символи вузлів, напрямків та площин записують чотирма індексами (сума перших трьох індексів при цьому дорівнює нулю), що відповідає чотирьохосній системі координат з 3 еквівалентними і розташованими під кутом 120о одна до одної осями в базисній площині.

**Кристалографія** – наука про кристали, їх утворення, морфологію, будову, симетрію та фізико-хімічні властивості. Кристалографія виконує такі завдання: 1) дослідження геометрії зовнішньої форми і внутрішньої будови кристалів; 2) вивчення процесів зародження, зростання, розчинення і дефектоутворення в кристалах і їх вирощування для практичних цілей; 3) експериментальне визначення внутрішньої будови кристалів; 4) вивчення взаємозв'язків між геометрією зовнішньої форми кристалів, їхньої внутрішньої будови і симетрії з фізичними властивостями кристалів.

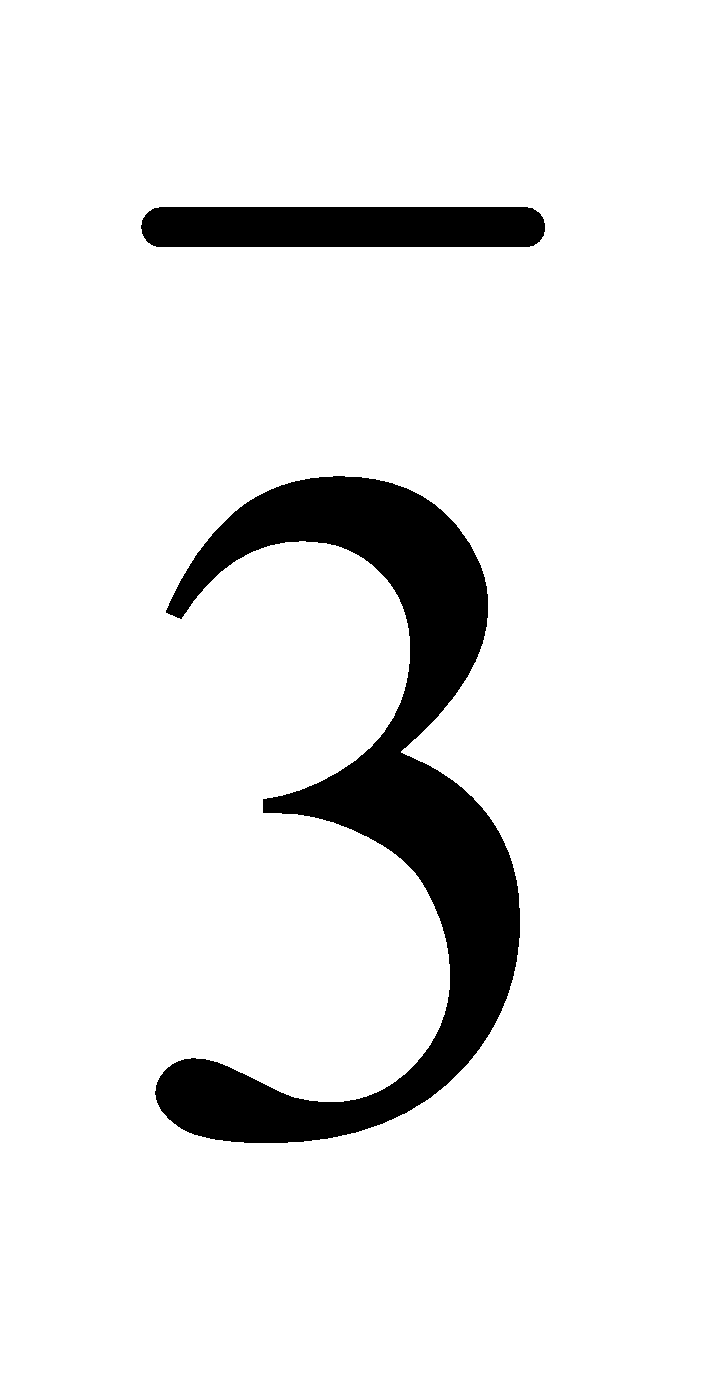
**Кристалофізика** – наука, яка є розділом кристалографії і вивчає взаємозв'язки геометрії зовнішньої форми кристалів, їхньої внутрішньої будови, анізотропії і кристалографічної симетрії з фізичними властивостями кристалів. Кристалофізика вивчає також зміни властивостей кристалів при зміні їх симетрії, структури та термодинамічних умов (у тому числі при фазових переходах), досліджує дефекти кристалів та їхній вплив на властивості, бере участь у пошуку нових кристалічних матеріалів. За своїм завданням кристалофізика примикає до фізики твердого тіла і кристалохімії. Народження кристалофізики датується 1669 р., коли датський учений Е. Бартолін відкрив двопроменеве заломлення в кальциті CaCO3.

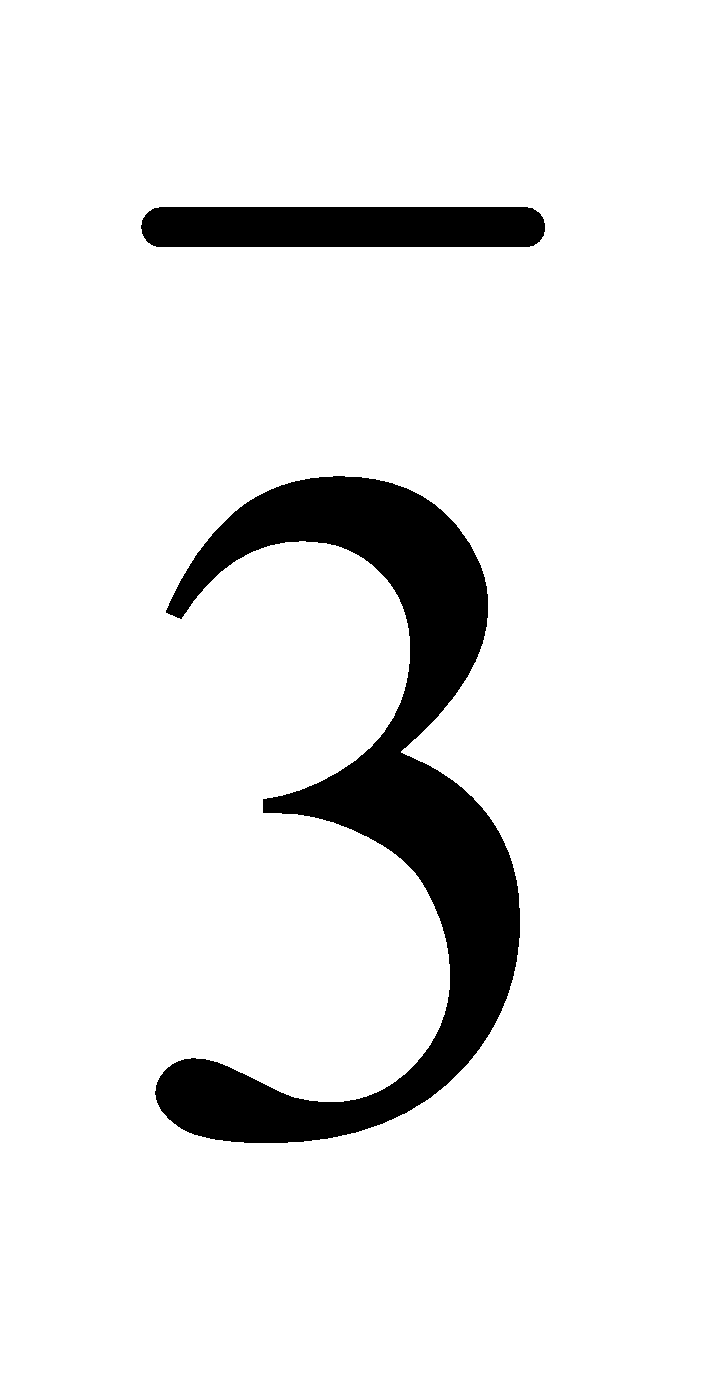
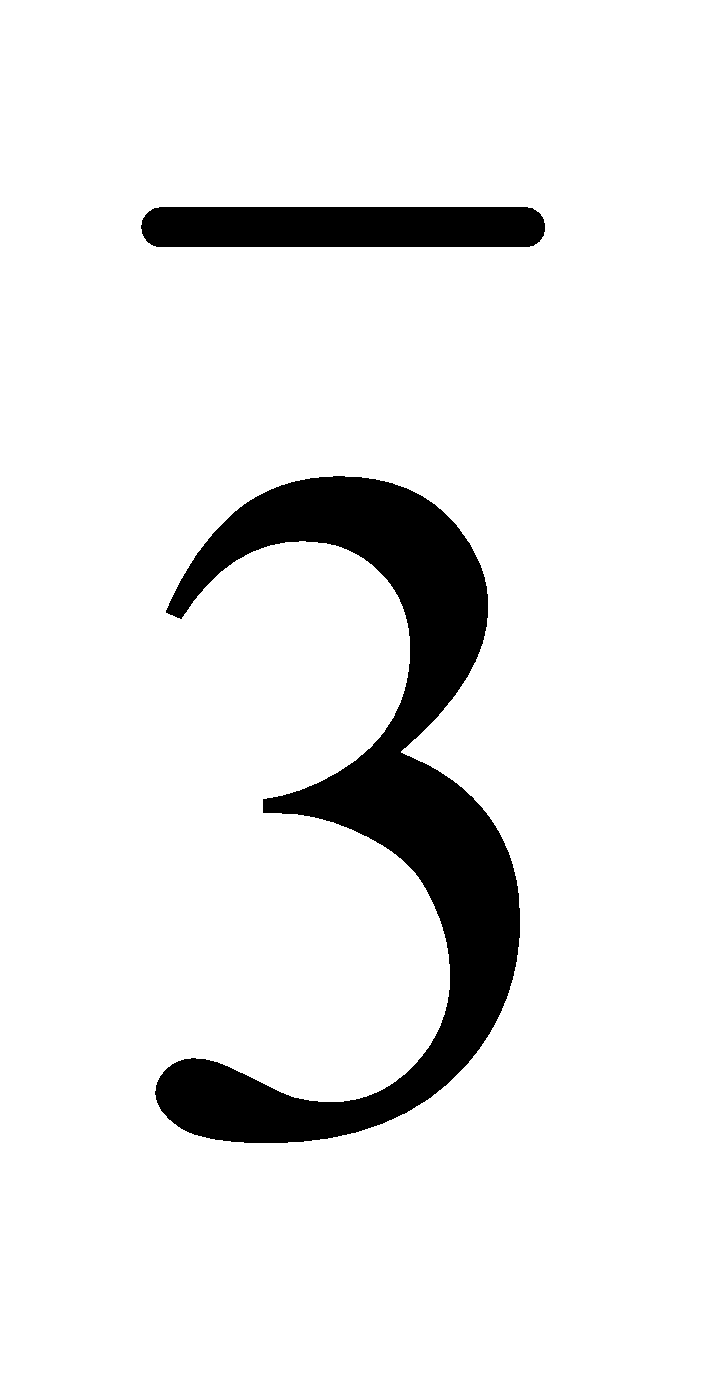
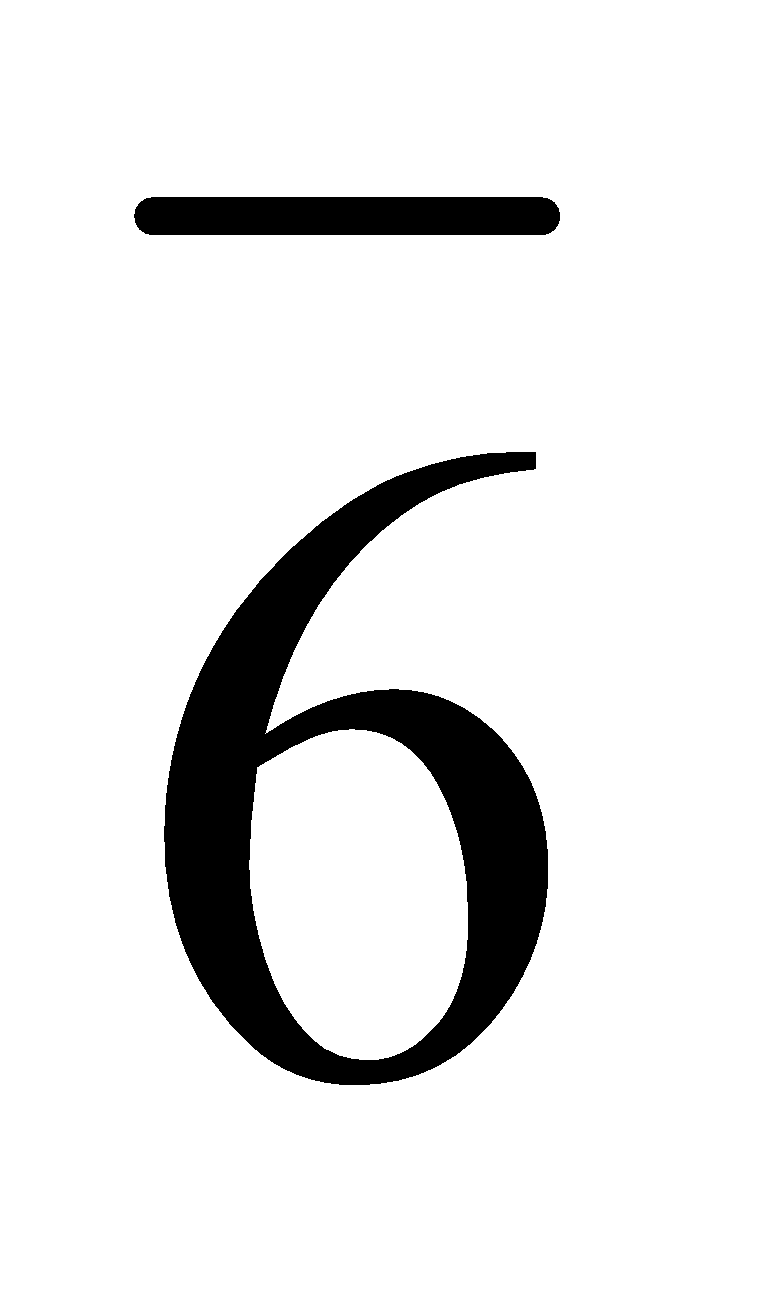
**Кристалохімічна (структурна) формула** – запис хімічної формули кристалічної сполуки, у якій відображені її структурні особливості. Єдині форми запису ще не вироблені, але найчастіше вказують: 1) координацію або КЧ (у вигляді верхнього індексу в квадратних дужках або без них); 2) структурні одиниці кристала (зазвичай у квадратних дужках) та їхню розмірність (нижніми або верхніми індексами 1∞, 2∞ і 3∞ для ланцюгових, шаруватих і каркасних мотивів відповідно); 3) зміст атомних позицій (відзначають види та/або частки кожного сорту атомів у круглих дужках, вакансії позначають символом 􀀀); 4) ступінь поділених вершин координаційного поліедра з іншими КП (зазвичай наявна в стехіометричному індексі, вираженому дробом КЧ / ступінь поділених КП). Приклади: сульфат барію Ba[12] S[4] O4[S+3Ba], перовскит CaXII [TiVIO3]3∞, хлорид натрію Na 6/ 6Cl6/6.

