

ной периодич. атомной структурой и при равновесных условиях образования имеющие естеств. форму правильных симметричных многогранников. К.— равновесное состояние твёрдых тел. К., выросший в неравновесных условиях и не имеющий правильной огранки (или потерявший её в результате обработки), сохраняет *кристаллическую структуру* и все определяемые ею свойства.

Атомистичность К. выражается математически условием дискретности: в пространстве есть такие точки, что вокруг них в радиусе r нет ни одной симметрически равной им точки. Условие однородности на микроуровне: существует шар постоянного радиуса R , внутри к-рого всегда есть точка x' , симметрично равная любой, наперёд заданной точке x [(r, R) -условие].

Если есть группа G , преобразующая пространство в себя при наличии (r, R) -условия, то математически доказывается, что эта группа есть G_3^3 , где верх. индекс — размерность пространства, а нижний — число направлений периодичности. Группа $G_3^3 \supset T_3$ содержит подгруппу трёхмерной трансляц. периодичности T_3 , к-рая описывает кристаллич. решётку относительно любой точки x : имеется бесконечное множество симметрично равных ей точек, находящихся на концах векторов

$$x' = x + p_1 a_1 + p_2 a_2 + p_3 a_3,$$

где $p_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, a_i$ — периоды элементарной ячейки. Это означает, что К. на микроуровне обладают дальним порядком, т. е., зная его структуру (элементарную ячейку) вблизи любой точки x , можно указать эту структуру в любой другой, далеко расположенной точке x' . Кроме того, расположение атомов в кристалле может обладать и др. элементами симметрии — плоскостями, осями, это описывается одной из 230 групп пространственной симметрии.

На макроскопич. уровне К. представляют собой силошную однородную симметричную среду, атомная микроструктура не наблюдается, но трансляционная и др. симметрии К. проявляются в их огранке и во всех физ. и физ.-хим. свойствах. Однородность К. есть макропроявление трансляц. микросимметрии и означает, что в любых участках К. (размеры к-рых существенно превышают размеры ячейки: $L \gg a$) все его свойства тождественны. В каком бы месте монокристалла мы не вырезали одинаково ориентированный образец иск-рой формы и размеров, любые его свойства — физические (оптические, механические и т. п.), физико-химические (растворимость поверхности, её химизм, адсорбция на ней — одинаковы). Анизотропия К. означает зависимость большинства их свойств, напр. теплопроводности, оптических, электрических, механических, от внеш. воздействий, от направления (относительно кристаллографич. осей), но к-рому они измеряются (в отличие от изотропности — независимости от направления, это — скалярные свойства). Нек-рые свойства К. могут быть изотропными. Симметрия К. заключается в том, что разл. признаки — внеш. форма огранённых кристаллов, анизотропия свойств, описываемая в векторной или тензорной форме, — оказываются равными для разл. направлений. Макросимметрия К. описывается одной из 32 точечных групп симметрии кристаллов, к-рая определяет и конкретный характер анизотропии. Анизотропия скоростей роста граней кристаллич. фазы обуславливает возникновение естеств. огранки кристаллов и определяет их внеш. форму — габитус. Кристаллич. структура, реализующаяся при данных условиях, отвечает минимуму свободной энергии. При повышении темп-ры вещества К. может перейти либо в другую кристаллич. модификацию (полиморфизм), либо в жидкость. Нек-рые вещества (мезогены) переходят в жидкокристаллич. состояние (см. Жидкие кристаллы). Большинство твёрдых материалов являются поликристаллическими; они состоят из множества отдельных беспорядочно ориентированных мелких кристаллич. зёрен (кристаллитов). Таковы, напр., многие горные породы, техн. металлы и сплавы. Крупные одиноч-

ные К. наз. монокристаллами. К. образуются и растут чаще всего из жидк. фазы — раствора или расплава; возможно получение К. из газовой фазы или при фазовом превращении в твёрдой фазе (см. Кристаллизация). В природе встречаются монокристаллы разл. размеров — от громадных [до сотен кг, К. кварца (горного хрустала), флюорита] до мелких (К. алмаза и др.). Для науч. и пром. целей К. выращивают (синтезируют) в лабораториях и на заводах (см. Синтетические кристаллы). К. образуются и из таких сложных природных веществ, как белки, нуклеиновые кислоты; возможно закристаллизовать и нек-рые вирусы (см. Биологический кристалл). При определ. условиях получают К. полимерных веществ, построенных из цепных молекул большой мол. массы.

Геометрия кристаллов. Выросшие в равновесных условиях К. имеют форму правильных многогранников той или иной симметрии, грани К.— плоские, рёбра между гранями — прямолинейные. Измерения огранения кристаллов — углов между гранями методамигониометрии и анализ соотношений между ними позволяют идентифицировать К. В 18—19 вв. установлены два основных закона геом. кристаллографии: углы между соответствующими гранями К. одногого и того же вещества постоянны (закон Стенона-Пауля); расположение всех граней, наблюдающихся на совокупности К. данного вещества, можно характеризовать целыми числами, находящимися между собой в рациональных отношениях (закон Гаюи). Эти геом. законы привели к выводу о существовании кристаллической решётки, что подтверждилось после открытия дифракции рентг. лучей.

Атомная структура К. описывается как совокупность повторяющихся в пространстве одинаковых элементарных ячеек, имеющих форму параллелепипеда с рёбрами a, b, c (периодами кристаллич. решётки). Поэтому атомная плоскость кристаллич. решётки (к-рой может соответствовать грань К.) отсекает на осях координат целые числа периодов решётки (закон Гаюи). Обратные им числа (h, k, l) наз. индексами кристаллографических граней и атомных плоскостей. Как правило, К. имеет грани с малыми значениями индексов, напр. (100), (110), (311). Длины рёбер a, b, c и углы α, β, γ между ними измеряются рентгенографически. Выбор осей координат производится по определ. правилам в соответствии с симметрией К.

Существуют 32 точечные группы G_0^3 симметрии К. Совокупность К., принадлежащих к данной группе, наз. классом К.; число классов равно числу групп — 32. Группы разбивают в 7 сингоний — триклиническую, моноклинную, ромбическую (низшие), тетрагональную, тригональную, гексагональную (средние), кубическую (высшие). Кристаллографич. оси координат выбираются: в ромбических, тетрагональных и кубических К. соответственно с их симметрией перпендикулярно друг другу ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$); в гексагональных и тригональных — одна вдоль гл. оси симметрии и две другие — перпендикулярно ей ($\alpha = \beta = 90^\circ$ под углом $\gamma = 120^\circ$; в моноклинной сингонии — две оси перпендикулярны ($\alpha = \beta = 90^\circ$), третья наклонна к ним ($\gamma \neq 90^\circ$); в триклинической сингонии все углы между всеми осями косые ($\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$). Подробнее см. Симметрия кристаллов.

Огранка каждого К. подчиняется описывающей его точечной группе симметрии при равномерном росте кристаллич. многогранника (рис. 1), когда он имеет идеальную форму. Совокупность кристаллографически одинаковых граней (т. е. совмещающихся друг с другом при операциях симметрии данной группы) образует т. н. простую форму К. Всего существует 47 простых форм К., но в каждом классе могут реализоваться лишь нек-рые из них. К. может быть ограничен граниями одной простой формы, но чаще комбинацией этих форм (рис. 2).

Если К. принадлежит к осевому классу, то он может кристаллизоваться в зеркально равных формах — пра-