



Кузьмин Н.Н.

**Общие понятия о
симметрии**

2020

Введение

Кристаллография — наука о кристаллах, их структуре, возникновении и свойствах

Кристалл — это

- термин произошел от греч. κρύσταλλος, что первоначально означало лёд, в дальнейшем — горный хрусталь и кристалл (в общем понимании)

Введение



Кристалл анатаза TiO_2



Кристалл берилла $\text{Al}_2[\text{Be}_3(\text{Si}_6\text{O}_{18})]$

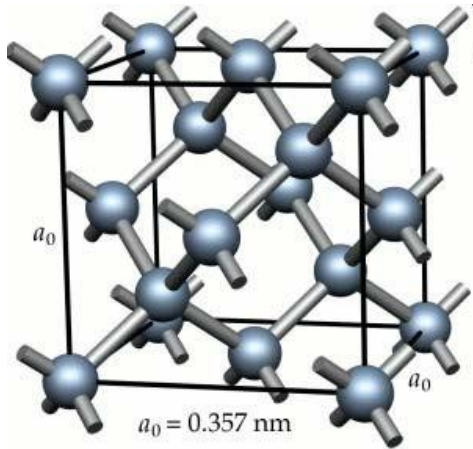


Кристалл гематита Fe_2O_3



Кристалл спессартина $\text{Mn}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$

Введение



Кристалл — это

- твердое тело, способное в определенных условиях самоограняться
- твердое тело, в котором атомы расположены закономерно, образуя трехмерно-периодическую пространственную укладку – кристаллическую решетку

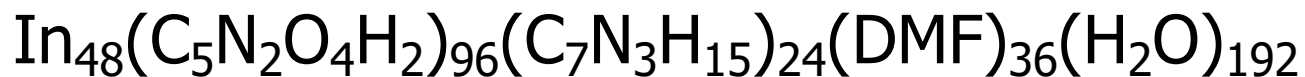
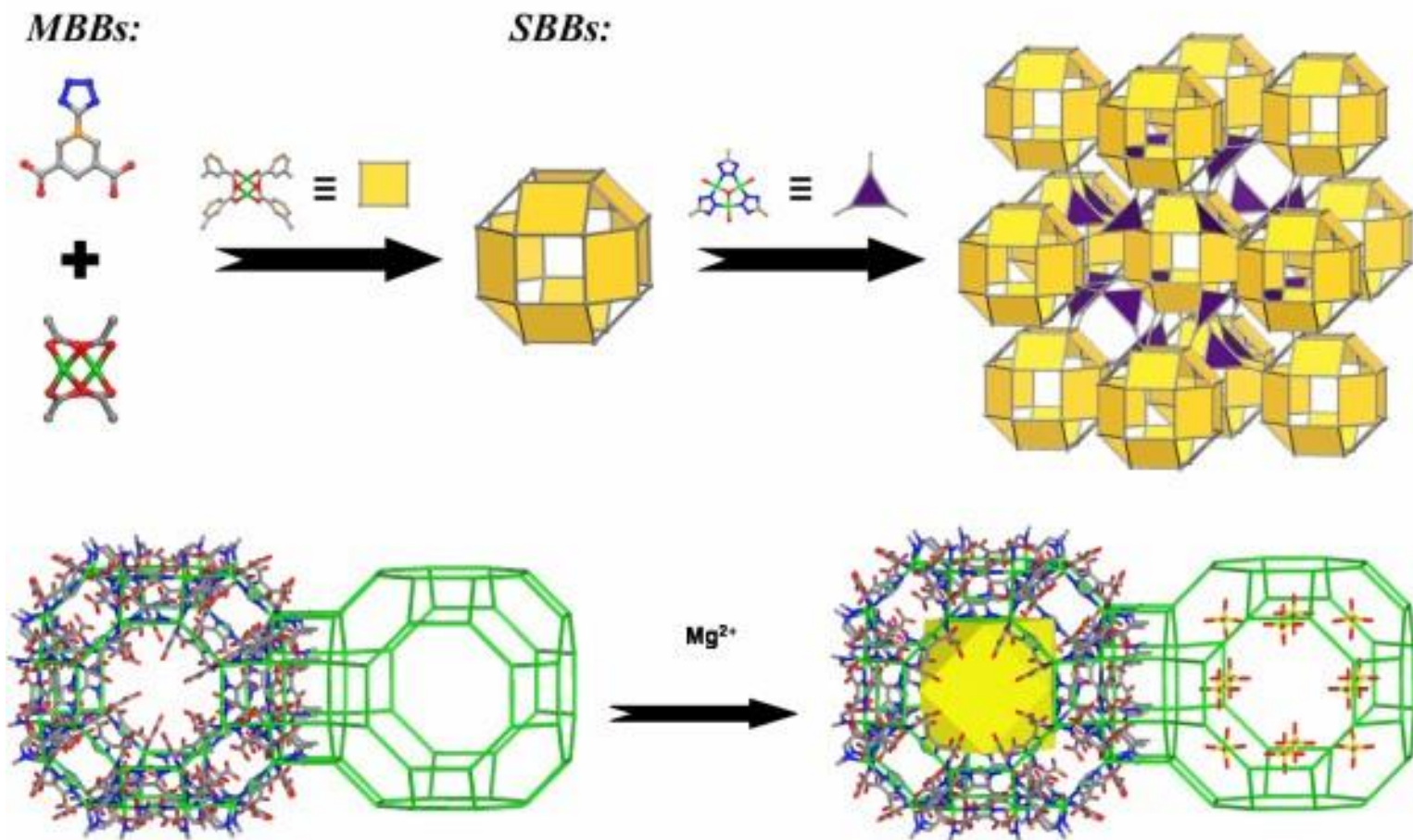
Введение

Кристаллохимия — наука о кристаллических структурах и их связи с природой вещества

Кристаллохимия изучает связь между кристаллическими структурами (расположением атомов) веществ, химическим составом, характером химических связей и свойствами веществ

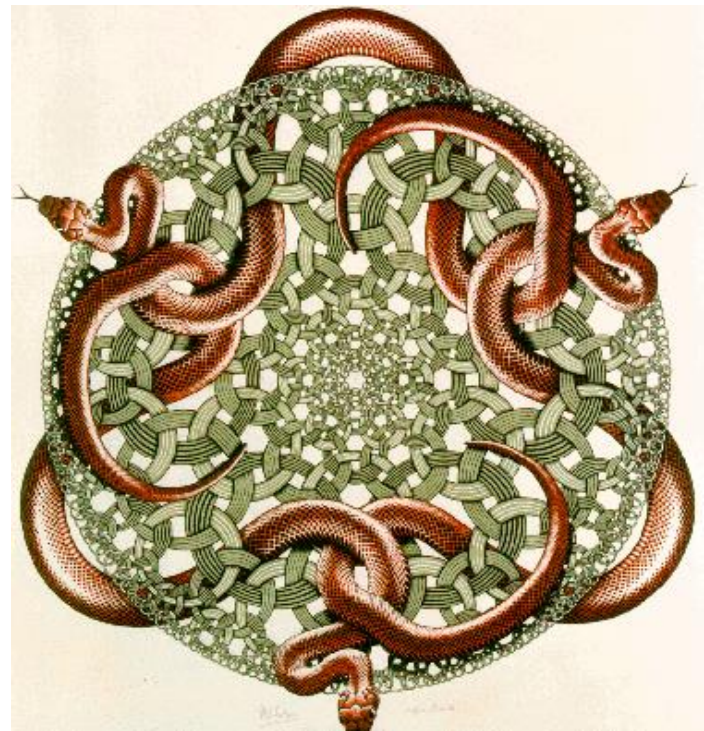
Примеры структур

Цеолито-подобные металлоорганические структуры



Симметрия кристаллов

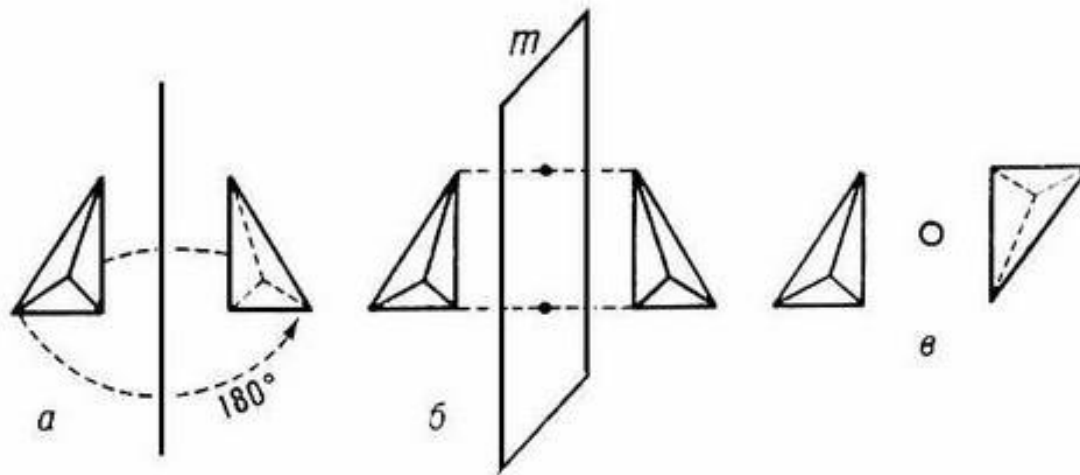
Симметрия — свойство геометрической фигуры при определенном преобразовании пространства приобретать новое положение, неотличимое от исходного (*самосовмещаться*).



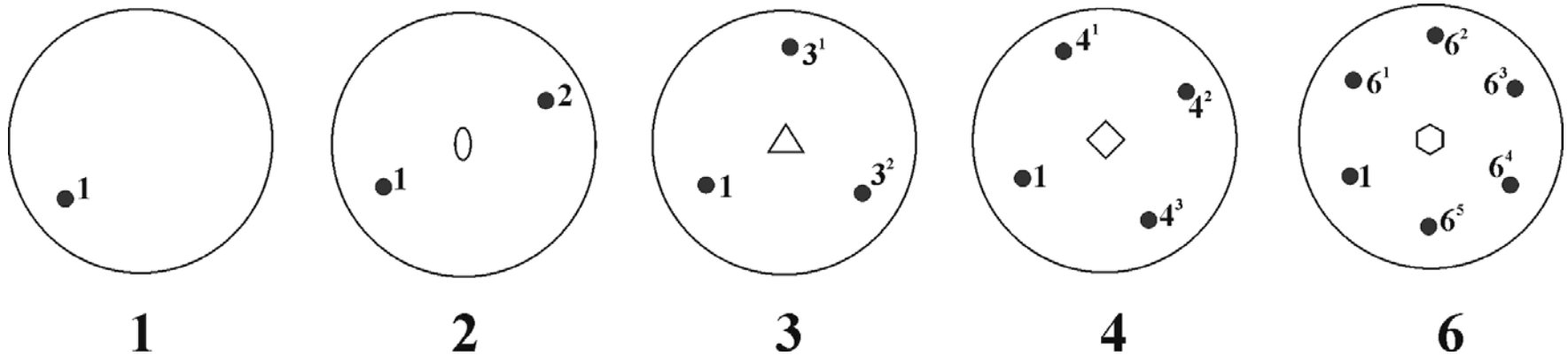
Симметрия кристаллов

Операция симметрии – отражение геометрической фигуры самой в себя при некотором изометрическом преобразовании пространства

Элемент симметрии – геометрическое место точек, переходящее в себя при симметрическом преобразовании пространства



