

# 11. Struktury krystaliczne

Rzeszów University of Technology

29 stycznia 2026

- C. Kittel. Wstęp do fizyki ciała stałego.
- N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. Fizyka ciała stałego.
- M.P. Marder. Condensed Matter Physics.
- C. Kittel. Kwantowa fizyka ciała stałego.
- L.D. Landau, J.M. Lifszyc. Fizyka statystyczna, Części 1 i 2.
- L.D. Landau, J.M. Lifszyc. Elektrodynamika ośrodków ciągłych.

- Kryształ – uporządkowany okresowo w przestrzeni trójwymiarowej zbiór atomów
- Idealny kryształ tworzy się przez nieskończone regularne powtarzanie się w przestrzeni *identycznych elementów strukturalnych* o kształcie równoległościanów
- W najprostszymi kryształach jak miedź, złoto i metali alkaliczne jednostką strukturalną jest pojedynczy atom
- Na ogół jednostka strukturalna zawiera kilka atomów lub cząsteczek
- Strukturę wszystkich kryształów opisujemy na podstawie modelu sieci periodycznej, zawierającej grupy atomów związanej z każdym węzłem sieci. Tę grupę atomów nazywamy bazą
- **Baza jest elementem kryształu powtarzającym się w przestrzeni**

- Doskonały kryształ składa się z uporządkowanych atomów w **sieci krystalicznej** opisanej przez trzy **podstawowe wektory translacji**  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$

$$\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad (1)$$

gdzie  $n_1, n_2, n_3$  są dowolnymi liczbami całkowitymi

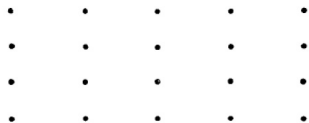
- Zbiór punktów  $\vec{r}'$  określonych taką zależnością dla wszystkich wartości liczb całkowitych  $n_1, n_2, n_3$  definiuje sieć krystaliczną
- **Sieć jest regularnym i periodycznym układem punktów w przestrzeni**
- Sieć i wektory translacji  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  nazywamy prostymi, jeśli dowolne dwa punkty  $\vec{r}, \vec{r}'$ , z których układ atomów wygląda zawsze tak samo, spełniają (1) w wypadku odpowiednio dobranych liczb całkowitych  $n_1, n_2, n_3$

- Osie krystaliczne  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  wyznaczają przyległe do siebie krawędzie równoległoscianu
- Jeśli węzły sieci znajdują się tylko w narożach równoległoscianu, to mówimy o prostym równoległoscianie
- **Przekształcenie translacji** sieci lub przekształcenie translacji kryształu definiuje się jako przesunięcie równoległe kryształu względem siebie o wektor translacji kryształu  $\vec{T}$

$$\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$$

Wektor  $\vec{T}$  łączy dwa dowolne węzły sieci

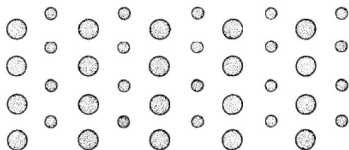
# Sieć przestrzenna i struktura krystaliczna



sieć przestrzenna



baza zawierająca  
dwa różne jony

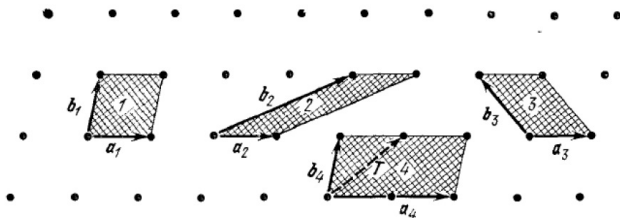


struktura  
krystaliczna

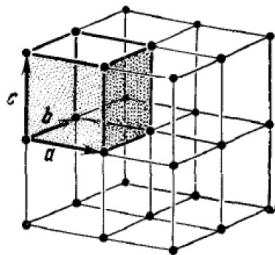
- Jednym z przekształceń symetrii są **przekształcenia translacji** kryształu
- Przekształcenia symetrii związane z **obrotem wokół osi i odbiciem w płaszczyźnie** są nazywane **przekształceniami względem punktu**
- Mogą być jeszcze przekształcenia złożone, wynikiem z połączenia przekształcenia względem punktu z translacjami