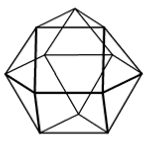
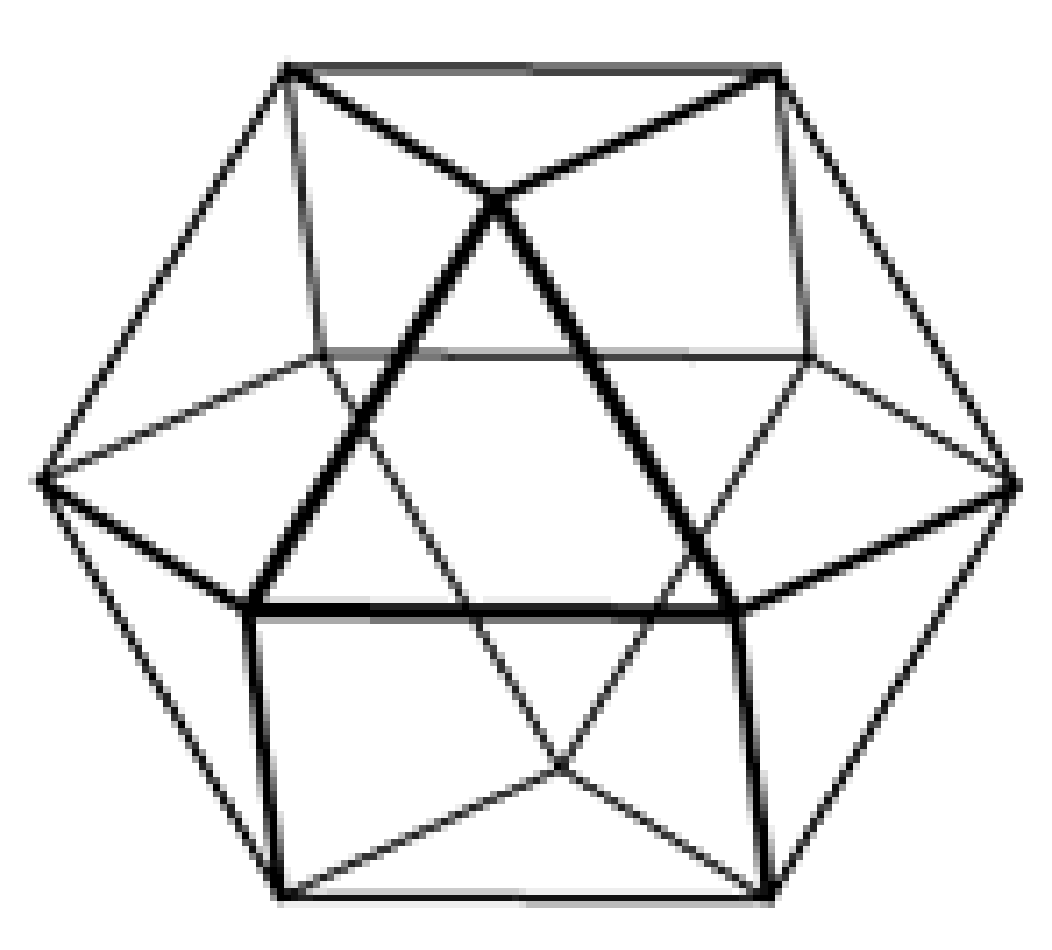
**Кристалохімічні радіуси** –розмірні характеристики атомів (їх величини порядку 1 Å), засновані на уявленні про атоми як дотичних кулях та ті, що дозволяють наближено оцінювати міжатомні (між'ядерні) відстані в молекулах і кристалах. Звичайно приймається, що відстань між пов'язаними атомами А і В не залежить від найближчого оточення та складу речовини і дорівнює сумі кристалохімічних радіусів цих атомів (адитивність радіусів), що становлять собою жорсткі «сфери дії», які стосуються сил зв'язку для цих певних КЧ і порядку зв'язку. Кристалохімічні радіуси можуть залежати від координаційного числа, валентного стану атомів і порядку зв'язку. Залежно від того, які сили діють між атомами А і В (див. хімічний зв'язок), розрізняють: атомні радіуси, металеві радіуси, іонні радіуси, ковалентні радіуси, Ван-дер-Ваальсові радіуси.

**Кристалохімічний аналіз** –розгляд і порівняння (в основному геометричне) кристалічних структур з метою виявлення закономірностей в розташуванні атомів і структурних одиниць і взаємозв'язків будови кристалу зі складом і властивостями. При аналізі зазвичай виділяють два рівні: стереохімічний аспект і кристалоструктурний аспект.

**Кристалохімія** –наука, що віділилась від кристалографії після відкриття рентгеноструктурного аналізу в 1912 р. і вивчає закономірності просторового розташування та хімічної взаємодії атомів у кристалах, взаємозв'язку їхнього складу і властивостей з будовою. Кристалохімія виконує такі завдання: 1)встановлення атомної будови кристалів, опис типів хімічного зв'язку в них, систематика структур; 2) з'ясування причин стійкості структур, законів і правил їх утворення залежно від природи складових кристалічних частинок; 3) вивчення закономірних зв'язків між фізико-хімічними властивостями кристалів, їхньою будовою і характером хімічного зв'язку; 4) моделювання і прогнозування структур, використання кристалохімічної інформації для спрямованого синтезу нових речовин і матеріалів. Теоретична база кристалохімії – кристалічна ґратка, просторові групи симетрії, термодинаміка і теорія хімічного зв'язку, експериментальна - дифракційні методи (головним чином рентгеноструктурний аналіз). У кристалохімії найбільш широко використовується геометричний підхід (див. кристалохімічні радіуси), деякі найбільш прості структури вдається прогнозувати шляхом мінімізації потенційної або вільної енергії ґратки.

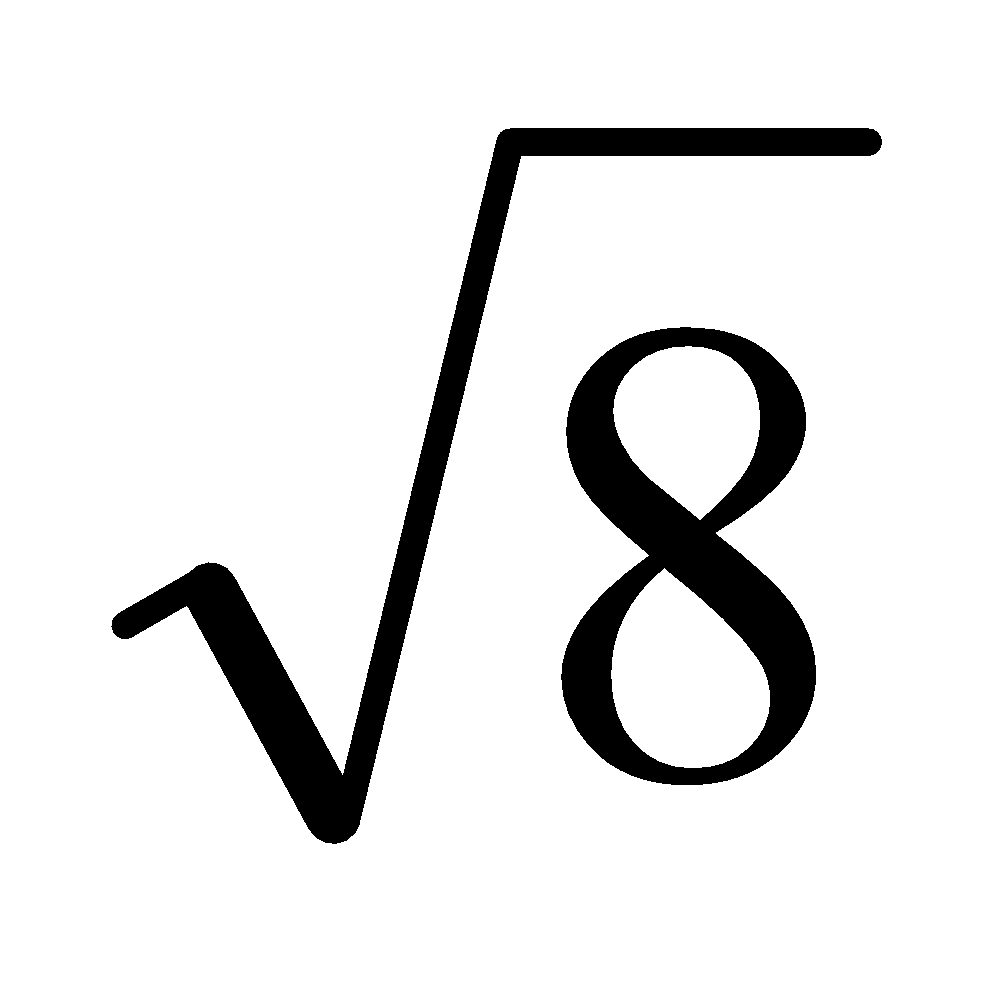
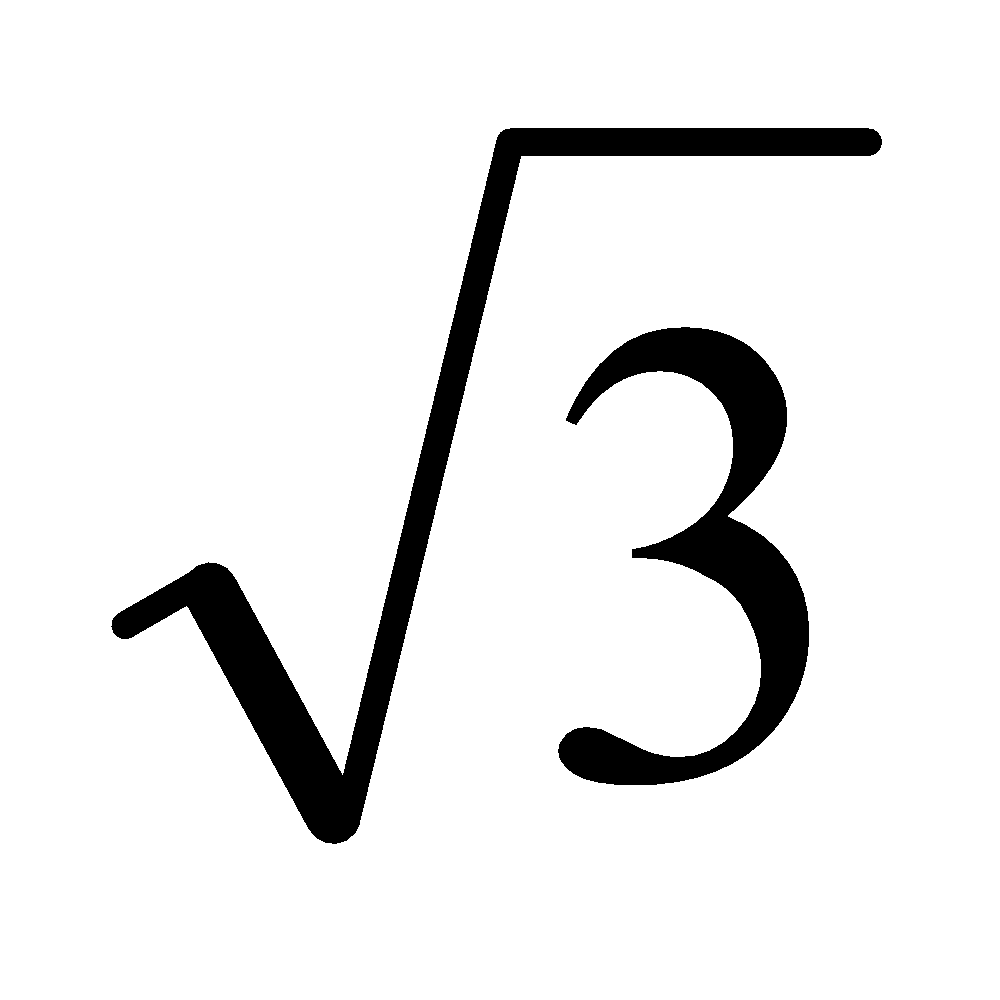
**Кубічна найщільніша упаковка (КНУ)** – кубооктаедрична тришарова найщільніша упаковка шарів, яка є єдиною НКУ з кубічною симетрією. КНУ побудована із гексагональних щільнозапакованих шарів так, що перший шар (А) входить у половину лунок другого шару (В), третій шар (С) потрапляє у другу половину лунок шару В, а третій шар повторює перший. Таким чином укладання шарів КНУ становить собою послідовність символів АВСАВС… КНУ описується ПГ F**m, параметр комірки зв’язаний співвідношенням а = 21/2rш , на комірку припадає чотири шарувпакування. Коефіцієнт впакування КНУ становить π/3\*21/2 ≈ 0,7405. Координаційний поліедр КНУ – архимедів кубооктаедр. У КНУ є два типи пустот: оточені 4 кулями (тетраедричні) й 6 кулями (октаедричні); їхні радіуси складають 0,225 та 0,414 від радіуса основної кулі відповідно. На одну кулю КНУ припадає дві Т-пустоти та одна О-пустота. Мотив КНУ мають кристали інертних газів, Cu, Al, Pb та багатьох інших металів.

**Кубооктаедр:** 1) один з напівправильних багатогранників (архімедів кубооктаедр), що є комбінацією куба і октаедра, і має 8 правильних трикутних і 6 квадратних граней, 24 ребра і 12 вершин (рис. 2а). Симетрія кубооктаедра Oh (m **mh). Симетрія кубооктаедра Oh (m **m). Кубооктаедр – КП кубічної щільної упаковки. 2) похідний від попереднього багатогранника поліедр з тією ж кількістю граней, ребер і вершин – гексагональний кубооктаедр (симетрія D3h =** m2), що відрізняється від першого поворотом навколо потрійної осі на 600 верхньої половини поліедра щодо нижньої (рис. 2 б). Гексагональний кубооктаедр (антикубооктаедр) – КП гексагональної ретельної упаковки. 3) іноді вживана назва одного з напівправильних багатогранників Архімеда – усіченого октаедра (кубооктаедра Кельвіна або федорівського кубооктаедра).



а б

Рисунок 2. Кубооктаедри: а – амрхімедів кубооктаедр; б – гексагональний

**Кульові упаковки** (кульові кладки) – розташування куль у просторі, при якого кожна куля торкається принаймні чотирьох інших куль. Найбільш важливими є упаковки рівновеликих куль. Серед них розрізняють нещільні (кількість сусідів менше 6), щільні упаковки (кількість сусідів 6-11) і найщільніші упаковки (кількість сусідів дорівнює 12). Найбільше значення в кристалохімії мають об’ємноцентрована кубічна упаковка (ОЦК) з КЧ = 8 + 6 і щільністю упаковки π/ ≈ 0,6802 та НКУ з максимально можливою щільністю π/ ≈ 0,7405. Щільні упаковки рівних і нерівновеликих куль найбільш часто трапляються в структурах металів та інтерметалідів. Багато інших структур, які складаються з приблизно сферичних структурних одиниць (атомів, іонів, молекул, комплексів), можуть бути описані в термінах кульових упаковок (див. найщільніші упаковки).

**Л**

**Ланцюгова структура** – гетеродесмічна структура, у якій основними структурними одиницями є полімерні ланцюги (стрічки, волокна) з найбільш міцно зв'язаних атомів. Приклади: сірий селен (гвинтові ланцюги Se-Se), поліетилен, піроксен MgSiO3, (ланцюги із з'єднаних вершинами SiO4-тетраедрів), PdCl2 (PdCl4-квадрати, пов'язані в стрічки по протилежних сторонах).

**Лауеграма** – рентгенограма (зазвичай на фотоплівці), отримана з нерухомого кристала при проходженні через нього поліхроматичного рентгенівського випромінювання. Назва дана на честь М. фон Лауе, який запропонував такий спосіб реєстрації розсіяного рентгенівського випромінювання від кристала, що призвело до відкриття дифракції рентгенівських променів кристалами на прикладі CuSO4 · 5H2O.

**М**

**Металевий зв'язок** – тип хімічного зв'язку в металах, сплавах, інтерметалідах і споріднених сполуках, зумовлений делокалізацією частини валентних електронів атомів металу (електронів провідності) по всьому об'єму кристала. Металевий зв'язок має багатоцентровий характер, просторово не спрямований (сферично симетричний) і не може бути насичений, що призводить до прагнення кожного атома металу оточити себе максимальною кількістю інших атомів. Структури речовин з металевим зв'язком звичайно побудовані з мотивацію щільних кульових упаковок атомів металу з високими КЧ = 6-24. Довжини зв'язків у металах лежать у межах 2,3-5,4 Å і зазвичай відповідають сумі металевих радіусів сусідніх атомів. Енергія ґратки металів – десятки кДж/ моль (для Cu, Mg і Li - 42, 84 і 160 кДж/моль відповідно).

**Металеві радіуси** – кристалохімічні радіуси атомів у металах, сплавах і інтерметалідах. Вважаються рівними половині найкоротшої відстані між атомами у відповідному металі, залежать від КЧ атома в структурі (стандартним вважається КЧ = 12). Якщо прийняти металевий радіус для КЧ = 12 за одиницю, то для КЧ = 8, 6 і 4 відповідні радіуси складуть 0,98, 0,96 і 0,88.