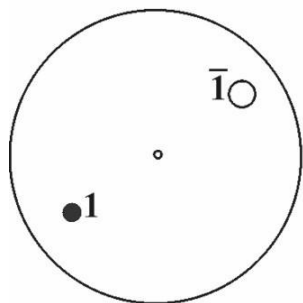
Элементы симметрии кристаллов



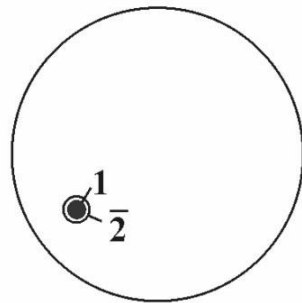
Простые оси симметрии – поворот на угол $360^\circ/n$

n – порядок оси симметрии

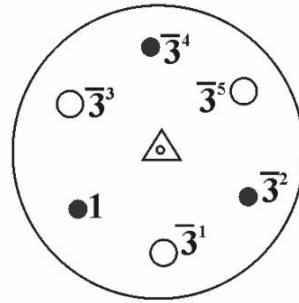
Элементы симметрии кристаллов



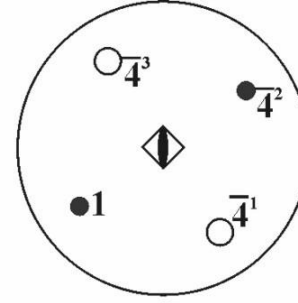
$$\bar{1} \equiv C$$



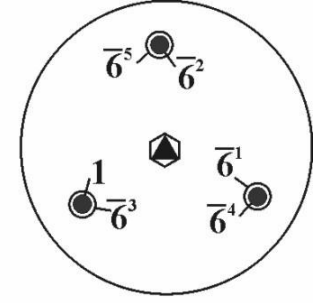
$$\bar{2} \equiv m_{\perp}$$



$$\bar{3} \equiv 3 + C$$



$$\bar{4}$$



$$\bar{6} \equiv 3 + m_{\perp}$$

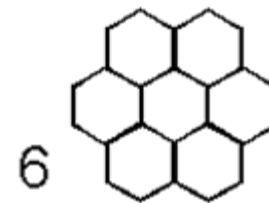
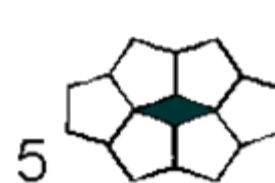
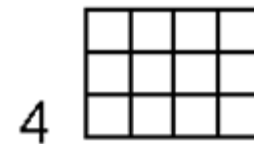
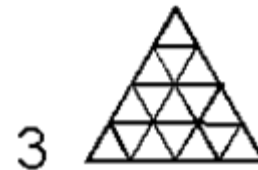
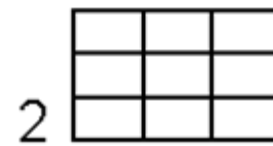
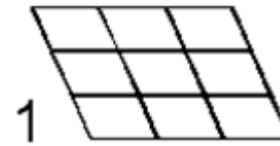
Инверсионные оси симметрии – поворот на угол $360^\circ/n$ плюс отражение в **точке инверсии**

n – порядок оси симметрии

Элементы симметрии кристаллов

Отсутствие осей симметрии 5 порядка и выше 6:

1. Невозможность
заполнения
пространства
правильными n -
угольниками, где $n = 5,$
 $7, 8...$

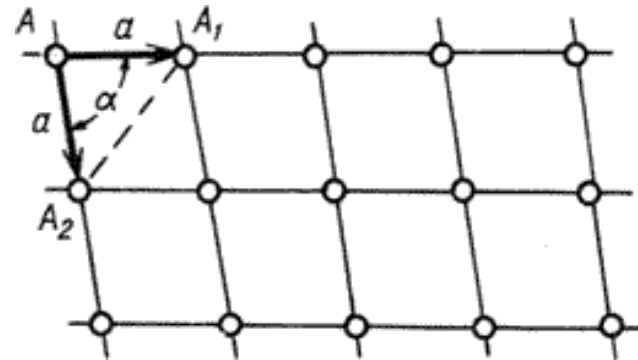


Элементы симметрии кристаллов

Отсутствие осей симметрии 5 порядка и выше 6:

2. Рассмотрение возможных порядков осей, перпендикулярных узловой сетке:

При минимальном расстоянии между узлами одного ряда в треугольнике AA_1A_2 сторона $A_1A_2 \geq a$, следовательно $\alpha \geq 60^\circ$ (если узел взят на оси перпендикулярной узловой сетке, то ее порядок не может быть больше 6)



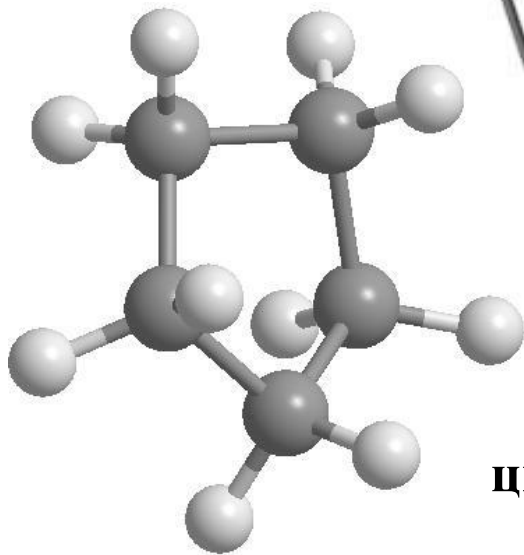
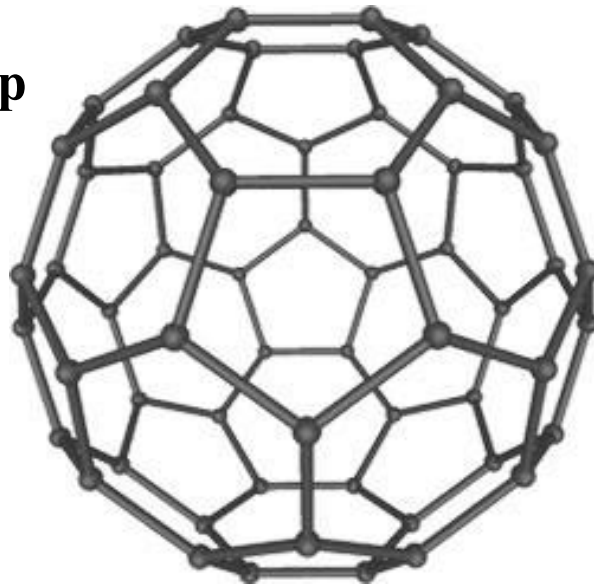
Любая параллелограмматическая сетка обладает L_2 , перпендикулярной слою. При наличии оси нечетного порядка их взаимодействие будет давать ось с удвоенным порядком $L_n + 1 \cdot L_2 = L_{2(n+1)}$:

$L_1 \rightarrow L_2$, $L_3 \rightarrow L_6$, а $L_5 \rightarrow L_{10}$, что противоречит предыдущему условию

Элементы симметрии кристаллов

Наличие запрещенных элементов симметрии:

бакминстер
фуллерен



ЦИКЛОПЕНТАН



Элементы симметрии кристаллов

Сингония (от греч. σύν - «согласно, вместе», и γωνία - «угол») - одно из подразделений кристаллов по признаку формы их элементарной ячейки. Применяется в кристаллографии для категоризации кристаллов.

Элементы симметрии кристаллов

Категория	Сингония	Признак
Низшая	Триклинная	Ось 1-го порядка
	Моноклинная	Одна ось 2-го порядка
	Ромбическая	Три \perp оси 2-го порядка
Средняя	Тригональная	Одна ось 3-го порядка
	Тетрагональная	Одна ось 4-го порядка
	Гексагональная	Одна ось 6-го порядка
Высшая	Кубическая	Четыре оси 3-го порядка

Точечные группы

32 вида симметрии

Триклинная	1	-1						Группы симметрии, операции которых оставляют хотя бы одну точку пространства на месте
Моноклинная	2	m	$2/m$					
Ромбическая	222	$mm2$	mmm					
Тетрагональная	4	-4	$4/m$	422	$4mm$	$-42m$	$4/mmm$	
Тригональная	3	-3	32	$3m$	$-3m$			
Гексагональная	6	-6	$6/m$	622	$6mm$	$-62m$	$6/mmm$	
Кубическая	23	$m-3$	432	$-43m$	$m-3m$			

Центросимметричные группы

Символы Германа - Могена

Были предложены немецким кристаллографом Карлом Германом в 1928 г. и модифицированы французским минералогом Шарлем-Виктором Могеном в 1931 г. Также называются международными символами, поскольку используются в Интернациональных Таблицах по Кристаллографии, начиная с их первого издания в 1935 г.

Обозначаются симметрически неэквивалентные элементы симметрии

Поворотные оси симметрии обозначают арабскими цифрами — 1, 2, 3, 4 и 6.

Инверсионные оси обозначают арабскими цифрами с чёрточкой сверху — $\bar{1}$ $\bar{3}$ $\bar{4}$ $\bar{6}$, при этом ось $\bar{2}$, которая является зеркальной плоскостью симметрии, обозначается символом m (от англ. mirror - зеркало)

Символы Шенфлиса

C_n — группы с единственным особым направлением, представленным поворотной осью симметрии

C_{ni} — группы с единственной инверсионной осью симметрии.

C_v (от нем. vertical — вертикальный) — для плоскостей, расположенных вдоль единственной или главной оси симметрии, которая всегда выбирается вертикальной.

C_h (от нем. horisontal — горизонтальный) — для плоскости, перпендикулярной к главной оси симметрии.

S (от нем. spiegel — зеркало) — для плоскости неопределенной ориентации, то есть не фиксированной ввиду отсутствия в группе иных элементов симметрии

Символы Шенфлиса

O, T — группы симметрии с несколькими осями высшего порядка — группы кубической сингонии — обозначаются буквой O в случае, если они содержат полный набор осей симметрии, или буквой T — если в группе отсутствуют диагональные оси симметрии.

D_n — является группой C_n с добавочной осью симметрии второго порядка, перпендикулярной исходной оси.

D_{nh} также имеет горизонтальную плоскость симметрии.

D_{nv} также имеет вертикальную плоскость симметрии.

n может равняться 1, 2, 3, 4, 6.

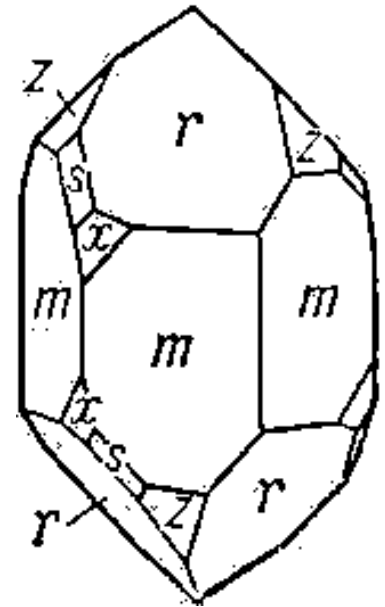
Простые формы

Простая форма — совокупность граней, размноженных элементами симметрии

Всего известно 47 геометрически различных простых форм

Если в кристалле есть одинаковые грани (одинаковые по форме, размеру,...), то они должны быть связаны элементами симметрии.

И наоборот, если есть элементы симметрии, то они должны связывать (объединять) какие-нибудь грани.



