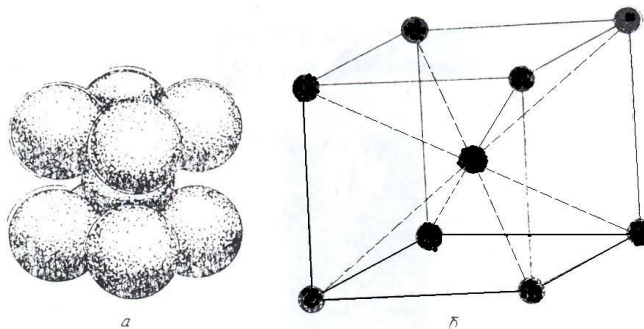


4. КРИСТАЛНИ СТРУКТУРИ С ПО-МАЛКА ПЛЪТНОСТ НА ОПАКОВКАТА

1. Объемноцентрирана кубична решетка (I)

- коефициент на запълване на елементарната клетка 68 %, $k = 0.68$.
- координатно число (броят на най-близките съседи) $Z = 8$.
- междини – на всяка сфера се падат 6 тетраедрични и 3 октаедрични междини:
 - тетраедрична – вписва се сфера с радиус $r = 0.291R$.
 - октаедрична – вписва се сфера с радиус $r = 0.154R$.

I КР – всички алкални метали от I група: Li, Na, Ka, Rb, Cs.



Фиг. 1. Модел на объемноцентрирана кубична решетка,

изградена от сфери с еднакви радиуси (а) и елементарна клетка на решетката (б).

2. Проста КР (Р)

- коефициент на запълване на елементарната клетка $k = 0.52$.
- координатно число $Z = 6$.

3. Валентни кристали

Структурата на валентните кристали се обуславя не от размерите на йоните и стремежа им към най-плътна опаковка, а от насочеността на валентните връзки. При тях има ясно изразена анизотропия на ковалентните връзки в различните посоки.

Действат обменни сили – осъществява се чрез двойка електрони, принадлежащи едновременно на двата атома, които образуват молекулата.

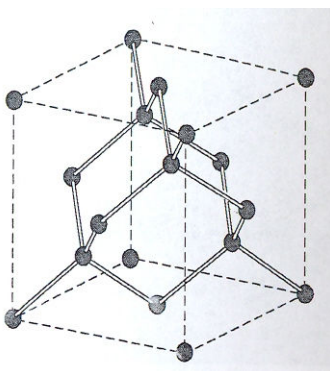
3.1. Диамант (С)

Връзката между С-атомите се осъществява с четири хибридни sp^3 състояния – комбинация от $1s$ и $3p$ състояния. Осите на четирите хибридни sp^3 състояния са разположени тетраедрично.

- две КСЦ КР отместени по диагонала на куба на $1/4$,

т.е. КСЦ КР с базис $[[0\ 0\ 0]]$ и $\left[\left[\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\right]\right]$

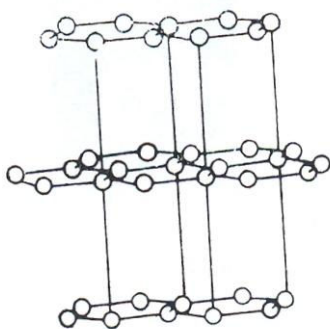
- коефициент на запълване на елементарната клетка $k = 0.34$ – най-малък от всички кубични КР
- координатно число $Z = 4$ – всеки С атом се свързва с четири С атома от върховете на тетраедъра



Фиг. 2. Елементарна клетка на диаманта.

3.2. Слоести КР – графит С, V група

- графит – алотропна модификация на С
- координатно число $Z = 3$



Фиг. 3. Кристална решетка на графита.