**Метод обертання** – один з експериментальних методів спостереження дифракції рентгенівського випромінювання в кристалі. Рентгенограма реєструється від монокристала, що обертається (качається), який опромінюється монохроматичним випромінюванням. Є основним методом відбору даних для рентгеноструктурного аналізу з метою визначення координат атомів у кристалічній структурі.

**Метод Дебая-Шеррера (метод порошку)** – метод дослідження полікристалів (порошків) за допомогою дифракції рентгенівського випромінювання. Запропонований голландським фізиком П. Дебаєм та швейцарським фізиком П. Шеррером у1916 р. Згідно з методом, тонкий пучок монохроматичного випромінювання, діфрагуючи на зразку, розсіюється ним по утворювальних співвісних конусах під кутом 2θ, що дозволяє використати формулу Брегга-Вульфа, оскільки у відбивальному положенні одночасно перебувають багато кристалітів, довільно орієнтованих навколо первинного пучка. Для того, щоб всі кристаліти потрапили у відбивальне становище, зразок рівномірно обертають перпендикулярно первинному пучку. Розсіяне випромінювання реєструють на фотоплівці (дебаєграмі) або на рентгенівському дифрактометрі у вигляді дифрактограми. Метод Дебая-Шеррера використовують для рентгенофазового аналізу, визначення параметрів ґратки, недосконалостей і розмірів кристалітів, аналізу текстури, вивчення фазових діаграм, поліморфних перетворень, термічного розширення, визначення кристалічної структури та інших цілей.

**Метод Лауе** – метод дослідження дифракції рентгенівського випромінювання на кристалах, при якому тонкий рентгенівський пучок білого випромінювання проходить крізь нерухомий кристал, а розсіяне випромінювання реєструється на фотоплівку або детектором. Метод Лауе використовується для кристалографічної орієнтації кристалів, визначення їх ТГС та внутрішньої доскональності, дослідження реальної структури кристалів. Цей метод використовується також при дослідженні процесів старіння й розпаду в метастабільних фазах, перебудови кристалічної структури під дією температури, опромінення нейтронами, γ – випромінюванням, а також непружних процесів розсіювання рентгенівського випромінювання та інших завдань.

**Моноклінна сингонія (моноклінна система)** – кристалографічний тип кристала (структури), що характеризується наявністю одного особливого напрямку, уздовж якого проходить вісь симетрії другого порядку та/або якій перпендикулярна площина симетрії. Подвійну вісь або нормаль до площини симетрії направляють або вздовж осі b (мінералогічна установка), або вздовж осі с (раціональна установка). Кристали, що належать до моноклінної сингонії, мають примітивну або базоцентровану (бокоцентровану) комірку Браве з параметрами в мінералогічній установці a ≠ b ≠ c, α = γ = 90o ≠ β (кут β називають моноклінним кутом) і відносяться до 3 ТГС (2, m, 2/m) і 13 ПГ.

**Монокристал** – великий (10-2-103 мм) і зазвичай досить добре огранений окремий кристал з однорідною і регулярною внутрішньою структурою. За ступенем досконалості реальні монокристали підрозділяють на немозаїчні (мають практично ідеальну структуру) і кристали з мозаїчною структурою. Монокристали найчастіше отримують рекристалізацією полікристалів, осадженням з газової фази, а також спонтанною (дрібні) або спрямованою (великі) кристалізацією розчинів або розплавів.

**Морфотропія** – закономірно зумовлена різка зміна кристалічної структури при поступовій зміні складу. Зазвичай морфотропію пов'язують із структурними змінами в ряді ізоформульних сполук (морфотропному ряді) або твердих розчинів. Наприклад, у ряді хлоридів лужних металів MCl (M = Li, Na, K, Rb, Cs) перехід від RbCl до CsCl супроводжується зміною СТ NaCl (КЧ = 6) на CsCl (КЧ = 8). Морфотропний перехід може відбуватись і без зміни складу, у якоїсь однієї сполуки, що існує в двох структурних формах (автоморфотропія). Так, у ряді карбонатів MCO3 (M = Mg, Ca, Sr, Ba) збільшення іонного радіусу M2 + призводить до зміни СТ кальциту з КЧ (M2+) = 6 на СТ арагоніту з КЧ (M2+) = 9, що відбувається у CaCO3, який кристалізується в обох формах. Поняття морфотропії введено німецьким ученим П. Гротом в 1870 р.

**Мотив структури** – загальна організація кристалічної структури, обумовлена конфігурацією структурних одиниць кристала і їх взаємним розташуванням. Виділяють п'ять основних типів структурних мотивів: 1) з нескінченною сіткою практично однакових зв'язків (координаційні структури); 2) з окремими кінцевими угрупованнями – молекулами, іонами, комплексами та ін. (острівні структури); 3) з полімерними ланцюгами або стрічками (ланцюгові структури); 4) з нескінченними шарами (шаруваті структури); 5) з нескінченною тривимірної сіткою зв'язків частини атомів структури (каркасні структури). Можливі також проміжні та гібридні мотиви з нечітко вираженими або різними за складом, формою і протяжністю структурними одиницями (змішаношарові, стрічково-ланцюгові, ланцюгово-острівні та ін.), Найбільш відомі серед силікатів.

**Н**

**Найщільніші упаковки:** 1) найщільніше (з максимальною щільністю) розташування тіл у просторі, при яких кожне тіло торкається найближчих сусідів. 2) розташування рівних куль у просторі (кульові упаковки), при яких кожна куля торкається 12 сусідніх куль. За типом КП кожної кулі розрізняють ікосаедричні (всі вони некристалографічні) і кубооктаедричні кульові упаковки. 3) найбільш часто під найщільнішою упаковкою розуміється одна з кубооктаедричних кульових упаковок (ККУ). Всі вони побудовані з гексагональних щільно упакованих шарів, в яких кожна куля оточена шістьма іншими з утворенням поглиблень (лунок) між трьома сусідніми кулями. Шари ККУ накладаються один на одний, заповнюючи тільки половину лунок сусіднього шару (рис. 3), що створює умови для альтернативних способів укладання шарів і утворення багатошарових ККУ. Кількість шарів, що припадає на період ККУ, перпендикулярний шару, називають «шаровістю» упаковки. Для шаровості n = 2, 3, 4, 5 ККУ єдині, для n = 6, 7, 8, 9, 10 – є 2, 3, 6, 7, 16 варіантів відповідно, і їхня кількість далі різко зростає.

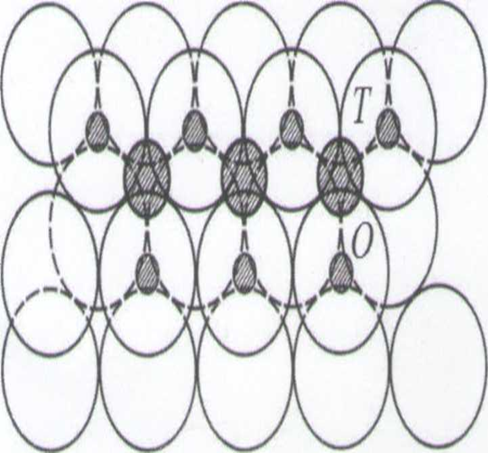


Рисунок 3. Накладання двох шарів найщільнішої упаковки з утворенням тетраедричних (Т) і октаедричних *(О)* порожнеч.

**Нано**: 1) Префікс у системі СІ, який означає множник 10-9, позначається українською літерою (н) або латинською (n). 2) Складник назв, які мають відношення до речовин або явищ міжатомних масштабів (наноматеріали, нанотехнології).

**Нанокристал** – окремий кристал, який має розміри не більше 100 нм.

**Нейтронографія** – один з дифракційних методів дослідження будови речовини, що дозволяє отримувати відомості про атомну і магнітну структуру кристалів за допомогою розсіювання (дифракції) теплових нейтронів на ядрах і магнітних моментах атомів. Нейтронографія поступається рентгеноструктурному аналізу за доступністю, вартістю, роздільною здатністю, вимагає великих розмірів зразка (більш 1 мм) у силу меншої інтенсивності випромінювання. У той же час мале поглинання нейтронів, відсутність систематичної залежності розсіювання від атомного номера дають можливість більш надійного визначення положень атомів з близькими атомними номерами і легких атомів при наявності важких. Магнітна нейтронографія дозволяє вивчати розташування магнітних моментів атомів у кристалічній структурі (магнітну структуру), величини магнітних моментів, характер магнітних фазових переходів, розподіл спінової густини і тощо.

**Недосконалий ізоморфізм** – здатність речовин утворювати обмежені тверді речовини. На відміну від досконалого ізоморфізму (нескінченного змішання), тут не обов’язкова вимога ізоструктурності: обмежені тверді розчини можуть утворювати не тільки ізоструктурні (NaI – KOH), а і різні за структурою речовини (ізоморфізм): як гомеотипні (KF – KOH), так й гетеротипні (CsBr – KBr або навіть LiCl – MgCl2). Однак різниця між недосконалим та досконалим ізоморфізмом не абсолютна: наприклад, при кімнатній температурі NaCl та KCl майже не розчинні один в одному, а при температурі вище за 500о С вони утворюють неперервні тверді розчини.

**Нестехіометричні сполуки** – тверді фази змінного складу (тверді розчини), які утворюються в дво-, три- і багатокомпонентних системах, і відрізняються від компонентів за складом (інтервалом області гомогенності) та структурою. Такі фази, за Н.С. Курнаковим, можна розділити на два типи: 1) дальтоніди, які характеризуються наявністю максимуму на діаграмі склад-властивість в точці раціонального складу в межах їх інтервалу гомогенності; 2) бертоліди, в інтервалі гомогенності яких раціональна точка максимуму властивостей відсутня. За Г.Б. Бокієм, у бертолідах у всьому інтервалі складів є або дефектні позиції, або позиції, заповнені ізоморфною сумішшю атомів-компонентів, у той час як в дальтонідах при досягненні точки раціонального складу такі позиції повністю звільняються або без залишку заселяються одним сортом атомів (з повним або частковим упорядкуванням структури). У деяких випадках (наприклад, при зміні складу, температури або тиску) можна спостерігати перехід від бертолідних до дальтонідних фаз. Фази, в межах області гомогенності яких такий перехід відбувається безперервно, називають фазами Курнакова. Так, в системі Fe-Ni-Sb при 600оС у фази зі структурою NiAs спостерігається ступеневий перехід від дальтонідів NixSb1-x (48-53 ат.% Sb) до бертолідів типу впровадження FexSb1-x (43-46 ат.% Sb), β-латунь (фаза типу заміщення зі СТ α-Fe в системі Cu-Zn при 40-45 ат.% Cu) при підвищенні температури розширює свою область гомогенності до стехіометрії 1: 1 (40-52 ат.% Cu при 1000оС), а вюстит Fe1-xO (0,05 ≤ x ≤ 0,15) під тиском можна отримати стехіометричним.

**О**

**Об'ємноцентрована ґратка** – ґратка Браве, коміркою Браве якої є об'ємноцентрована комірка.

**Об'ємноцентрована комірка** – не примітивна комірка з двома вузлами ґратки, у центрі якої знаходиться додатковий вузол ґратки. Об'ємноцентрована комірка Браве позначається символом **I**.

**Операція симетрії** – відображення геометричної фігури самої в себе при деякому ізометричному перетворенні простору. Будь-яку операцію симетрії можна представити як лінійне перетворення координат точки, що перейшло в нове, симетрично еквівалентне вихідному положенню: r '= r0 + Ur, де r0 – постійний для цього перетворення вектор, r і r' – вихідний і перетворений радіус-вектори відповідно, U – фіксована для цієї операції симетрії ортогональна матриця, для якої detU = ± 1. Залежно від знака цього детермінанта розрізняють: 1) операції симетрії I роду (detU = 1), які пов'язують конгруентні фігури, 2) операції симетрії II роду (detU = -1), які пов'язують енантіоморфні фігури. Показник ступеня n в рівнянні Un = E (E – одинична матриця) називають порядком операції симетрії. Якщо операція симетрії залишає нерухомою хоча б одну точку симетричною фігури, то її називають закритою операцією симетрії, в іншому випадку це відкрита операція симетрії. Відкриті операції симетрії характерні тільки для нескінченних фігур.

**Оптична вісь кристала** – напрямок у кристалі, вздовж якого не відбувається двопроменеве заломлення світла. Кристали можуть бути не двозаломлювальними (кубічна сингонія) або мати одну (тетрагональна, тригональна і гексагональна сингонія) або дві (триклінна, моноклінна і ромбічна сингонії) оптичних осі.

**Основний закон кристалохімії** – узагальнення результатів початкового етапу розвитку кристалохімії (в основному неорганічної), сформульоване норвезьким ученим В.М. Гольдшмідтом у 1926 р.: структура кристала визначається кількістю його структурних одиниць, співвідношенням їхніх розмірів і їхніми поляризаційними властивостями. У цей час у зв'язку з подальшим розвитком хімії та кристалохімії цей закон може бути сформульований у такому вигляді: структура та фізичні властивості кристала визначаються енергією взаємодії атомів (їхніх груп, молекул), що залежить від кількості структурних одиниць, їхніх розмірів і електронної будови їхніх валентних оболонок.

**Острівна структура** – це гетеродесмічна структура, у якій структурними одиницями є окремі атоми (іони) та/або кінцеві угруповання (молекули, складні іони, комплекси) з найбільш міцно пов'язаних атомів. Приклади: ромбічна сірка (з молекулами S8), нафталін С10Н8, ангідрит СаS04, сіль Магнуса [Рt (NH3)4] [РtС14].

**П**

**Параметри комірки** – скалярні величини, що визначають розміри і форму комірки ґратки, величини (модулі) некомпланарних векторів ґратки (осередки) а, b, с і кути між їх напрямками а = аrссоs (bc), b = аrссоs (ас), g = аrссоs (ас).

**Площина дзеркального відображення (дзеркальна площина)** – закритий елемент симетрії – площина, щодо якої відбувається відображення точки. Позначається за Германом-Могеном ***m*** і за Шенфлісу ***s***. Еквівалентна перпендикулярній до неї дзеркально-поворотній осі першого порядку S1 і інверсійно-поворотній осі другого порядку.

**Площина симетрії** –eлемент симетрії, для якого операцією симетрії є відображення точки відносно деякої площини (площина дзеркального відображення) або таке ж відображення, доповнене перенесенням відображеної точки на величину, рівну половині однієї з трансляцій, паралельних площині, що відображається (площина ковзального відображення). Часто площина симетрії – синонім площини дзеркального відображення.

**Полікристал** – компактний агрегат з безлічі дрібних монокристалічних зерен (кристалітів) розмірами 10-6-10-2 мм, зчеплених міжатомними або міжмолекулярними силами і зазвичай довільно орієнтованих один до одного. У ряді випадків може виникати переважаюча взаємна орієнтація кристалітів (текстура), найчастіше пов'язана з їхньою різко анізотропною формою. Для полікристалів (але не текстур) зазвичай характерна ізотропія їхніх властивостей. Полікристали (порошки) – звичайний продукт хімічного синтезу (спонтанної кристалізації), фазових перетворень, рекристалізації, а також механічних, термічних та інших перетворень великих кристалів.