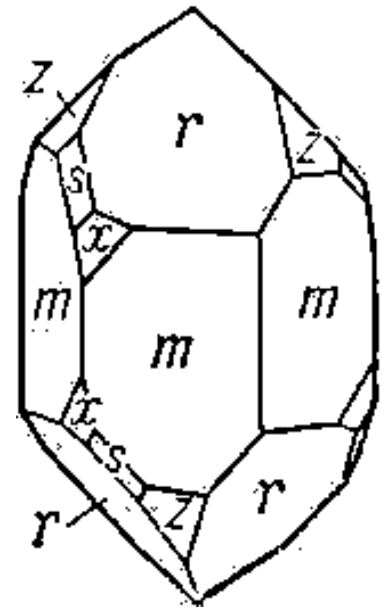
Простые формы

Простая форма — совокупность граней, размноженных элементами симметрии

Всего известно 47 геометрически различных простых форм

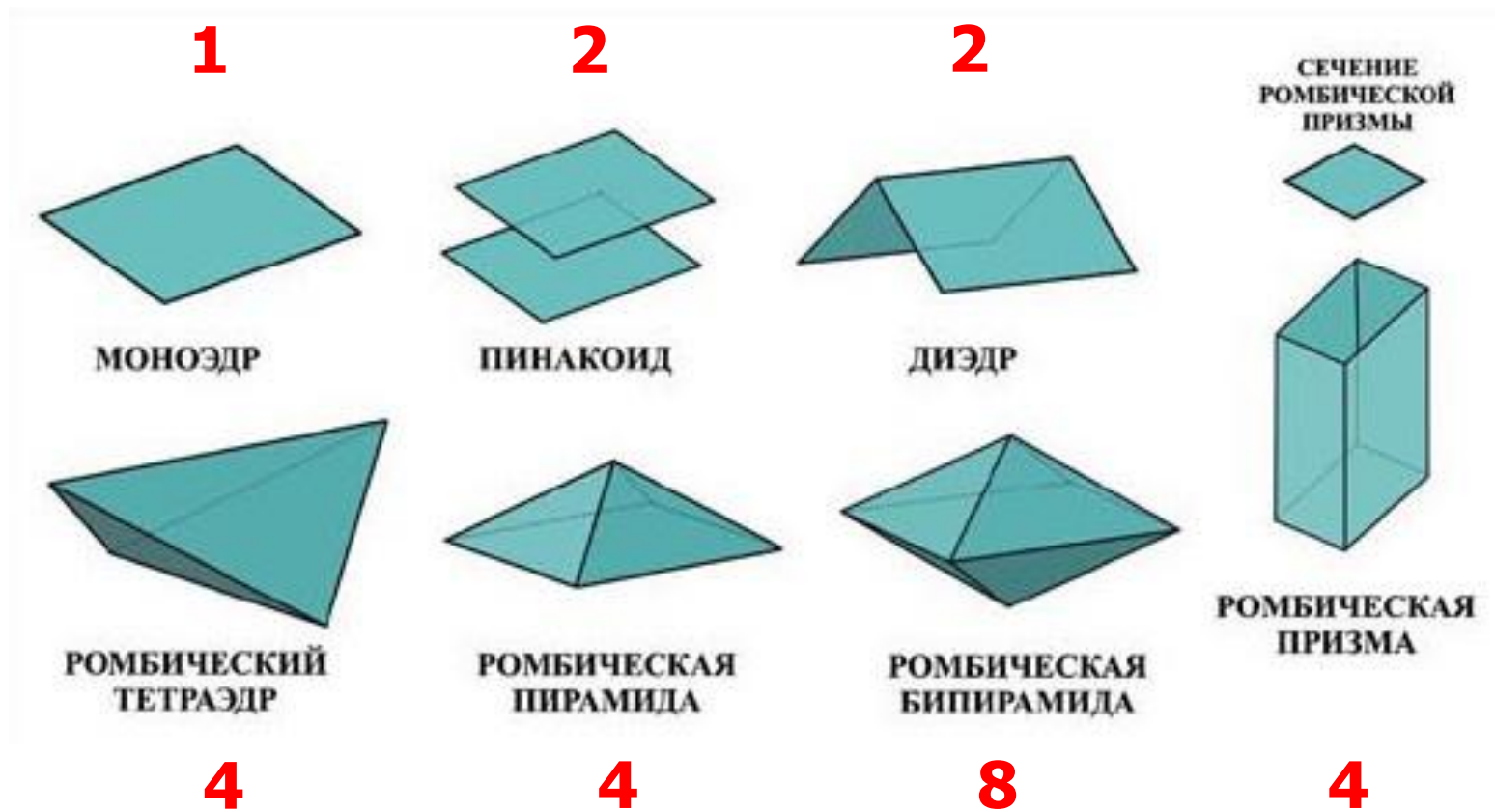
Для каждой категории есть свой набор не повторяющихся простых форм.

Есть лишь незначительное пересечение в низшей и средней категориях.



Простые формы

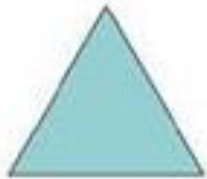
Низшая категория



Простые формы

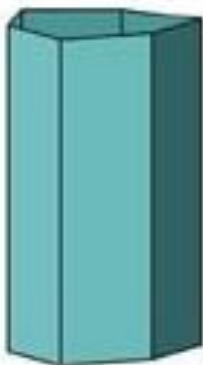
Средняя категория. Призмы

3



ТРИГОНАЛЬНАЯ

6



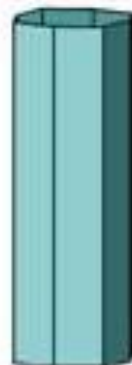
ДИТРИГОНАЛЬНАЯ

4



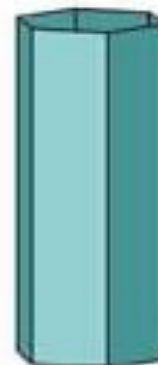
ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ

8



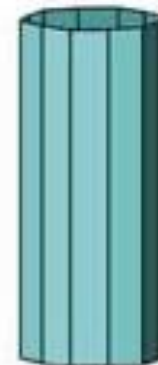
ДИТЕТРАГОНАЛЬНАЯ

6



ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ

12



ДИГЕКСАГОНАЛЬНАЯ

Простые формы

Средняя категория. Пирамиды

3



ТРИГОНАЛЬНАЯ

4



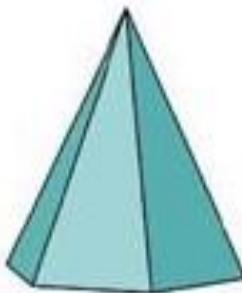
ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ

6



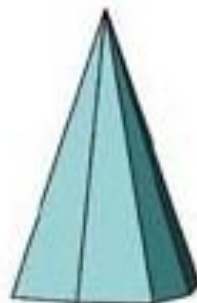
ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ

6



ДИТРИГОНАЛЬНАЯ

8



ДИТЕТРАГОНАЛЬНАЯ

12



ДИГЕКСАГОНАЛЬНАЯ

Простые формы

Средняя категория. Дипирамиды

6



ТРИГОНАЛЬНАЯ

8



ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ

12



ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ

12



ДИТРИГОНАЛЬНАЯ

16



ДИТЕТРАГОНАЛЬНАЯ

24

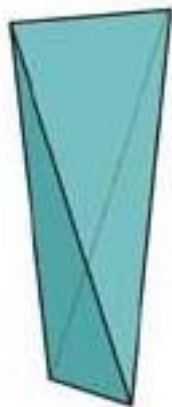


ДИГЕКСАГОНАЛЬНАЯ

Простые формы

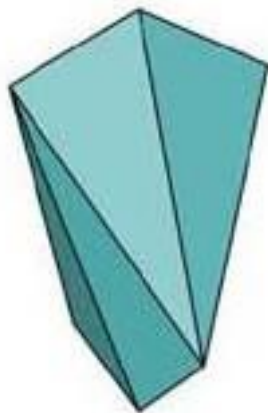
Средняя категория. Тетраэдры и скаленоэдры

4



ТЕТРАГОНАЛЬНЫЙ
ТЕТРАЭДР

8



ТЕТРАГОНАЛЬНЫЙ
СКАЛЕНОЭДР

6



РОМБОЭДР

12

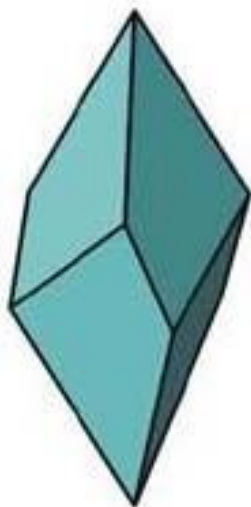


ТРИГОНАЛЬНЫЙ
СКАЛЕНОЭДР

Простые формы

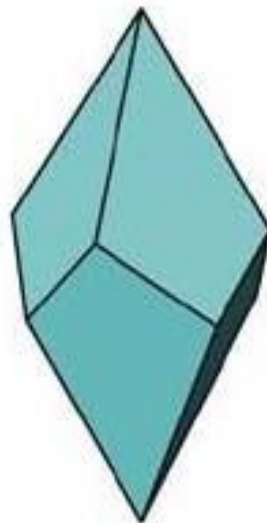
Средняя категория. Трапецеэдры

6



ТРИГОНАЛЬНЫЙ

8



ТЕТРАГОНАЛЬНЫЙ

12



ГЕКСАГОНАЛЬНЫЙ

Простые формы

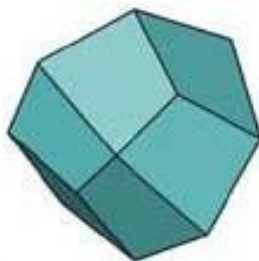
Высшая категория. Производные тетраэдра

12



ТРИГОНТРИТЕТРАЭДР

12



ТЕТРАГОНТРИТЕТРАЭДР

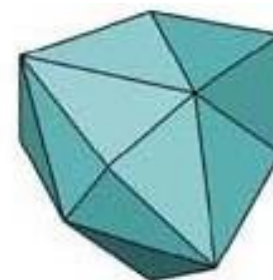
ПЕНТАГОНТРИТЕТРАЭДР

12



ТЕТРАЭДР

4



ГЕКСАТЕТРАЭДР

24

Простые формы

Высшая категория. Производные октаэдра

24



ТРИГОНТРИОКТАЭДР

24



ТЕТРАГОНТРИОКТАЭДР



ОКТАЭДР

8

24



ПЕТАГОНТРИОКТАЭДР

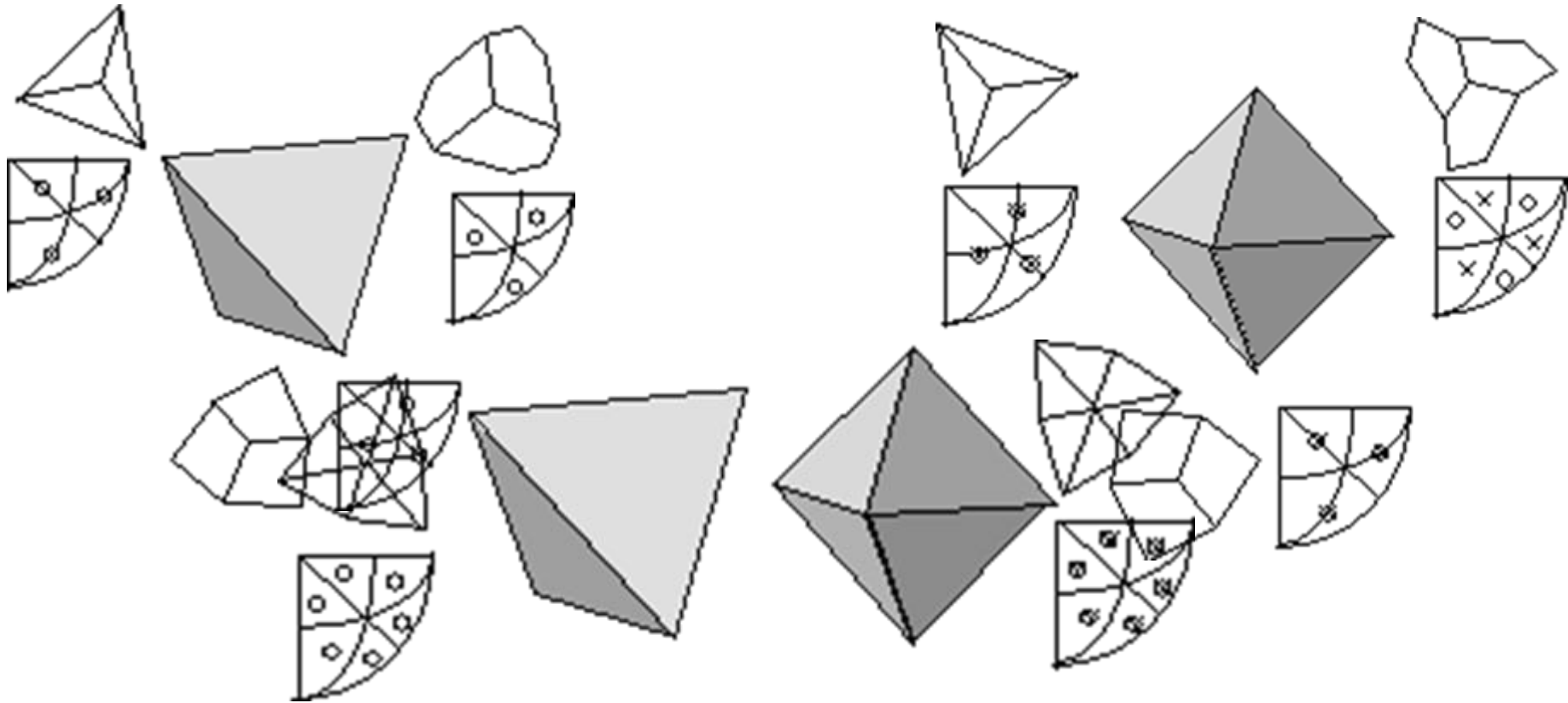
48



ГЕКСАОКТАЭДР

Простые формы

Высшая категория.



Простые формы

Высшая категория. Производные гексаэдра

12

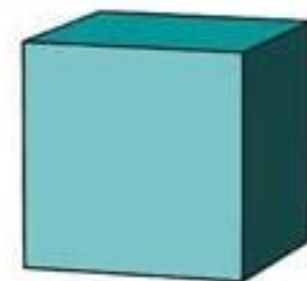


ПЕНТАГОНДОДЕКАЭДР

24



ДИДОДЕКАЭДР



ГЕКСАЭДР (КУБ)

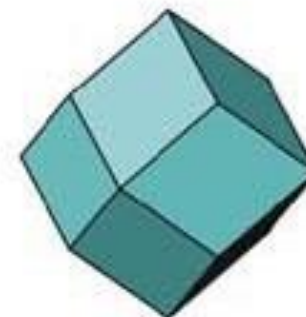
6

24



ТЕТРАГЕКСАЭДР

12



РОМБОДОДЕКАЭДР

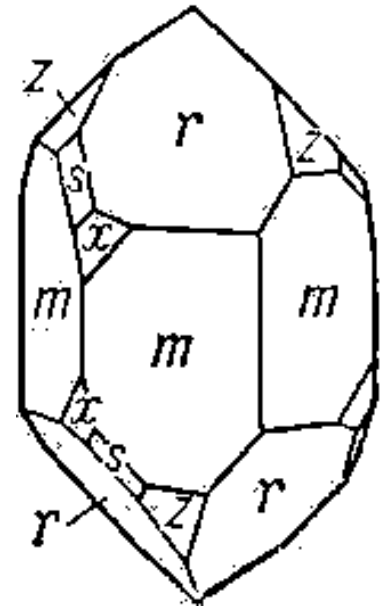
Простые формы

Частные - грани которых параллельны, перпендикулярны или симметрично пересекают элементы симметрии

Общие - грани которых произвольно пересекают все элементы симметрии

Для каждого вида симметрии есть только одна **общая простая форма**.

