

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Казанский (Приволжский) федеральный университет»

Набережночелнинский институт (филиал)

ЭЛЕМЕНТЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Учебно-методические указания
(практикум)

Набережные Челны
2018

УДК 620.18:548

Элементы кристаллографии: учебно-методические указания (практикум) / Акт Е.Р. – Набережные Челны: НЧИ К(П)ФУ, 2018, – 22 с.

Предлагаемые учебно-методические указания предназначены для студентов, осваивающих дисциплины «Материаловедение», «Физика конденсированного состояния», «Физика твёрдого тела», «Кристаллография» и др., в рамках которых рассматриваются такие понятия как структура кристаллов, кристаллическая решётка, параметры кристаллической структуры.

В брошюре приведена вся необходимая для организации практических занятий (практикума) информация – теоретические основы кристаллографии материалов, индивидуальные задания для студентов по вариантам, примеры выполнения практических заданий и пояснения к ним, вопросы для подготовки к отчёту, а также список рекомендуемой литературы.

Илл. 10, табл. 3., библиограф. 8 назв.

Рецензент: д.т.н., профессор Асташенко В.И.

Печатается по решению учебно-методической комиссии Автомобильного отделения НЧИ К(П)ФУ.

© НЧИ ФГАОУ ВО К(П)ФУ
2018 г.

ЭЛЕМЕНТЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Цель практикума – ознакомиться с атомно-кристаллическим строением материалов и понятием кристаллической решётки; научиться определять координаты узлов, индексы кристаллографических направлений и атомных плоскостей.

1. Атомно-кристаллическое строение твёрдых тел

Вещества, находящиеся в твёрдом состоянии, могут быть либо *аморфными*, либо *кристаллическими*. Аморфное состояние твёрдых тел характеризуется хаотическим расположением частиц вещества в пространстве. Аналогичную внутреннюю структуру имеют жидкости, но в них частицы вещества за счёт энергии теплового движения совершают частые перескоки с места на место, что является причиной текучести жидкостей. В аморфных материалах более сильное взаимодействие удерживает частицы вещества вместе и при той же температуре не позволяет им совершать частые перескоки с места на место. В результате образец выглядит твёрдым и не течёт, хотя и имеет структуру жидкости. Учитывая вышесказанное, аморфное состояние обычно считают переохлаждённой жидкостью, у которой бесконечно высокая вязкость. С повышением температуры вязкость этой «твёрдой жидкости» плавно понижается, вещество размягчается и постепенно переходит из твёрдого состояния в жидкое. Примером аморфного материала является обычное оконное стекло, а также янтарь - окаменевшая смола древних деревьев.

В кристаллических твёрдых телах частицы вещества располагаются в пространстве упорядоченно, т.е. выстроены правильными рядами, плоскостями, симметричными блоками, что придаёт отдельным кристаллам (*монокристаллам*) характерную правильную огранку. Кристалличе-

ское состояние твёрдых тел встречается в природе чаще, чем аморфное, поскольку обладает меньшей свободной энергией и, в силу этого, является более стабильным. С течением времени многие аморфные тела стремятся перейти в кристаллическое состояние. Примером кристаллических материалов являются различные драгоценные камни и минералы (алмаз, изумруд, рубин, кварц и т.д.), а также металлы и сплавы, которые в отличие от монокристаллов имеют *поликристаллическое строение*, т.е. состоят из множества микроскопических кристалликов неправильной формы (*зёрен*), образующих единое целое.

Необходимо отметить, что вещество одного и того же состава может быть получено как в кристаллическом, так и в аморфном состоянии. Например, в металлах и сплавах при их сверхбыстром охлаждении из жидкого или газообразного состояний не успевает сформироваться упорядоченная кристаллическая структура, и вещество оказывается аморфным. Свойства таких материалов, названных металлическими стёклами (*metal glass*), зачастую заметно отличаются от свойств кристаллических аналогов. Это говорит о том, что в формировании свойств материалов важную роль играет не только химический состав, но и структура.

1.1. Понятие кристаллической решётки

С целью отражения симметрии кристаллического пространства и описания упорядоченного расположения частиц вещества в кристаллах используется некая геометрическая модель, называемая *кристаллической решёткой*. Кристаллическая решётка представляет собой совокупность идентичных точек (узлов) кристаллического пространства, в роли которых обычно выступают центры тяжести частиц кристалла. Можно сказать, что кристаллическая решётка это воображаемая пространственная координатная сетка, узлы которой соответствуют центрам тяжести атомов, ионов или

молекул кристалла. Поскольку узлы кристаллической решетки, как и соответствующие им частицы, располагаются в пространстве закономерно, задать (описать) кристаллическую решетку можно с помощью минимального её фрагмента (набора узлов), периодически повторяющегося в пространстве. Этот минимальный фрагмент решетки называют *элементарной ячейкой*. Таким образом, под элементарной ячейкой понимается периодически повторяющаяся в трёхмерной системе координат минимальная группа узлов кристаллического пространства. Обычно элементарная ячейка имеет вид параллелепипеда, частным случаем которого является куб (рис. 1).