**Поліморфізм** – здатність твердих речовин і рідких кристалів існувати в декількох формах (поліморфних модифікаціях), відмінних за своєю будовою (структурним типом). Поліморфізм простих речовин називають також алотропією. Зазвичай різні поліморфні модифікації стабільні в певних інтервалах температур і тисків та пов'язані між собою поліморфними перетвореннями, однак деякі з них можна перевести в метастабільний стан, наприклад, різким зниженням температури (загартування). Деякі метастабільні модифікації (алмаз, арагоніт CaCO3) можуть існувати при звичайних умовах необмежено довго. Відмінності між структурами різних поліморфних форм коливаються від незначних (невеликі зрушення атомів або повороти іонів чи молекул) до істотних (зміна координаційного числа і мотиву структури). Різновидом поліморфізму, пов'язаного з утворенням сімейств разом споріднених структур, що відрізняються укладенням плоских шарів, вважають також політипію. Приклади поліморфізму: С (алмаз, графіт, карбін, фулерен та ін. форми), SiO2 (кварц, тридиміт, кристобаліт, стишовіт та ін.), політипні модифікації карборунда SiC. Поліморфізм відкритий німецьким хіміком і кристалографом Е. Митчерлихом, який вивчив поліморфізм у Na3PO4, CaCO3, сірки та інших речовинах

**Політип** –шарова поліморфна модифікація простої чи складної речовини, що відрізняється від інших модифікацій чергуванням, зсувом або поворотом однакових шарів чи ланцюжків (модулів). Політипи можна вважати спорідненими фрагментованими структурами з різним укладанням модулів, які виділяються як в шарових, так і в каркасних (координаційних) структурах. Політипні форми мають рівні параметри ґраток у межах шару і різні – перпендикулярно шару, які пропорційні кількості шарів у періоді. Численні політипи відомі для SiC, ZnC, CdI2, С (графіту), MoS2, слюда та ін. шарові й щільноупаковані структури. Політипи характеризують цифрою, що вказує число шарів у комірці та буквою, що позначає тип комірки (позначення Рамсдела): наприклад, 4*Н,* 3*С*, 9*R* де *Н*, *С*, *R* – примітивна гексагональна, кубічна і ромбоедрична комірка відповідно. У цих позначеннях структури типу ГНУ і КНУ будуть представлені як 2*Н* і 3*С* відповідно. Велику структурну спорідненість з політипами показують змішано шарові сполуки і структури проростання, що складаються з двох і більше.

**Постійна Маделунга (константа Маделунга)** – безрозмірна стала, дорівнює сумі нескінченного знакозмінного ряду, що виникає при підрахунку вкладу в енергію іонної ґратки кулонівської взаємодії певного іона з усіма іонами кристала. У простому випадку кристала, що складається з катіонів з зарядом z+ і аніонів з зарядом z-, які рівномірно оточуючих один одного, вираз для електростатичної енергії в першій координаційній сфері іона має вигляд φ1 = -a1z + z-e2/R, у другій φ2 = Ra2 – і т.п., де a1, a2, ... ai і R, b2R, ... biR – координаційні числа і відстані в першій, другій, ... *і*-ій координаційних сферах відповідно. Додавши члени φi і множачи на число іонів NА (число Авогадро) одного знака в молі сполуки, отримаємо:

U (кул) = -z +z-e2*N*/R (a1 – a2 / b2 + ... + ai/bi ...) = - Az + z-e2NА /R

де А – постійна Маделунга, e – заряд електрона.

Для наведеного випадку постійна Маделунга залежить тільки від структурного типу, але не залежить від масштабу структури. Для більш складних випадків ця постійна залежатиме як від параметрів ґратки, так і від координат іонів. Приклади деяких постійних Маделунга: СТ NaCl – 1,74756, CT CsCl – 1,76267, CT ZnS (сфалерит) – 1,63806, CT CaF2 – 2,51939. Постійна Маделунга названа на його честь, він уперше провів розрахунки подібних сум у 1918 р.

**Правила Китайгородського** – емпіричні закономірності, сформульовані А.І. Китайгородським у 1946-1955 рр. на основі узагальнення даних про структури органічних сполук, молекули яких пов'язані Ван-дер-Ваальсовими силами: 1) структуру органічного кристала можливо уявити щільною упаковкою («виступ до западини») молекул, облямованих Ван-дер-Ваальсовими радіусами; 2) органічні структури зазвичай характеризуються великою кількістю дотичних сусідів, найчастіше 12 ( трапляється від 10 до 16); 3) коефіцієнт упаковки для органічних кристалів змінюється в межах k = 0,6-0,8 (якщо k <0,6, речовина не кристалізується); 4) для щільної упаковки молекул найбільш переважними ПГ з гвинтовими осями і ковзальними площинами симетрії. Правила Китайгородського порушуються при зв'язуванні молекул сильнішими зв'язками, ніж Ван-дер-Ваальсові (наприклад, водневими зв'язками).

**Правила Полінга** – напівемпіричні закономірності (принципи), сформульовані американським ученим Л. Полінгом 1929 р. на основі узагальнення даних про структури неорганічних іонних кристалів: 1) навколо кожного катіона утворюється КП з аніонів, причому відстань катіон-аніон визначається сумою іонних радіусів, а КЧ – їх відношенням (узагальнення правила Магнуса-Гольдшмідта); 2) сума валентних зусиль катіонів, що сходяться на аніоні, дорівнює заряду аніона (правило електростатичної валентності); 3) стійкість структури знижується при з'єднанні КП гранями або ребрами, особливо в разі високозарядних катіонів з малими КЧ; 4) у структурі з катіонами декількох сортів катіони з найбільшим зарядом і малим КЧ прагнуть не мати загальних аніонів; 5) число істотно різних структурних одиниць кристала прагне бути малим (правило економічності). Правила Полінга зіграли важливу роль на початковому етапі розвитку кристалохімії силікатів та інших мінералів, але сьогодні в основному втратили своє значення. Винятком є друге правило, яке є наслідком координаційного балансу і балансу зарядів у структурі і займає одне з центральних місць у неорганічній кристалохімії. Друге правило Полінга з сучасним тлумаченням валентних сил можливо використовувати для перевірки якості уточнення структури і оцінки її стабільності, локалізації атомів водню та інших відсутніх частин структури, моделювання та прогнозування структур, вивчення кореляцій структура-властивість та ін.

**Правила Фаянса** – емпіричні закономірності, що встановлені польсько-американським фізико-хіміком К. Фаянсом для поляризації іонів у кристалі:  
1) поляризованість аніона тим більша, чим більший його радіус; 2) поляризована дія катіона тим більша, а його поляризованість тим менша, чим більший його заряд і менший радіус; 3) чим ближче електронна оболонка атома до оболонки інертного газу, тим менші поляризаційні ефекти. Правила Фаянса дозволяють передбачати, чи буде хімічний зв’язок ковалентним або іонним залежно від зарядів і відносних розмірів катіона та аніона, оскільки під дією поляризації електронні оболонки атомів та іонів знімаються, електронна густина аніона зміщується до катіона і зростає ковалентність зв’язку.

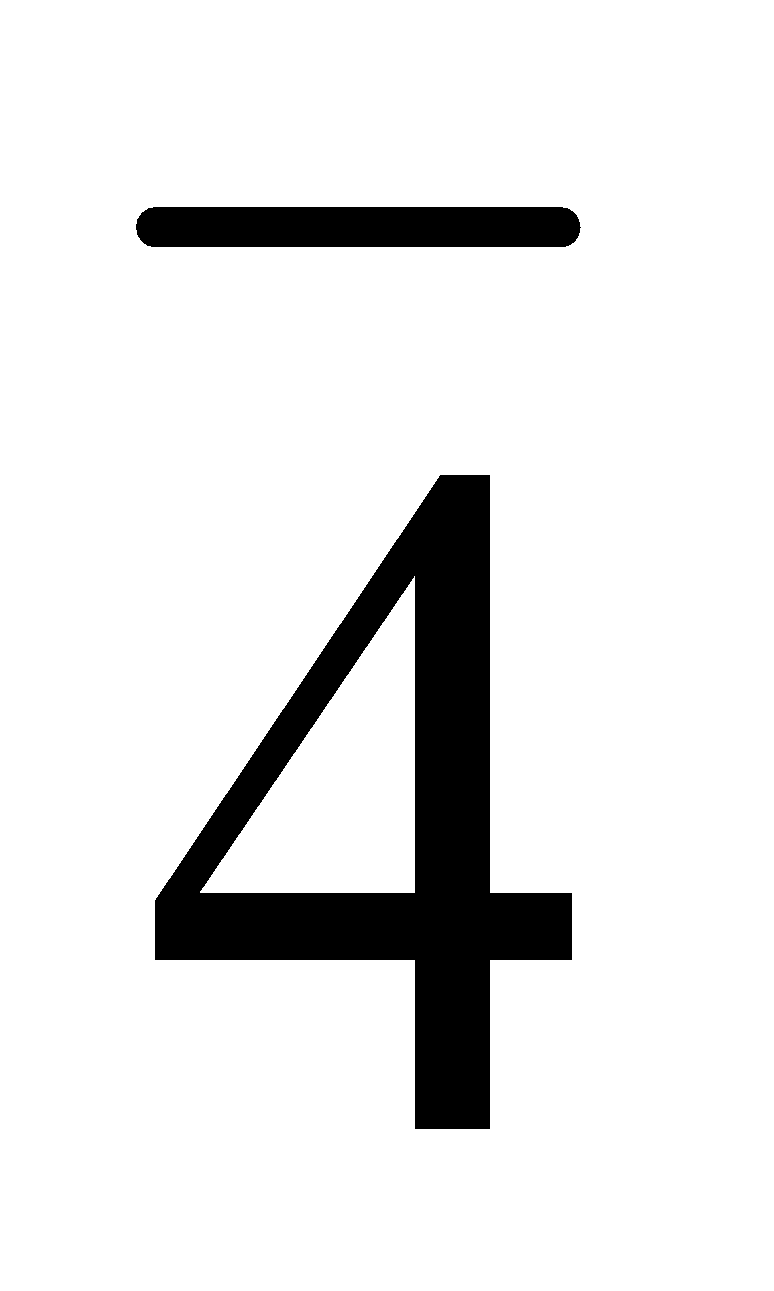
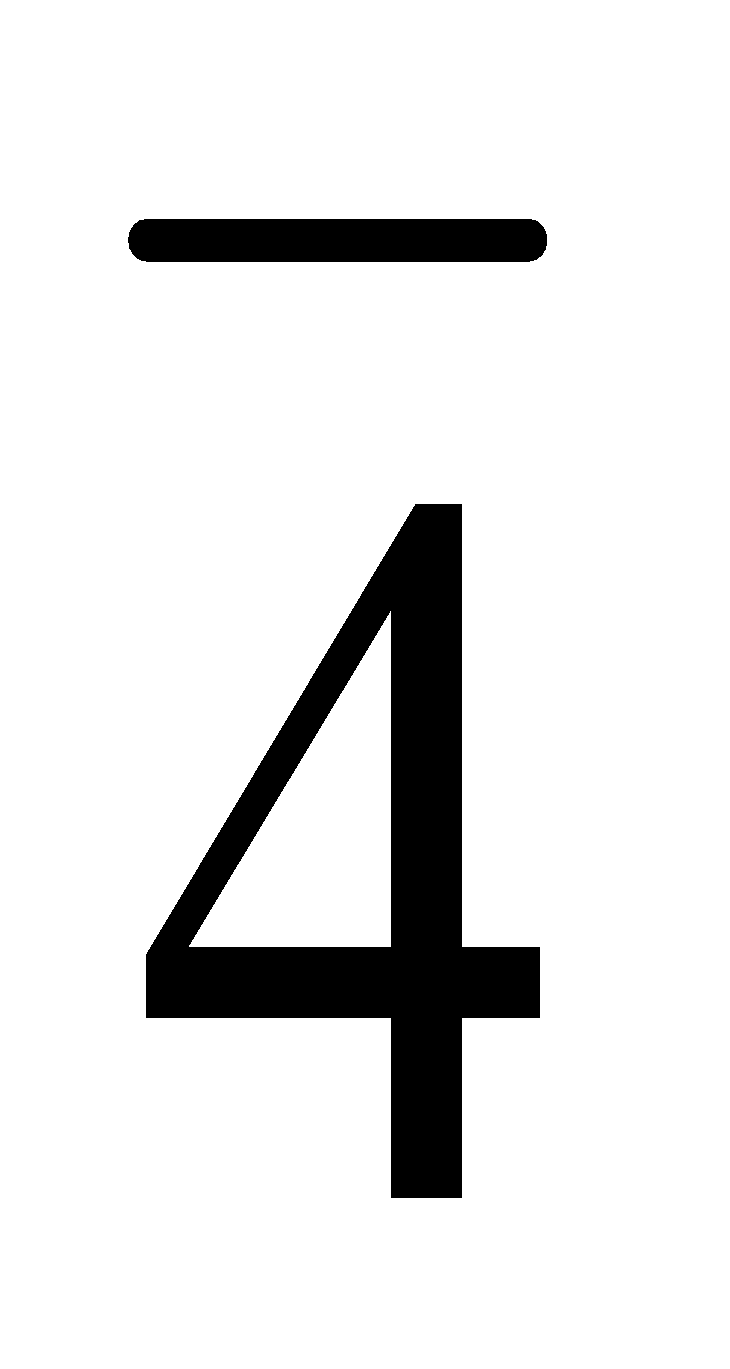
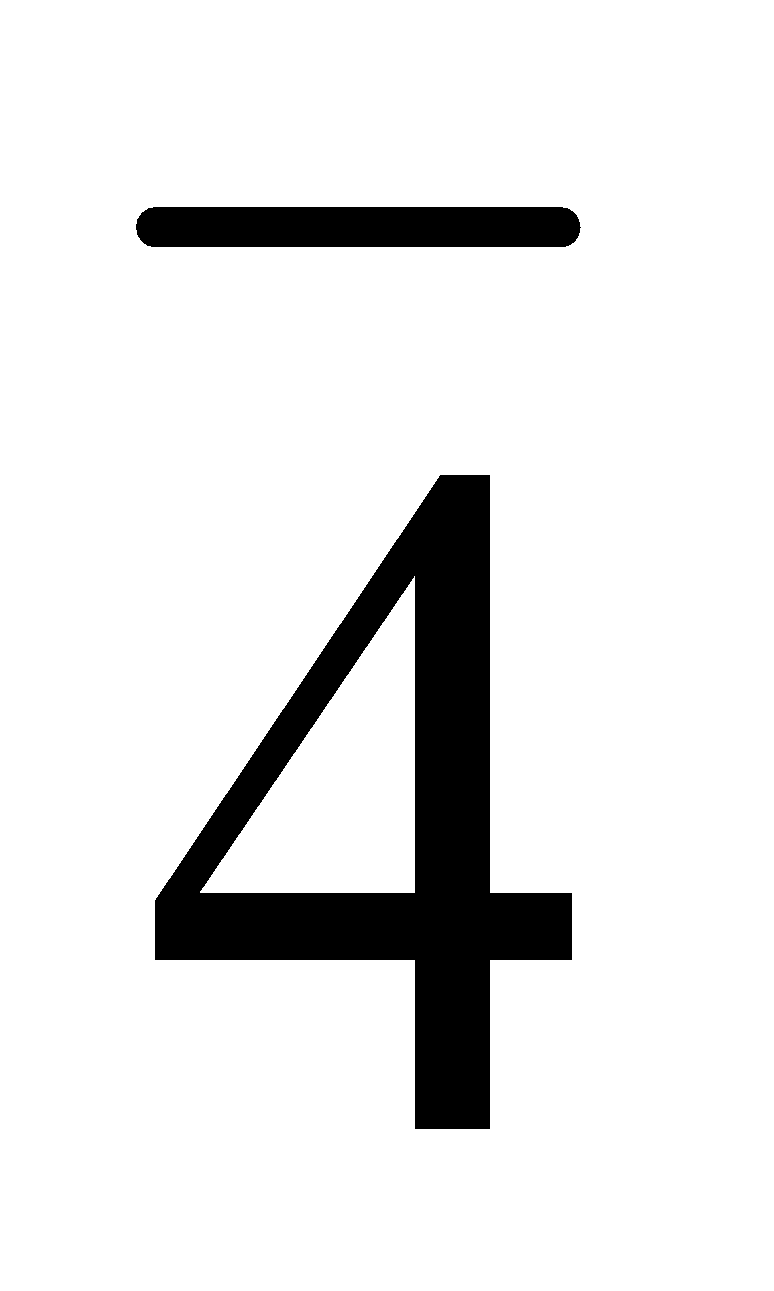
**Правило Гольдшміта-Юм-Розері** – емпіричне правило, що застосовується для оцінки можливості утворення широких твердих розчинів заміщення: різниця між радіусами, які заміщують один одного атомами, (іонами) не повинна перевищувати 15% від меншої величини. Правило добре виконується для простих структур при звичайних температурах, але в інших умовах різниця може бути і більшою. Наприклад, для Li+ і Na+ іонні радіуси для КЧ = 6 рівні 0,9 і 1,16 А (різниця 29%) і при кімнатній температурі взаємна розчинність LiCl і NaCl мала, але вище 300◦С сполуки дають безперервні тверді розчини; те ж саме спостерігається для LiMnPO4 і NaMnPO4 вже при кімнатній температурі. Тому з ускладненням складу сполуки і збільшенням розміру аніонної частини структури можливість катіонного ізоморфізму зростає. Правило встановлене норвежцем В.М. Гольдшмідтом у 1926 р. для іонних кристалів і підтверджено англійцем У.Дж. Юм-Розери у 1934 р. для металевих і ковалентних кристалів.