Для ее определения, можно поставить на проекции элементов симметрии «грань» в произвольном положении и подействовать на нее всеми элементами симметрии.



Элементы симметрии кристаллических структур

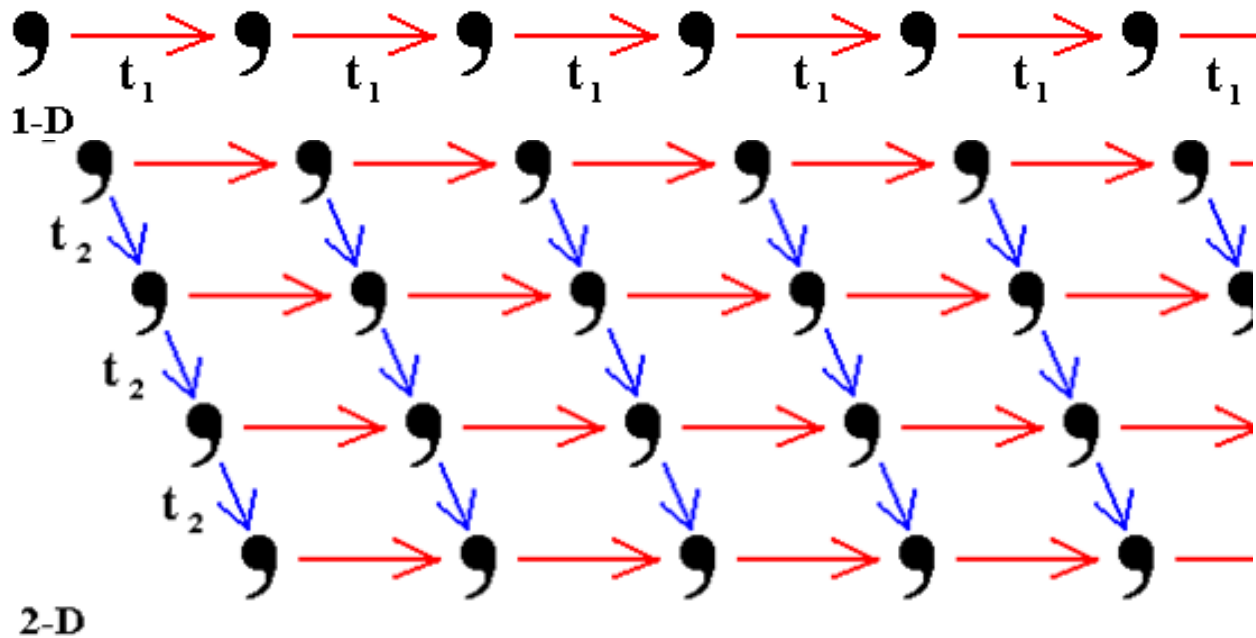
Кристаллические многогранники рассматриваются в рамках «закрытых» элементов симметрии (элементы симметрии неперiodических структур)

Но кристаллы состоят из атомов, закономерное распределение в пространстве (объеме) которых также описывается теорией симметрии


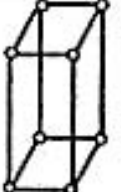
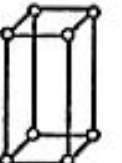

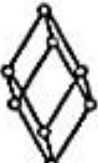
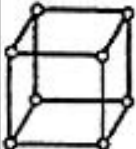





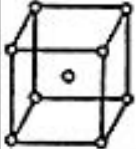

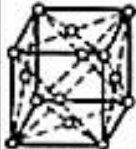
Для их описания применяют «открытые» элементы симметрии – соответствующие им симметрические операции содержат в себе поступательное движение

Элементы симметрии кристаллических структур

Трансляция – симметрическая операция, представляющая собой поступательное перемещение на величину некоторого вектора \mathbf{t} .



Элементы симметрии кристаллических структур

Сингония Тип решетки	Три- клинная	Моно- клинная	Ромби- ческая	Тетраго- нальная	Триго- нальная (ромбоэд- рическая)	Гексаго- нальная	Куби- ческая
Примитивный							
Базоцентри- рованный							
Объемноцен- трированный							
Гранецентри- рованный							

Элементы симметрии кристаллических структур

Оси симметрии, перпендикулярные плоскости чертежа

Система обозначений осей симметрии

	Поворотные оси	Инверсионные оси		Винтовые оси				
1	нет обозн.	$\bar{1}$	\circ	2_1				
2		$\bar{2}$	m_{\perp}		3_2			
3		$\bar{3}$						
4		$\bar{4}$						
6		$\bar{6}$						

Оси симметрии, параллельные плоскости чертежа

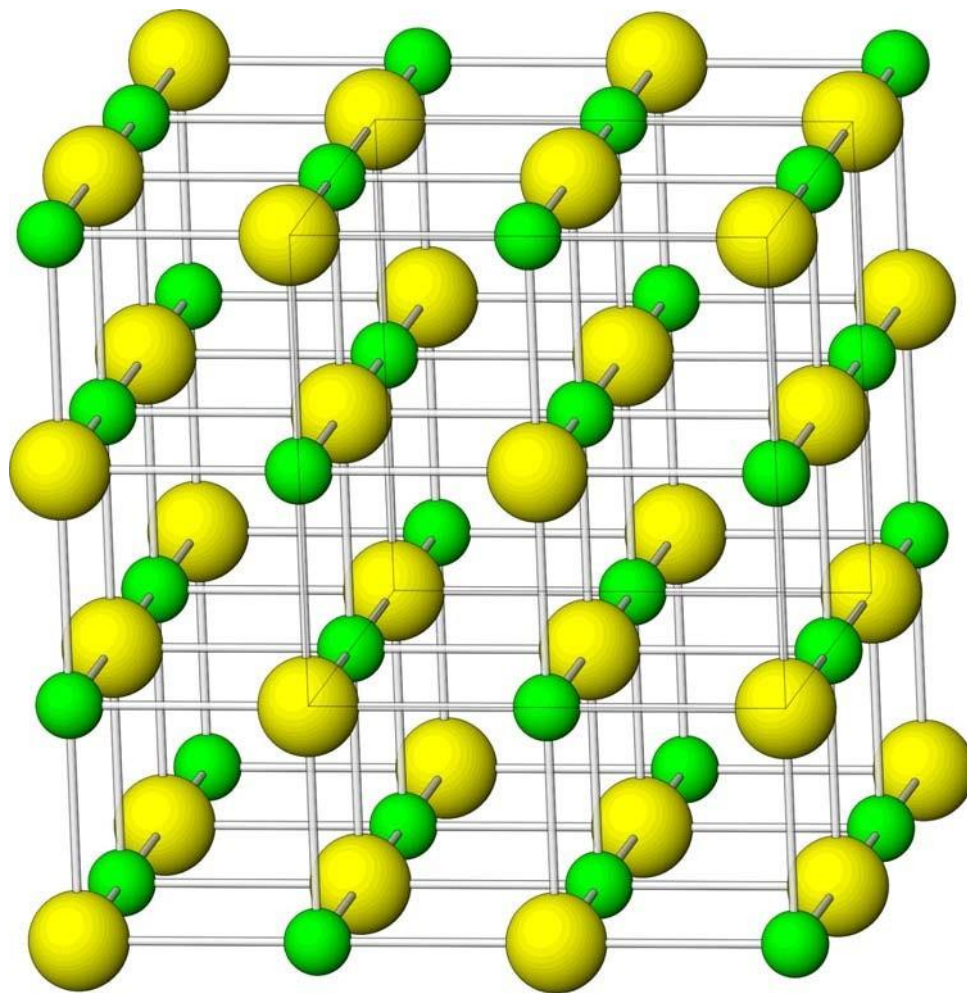
2		4		4_2		4	
2_1		4_1		4_3			

Оси симметрии, расположенные косо по отношению к плоскости чертежа

2		3		3_2	
2_1		3_1		$\bar{3}$	

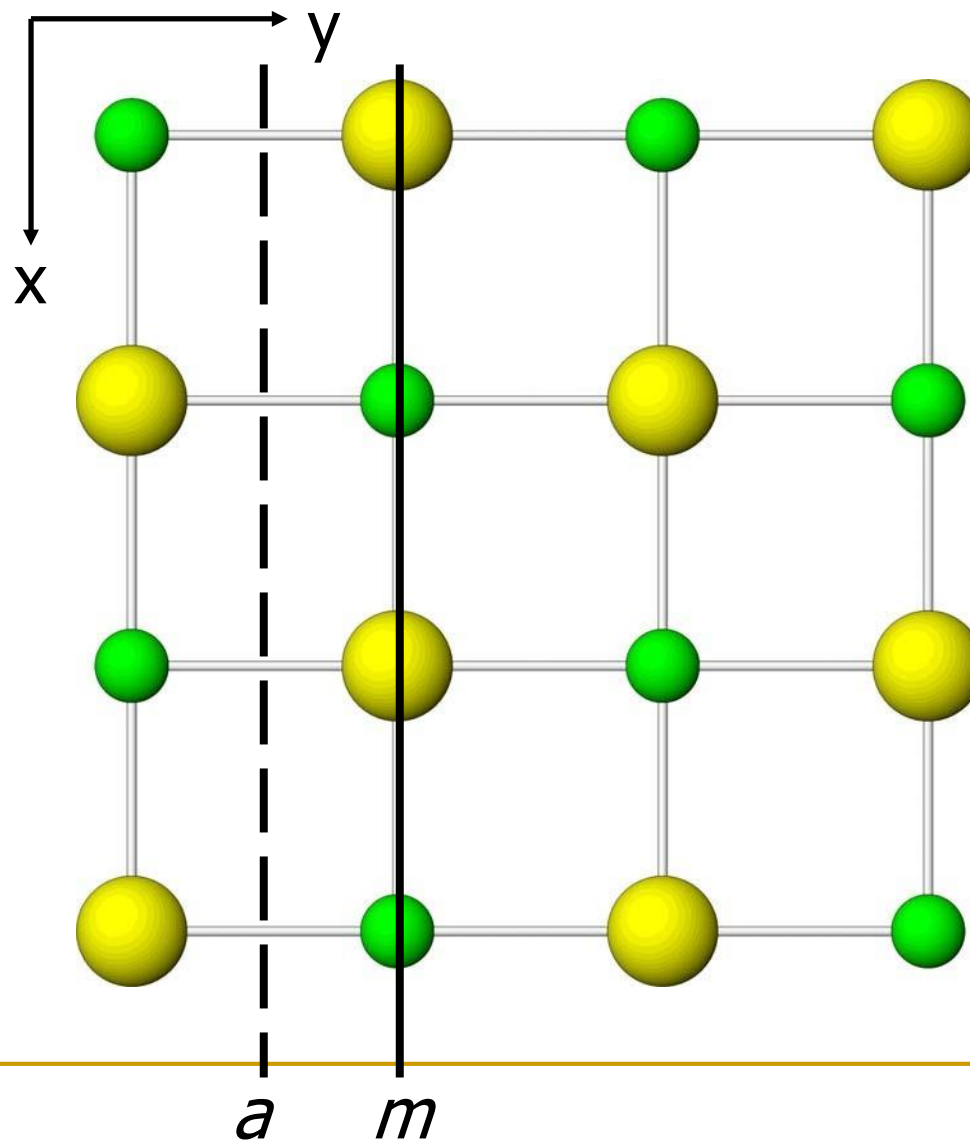
Элементы симметрии кристаллических структур