- Równoległoscian opisany przez wektory  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  nazywamy **komórką prostą**, która jest jednym z typów **komórki elementarnej**
- Komórka elementarna stanowi przestrzeń powstałą z przekształceń translacji kryształu
- Komórka prosta stanowi najmniejszą jednostkę objętości komórki elementarnej
- Jeden węzeł sieci przypada na jedną komórkę prostą
- Liczba atomów w komórce prostej jest określona liczbą atomów w bazie
- Objętość komórki prostej:

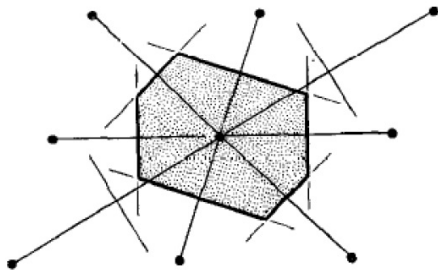
$$V_c = |(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}|$$



4 nie jest komórką prostą

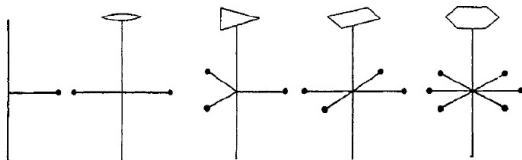


Komórka prosta w trójwymiarowej sieci przestrzennej

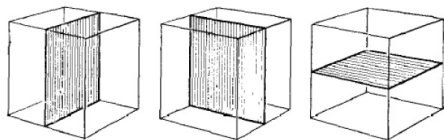


Komórka prosta Wignera-Seitza

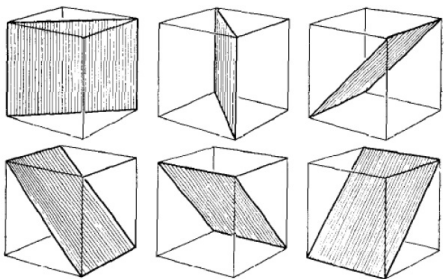
- Przykład przekształcenia symetrii: **obrót wokół osi** - sieć się nie zmienia, jeśli stosujemy obrót wokół jedno-, dwu-, trzy-, cztery- o sześciokrotnych osi symetrii ( $2\pi, 2\pi/2, 2\pi/3, 2\pi/4, 2\pi/6$ ) i jeśli pomnożymy obroty przez liczbę całkowitą  
Osie obrotu są oznaczone symbolami 1,2,3,4,6
- Może zachodzić także **odbicie zwierciadlane** względem płaszczyzny przechodzącej przez węzeł sieci
- **Grupa punktowa sieci** jest określona jako zbiór przekształceń symetrii, które nie zmieniają się, gdy zastosujemy obrót wokół punktu



Obrót wokół osi

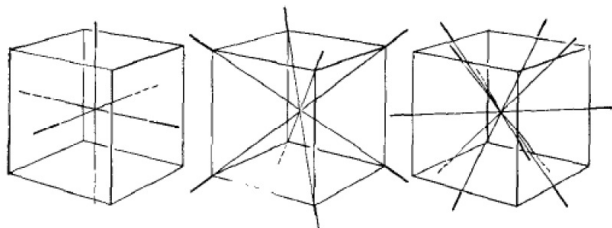


$\alpha)$



$\beta)$

## Płaszczyzny symetrii sześcianu



trzy czterokrotne  
osi sześcianu

cztery trzykrotne  
osi sześcianu

sześć dwukrotnych  
osi sześcianu

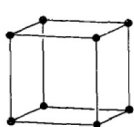
W przypadku trzech wymiarów symetria grup punktowych wymaga 14 rodzajów sieci

**14 rodzajów sieci** zostało podzielono na **7 układów**, odpowiednio do siedmiu rodzajów umownych komórek elementarnych:

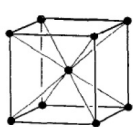
**trójskośny, jednoskośny, rombowy, tetragonalny, regularny, romboedryczny i heksagonalny**

## Czternaście sieci Bravais'go (sieci przestrzennych)

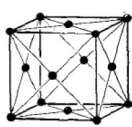
7



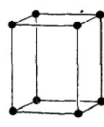
regularna P



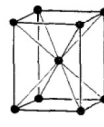
regularna I



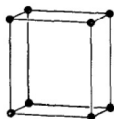
regularna F



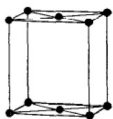
tetragonalna P



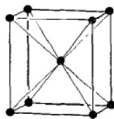
tetragonalna I



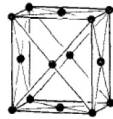
rombowa P



rombowa C



rombowa I



rombowa F



jednoskośna P



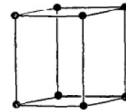
jednoskośna C



trójskośna P



romboedryczna



heksagonalna P

FCC - face centered cubic (regularna powierzchniowo centrowana)

