

Параметры элементарных ячеек некоторых кристаллов

Типы кристаллов	Периоды элементарной ячейки, нм	Число атомов в элементарной ячейке
Химические элементы, простейшие соединения	0,5—1,0	~ 10
Неорганические и простые молекулярные соединения	1,0—2,0	до сотен
Сложные органические соединения	2,0—4,0	до тысяч
Белки	до 10—30	$10^3—10^5$
Вирусы	до 200	$10^6—10^9$

ранственного и хим. строения составляющих их молекул. Изучено неск. сотен К. с. сложнейших веществ биол. происхождения: белков, нуклеиновых кислот, вирусов (см. *Биологический кристалл*). Существуют международные ЭВМ-банки данных, описывающие все неорганич., органич. и биологич. К. с.

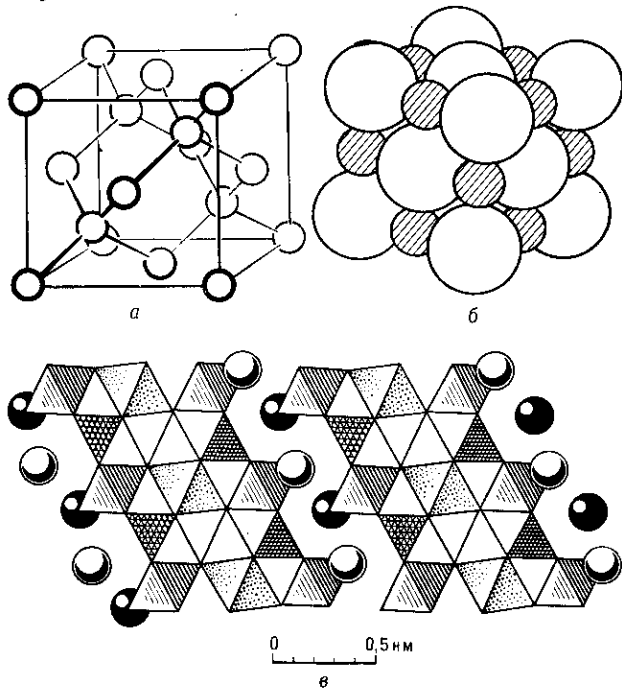


Рис. 1. Модели кристаллических структур: а — алмаз, б — хлористый натрий NaCl, в — бафертит BaFe₂Ti(Si₂O₇)O(OH).

Совр. прецизионные дифракционные методы позволяют, кроме координат атомов (геом. модели), определять др. характеристики К. с.

Тепловые колебания атомов. Амплитуда тепловых колебаний атомов, приблизительно обратно пропорциональна силам хим. связей между атомами в К. с., обратно пропорциональна массе атомов и прямо пропорциональна темп-ре *T*. В первом приближении сферически симметричных (изотропных) колебаний вероятность *w(r)* нахождения центров атомов на расстоянии *r* от идеальной позиции описывают гауссовским распределением

$$w(r) = (2\pi\bar{u}^2)^{-3/2} \exp(-r^2/2\bar{u}^2),$$

где \bar{u}^2 — среднеквадратичное смещение атома. Величины \bar{u}^2 определяются экспериментально по спаду интенсивностей дифракционных отражений. В общем случае анизотропных колебаний *w(r)* каждого атома характери-

эллипсоида тепловых колебаний и тремя углами, задающими ориентацию эллипсоида (рис. 2, а) (это определяет 6 компонент симметричного тензора 2-го ранга). Обычно изображают эллипсоид, соответствующий тому, что интеграл по *w(r)* внутри него равен 0,5, тогда полуоси эллипсоида равны $1,54\sqrt{\bar{u}_i^2}$. Величины $\sqrt{\bar{u}^2}$ в К. с. колеблются от 0,005—0,015 нм (ковалентные неорганич. кристаллы, металлы, неорганич. соединения) и до 0,02—0,03 нм для органич. кристаллов, в к-рых вандер-ваальсовы связи между молекулами слабы. В колебаниях атомов органич. кристаллов можно выделить колебания молекулы как целого и внутримолекулярные атомные колебания. Для алмаза $\sqrt{\bar{u}^2}=0,002$ нм. При повышении темп-ры перед плавлением $\sqrt{\bar{u}^2}$ достигает пригл. 0,1 от межатомных расстояний и К. с. становится неустойчивой, происходит переход в жидкость.

Экспериментально можно детально определить ангармонизм тепловых колебаний атомов К. с., описываемый тензорами более высокого ранга. Поверхность, характеризующая колебания, уже не является трёх-

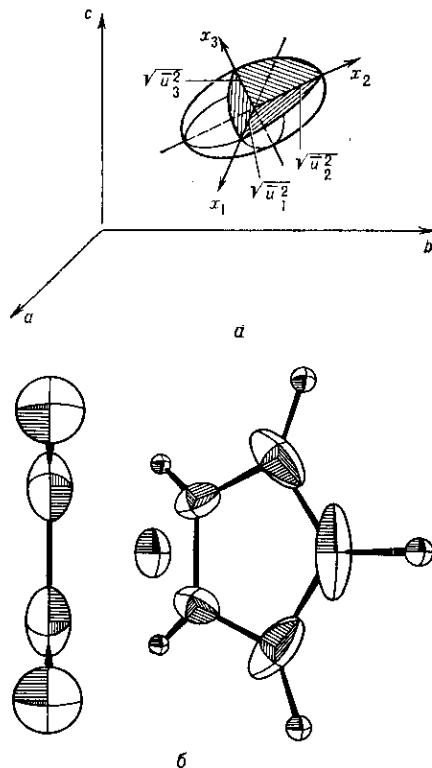


Рис. 2. Эллипсоиды тепловых колебаний атомов в решётке: а — общий случай произвольной ориентации; б — анизотропии колебаний в структуре, μ — ацетилена — бис-циклопентадиена никеля при 300К. Слева — молекулы ацетилена, справа — циклопентадиена.

ным гауссовым эллипсоидом и не имеет центра симметрии. Параметры ангармонизма позволяют связать характер колебаний атомов с акустич., сегнетоэлектрич. свойствами кристаллов, указать возможные смещения атомов при фазовых переходах в высокотемпературные модификации К. с. Частоты колебаний атомов в К. с. составляют порядка 10^{12} Гц, их определяют спектроскопич. методами, методом неупругого рассеяния нейтронов (см. *Колебания кристаллической решётки*).

Вычитая из наблюдаемого распределения $\rho(r)$ (1) распределение $\rho_0(r)$ (2), можно найти деформационную