**Структура
NaCl**



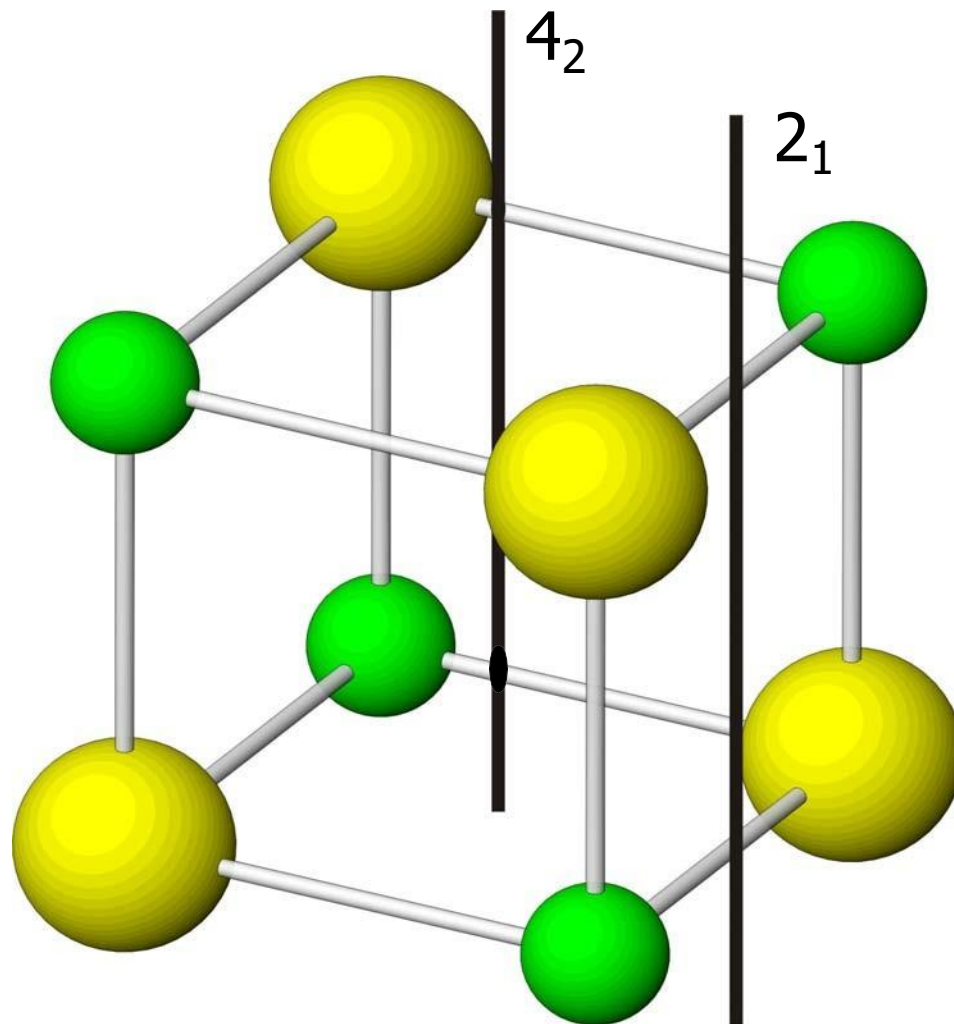
Элементы симметрии кристаллических структур

Структура NaCl



Элементы симметрии кристаллических структур

Структура NaCl

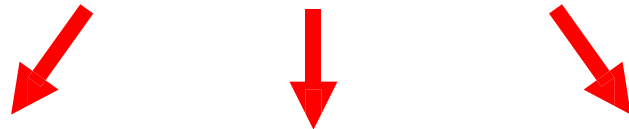


Пространственные группы

Пространственная группа — совокупность преобразований симметрии кристаллической решетки, совмещающих эту решетку саму с собой

Всего существует 230 различных пространственных групп симметрии

32 точечные группы



230 пространственных групп

Правила записи пространственных групп

Триклинная сингония:

1. Тип решетки Браве (всегда P -ячейка при стандартной установке)
2. $P1$ или $P-1$

Моноклинная сингония:

1. Тип решетки Браве
2. Ось 2-го порядка или перпендикулярная ей плоскость

Примеры: $P2_1/c$, $P2$, Cc

Правила записи пространственных групп

Ромбическая сингония:

1. Тип решетки Браве

2. Ось симметрии, совпадающая с первой кристаллографической осью (x) и перпендикулярная ей плоскость

3. Ось симметрии, совпадающая со второй кристаллографической осью (y) и перпендикулярная ей плоскость

4. Ось симметрии, совпадающая с третьей кристаллографической осью (z) и перпендикулярная ей плоскость

Примеры: $Ibam$, $P222_1$, $Cma2$

Правила записи пространственных групп

Тригональная и гексагональная сингония:

1. Тип решетки Браве
2. Направление $[0001]$ – ось симметрии, совпадающая с z и перпендикулярная ему плоскость
3. Большая диагональ: плоскость, проходящая вдоль большой диагонали и (или) перпендикулярная ей ось
4. Малая диагональ: плоскость, проходящая вдоль малой диагонали и (или) перпендикулярная ей ось

Примеры: $R6_3/mc$, $R6_3/mst$, $R6_322_1$

Правила записи пространственных групп

Тетрагональная сингония:

1. Тип решетки Браве
 2. Направление $[001]$ – ось симметрии, совпадающая с z и перпендикулярная ему плоскость
 3. Направление $[100] = [010]$ и перпендикулярная ему плоскость
 4. Диагональное направление $[110]$ и перпендикулярная ему плоскость
- Примеры: $I4_1/a$, $P-42m$, $I4_1/amd$

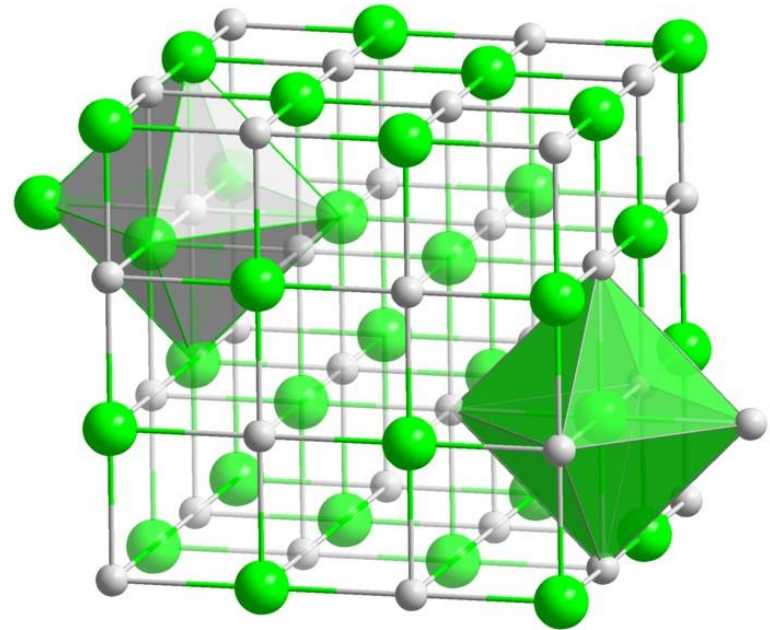
Кубическая сингония:

1. Тип решетки Браве
 2. Координатное направление $[100] = [010] = [001]$ и перпендикулярная ему плоскость
 3. Направление $[111]$ – ось 3-го порядка
 4. Диагональное направление $[110]$ и перпендикулярная ему плоскость
- Примеры: $Fm-3m$, $F-43m$, $Pn-3m$, $Pa-3$, $P2_13$

Координационные числа (КЧ)

Координационное число – это число ближайших к данному атому соседних атомов (лиганды) в структуре кристалла.

Причем в монокристаллической структуре учитываются атомы того же сорта, что и центральный, а в полиатомной – обязательно другого сорта.



Координационные полиэдры (КП)

Координационный полиэдр – геометрия расположения лигандов вокруг центрального атома.

Некоторые координационные полиэдры, встречающиеся в кристаллических структурах:

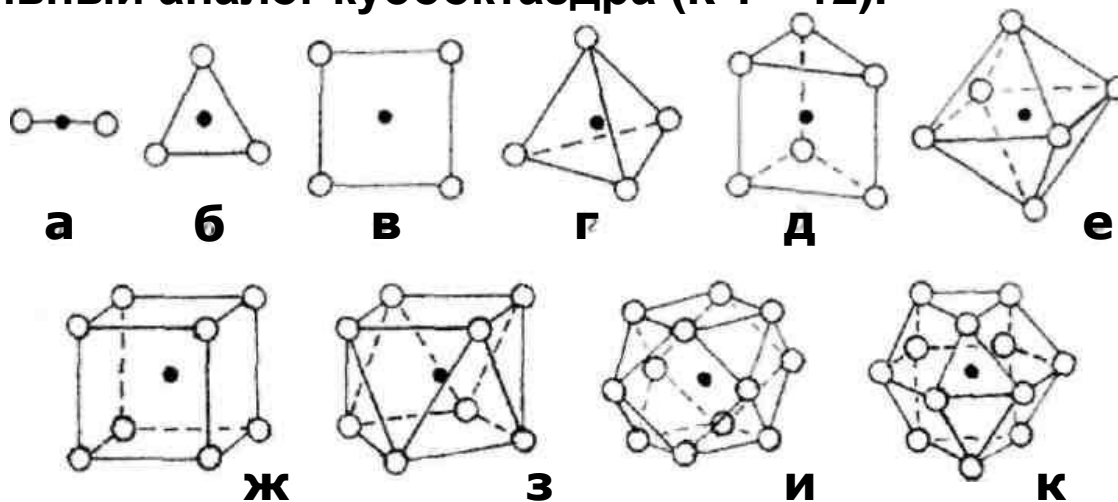
а — гантель (КЧ = 2); *б* — треугольник (КЧ = 3); *в* — квадрат (КЧ = 4)

г — тетраэдр (КЧ = 4); *д* — тригональная призма (КЧ = 6);

е — октаэдр (КЧ = 6); *ж* — куб (КЧ = 8); *з* — томсоновский куб (КЧ = 8)

и — архимедов кубооктаэдр (КЧ = 12)

к — гексагональный аналог кубооктаэдра (КЧ = 12).



Число формульных единиц (Z)

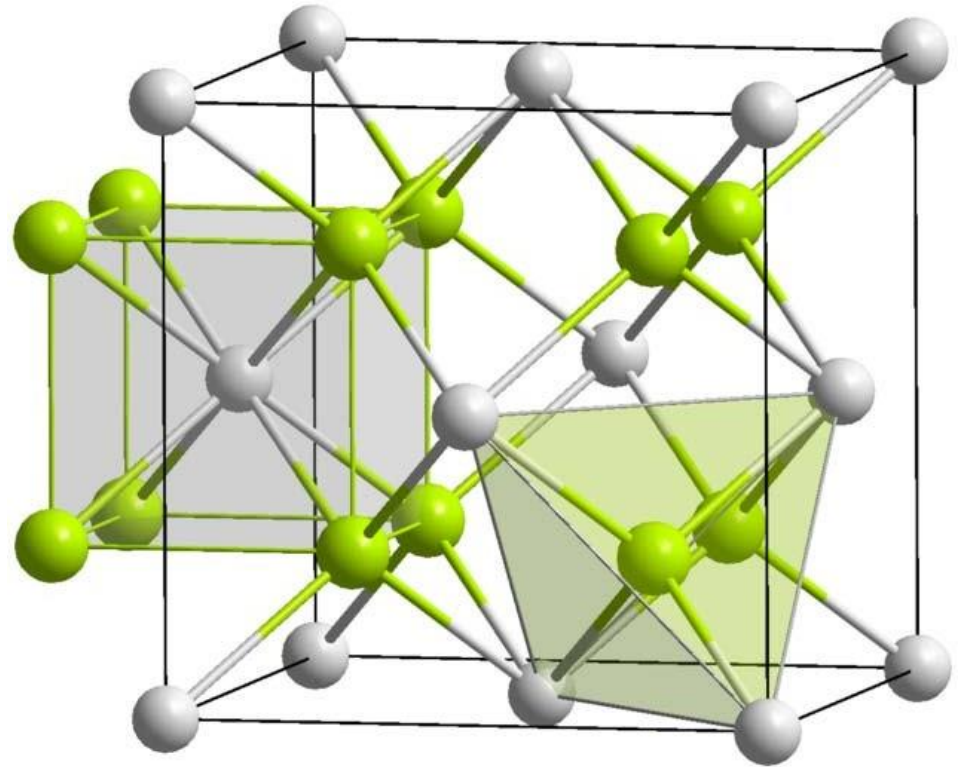
Z – количество элементарных формул соединения в одной ячейке.