**Правило Гримма-Зомерфельда** –правило, встановлене Г.Г. Гриммом та А. Зоммерфельдом (HG Grimm, A. Sommerfeld, 1926) для сполук неперехідних металів типу *АХ*, ізоструктурних ZnS (СТ сфалерита і вюрцита): *NA + NX* = 8, де *N* – номер групи Періодичної системи (у короткому варіанті). Є наслідком правила електронного октету (сума чисел валентних електронів атомів, що беруть участь в ковалентному зв'язку, дорівнює восьми). Правило можна узагальнити на випадок більш складних сполук у вигляді: ne/m = 4, де   
ne – загальна кількість валентних електронів у формулі сполуки, m – число атомів у формулі.

**Правило Магнуса-Гольдшмідта** – напівемпіричне правило для геометричних меж стійкості СТ іонних кристалів: структура кристала і КЧ катіона визначається співвідношенням іонних радіусів катіона і аніона. Граничні співвідношення визначають з умови взаємного доторкання катіона та аніонів, що утворюють КП. Такі розрахунки були вперше виконані А Магнусом у 1922 р. і використані В.М. Гольдшмідтом 1926 р. для обґрунтування меж стійкості іонних структур. Правило Магнуса-Гольдшмідта входить в як складник до «основного закону кристалохімії» і правила Полінга (перше правило Полінга).

**Примітивна комірка** – комірка ґратки, у якої вузли ґратки знаходяться тільки в вершинах. Примітивна комірка Браве позначається символом **P**. Об’єм примітивної комірки не залежить від її форми і дорівнює обсягу елементарної комірки.

**Просторова група симетрії (Федорівська група)** – повний набір операцій симетрії нескінченної тривимірної періодичної фігури, наприклад, кристалічної структури. ПГ завжди містять трансляції і допускають тільки кристалографічні операції симетрії. Усього є 230 ПГ, які ділять на 32 кристалографічні класи, 7 сингоній (систем) і 3 категорії. З них абстрактно різними є 219 груп, оскільки є 11 пар енантіоморфних груп симетрії. ПГ підрозділяють також на сімморфні групи (включають в як підгрупу подібну ТГС), і решта – несімморфні групи, у яких частина (або всі) закритих елементів симетрії, подібної ТГС замінені на відкриті. ПГ зазвичай позначають символами Германа-Могена, що складаються згідно випадку з 4 позицій: у першій вказують символ комірки Браве, а в інших – у порядку координатних і діагональних напрямків – вісі симетрії і перпендикулярні їм площини симетрії. Стандартні символи ПГ, види і коди позицій для різних ПСТ (позицій Уайкова), їхня симетрія розташування та координати в комірці Браве, а також інші відомості табульовані в «інтернаціональних таблицях з кристалографії». Усі ПГ виведені російським кристалографом Є.С. Федоровим у 1890 р. і німецьким математиком А. Шьонфлісом у 1891 р.

**П’єзоелектрики** –кристалічні діелектрики або напівпровідники, у яких при стисненні або розтягуванні в певних напрямках виникає електрична поляризація (п'єзоефект). П'єзоефект може виникнути лише в нецентросиметричних кристалах, які мають полярні напрями належать до одного з 20 кристалографічних класів: 1, 2, 3, 4, 6, 222, 32, 422, 622, m, mm2, 3m, 4mm, 6mm,, ,2m, m2, 23, 3m. П'єзоелектричні властивості проявляють також деякі кераміки, полімери та біологічні речовини. Приклади п’єзоелектриків: кварц SiO2, парателуріт α-TeO2, Bi12GeO20, BaTiO3 (сегнетоелектрик). П'єзоефект був уперше виявлений на кристалах кварцу братами Ж. і П. Кюрі в 1880 р.

**Р**

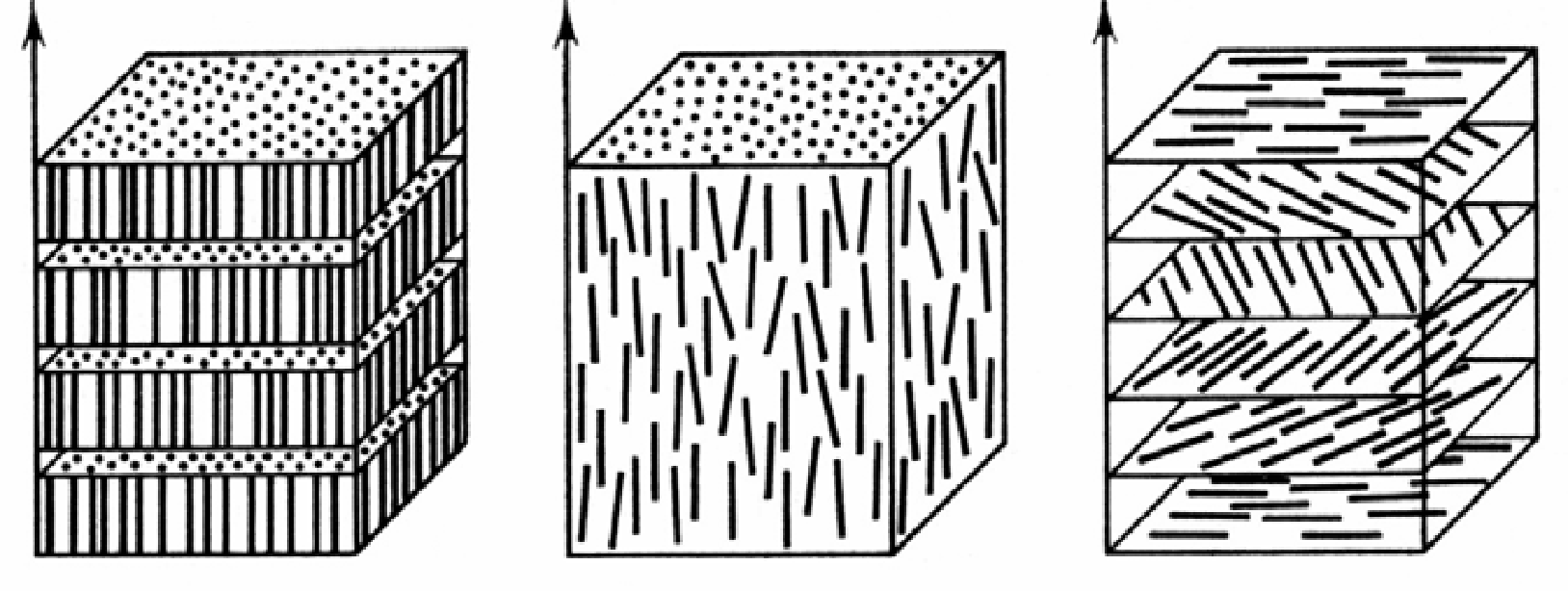
**Реальна структура** – конкретне розташування атомів у певній ділянці кристала. Найчастіше під реальною структурою розуміють локальні або глобальні порушення ідеальної структури (дальнього порядку) кристала, середньостатистично ідеалізованої в масштабах усього кристала: впровадження домішкових атомів або фрагментів інших фаз, дефекти, дислокації, нерівномірність розподілу атомів, невпорядкованість і т.п. Експериментально реальну структуру зазвичай вивчають за допомогою рентгенографії, електронної дифракції, електронної мікроскопії високої роздільної здатності та інших методів.

**Рентгенографія** – сукупність методів дослідження фазового складу і будови речовини за допомогою розсіювання (дифракції) рентгенівського випромінювання. У рентгенографії використовують як моно-, так і поліхроматичне випромінювання, картини розсіяння від різних об'єктів (рентгенограми) реєструють фотографічно (фотометод) або лічильниками рентгенівських квантів (дифрактометричний метод). Об'єктами дослідження є монокристали, полікристали, плівки, полімери, аморфні тіла, рідкі кристали, рідини та гази. Аналіз картини розсіювання дозволяє отримати відомості про симетрії, параметри ґратки, будову, недоліки та дефекти кристалів і плівок, фазовий склад, розміри і орієнтацію частинок речовини, процеси упорядкування, фазові переходи, ближній порядок у різновпорядкованих кристалах, аморфних тілах, рідинах і т. д. Основні рентгенографічні методи: 1) рентгено-дифракційні методи вивчення симетрії і будови кристалів (рентгеноструктурний аналіз); 2) рентгено-дифракційні методи дослідження полікристалів (метод Дебая-Шеррера); 3) методи вивчення реальної структури кристалів і плівок (дослідження текстури, рентгенівська топографія, малокутове розсіяння та ін.); 4) спеціальні методи (прецизійний вимір параметрів ґратки, дослідження радіального розподілу в аморфних і рідких речовинах, дифузне розсіювання тощо).

**Рентгеноструктурний аналіз** – найбільш поширений дифракційний метод вивчення симетрії і будови речовини (головним чином кристалів) за допомогою дифракційного рентгенівського випромінювання електронами атомів. РСА – найбільш зручний, доступний і універсальний метод структурного аналізу, за допомогою якого визначають більше 99% кристалічних структур. Основні практичні особливості РСА – невеликі розміри зразка (0,01-0,5 мм), пропорційність атомного фактора атомному номеру Z. Останнє обумовлює головні недоліки РСА – фактичну нерозрізнюваність атомів з близькими Z і складність фіксації легких атомів на фоні важких, чого в основному позбавлені нейтронографія і електронографія. Основні експериментальні методи РСА: 1) реєстрація дифракційної картини з нерухомого монокристала на поліхроматичному випромінюванні (метод Лауе, використовується для орієнтування, виявлення симетрії і якості кристала);   
2) реєстрація дифракційних відображень на монохроматичному випромінюванні з монокристала, що обертається або коливається навколо кристалографічної осі (метод обертання-коливання, використовується для попереднього визначення періодів ґратки і симетрії кристала); 3) реєстрація інтегральних інтенсивностей і кутів дифракції монохроматичного випромінювання, виміряних з різних положень монокристала (зазвичай використовується на монокристальних дифрактометрах для точного визначення параметрів ґратки та збору даних для визначення структури). Отримані в останньому випадку рентгенодифракційні дані використовують для розшифровки і уточнення структури та розрахунків розподілу електронної густини в кристалі. Деякі задачі визначення симетрії і будови кристалів для відносно простих випадків можна розв’язувати за даними, отриманими за допомогою методу Дебая-Шеррера. Спеціальні методи РСА застосовують для встановлення будови рідких кристалів, полімерів, аморфних тіл, рідин і газів.

**Рентгенофазовий аналіз** – метод якісного і кількісного визначення фазового складу полікристалічних зразків, що використовує дані, отримані за методом Дебая-Шеррера. Метод заснований на розходженні інтенсивностей і кутів дифракційних відображень, отриманих від різних фаз. Дифракційна картина багатофазного зразка є суперпозицією дифракційних картин окремих фаз, що дозволяє їх ідентифікувати (якісний РФА) і знайти кількісний вміст кожної з них (кількісний РФА). Мінімальна межа виявлення фази становить   
1-5% і залежить від умов зйомки, складу суміші, симетрії фаз, коефіцієнтів їх поглинання та інших чинників. За співвідношенням інтенсивностей фаз в аналізованому зразку можна визначити їх концентрацію з похибкою 1-3%. Стандартні рентгенограми відомих фаз зібрані в базі даних Міжнародного центру дифракційних даних (ICDD, США).

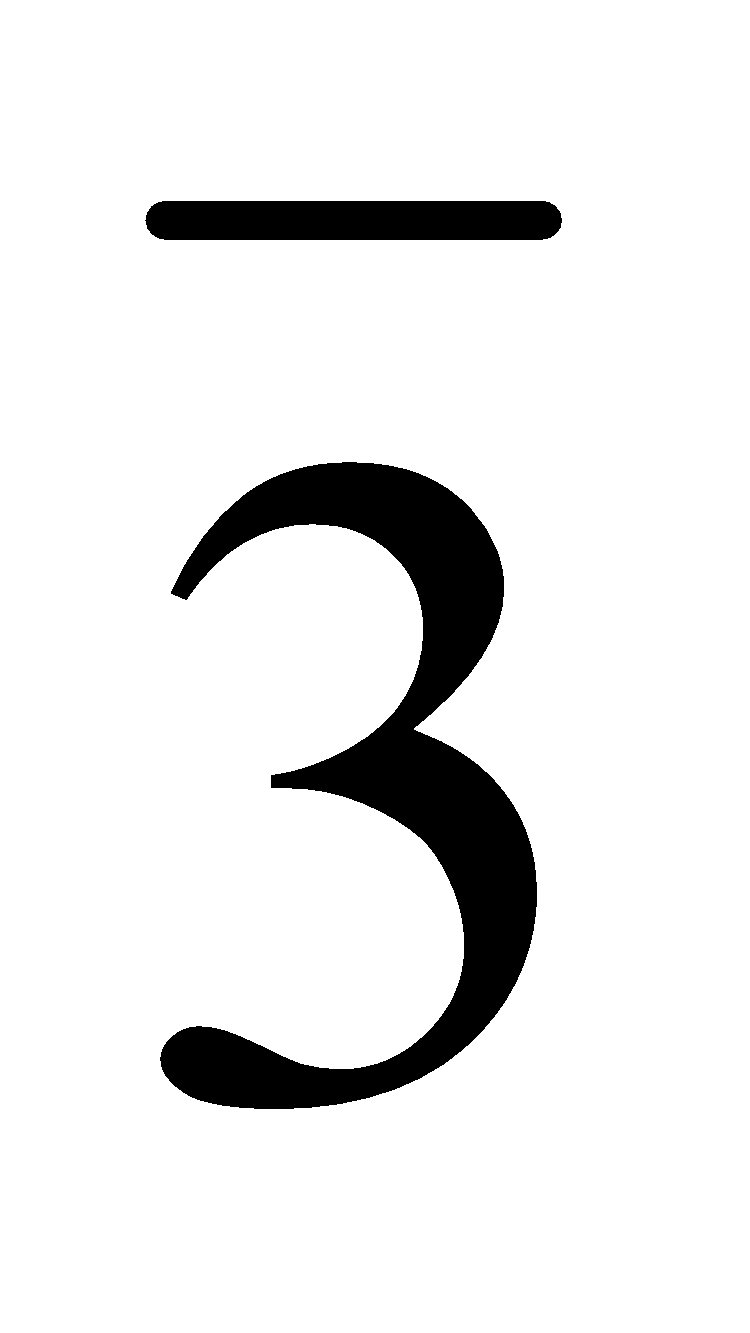
**Рідкі кристали (анізотропні рідини, мезофази)** – особливий стан деяких органічних речовин, що поєднує притаманну рідинам плинність з анізотропією ряду властивостей, характерною для кристалів. Рідкокристалічний стан – проміжний між кристалічним та звичайним рідким і може існувати в різних формах, які утворюються при зміні температури (термотропні рідкі кристали) або в розчинах (ліотропні рідкі кристали). Причина утворення рідких кристалів – істотно анізотропна форма його молекул (ланцюгова або пласка), що визначає приблизну паралельність їх укладання. Розрізняють три основних типи рідких кристалів: смектичні, нематичні, холестеричні (див. рис. 4), останнім часом виділяють і дискотичні фази. Рідкокристалічна впорядкованість спостерігається в доменах розміром 10-2-10-1 мм, які можна змінювати впливом електричного або магнітного полів.



а б в

Рисунок 4. Види рідких кристалів: а – смектичні, б – нематичні,  
 в– холестеричні

**Ромбічна сингонія (ромбічна система)** – кристалографічний тип кристала (структури), що характеризується наявністю трьох взаємно перпендикулярних особливих напрямків, уздовж яких проходять осі другого порядку та/або яким перпендикулярні площини симетрії. Кристали, що належать до ромбічної сингонії, мають примітивну, базо (боко) центровану, об’ємноцентровану або гранецентровану комірку Браве з параметрами *a ≠ b ≠ c, α = β = γ =* 90o (осі 2-го порядку направлені уздовж ребер комірки) і відносяться до 3 ТГС (*222, mm2, mmm*) і 59 ПГ.