BCC - body centered cubic (regularna przestrzennie centrowana)

## Czternaście rodzajów sieci trójwymiarowych

Układ	Liczba sieci w układzie	Symbole sieci	Parametry sieciowe komórki elementarnej
Trójskośny	1	$P$	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Jednoskośny	2	$P, C$	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Rombowy	4	$P, C, I, F$	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonalny	2	$P, I$	$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Regularny	3	$P, I, F$	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Romboedryczny	1	$R$	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
Heksagonalny	1	$P$	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

# Struktura krystaliczna chlorku sodu

Sieć Bravais'go - sieć regularna centrowano powierzchniowo

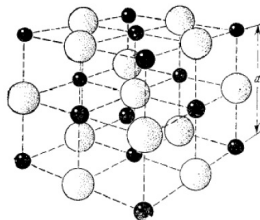
Baza zawiera jeden atom Na i jeden atom Cl

W elementarnym sześcianie znajdują się 4 cząsteczki NaCl, których atomy zajmują pozycję

Na:  $000, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

Cl:  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}, 00\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}00$

Każdy atom jednego rodzaju ma w swoim najbliższym otoczeniu 6 atomów innego rodzaju



NaCl

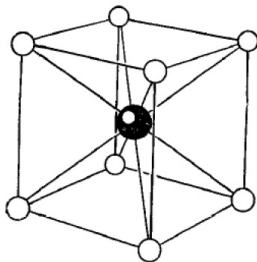
# Struktura krystaliczna chlorku cezu

Sieć przestrzenna jest prostą siecią regularną

W komórce elementarnej znajduje się jedna cząsteczka z atomem w położeniach centrowanych przestrzennie:

Cs: 0 0 0

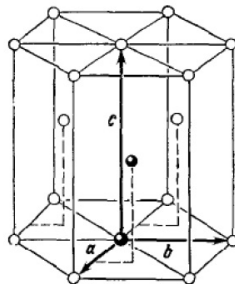
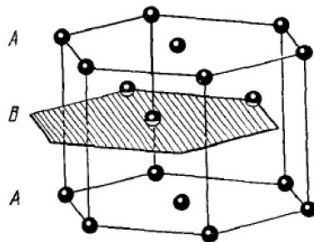
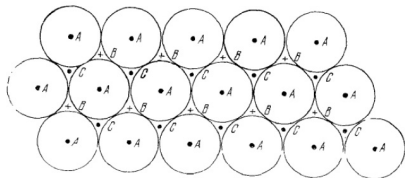
Cl:  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$



CsCl

# Struktura heksagonalna o najgęstszym upakowaniu $A_3$

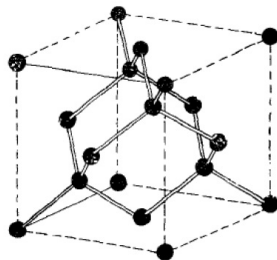
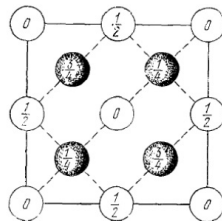
Sieć przestrzenna jest prostą siecią heksagonalną, mającej dwa takie same atomy w każdym węzle sieci



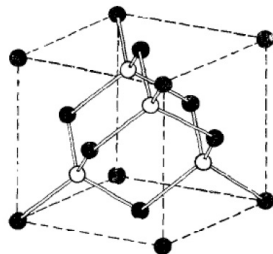
Sieć przestrzenna diamentu jest ciecią regularną powierzchniowo centrowaną

Prosta baza zawiera dwa takie same atomy w położeniach  $000$ ,  $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$

Struktura krystaliczna diamentu, przedstawiająca wiązania w konfiguracji tetraedrycznej



Regularna struktura siarczku cynku pokrywa się ze strukturą diamentu wówczas, gdy atomy Zn umieszczone są na jednej sieci  $A_1$ , a atomy S na drugiej sieci  $A_1$



ZnS