

К. р. характеризуется трёхмерно-периодич. пространственной системой  $T$  точек (рис.), лежащих на концах векторов  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , при этом трансляции

$$t_{p_1 p_2 p_3} = p_1 \alpha_1 + p_2 \alpha_2 + p_3 \alpha_3, \quad p_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (1)$$

и если описывать каждую точку  $\delta$ -функцией, равной 1 в точке и 0 вне её, то К. р. может быть записана как

$$T(\mathbf{r}) = \sum \delta(\mathbf{r} - t_{p_1 p_2 p_3}). \quad (2)$$

Расположение всех частиц, составляющих К. р., описывается т. н. фёдоровскими пространственными группами симметрии кристаллов  $G_3^3$ , каждая из к-рых содержит подгруппу трёхмерных трансляций  $T_3 \subset G_3^3$ . По симметрии К. р. и центрированности граней элементарной ячейки различают 14 типов К. р. — типов Браве решёток.

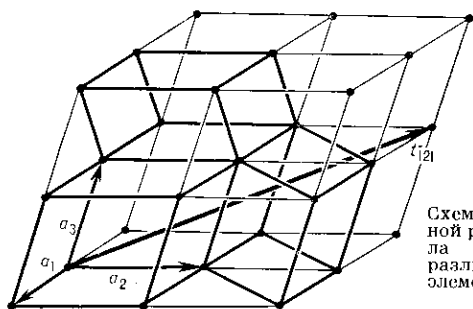


Схема пространственной решётки кристалла и возможность различного выбора элементарной ячейки.

Строго говоря, термин «К. р.» совпадает с термином пространственная решётка и означает трёхмерную периодичность, присущую атомному строению кристаллов. В более широком смысле термин «К. р.» употребляется для описания структуры кристаллов вообще. Конкретное расположение атомов в кристаллах наз. кристаллической структурой (хотя часто для этого используют термин «К. р.», напр. «К. р. NaCl» или «К. р. нафталина» и т. п.). Если расположение атомов (электронную плотность) внутри одной элементарной ячейки кристалла задать ф-цией  $\rho_{яч}(\mathbf{r})$ , то бесконечная трёхмерная кристаллич. структура  $\rho_{кр}(\mathbf{r})$  запишется так:

$$\rho_{кр}(\mathbf{r}) = \rho_{яч}(\mathbf{r}) * T(\mathbf{r}), \quad (3)$$

\* — знак свёртки, «размножения» одной элементарной ячейки  $\rho_{яч}$  около каждой точки К. р.  $T(\mathbf{r})$ . Структура реального кристалла отличается от идеализиров. схемы, описываемой понятием «К. р.», тем, что всегда имеются разл. рода дефекты, нарушающие идеальную периодичность, — примесные атомы, вакансии, дислокации и т. д.; их необходимо учитывать, т. к. многие физ. свойства существенно зависят от этих несовершенств.

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА** — расположение атомов, ионов, молекул в кристалле. Кристалл с определ. хим. ф-дой имеет присущую ему К. с., обладающую трёхмерной периодичностью — кристаллической решёткой. Термин «К. с.» употребляют вместо термина «кристаллич. решётка», когда речь идёт об энергии решётки, динамике решётки, о решётке как конкретной структуре того или иного хим. соединения, об описании атомного строения конкретных соединений и их модификаций. Геом. описание конкретной К. с. состоит в указании координат центров атомов в элементарной ячейке кристалла, что позволяет определять межатомные расстояния и тем самым изучать геом. особенности К. с.

Осн. методами исследования К. с. являются дифракционные — рентгеновский структурный анализ, нейтронография, электронография. Дифракционные методы дают непрерывное, усреднённое по времени и по всему объёму кристалла распределение рассеивающей мате-

рии в элементарной ячейке К. с. Методами рентг. анализа получают распределение электронной плотности  $\rho$  в кристалле, к-рос рассчитывается как ряд Фурье:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{hkl} F_{hkl} \exp[-2\pi i(hx + ky + lz)], \quad (1)$$

где  $x, y, z$  — координаты в элементарной ячейке,  $\Omega$  — её объём,  $F_{hkl}$  — коэф. Фурье, наз. структурными амплитудами. Распределение электронной плотности  $\rho_0$  в ячейке можно приближённо представить как сумму электронных плотностей атомов  $\rho_{ат}(\mathbf{r}_i)$ :

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \sum_i \rho_{ат i}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (2)$$

где  $\rho_{ат i}$  — усреднённые во времени, т. е. размазанные тепловым движением, распределения электронов в атоме. Максимумы (1) соответствуют атомам — сгусткам электронной плотности, что позволяет найти координаты их центров  $\mathbf{r}_i(x_i, y_i, z_i)$  и создать геом. модель, установив межатомные расстояния с точностью до 0,0001—0,00001 нм.

В нейтронографии аналогично (1) по амплитудам ядерного рассеяния кристалла  $F_{нейтр}$  определяют распределение ядерной плотности  $n(\mathbf{r})$  ячейки, т. е. вероятностное, размазанное тепловым движением распределение ядер (см. Нейтронография структурная). При наличии у атомов магн. момента нейтронографически определяют магн. К. с. — распределение спиновой плотности (см. Магнитная нейтронография). В электронографии по амплитудам  $F_{эя}$  согласно (1) определяют распределение электростатич. (суммарного — ядер и электронов) потенциала  $\phi(\mathbf{r})$ . Положение максимумов всех трёх распределений совпадает — это и есть среднее во времени положение центров атомов (ядер) в элементарной ячейке.

**Геометрическая модель.** Для создания геом. модели К. с. необходимо: знание параметров элементарной ячейки (параллелепипеда повторяемости) структуры — в общем случае длин её рёбер  $a, b, c$  и углов  $\alpha, \beta, \gamma$ ; указание симметрии К. с., т. е. принадлежности её к одной из 230 пространственных групп (см. Симметрия кристаллов) и тем самым — типу Браве решётки; указание координат всех химически различных атомов и симметрии их позиций. Для этого достаточно знать координаты атомов в симметрически независимой части ячейки, из к-рых можно с учётом операций пространственной группы вывести положение всех атомов К. с. На этой основе рассчитываются межатомные расстояния, взаимная координация атомов и др. геом. характеристики К. с. Графически К. с. изображают расположением атомов («шариков») в элементарной ячейке (рис. 1, а). Крупными соприкасающимися «шарами» в случае необходимости можно показать контакты атомов в плотноупакованных неорганич. (рис. 1, б) или молекулярных структурах. Для изображения ионных К. с. часто пользуются полиэдрами, в вершинах к-рых находятся анионы, в центрах — катионы (рис. 1, в).

Геом. анализ К. с. позволил развить целый ряд обобщений и законов атомной структуры кристаллов — представления об атомных радиусах, о типах хим. связи в кристаллах (ионной, ковалентной, металлической, ван-дер-ваальсовой, водородной), правила плотнейшей упаковки атомов и молекул в К. с., связи К. с. со свойствами кристаллов (см. Кристаллохимия). Анализ К. с. и её симметрии служит отправным пунктом расчётов энергетич. спектра, истолкования физ. свойств кристалла (см. Кристаллофизика).

Изучено более 100 тыс. К. с. разл. веществ, из них ок. 20 тыс. неорганич. К. с. элементов, разл. соединений, минералов, остальную — большую часть — составляют органич. К. с. Периоды решётки разл. кристаллов составляют от долей до сотен нм (табл.). Рентгеноструктурный анализ К. с. органич. соединений есть наиб. точный и достоверный метод определения прост-