**Ромбооктаедр (ромбічний додекаедр, гранатоедр)** – дванадцятикутник з 24 ребрами та 14 вершинами, усі грані якого - рівні ромби з кутом, рівним тетраедричному 109,47о (рис. 5). Має 6 вершин, у яких сходяться гострі кути 4 граней і 8 вершин, в яких сходяться тупі кути 3 граней. Може бути отриманий з куба приєднанням до нього центрів 8 прилеглих до нього кубів. Симетрія ромбододекаедра *mm* (Oh).

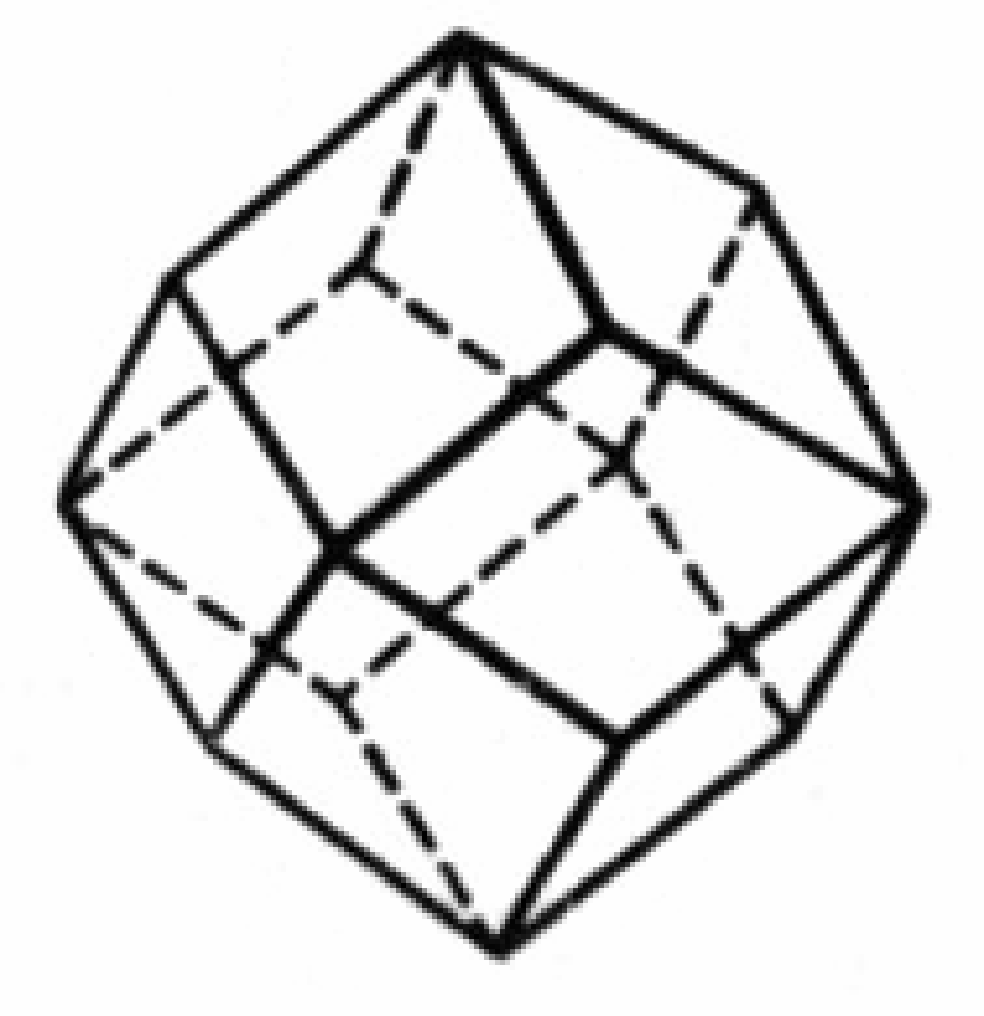
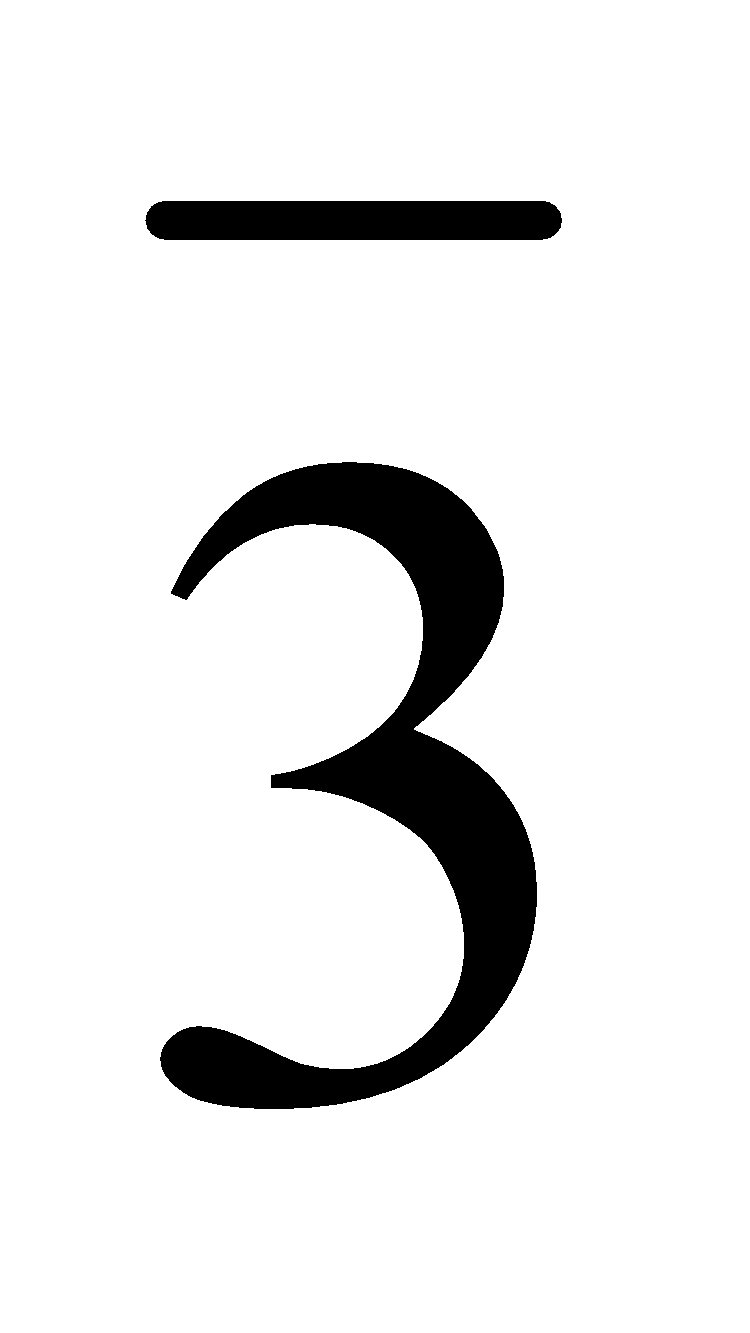
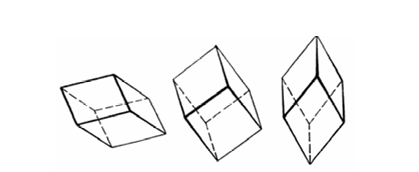


Рисунок 5. Ромбододекаедр

**Ромбоедр** – паралелепіпед, усі грані якого – рівні ромби. Ромбоедр можна отримати стисненням (тупий ромбоедр) або розтягуванням (гострий ромбоедр) куба вздовж його тілесної діагоналі (рис. 6). Симетрія ромбоедра m (D3d).



а б в

Рисунок 6. Ромбоедри: а – тупий; б – прямий (куб); в – гострий

**Ромбоедрична ґратка** – ґратка Браве, коміркою Браве якої є ромбоедрична комірка.

**Ромбоедрична комірка** –елементарна комірка кристала, що відноситься до тригональної сингонії, має вигляд ромбоедра (примітивна ромбоедрична комірка, позначається символом **Р**) з параметрами aR = bR = cR, αR = βR = γR≠ 90o. Комірка Браве цього кристала в гексагональній установці, яка містить два додаткових вузли ґратки, що розділяють довгу об'ємну діагональ комірки на три рівні частини (двічі центрована гексагональна комірка, позначається символом **R**), має параметри aH = bH ≠ cH, αH = βH = 90o , γH = 120o. Зв'язок між векторами обох осередків (рис.7) дається співвідношенням:

*aH = aR - bR, bH = bR - cR, cH = aR + bR + cR*.

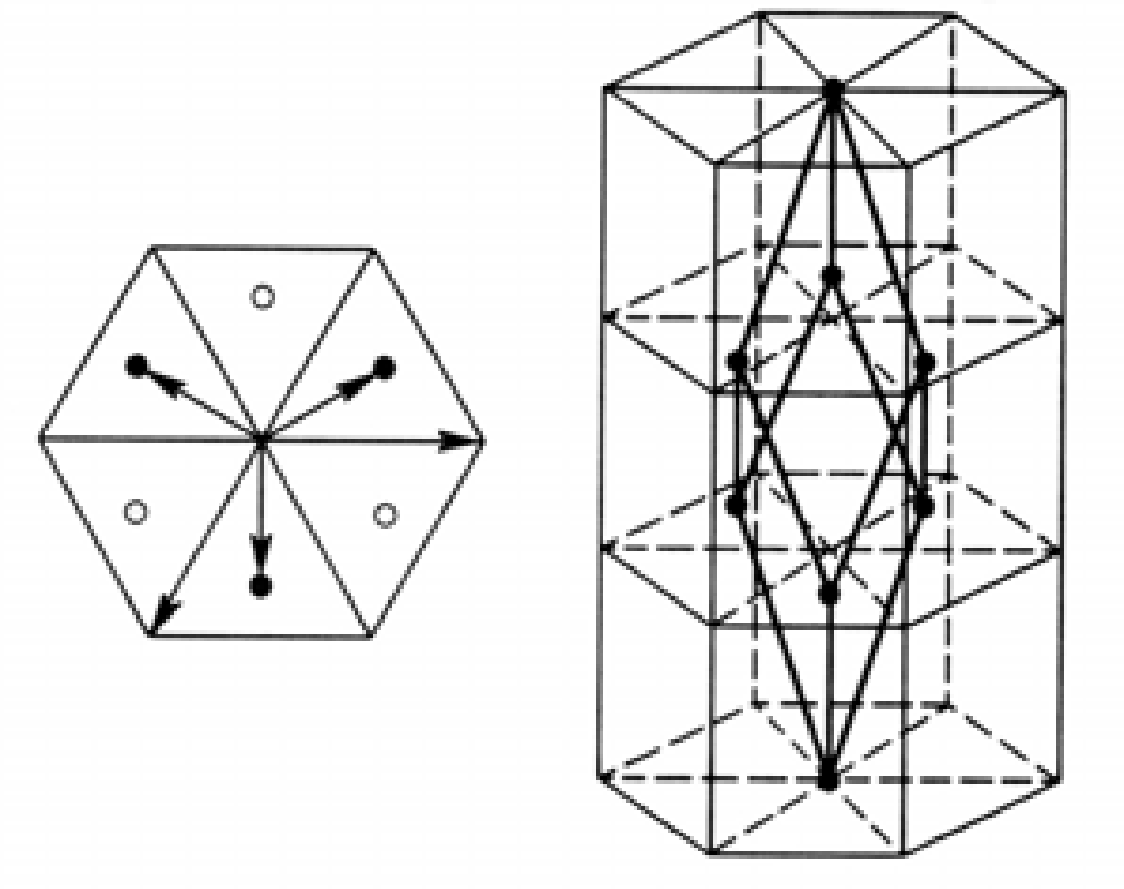


Рисунок 7. Зв'язок між примітивною ромбоедричною і двічі центрованою гексагональною комірками: а – план; б – аксонометрія

**С**

**Сингонія (кристалографічна система)** – кристалографічний тип кристала (структури), що характеризується певним набором старших елементів симетрії його ТГС (поворотних або інверсійних осей) і формою комірки Браве. Відповідно до цього розрізняють такі сингонії (таб. 3.): триклінну, моноклінну, ромбічну (нижчі сингонії), тригональну, тетрагональну, гексагональну (середні сингонії) і кубічну (вища сингонія). Зважаючи на збіг форми комірки Браве для тригональних (ромбоедричних) і гексагональних кристалів їх іноді відносять до однієї сингонії – гексагональної, виділяючи тригональну і гексагональну підсингонії. Кожна з сингоній підрозділяється на кристалографічні класи. Розділення кристалів на сингонії запропоноване німецьким кристалографом Х.С. Вейссом в 1815 р.

Таблиця 3 – Види сингоній

| **Сингонія** | **Осі симетрії ТГС** | **Параметри комірки** |
| --- | --- | --- |
| Триклінна | Вісь 1-го порядка | *a* ≠ *b* ≠ *c,* α ≠ β ≠ γ ≠ 90o |
| Моноклінна | Вісь 2 і/або 2⊥ ***b*** | *a* ≠ *b* ≠ *c,* α = γ = 90o ≠ β |
| Ромбічна | Три ⊥ осі 2 і/або 2|| ***a***, ***b***, ***c*** | *a* ≠ *b* ≠ *c,* α = β = γ = 90o |
| Тригональна  (Ромбоедрична) | Вісь 3 і/або 3|| ***c***  (вісь 3 і/або 3  за об’ємною діагоналлю ромбоедра) | *a = b* ≠ *c,* α = β = 90o, γ = 120o (*a = b = c,* α = β = γ ≠ 90o) |
| Тетрагональна | Вісь 4 і/або 4|| ***с*** | *a = b* ≠ *c,* α = β = γ = 90o |
| Гексагональна | Вісь 6 і/або 6|| ***с*** | *a* = *b* ≠ *c,* α = β = 90o, γ = 120o |
| Кубічна | 4 осі 3 або 3  вздовж об’ємних діагоналей куба,  осі 2, 4 або 4|| ***a***, ***b***, ***c*** | *a* = *b* = *c,* α = β = γ = 90o |

**Скалярні властивості кристалів** – фізичні властивості кристалів, що не залежать від напрямку і можуть бути описані одним числом. Симетрія скалярних властивостей збігається з симетрією кулі. До скалярних властивостей належать щільність, теплоємність, температура тощо.

**Спайність** – властивість кристала розколюватись за певними кристалографічними площинами (площинами спайності), поперечно яким зазвичай знаходяться відносно слабкі хімічні зв'язки. Явище спайності вперше спостерігав на кристалах кальциту CaCO3 датський учений Е. Бартолін у 1669 р.

**Спорідненість структур** – подібність розташування атомів або структурних фрагментів у порівнюваних кристалічних структурах, що належать до різних структурних типів. Спорідненість структур найчастіше пов'язана з одним або кількома видами структурно-генетичних операцій. Одним з найпростіших видів спорідненості структур є гомеотіпія. Споріднені структури можуть утворювати структурні родини, надструктури і гомологічні ряди структур.

**Складна вісь симетрії** –вісь симетрії, що поєднує поворот на кут 360ο/n (n – натуральне число) з інверсією в одній із точок осі(інверсійно-поворотна вісь), відображенням у перпендикулярній їй площині (дзеркально-поворотна вісь) або зсувом уздовж прямої на дробову частину трансляції ґратки (гвинтова вісь). Позитивним напрямком повороту прийнято поворот проти годинникової стрілки.

**Смектики** – назва найбільш упорядкованих фаз термотропних рідких кристалів, де витягнуті ахиральні органічні молекули утворюють на відміну від нематиків і холестеринів, шарувату структуру. Товщина шару визначається довжиною молекул і шари можуть переміщуватись один відносно одного.

**Ступені свободи** – кількість координат точки, що незалежно варіюють (без зміни симетрії), і яка належить правильний системі точок. Якщо точка в загальній позиції ТГС або ПГ завжди має три ступеня свободи (або три координатних параметри), то в окремих положеннях кількість ступенів свободи менше: на дзеркальній площині їх два (фіксована одна координата), на поворотній осі – один (фіксовані дві координати), а в центрі інверсії, в особливій точці інверсійної осі або на перетині закритих елементів симетрії, точка не матиме ступенів свободи (параметрів).