Для флюорита:

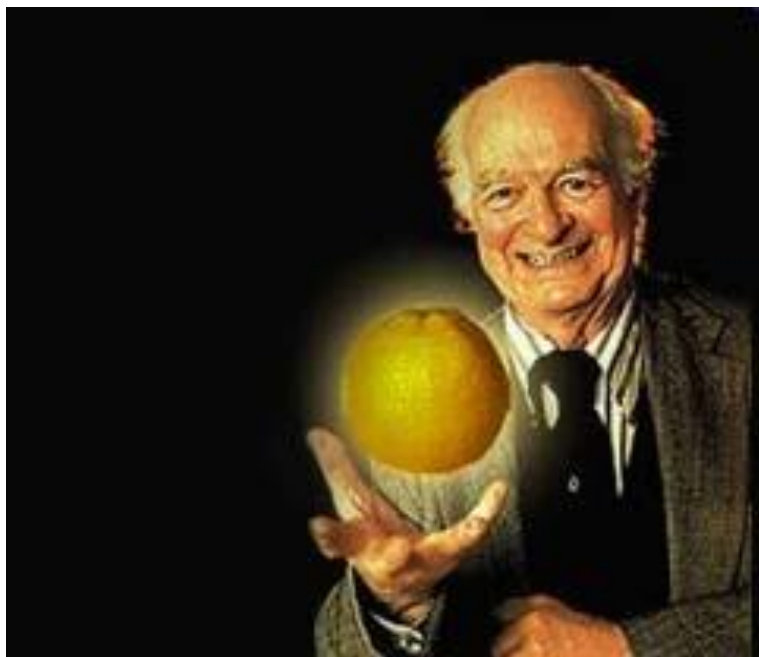
$$\text{Ca: } 1/8 * 8 + 1/2 * 6 =$$

$$4 \text{ F: } 1 * 8 = 8$$

$$\text{Ca}_4\text{F}_8 = 4 (\text{CaF}_2) - Z = 4$$



Правила Полинга



**Лайнус Карл Полинг
(1901-1994)**

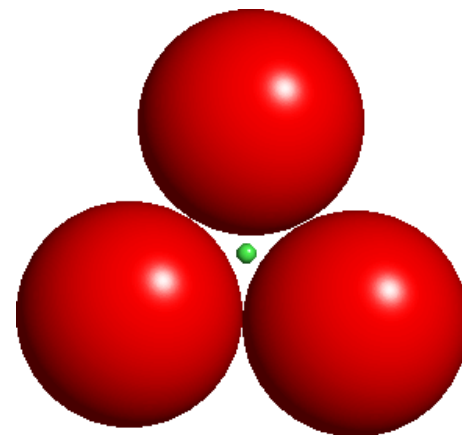
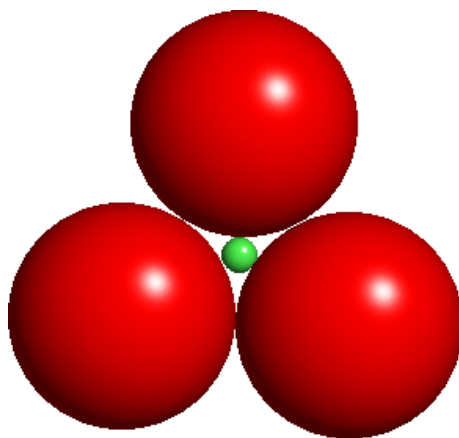
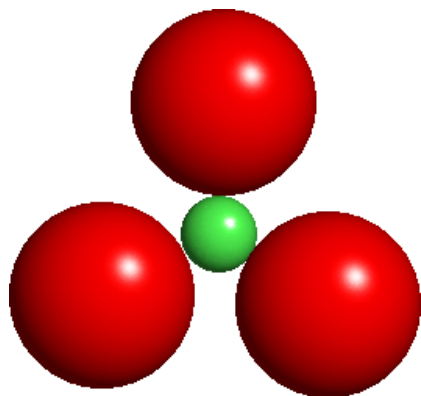
1-ое правило

расстояние катион - анион в координационном полиэдре определяется суммой ионных радиусов, а КЧ - их отношением

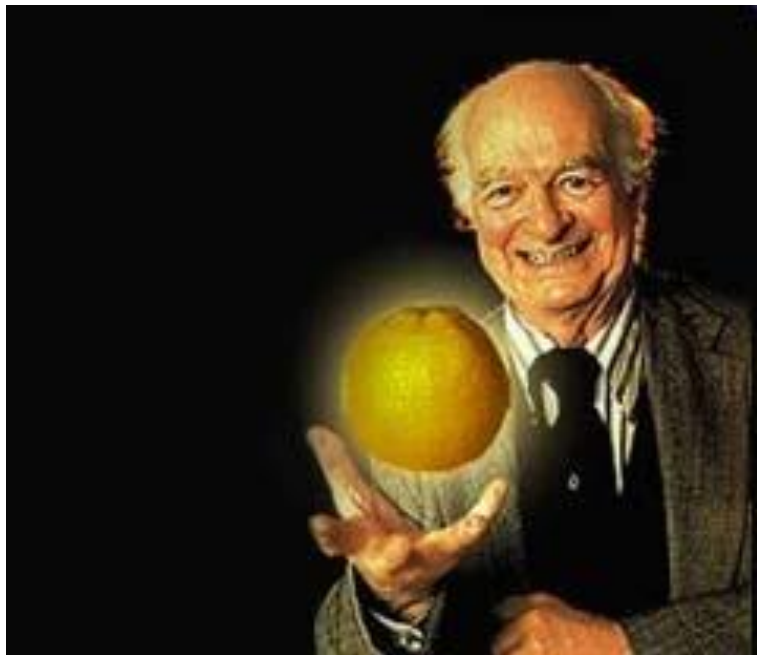
В плотнейших упаковках крупные ($R_k/R_a > 0,414$) катионы располагаются в октаэдрических пустотах, меньшие катионы занимают тетраэдрические позиции ($R_k/R_a = 0,414 - 0,215$)

Правила Полинга

1-ое правило



Правила Полинга



**Лайнус Карл Полинг
(1901-1994)**

2-ое правило

сумма валентных усилий катионов первой координационной сферы, сходящихся на анионах, должна быть численно равна или почти равна валентности аниона

в стабильной структуре должен соблюдаться локальный баланс валентностей

Правила Полинга

2-ое правило

$r(\text{Si}) = 0.39$ Angstroms

$r(\text{Al}) = 0.57$ Angstroms

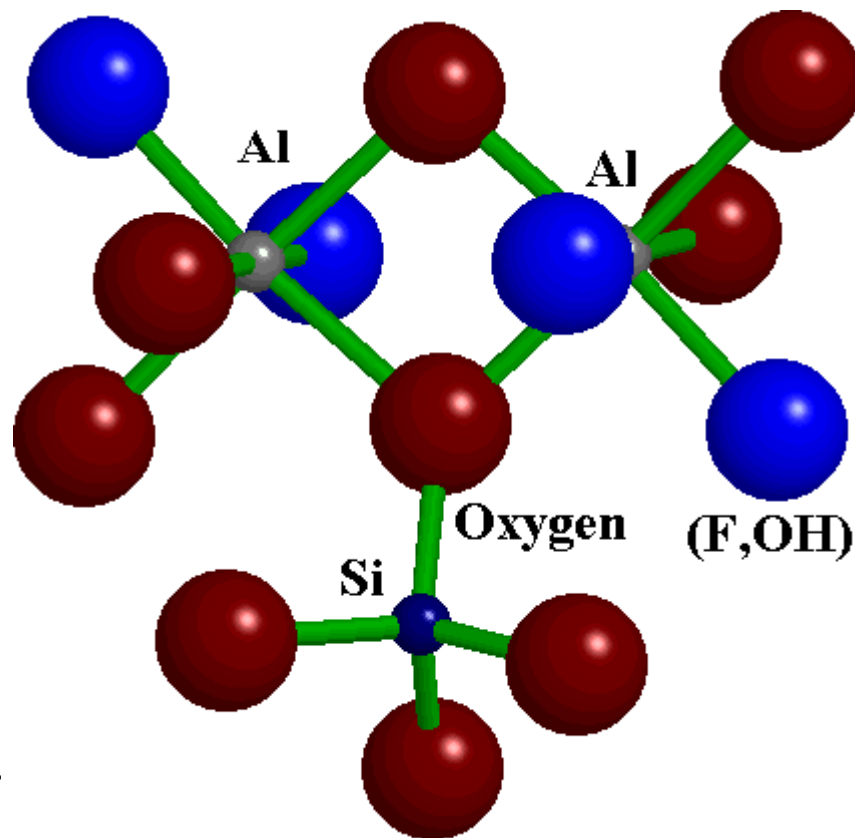
$r(\text{O}) = 1.32$ Angstroms

Сила связи $S = Z_{\text{кат}} / KЧ$

$r(\text{Si})/r(\text{O}) = 0.3 \rightarrow KЧ_{\text{Si}} = 4$

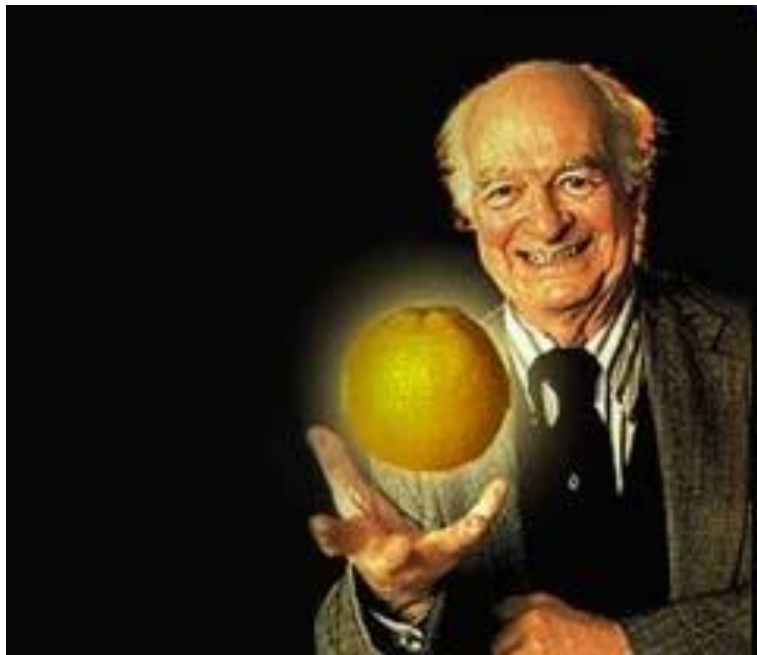
$r(\text{Al})/r(\text{O}) = 0.43 \rightarrow KЧ_{\text{Al}} = 6$

$S(\text{Al-O}) = 3/6 = 1/2$, $S(\text{Si-O}) = 4/4 = 1$
каждый O связан с $2\text{Al} + 1\text{Si}$.



Топаз - $\text{Al}_2\text{SiO}_4(\text{F},\text{OH})_2$

Правила Полинга



**Лайнус Карл Полинг
(1901-1994)**

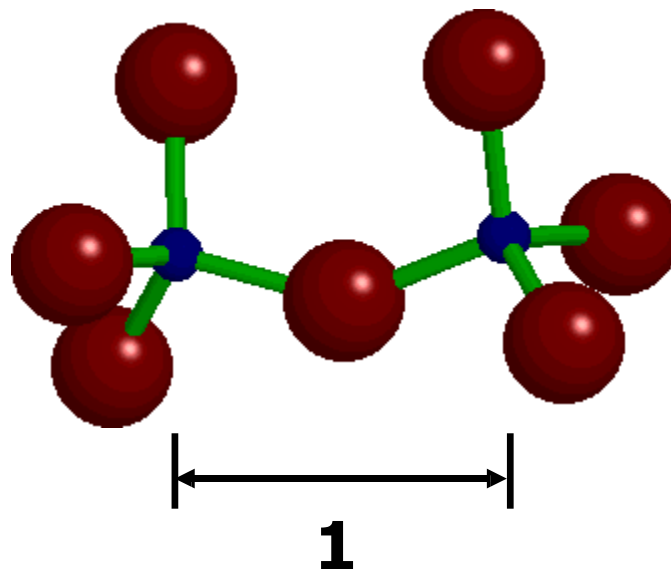
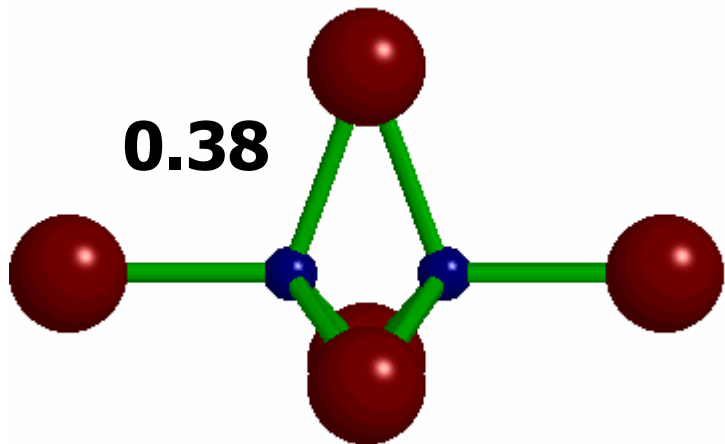
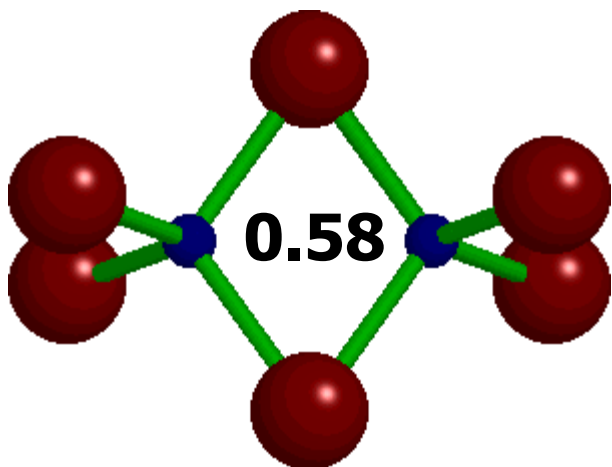
3-е правило