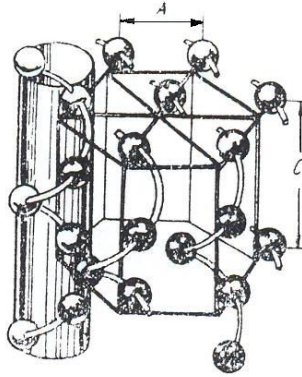
Връзката между С-атомите се осъществява с три sp^2 хибридни състояния + едно чисто р състояние

- трите sp^2 хибридни състояния, лежат в една равнина, като всеки С-атом се свързва с още три С атома в равнината и се образува слой.
- връзката между слоевете е по-слаба (междумолекулна) дисперсионна.

Дисперсионни сили – възникват в електронеутрални системи, в които няма обменни сили (ковалентна връзка). Дължи се на взаимодействието на моментите електрични диполни моменти.

3.3. Верижни КР – елементи от VI група

- КР от дълги спирални вериги
- между атомите на всяка спирала – валентни връзки
- между отделните спирали – дисперсионни сили



Фиг. 4. Кристална решетка на телура

4. Молекулни кристали – O₂, N₂, H₂, VII група елементи

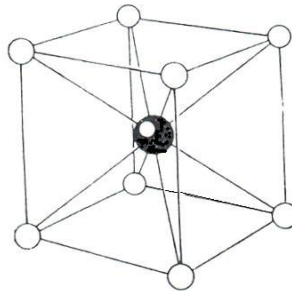
В твърдо състояние образуват молекулни кристали, в които двуатомните молекули на тези елементи се свързват помежду си с дисперсионни сили.

5. КР на химични съединения:

5.1. КР на цезиев хлорид - CsCl

Химичната структура е като тази на NaCl, но за разлика от него радиусите на Cs⁺ и Cl⁻ йони са сравними и затова се получава друга кристална структура:

– проста кубична КР (Р) с базис $[[0\ 0\ 0]]$ (Cs⁺) и $[[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}]]$ (Cl⁻)



Фиг. 5. Елементарна клетка на кристална решетка на цезиевия хлорид.

Проста кубична КР имат и CsBr, CsI, TaCl, TaBr, TaI, танталов хлорид.

5.2. КР на цинков сулфид ZnS.

ZnS кристализира в две алотропни модификации на КР – кубична /сфарелит/ и хексагонална /вюрцит/.

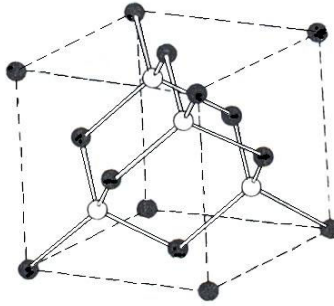
5.2.1. Сфарелит

– Кубична стенноцентрирана КР (F) с базис $[[0\ 0\ 0]]$ (S²⁻) и $[[\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}]]$ (Zn²⁺)

– Аналогична кристална структура на диаманта с две КСЦ КР

$$k_{ZnS} > k_{диамант}, R_{Zn} > R_S$$

S-йоните образуват КСЦ КР с плътна опаковка, като в половината тетраедрични междини има Zn йони.



Фиг. 6. Елементарна клетка на сфалерита.

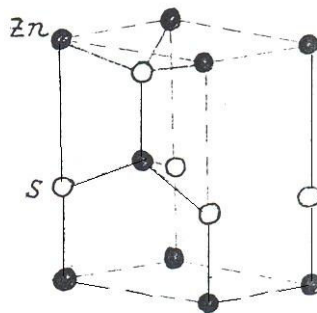
5.2.2. Вюрцит

– тетраедри, както при диаманта и сфалерита, но разположението им един спрямо друг е друго

– хексагонална КР с базис:

$$\text{Zn}^{2+} [[0\ 0\ 0]], \text{Zn}^{2+} [[\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}]], \quad \text{S}^{2-} [[0\ 0\ u]], \text{S}^{2-} [[\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2} + u]], \quad u = \frac{3}{8}C$$

Две ХКР → по една ХКР с най-плътна опаковка за Zn йони и за S йони, отместени по ос X_3 на $\frac{3}{8}C$.



Фиг. 7. Елементарна клетка на вурцита

5.3. Междинни кристали – 50 % йони и 50 % ковалентни връзки (наличие на тетраедрично разположение на връзките).