**Стереохімія** – наука, що вивчає просторову будову молекул і її вплив на хімічні та фізичні властивості речовин. Почала розвиватись після відкриття  
Ж.Б. Біо в 1815 р. оптичної активності органічних сполук у розчинах. Стереохімія включає три основні розділи: 1) статичну (конфігураційну) стереохімію, яка вивчає просторову будову молекул, їхню ізомерію і вплив молекулярної структури на фізичні властивості; 2) конформаційний аналіз, який вивчає залежність фізичних і хімічних властивостей від конформацій молекул; 3) динамічну стереохімію, яка вивчає стереохімічні нежорсткі молекули і стереохімічний хід хімічних реакцій. Базовими поняттями стереохімії є хіральність, конфігурація, конформація. Теоретичний апарат стереохімії – теорія груп, топологія, теорія графів, квантова хімія, молекулярна механіка, термодинаміка. Основні експериментальні методи – спектрополяриметрія, коливальна та ЯМР-спектроскопія, дифракційні методи. Останні дозволяють отримати найбільш надійні дані про молекулярну структуру і визначити абсолютну конфігурацію хіральних молекул. Для сучасної стереохімії характерне комплексне вивчення оптично активних сполук, розвиток методів асиметричного і стереонаправленого синтезу й каталізу.

**Стехіометрична класифікація структур** – класифікація структурних типів, прийнята в міжнародному структурному довіднику "Strukturbericht" (виходив з 1931 по 1943 рр.) й іноді використовувалась для позначення найпростіших структурних типів. Відповідно до цієї класифікації, кожному СТ привласнений символ, що складається з букви і цифрового коду СТ: структури простих речовин позначаються буквою **А**, бінарних сполук типу АВ – буквою **В**, сполук типу АВ2 – літерою **С**, сполук типу AmBn – буквою **D**, сполук типу AmBnCp – буквою **Е** і т.п. Приклади: A1 – СТ Cu (ГЦК), А2 – СТ α-Fe (ОЦК),  
А3 – СТ Mg (ГПУ), A4 – СТ алмазу, А9 – СТ графіту, В1 – СТ NaCl, В2 – СТ CsCl, В3 – СТ сфалериту (ZnS), В4 – СТ вюрциту (ZnS), C1 – СТ флюориту (CaF2), D51 – СТ корунда (α-Al2O3), E21 – СТ перовскиту (CaTiO3).

**Стехіометрія (кристала)** – відносна кількість атомів кожного сорту в структурі, яке визначається вмістом елементарної комірки (комірки Браве), що залежить від кількості атомних позицій, їхньої кратності і заселеності атомами. Кристали з повністю впорядкованою структурою, де атоми кожного сорту воуціль заповнюють свої позиції, завжди мають постійний склад з цілими коефіцієнтами. Фази змінного складу (тверді розчини або нестехіометричні сполуки) завжди мають позиційно невпорядковані структури, у яких зміна складу кристала відбувається за рахунок зміни заселеності позицій атомів.

**Структурна хімія** – розділ хімії, що вивчає структурні аспекти фізико-хімічних перетворень речовин у різних агрегатних станах.

**Структурний аналіз:** 1) у широкому сенсі – сукупність методів дослідження просторової будови речовини, як правило, пов'язаних з вивченням будови молекул, а також мікроструктури, ідеальної структури або реальної структури кристалів. Найбільш потужними використовуваними методами прямого структурного аналізу є дифракційні методи та електронна мікроскопія. До непрямих методів належать оптична мікроскопія, спектроскопічні та резонансні методи, а також квантово-хімічні та термодинамічні розрахунки;  
2) у вузькому сенсі – процес ідентифікації структурного типу або визначення атомної будови (розшифровки структури та уточнення структури) якої-небудь речовини, кристала або молекули дифракційними методами. Передбачає послідовне виконання таких завдань: а) отримання дифракційних даних;  б) визначення форми, розмірів і типу комірки Браве; в) визначення симетрії кристала; г) визначення розташування атомів.

**Структурний тип** –вид відносного взаємного розташування атомів у кристалі, який характеризується: 1) певною просторовою групою симетрії і формою комірки Браве; 2) певним набором правильних систем точок;  
3) певними КЧ, формою і взаємним розташуванням координаційних поліедрів. Структурний тип зазвичай називають за першим структурно вивченим представником або відомим мінералом такої будови, наприклад: структурний тип NaCl, структурний тип перовскиту. Відсутність у визначенні СТ обмежень, пов’язаних зі складом, дає можливість зміни останнього в царині гомогенності без зміни структурного типу, що спостерігається в багатьох фазах змінного складу (тверді розчини, нестехіометричні сполуки), які обов’язково мають один із видів позиційного безладу. Для позначення найпростіших структурних типів іноді використовують стехіометричну класифікацію структур. Як додаткову характеристику структурного типу застосовують символ (код) Пірсона.

**Структурний фактор (рентгенівський)** – комплексна величина *F* (*hkl*), модуль якої становить собою амплітуду рентгенівського дифракційного відбиття від площини (*hkl*), вираженої відношенням амплітуди розсіювання всіма електронами комірки ґратки до амплітуди розсіювання одним електроном, а її аргумент – початкову фазу цього дифракційного променя. Інтегральна інтенсивність дифракційного відбиття пропорційна квадрату модуля структурного фактора. Структурний фактор можна представити у формі:

*F (hkl*) = *A + Bi* = | *F (hkl)* | · eiφ,

де *A = Σficos2π (hxi + kyi + lzi), B = Σfisin2π (hxi + kyi + lzi), fi* – атомний фактор *i*-го атома в комірці, *xi, yi, zi* – його координати, | *F (hkl)* | = (*A2 + B2*) 1/2 – модуль структурного фактора (структурна амплітуда), *B / A = tgφ, φ* – поч.аткова фаза.

Структурний фактор пов'язаний з електронною щільністю ρ (xyz) кристалу вираженням:

*F (hkl) = ∫ρ (xyz) exp [2πi (hx + ky +* *lz)] dV*

де інтегрування ведеться по всьому об'єму V комірки.

Якщо модуль структурного фактора можна безпосередньо визначити за інтенсивністю відображення, то фазовий кут – не можна, що становить суть фазової проблеми, розв'язуваної в рамках методів розшифровки структури.

**Т**

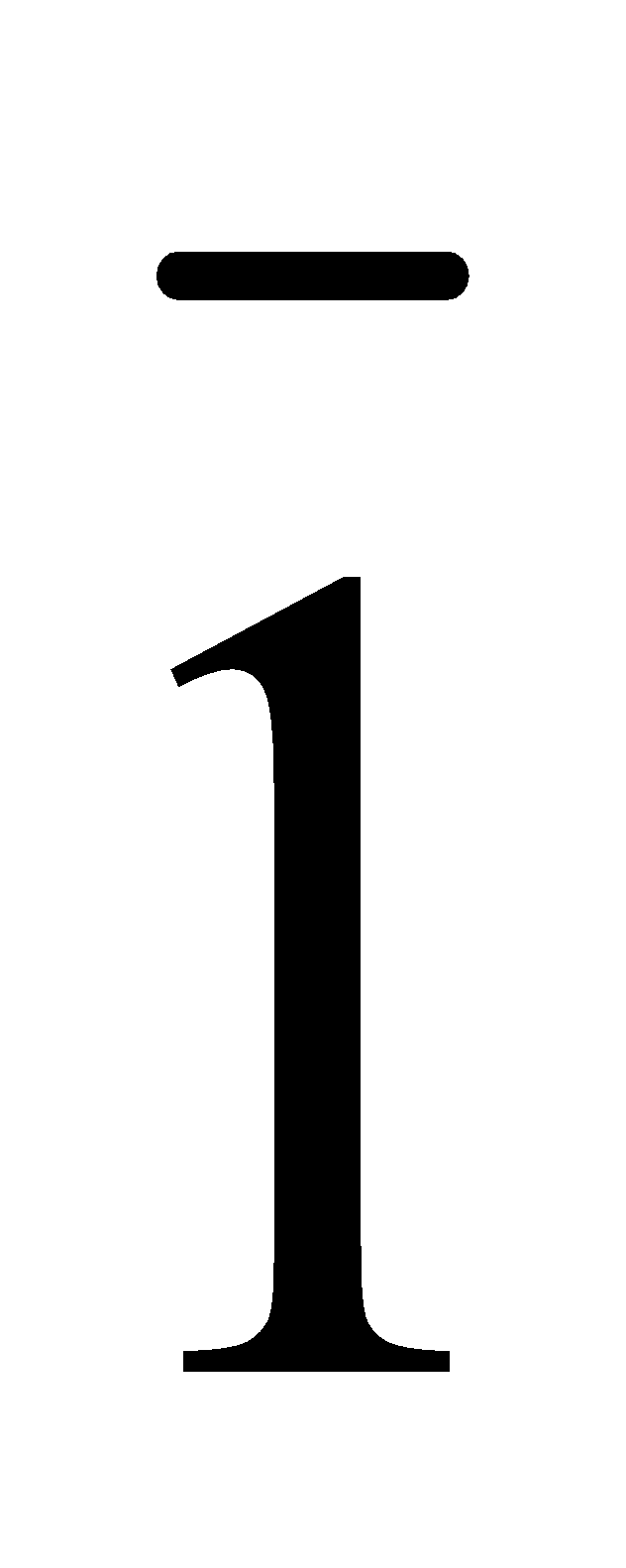
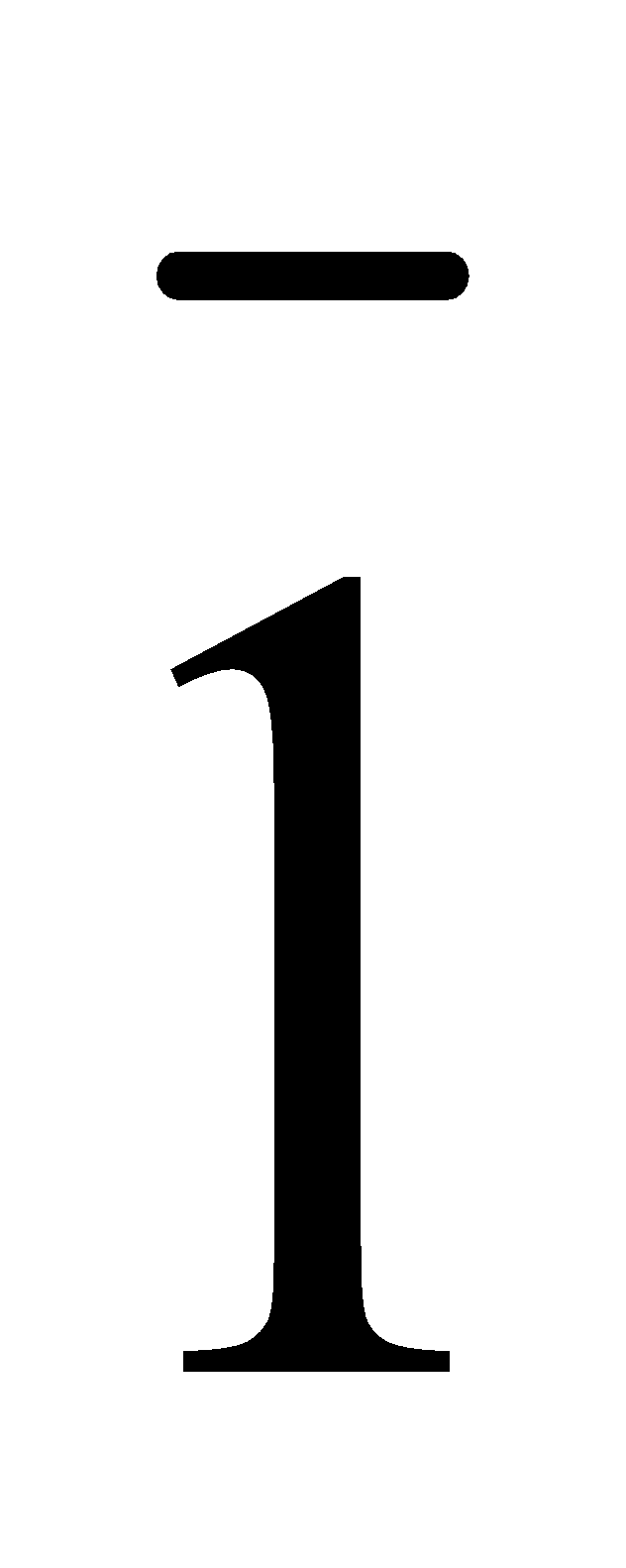
**Тверді електроліти (іонні провідники)** – тверді тіла, які мають значну іонну провідність при кімнатній і підвищених температурах (питома провідність σ = 10-5-101 Ом-1см-1), що істотно перевищує електронну. Тверді електроліти характеризуються наявністю щільно упакованих структур, жорстких ковалентних каркасів або шарів, у яких наявні нескінченні ланцюжки близько розташованих дефектних позицій, по яких і здійснюється транспорт іонів (зазвичай одно-і двозарядних) в одному, двох або трьох вимірах. Оскільки в твердих електролітах мобільний, як правило, один тип іонів, вони діляться на катіонні (α-AgI, Cu2S, Na3Zr2PSi2O12) або аніонні (PbF2, кубічний ZrO2) провідники. Відомі також протонні провідники (CsHSO4), тверді електроліти з двома провідними іонами (високотемпературний Ag2HgI4) та іонопровідні види скла (AgI-Ag2O-P2O5 та ін.). Найбільш високопровідні тверді електроліти  
(σ = 10-3-101 Ом-1см-1, енергія активації Ea = 0,1-0,3 еВ) називають суперіонними провідниками.

**Тензорні властивості кристалів** – анізотропні фізичні властивості, що залежать від напрямку та симетрії кристала і описувані тензорами (узагальненими матрицями, що мають 3*п* компонентів). До тензорних властивостей належать діелектрична проникність, магнітна сприйнятливість, теплопровідність, п’єзоефект та ін.

**Тетрагональна сингонія (тетрагональна система)** – кристалографічний тип кристала (структури), що характеризується наявністю однієї осі симетрії четвертого порядку. Кристали, що належать до тетрагональної сингонії, мають примітивну або об'ємноцентровану комірку Браве з параметрами a = b ≠ c,  
α = β = γ = 90o (вісь 4-го порядку || с) і відносяться до 7 ТГС (4, 4, 4/m, 422, 4mm, 42m, 4/mmm) і 68 ПГ.

**Точкова група симетрії** – група симетрії, складена тільки із закритих операцій симетрії, що залишають нерухомою хоча б одну особливу (інваріантну) точку симетричної фігури. Якщо особлива точка – єдина, у ній перетинаються всі елементи симетрії ТГС. Залежно від поєднань елементів симетрії, виділяють сім сімейств точкових груп, що об'єднуються в три категорії. ТГС зазвичай позначають символами Шенфліса або Германа-Могена. Перші акцентують увагу на головній осі симетрії і перпендикулярних їй елементах симетрії, а другі складаються, як правило, з 3 позицій, у яких у порядку координатних і діагональних напрямків вказують осі симетрії і перпендикулярні їм площини симетрії. Усі кінцеві точкові групи вперше виведені німецьким вченим І.Ф.Х. Гесселем 1830 р.

**Трансляція (паралельний перенос)**: 1) операція симетрії, яка полягає у зміщення точки на вектор певної довжини; 2) вектор, що з'єднує будь-які два вузли кристалічної ґратки (трансляція ґратки); 3) частина відкритої операції симетрії, яка полягає в переносі точки паралельно відкритого елемента симетрії (гвинтової осі або площини ковзального відбиття) на величину, рівну дробовій частині трансляції ґратки.

**Триклінна сингонія (триклінна система)** – кристалографічний тип кристала (структури), що характеризується наявністю тільки осі першого порядку. Кристали, що належать до триклінної сингонії, мають примітивну комірку Браве з параметрами a ≠ b ≠ c, α ≠ β ≠ γ ≠ 90o і відносяться до 2 ТГС (1, ) і 2 ПГ (P1, P).

**У**

**Упакування** – розташування тіл у просторі, при якому кожне тіло торкається найближчих сусідів. У кристалохімії поняття упаковки застосовують до структур, утворених за рахунок не напрямлених типів хімічного зв'язку: іонного, металевого або Ван-дер-Ваальсового.