устойчивость структуры
снижается при наличии
общих ребер и особенно
граней координационных
полиэдров

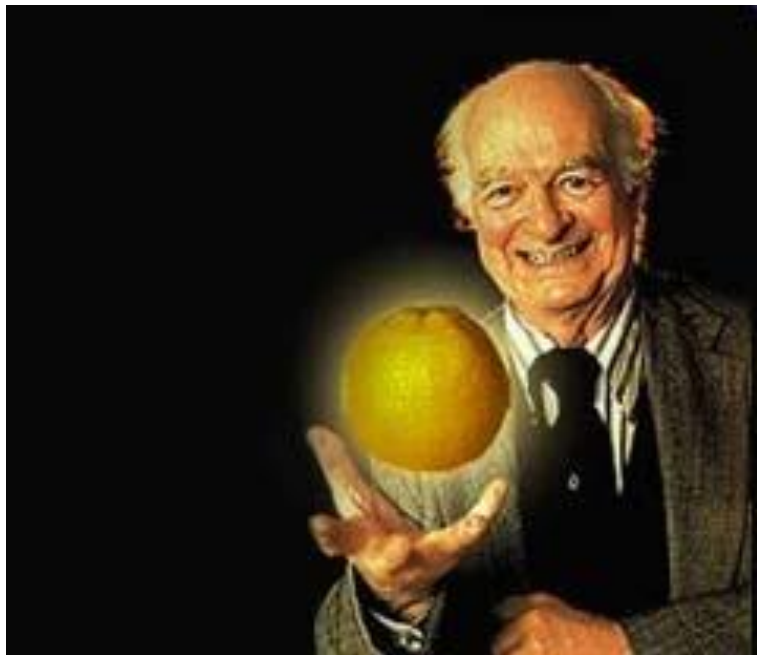
Чем больше общих вершин у
полиэдров – тем ближе друг к
другу располагаются катионы. Это
дестабилизирует структуру, так как
приводит к катион-катионному
отталкиванию

Правила Полинга

3-е правило



Правила Полинга



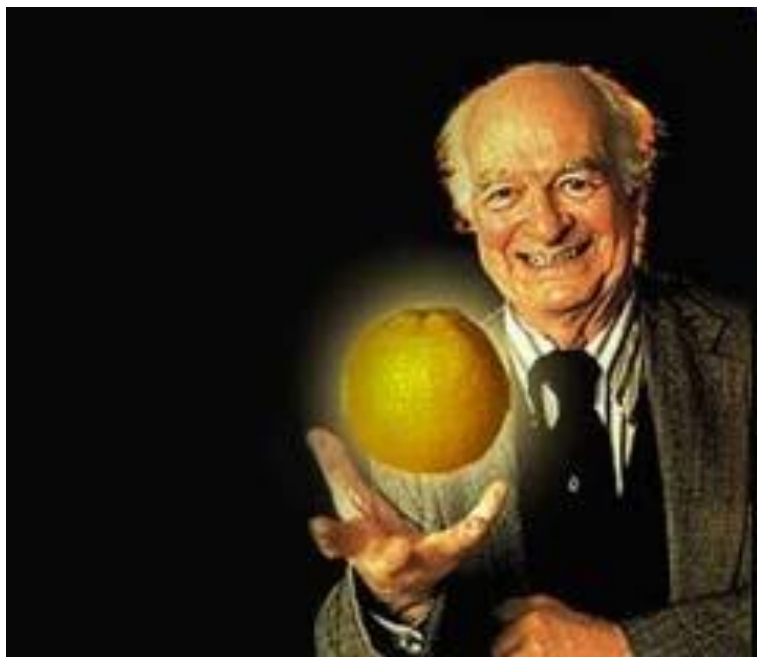
4-е правило

высоковалентные и
небольшие по размеру
катионы стремятся не иметь
общих анионов

Обобщение 3-го правила

**Лайнус Карл Полинг
(1901-1994)**

Правила Полинга

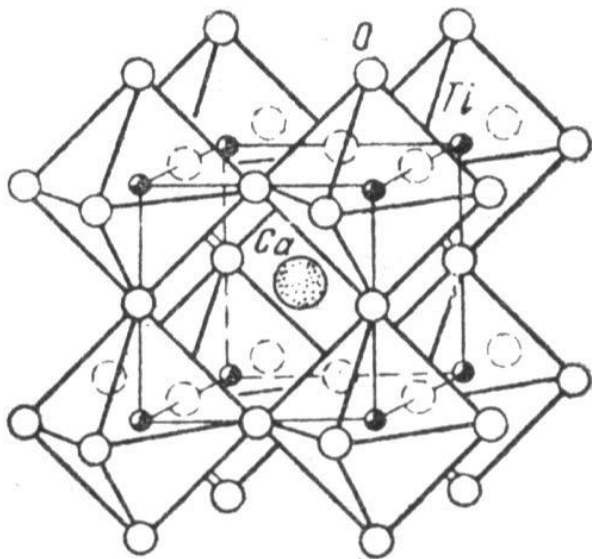


5-е правило

число разных по конструкции структурных фрагментов (координационных полиэдров) стремится к минимуму

**Лайнус Карл Полинг
(1901-1994)**

Фактор толерантности



Структура имеет кубическую или псевдокубическую ячейку

Ионы А расположены в ее вершинах, В - в центре, а X - в центре граней; КЧ(А) = 12 (кубооктаэдр), КЧ(В)=6 (октаэдр), КЧ (X) =6 (4А+2В)

Для куба, А-Х в $\sqrt{2}$ раза больше, чем В-Х, т. е.

Перовскит CaTiO_3

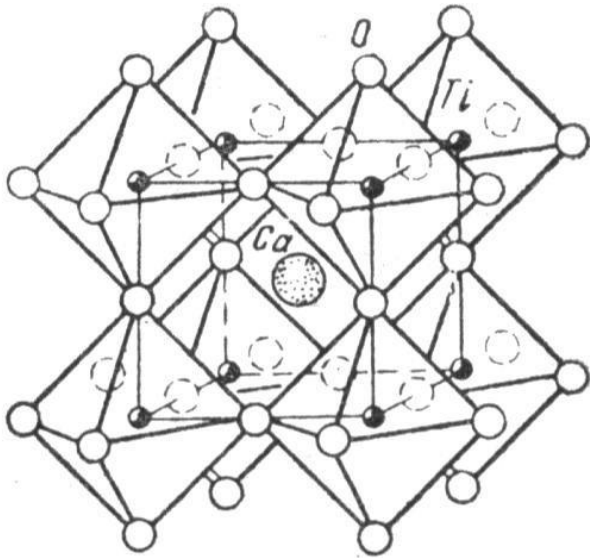
$$r_A + r_X = \sqrt{2}(r_B + r_X)$$

Поскольку большинство перовскитов некубические, то в общем виде

$$r_A + r_X = t\sqrt{2}(r_B + r_X)$$

где t - **фактор толерантности** (приспособляемости).

Фактор толерантности



Перовскит CaTiO_3 LaAlO_3 , NaTaO_3 и др.).

Когда фактор толерантности t выходит за указанные пределы, структура перовскита перестает существовать и заменяется другими структурными типами соединений ABX_3 .

Рассмотрим смену структурных типов в ряду **ильменит** → **перовскит** → **кальцит** → **арагонит** → **RbNO_3** по мере увеличения фактора толерантности t .

Если использовать стандартные ионные радиусы для КЧ = 6, то t для реальных структур находится в пределах 0,8-1,0. Для истинно кубического представителя перовскитов **таусонита SrTiO_3** t находится как раз в середине этого интервала (0,9). Если учесть, что расстояние А-Х в кубооктаэдре примерно на 6% больше, чем сумма стандартных радиусов, то фактор t приблизится к 1 для строго кубических перовскитов (SrTiO_3 , KNiF_3 ,

Фактор толерантности

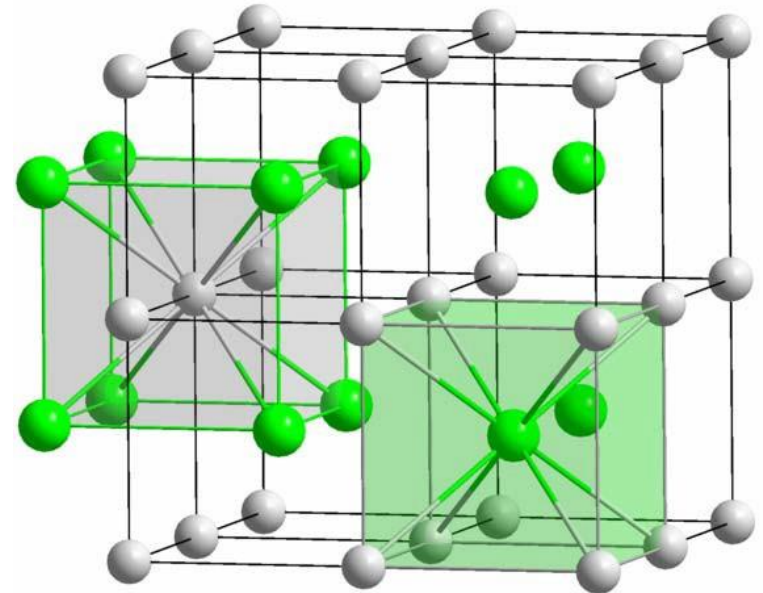
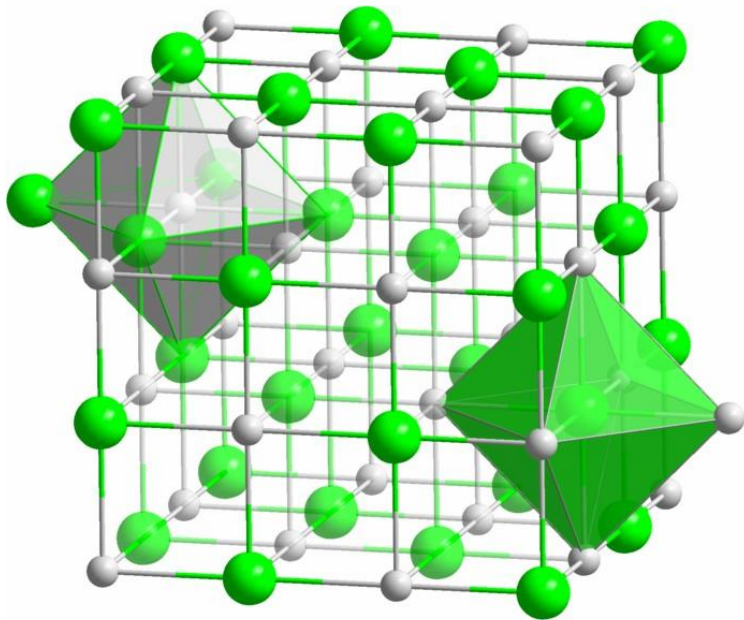
Минерал	t	Структурный тип; КЧ
MgTiO ₃ <i>гейкилит</i>	0,76	<i>ильменит</i> 6:6:4
FeTiO ₃ , <i>ильменит</i>	0,78	
MnTiO ₃ <i>пирофанит</i>	0,80	
CaTiO ₃ , <i>перовскит</i>	0,86	<i>перовскит</i> 12:6:6
SrTiO ₃ <i>таусонит</i>	0,91	
BaTiO ₃	0,99	
MgCO ₃ <i>магнезит</i>	1,20	<i>кальцит</i> 6:3:3
MnCO ₃ <i>родохрозит</i>	1,26	
CaCO ₃ <i>кальцит</i>	1,35	
CaCO ₃ <i>арагонит</i>	1,35	
SrCO ₃ <i>стронцианит</i>	1,47	<i>арагонит</i> 9:3:4
BaCO ₃ <i>витерит</i>	1,56	
<i>RbNO₃</i>	1,65	
<i>CsNO₃</i>	1,75	<i>RbNO₃</i> 12:3:5

Если использовать стандартные ионные радиусы для КЧ = 6, то t для реальных структур находится в пределах 0,8-1,0

Морфотропия

От греческого $\mu\omicron\rho\phi\acute{\eta}$ — «форма» и $\tau\rho\omicron\pi\acute{\eta}$ — «поворот»

Изменение свойств, в том числе и структуры, в однотипных по стехиометрии соединениях при резком изменении состава



При увеличении R катиона: Li, Na, K, Rb, Cs КЧ меняется с 6 на 8, а ячейка с F – на P

Полиморфизм

От греческого πολὺ- — «много», и μορφή — «форма»

Способность вещества существовать в различных кристаллических структурах

которые называются *полиморфными модификациями* (их принято обозначать греческими буквами α , β , γ и т. д.)