**Уточнення структури** – процедура отримання найкращої узгодженості між обчисленими та експериментальними структурними амплітудами шляхом послідовного додавання і покращення атомних параметрів наближеної (пробної) моделі структури, одержуваної зазвичай за допомогою методів розшифровки структури. Процедура уточнення багатоетапна і використовує, як правило, поєднання методу найменших квадратів і розносних карт електронної густини.

**Ф**

**Фізичні іонні радіуси** – іонні радіуси, величини яких визначають із даних з тримірного розподілу електронної щільності *p(xyz)* у структурі кристалів. Фізичні радіуси катіона та аніона вважають рівними відстаням від їхніх ядер або відповідних їм максимумів *p(xyz)* до мінімуму *p(xyz)* на лінії зв’язку катіон-аніон. Такі радіуси лежать в основі загальноприйнятої системи іонних радіусів Р.Д. Шеннона.

**Формула (умова) Брега-Вульфа** – визначає напрями дифракційних променів в кристалі, «відбитих» від серії вузлових сіток *(hkl):*

*2d (hkl) · sinθ = nλ,*

де *d (hkl*) – міжплощинна відстань, θ – кут падаючого і відбитого променів з площиною *hkl* (кут Брегга) , n – порядок відображення, λ – довжина хвилі випромінювання (рис. 8)

Незалежно виведена англійським фізиком У.Л. Бреггом у 1912 р і російським кристалографом Г.В. Вульфом у 1913 р, справедливо для дифракції рентгенівського і γ-випромінювання, електронів і нейтронів.

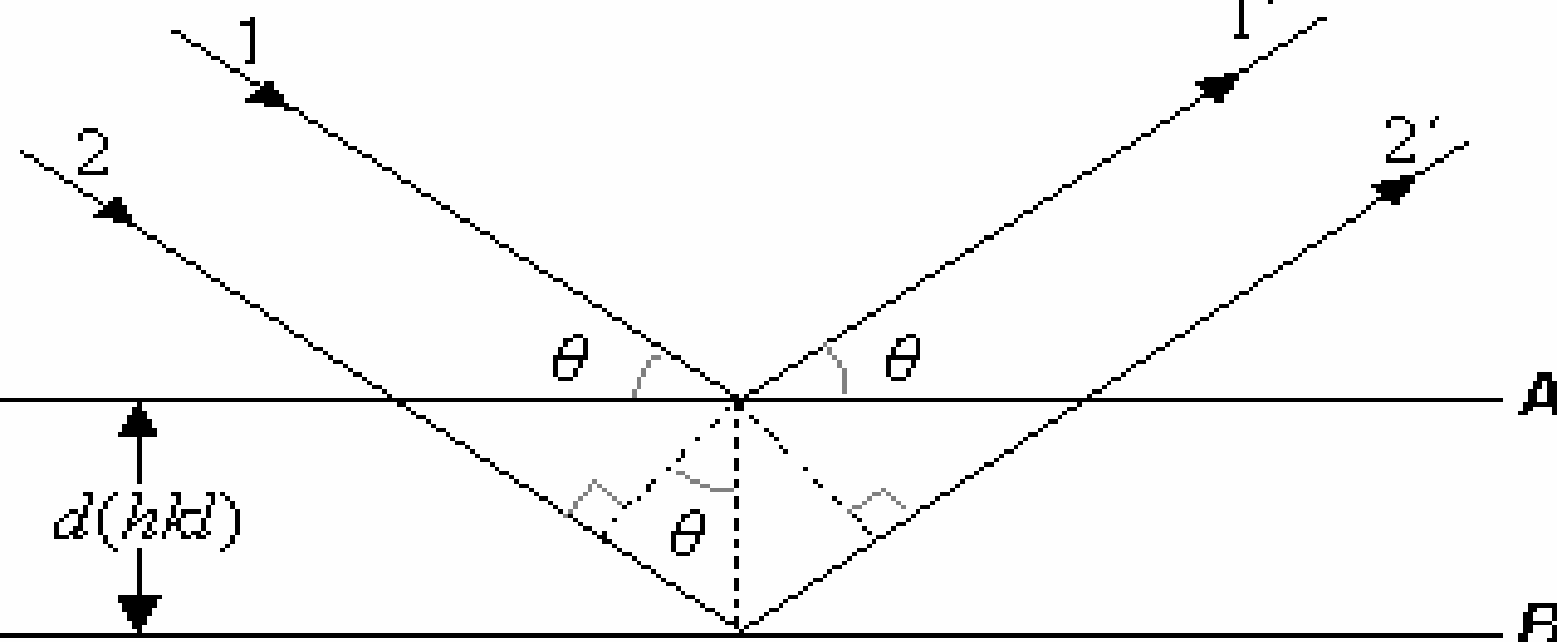


Рисунок 8. До висновку формули Брегга-Вульфа

**Формульна одиниця** – одиниця хімічного складу речовини, зазвичай сукупність атомів, що входять до складу стабільного структурного фрагмента (наприклад, молекули) або прийнятої хімічної формули речовини.

**Формульна маса** – маса формульної одиниці речовини, виражена в абсолютних або відносних (вуглецевих) одиницях – узагальнення поняття молекулярної маси.

**Х**

**Характеристичне випромінювання** – монохроматичне рентгенівське випромінювання, зумовлене електронними переходами з зовнішніх енергетичних рівнів атома на внутрішні (K-, L-, M- ... оболонки, що відповідають значенням головного квантового числа n = 1, 2, 3 ...). Відповідні емісійні лінії, що виникають при таких переходах, носять назву K-, L-, M- і т.п. серій; усередині серії лінії позначаються α, β, γ і т.п., наприклад, лінія переходу L → K позначається Kα. Довжини хвиль характеристичного випромінювання лежать в інтервалі 0,05-100 Å.

**Хімічна кристалографія** – розділ кристалографії к. XVIII в.-поч. XX ст., який вивчав взаємозв'язки зовнішньої форми кристалів з їхнім складом, умовами росту і хімічними властивостями. З відкриттям рентгеноструктурного аналізу і розвитком методів визначення внутрішньої будови кристалів з хімічної кристалографії виросла кристалохімія, а функції хімічної кристалографії багато в чому перейшли до кристалогенезису та прикладної кристалографії, що займаються вивченням процесів зародження, зростання, розчинення і дефектоутворення в кристалах та їх вирощуванням для практичних цілей.

**Хімічний зв'язок** – загальна назва різних міжатомних взаємодій, що зумовлюють існування молекул, іонів і конденсованих фаз. Утворення хімічного зв'язку супроводжується перерозподілом електронної щільності між взаємодіючими атомами і їхніми фіксованим взаємним розташуванням. Залежно від виду цього перерозподілу розрізняють основні типи хімічного зв’язку: 1) іонний зв'язок, що виникає в результаті переносу валентних електронів з одного атома на інший з утворенням протилежно заряджених іонів і електростатичною взаємодією між ними; 2) ковалентний зв'язок, що виникає між двома атомами при узагальненні належних їм пар валентних електронів; 3) металевий зв'язок, зумовлений делокалізацією частини зовнішніх електронів атомів металу по кристалу; 4) Ван-дер-Ваальсові взаємодії (міжмолекулярні сили), викликані слабким диполь-дипольним тяжінням заповнених електронних оболонок атомів; 5) водневий зв'язок, здійснюваний за рахунок тяжіння атома водню, пов'язаного з електронегативним атомом, до неподіленої електронної пари іншого електронегативного атома. Основні характеристики хімічного зв'язку – міцність (енергія зв'язку), довжина і спрямованість. Перші три типи хімічних зв'язків відносять до сильних зв'язків (середні енергії дисоціації близько 100-400 кДж/моль), а водневий зв'язок (звичайні енергії зв'язку  
10-50 кДж/моль) і Ван-дер-Ваальсова взаємодія (близько 0,1-1 кДж/моль) вважають слабкими зв'язками. Сильні хімічні зв'язки відносять до валентних взаємодій, Ван-дер-Ваальсові – до невалентних взаємодій. Проміжне становище займають водневі зв'язки і деякі інші зв'язки (наприклад, що зумовлюють π-π-взаємодію в ароматичних системах), які називають специфічними. Довжини сильних хімічних зв'язків становлять близько 1 – 3,0 Å, слабких хімічних зв'язків – близько 2,5 – 4 Å і відповідають сумам кристалохімічних радіусів (крім водневих зв'язків), відповідних кожному типу зв'язків. Іонні, металеві і Ван-дер-Ваальсові зв'язки є ненаправленими (сферично-симетричними) і відрізняються високими КЧ ≥ 6, а ковалентні і водневі зв'язки характеризуються спрямованістю і низькими КЧ ≤ 6 (для водневого зв'язку звичайні КЧ = 2). Основні типи хімічних зв'язків слід вважати граничними (ідеальними), у багатьох випадках хімічний зв'язок має проміжний характер. Переважно іонними є зв'язки в лужних галогенідах, ковалентними – зв'язки в гомоатомних молекулах неметалів (H2, S8, C60 та ін.), металевими – зв'язки в звичайних металах, Ван-дер-Ваальсовими – сили зчеплення кристалів інертних газів. Іонно-ковалентний характер зв'язків має більшість простих і складних оксидів перехідних металів; зв'язки, проміжні між ковалентними і металевими, реалізуються в багатьох напівпровідниках.

**Хіральна група симетрії** – група симетрії симетричної фігури, яка проявляє хіральність. Такі групи (точкові або просторові) не містять елементів симетрії II роду (центру інверсії, площин симетрії або інверсійних осей) і відносяться до сімейств точкових груп конуса, що обертається, скрученого циліндра або кулі з точками поверхні, що обертаються. Наявність хіральної групи симетрії – необхідна умова існування оптичної активності у молекулі і нелінійно-оптичних властивостей у кристала.

**Хіральний** –ознака, що відноситься до об'єкта (фігури, молекули, кристала), що проявляє хіральність та, який має хіральну групу симетрії.

**Хіральність** – властивість фігури існувати в двох дзеркально рівних між собою (правої і лівої) формах, що не поєднуються; те само, що і енантіоморфізм. Термін уперше використаний лордом Кельвіном (В. Томсоном) у 1884 р.

**Холестерики** – назва однієї з фаз термотропних рідких кристалів, де витягнуті хіральні органічні молекули орієнтовані своїми довгими вісями в шари так, що вісі молекул сусідніх шарів повернуті в одному напрямку на невеликий постійний кут, а кутове зміщення поступово зростає від шару до шару по спіралі. Холестеричний стан переважно характерний для молекул складних ефірів холестерину, звідки і назва.

**Ш**

**Шарувата структура** – гетеродесмічна структура, у якій основними структурними одиницями є нескінченні шари з найбільш міцно пов'язаних атомів. Приклади: графіт, CdI2, слюда.

**Шаруватість:**1) кількість гексагональних щільно упакованих шарів, що припадають на період найщільнішої упаковки куль, перпендикулярних шару. 2) число однотипних або різних за будовою шарів, що укладаються в період шаруватої структури, перпендикулярних шару.

**Щ**

**Щільноупаковані структури** –структури, у яких частина атомів (або всі атоми) розташована за законом однієї з ЩШУ, а решта атомів – у її тетраедричних і/або октаедричних порожнечах. Найбільш часто трапляються серед найпростіших структур інертних газів (He, Xe), металів (Mg, Cu, α-Nd, α-Sm) і неорганічних сполук (NaCl, ZnS, NiAs, CaF2).

**ВИКОРИСТАНА ЛІТЕРАТУРА**

1. Сирова Г. О., Петюніна В. М., Лук’янова Л. В., Тішакова Т. С., Савельєва О. В. Аналітична хімія (якісний аналіз): Навчальний посібник. Харків, 2019. 131 с.
2. Корольчук С.І., Савчук Т.І., Кормош Ж.О. Аналітична хімія та інструментальні методи хімічного аналізу: методичні рекомендації для студентів спеціальності 014 Середня освіта (Хімія). Львів : ПП “Іванюк В.П.”, 2019. 45 с.
3. Слободнюк Р. Є. Курс аналітичної хімії: навчальний посібник. Херсон: ОЛДІ-ПЛЮС, 2020. 256 с.
4. Кельїна С.Ю., Невинський О.Г., Лічко О.І., Ремешевська І.В. Загальна хімія. Хімія та екологія води. Навчальний посібник. Миколаїв: НУК, 2019. 215 с.
5. Спаська О.А. Аналітична хімія: лабораторний практикум. Київ : Вид-во Нац. авіац. ун-ту «НАУ-друк» 2021. 66 с.
6. Левітін Є. Я., Ведерникова І. О., Антоненко О. В. та ін. Загальна та неорганічна хімія : навчальний посібник для студентів закл. вищ. освіти. Харків : НФаУ : Золоті сторінки, 2019. 368 с.
7. Спасьонова Л.М., Тобілко В.Ю., Пилипенко І.В. Інструментальні методи хімічного аналізу : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» спеціалізації «Хімічні технології неорганічних керамічних матеріалів». Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. 69 с.
8. Зиман З.З. Основи структурної кристалографії : навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. Харків : ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2008. 212 с.
9. Зінчук В.К., Левицька Г.Д., Дубенська Л.О. Фізико-хімічні методи аналізу: Навчальний посібник. Львів : Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2008. 362 с.
10. Олійник М. М. , Горічко М. В., Швед О. М. та ін. Фізичні методи дослідження в хімії: навчальний посібник для самостійної роботи (для студентів спеціальності «Хімія» хімічного факультету). Вінниця: ДонНУ, 2015. 198 с.
11. Супрунович С. В., Кормош Ж. О., Сливка Н. Ю. Статистичні та хемометричні методи в хімії : Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. Луцьк: ВНУ імені Лесі Українки, 2022. 210 с.
12. Herbert C.G., Johnsone R.A.W. Mass spectrometry basics. CRC Press, 2003. 325 р.
13. Кичкирук О.Ю., Шляніна А.В., Кусяк Н.В. Аналітична хімія : навчальний посібник. Житомир : ЖДУ імені Івана Франка, ПП «Євро-Волинь», 2022. 240 с.
14. Бірюкович Л. О. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія [Електронний ресурс] : підручник для студ. спеціальності 132 Матеріалознавство. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. 234 с.
15. Поплавко Ю. М Фізика твердого тіла. Том 1: Структура, квазічастинки, метали, магнетики : підручник. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017. 415 с.
16. Сколоздра Л.Л. Кристалографія. Кристалохімія та мінералогія: навчальний посібник, Луцьк : Вид. центр ЛНТУ. 2010. 240 с.
17. Ворошилов Ю.В., Сливка В.Ю. Основи кристалографії та кристалохімії. Ужгород : Ужгородський національний ун-т. 2001. 210 с.
18. International Tables for Crystallography. Vol. A: Space-group Symmetry / Ed. Th. Hahn. Dordrecht – Holland: D. Reidel Publishing Company, 1983. – 854 p.
19. Фрей К. Минералогическая энциклопедия : [пер. с англ.]. Луцьк: Недра, 1985. 512 с.
20. Мінаєва В. О. Хроматографічний аналіз : підручник для студентів вищих навчальних закладів. Черкаси : вид. від. ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2013. 284 с.
21. Григор’єва В. В., Самійленко В. М., Сич А. М., Голуб О. А. Загальна хімія : підручник. Київ : Вища школа., 2019. 471 с.
22. Mori S., Barth H. G. Size Exclusion Chromatography. Berlin : Springer, 1999. 234 p.
23. Air monitoring by spectroscopic technigues / edited by M. W. Sigrist. New York : John Wiley & Sons, 1994. 531 p.
24. Frey P. R. Chemistry Problems and How to Solve Them. New York : Barnes & Noble, Inc., 1959. 228 p.
25. P. Atkins, J. de Paula, J. Keeler Atkins’ Physical Chemistry, 11th Edition. Oxford UniversityPress, 2018, 1040 p

Навчальне видання

(українською мовою)

Синяєва Ніна Петрівна

Омельянчик Людмила Олександрівна

Луганська Ольга Василівна

**КРИСТАЛОХІМІЯ**

Термінологічний словник для студентів освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр» напряму підготовки «Хімія»

Рецензент *О.В.Власова*

Відповідальний за випуск *Л.О. Омельянчик*

Коректори: *Л.М.Стовбур, Т.Г.Ніколаєва*