Открыт в 1798 году М. Клапротом на примере карбоната кальция (CaCO_3), для которого были обнаружены две модификации кальцит и арагонит.



Мартин Генрих Клапрот
1743 - 1817

Полиморфизм

Полиморфизм объясняется тем, что одни и те же атомы вещества могут образовывать различные устойчивые кристаллические решётки, соответствующие минимумам на поверхности энергии Гиббса.

$$G = U + PV - TS,$$

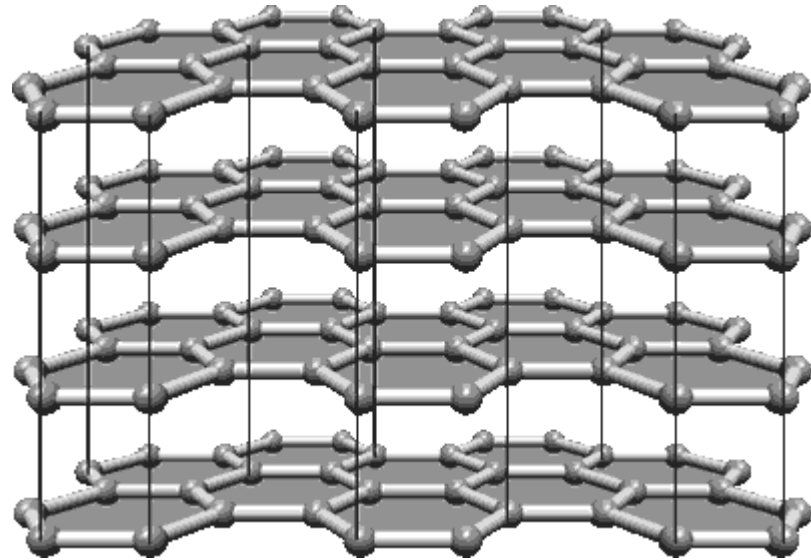
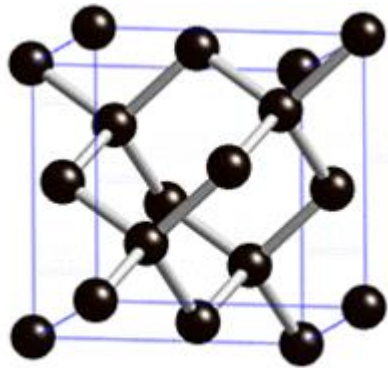
U – внутренняя энергия, P – давление, V – объем, T – абсолютная температура, S - энтропия

При повышении температуры более прочная кристаллическая решетка низкотемпературной модификации может характеризоваться меньшей энтропией за счёт того, что она менее восприимчива к возбуждению тепловых колебаний, поэтому другая модификация, характеризующаяся более крутой зависимостью энергии Гиббса от температуры, становится более выгодной.

Полиморфизм

Типы полиморфизма:

1. Реконструкционный – полное изменение структуры (распад до элементарных блоков: атомы, полиэдры)

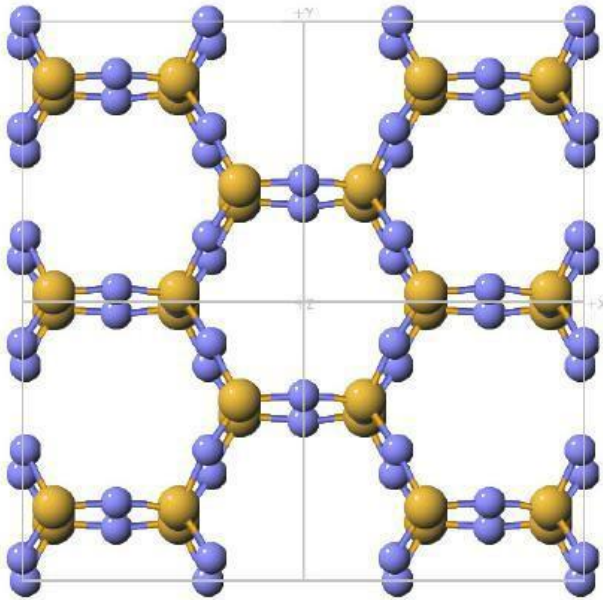


С изменением КЧ. Распад «до атомов»

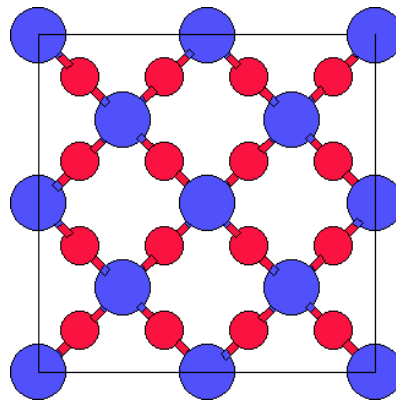
Полиморфизм

Типы полиморфизма:

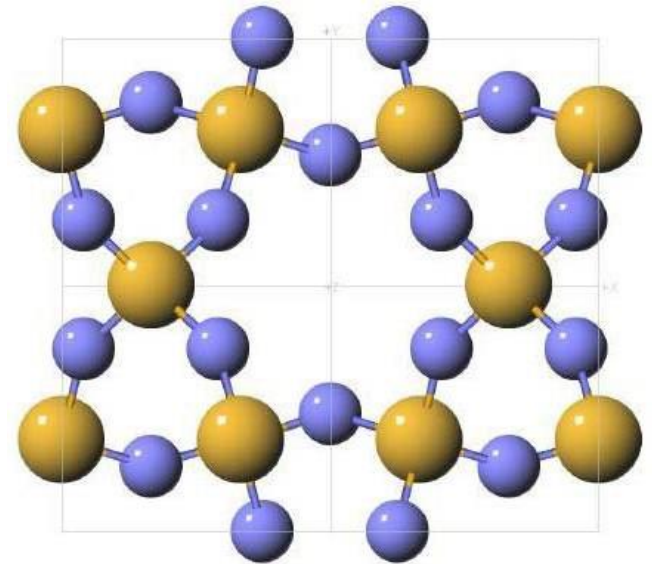
1. Реконструкционный – полное изменение структуры (распад до элементарных блоков: атомы, полиэдры)



Тридимит - ромбический



Кристаллит -
кубический



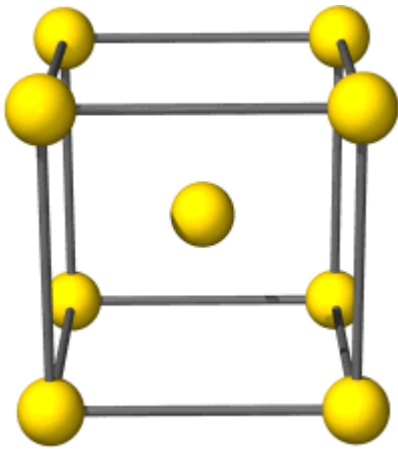
β -кварц -
гексагональный

Без изменения КЧ. Распад «тетраэдров»

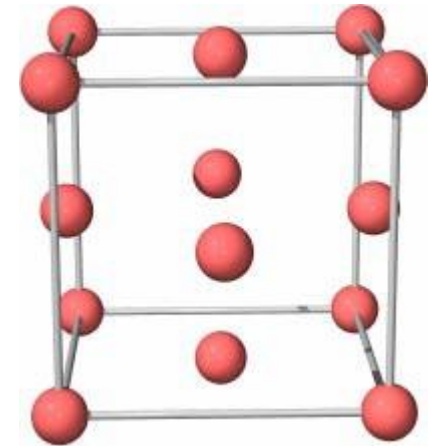
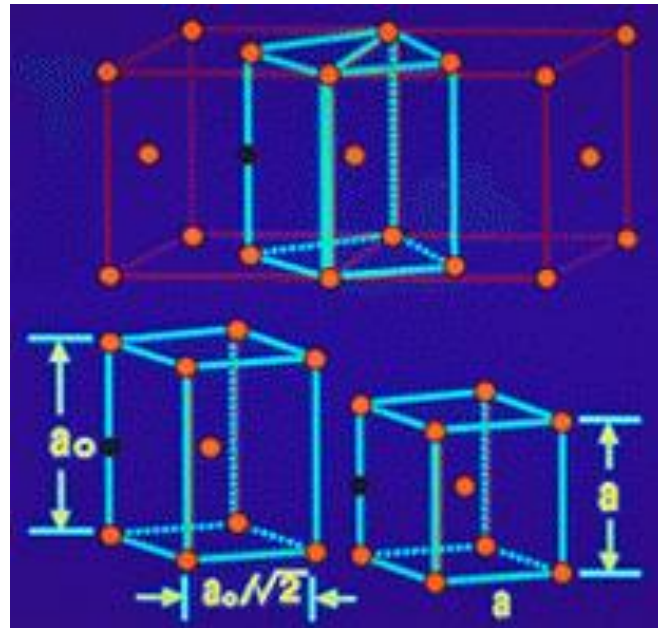
Полиморфизм

Типы полиморфизма:

2. Деформационный – сжатие / растяжение структуры



α -Fe



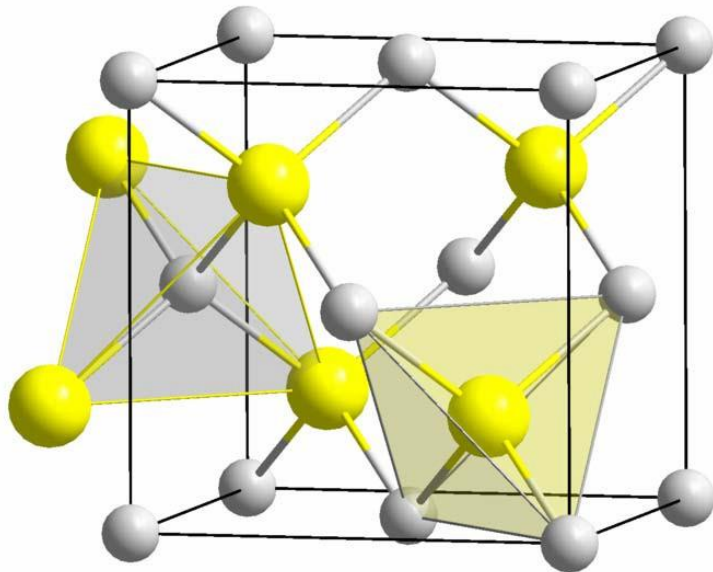
γ -Fe

В рамках кубической F-ячейки выбирается тетрагональная I по {110}.
Чтобы прийти к кубической – надо деформировать по (001). И наоборот

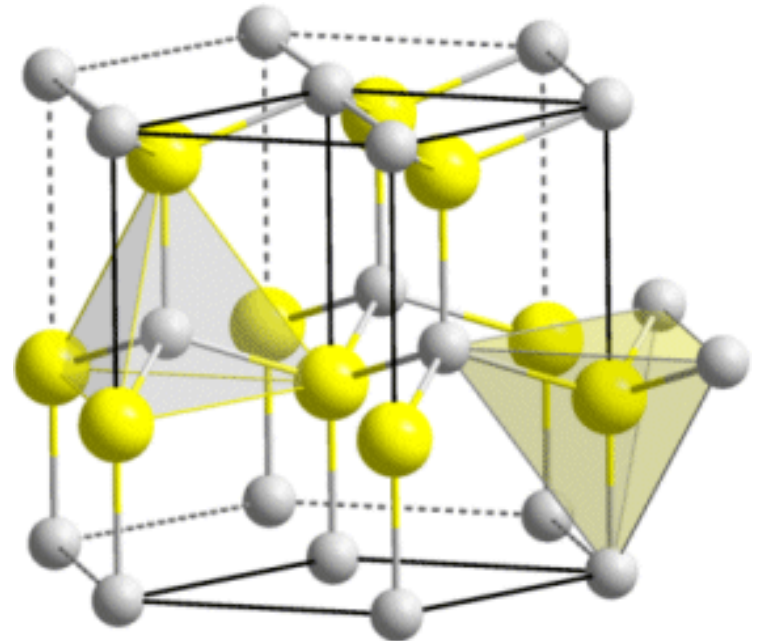
Полиморфизм

Типы полиморфизма:

3. Сдвиговый – смещение фрагментов структуры (слоев)



ZnS – сфалерит (кубическая)



ZnS – вюртцит (гексагональная)

Сдвиг третьего слоя кубической плотнейшей упаковки, так, чтобы встал над первым (ГПУ). И наоборот

Полиморфизм

Полиморфизм простых веществ называют аллотропией (от греч. *ἄλλος* — «другой», *τροπος* — «поворот, свойство»)

Спасибо за внимание!