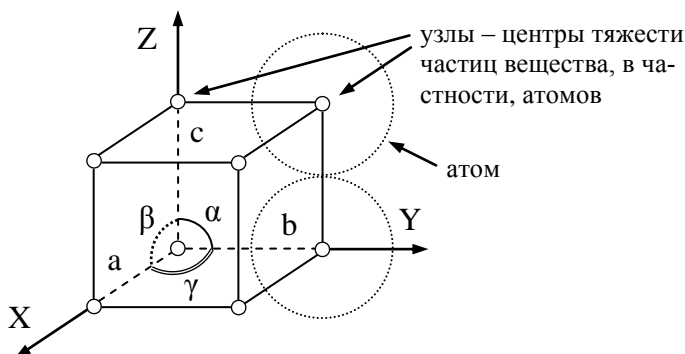


Рис. 1. Прimitives кубическая элементарная ячейка.

Рёбра элементарного параллелепипеда (a , b , c) и его углы (α , β , γ) называют *параметрами элементарной ячейки*. Соотношения между этими параметрами определяют форму элементарной ячейки и соответствующую систему симметрии. Всего существует 7 систем симметрии, от наименьшей триклинной, до наивысшей кубической:

- | | |
|----------------|--|
| 1) триклинная | $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$; |
| 2) моноклинная | $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma \neq 90^\circ$; |
| 3) ромбическая | $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; |

- 4) ромбоэдрическая $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$;
- 5) гексагональная $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$;
- 6) тетрагональная $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
- 7) кубическая $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

Элементарная ячейка органически связана с трёхмерной системой координат, начало которой совпадает с одним из узлов кристаллической решетки (рис. 1). Если элементарную ячейку перемещать вдоль координатных осей ОХ, ОУ и ОZ с шагом, соответственно a , b и c , то можно построить (воспроизвести) всю пространственную координатную сетку, т.е. кристаллическую решётку. Подобное перемещение с некоторым шагом называют трансляцией. Таким образом, посредством трансляции элементарной ячейки воспроизводится вся кристаллическая решетка. Параметры элементарной ячейки a , b и c принято называть *периодами кристаллической решётки*. Периоды представляют собой шаг, с которым всё повторяется в кристаллическом пространстве. По своему физическому смыслу это расстояния между центрами тяжести соседних частиц вещества, в частности атомов, сближенных в кристаллах до соприкосновения электронных орбит (рис. 1). По порядку величины периоды решётки составляют 10^{-10} м или 1\AA (Ангстрем). ($1\text{\AA} = 10^{-10}$ м или $0,1$ нм).

Элементарная ячейка, изображённая на рис. 1, относится к числу простых (примитивных) ячеек. Но возможны и более сложные ячейки, содержащие дополнительные узлы, расположенные либо в центре всех граней элементарного параллелепипеда (*гранецентрированная ячейка*), либо в центре верхней и нижней грани (*базоцентрированная ячейка*), либо в центре объёма (*объёмцентрированная ячейка*). Всего насчитывается 14 типов элементарных ячеек (трансляционных решёток Бравэ), которые определённым образом распределены по 7 системам симметрии. В частности, триклинной системе симметрии принадлежит только одна

примитивная ячейка, а кубическая система симметрии содержит примитивную, объёмцентрированную и гранецентрированную ячейки.

Следует различать понятия «кристаллическая решётка» и «структура кристалла». Структура кристалла – это физическая реальность, конкретное расположение в пространстве определённых атомов. Кристаллическая решётка – это геометрический образ структуры, идеализированная схема, отражающая лишь симметрию кристаллического пространства. Для более полного описания структуры кристаллов используют понятие *базис*. Базисом структуры называют совокупность атомов, определённым образом расположенных в объёме одной элементарной ячейки. То есть перечисляются все полностью принадлежащие одной элементарной ячейке атомы, вместе с их координатами в этой ячейке. Если элементарная ячейка определяет размер и форму воображаемых «кирпичиков», из которых построен кристалл, то базис определяет как бы «материал» этих кирпичиков. Можно сказать, что элементарная ячейка это некий воображаемый контейнер, атомарным содержимым которого является базис. Другими словами, базис представляет собой минимальный фрагмент вещества, трансляцией которого воспроизводится весь рассматриваемый кристалл.

Базис сложных кристаллов, состоящих из гигантских молекул, может включать в себя большое количество атомов различного типа. В простейшем случае, когда в узлах кристаллической решётки расположены однотипные атомы или ионы, базис состоит только из одной или нескольких таких частиц. Подобная ситуация характерна, в частности, для металлов. Если структуру металла описывает кристаллическая решётка с примитивной ячейкой, изображенной на рис. 1, то базис такой структуры состоит только из одного атома данного металла. (Действительно, в данном случае, каждый атом металла, расположенный в узле кристалличе-

ской решётки, находится на пересечении 8 аналогичных ячеек и принадлежит рассматриваемой ячейке только на $\frac{1}{8}$ часть. Но поскольку таких узлов в ячейке 8, то полностью принадлежит ей ровно один атом, составляющий по определению базис. Перемещением этого атома–базиса вдоль координатных осей с шагом, соответствующим периодам кристаллической решётки, воспроизводится вся пространственная структура рассматриваемого металла). В случае объёмцентрированной ячейки базис составляют 2 атома металла (атом в центре ячейки полностью принадлежит данной ячейке, плюс один атом дают узлы, расположенные в вершинах ячейки), а гранецентрированной – 4 (каждый из 6 атомов, расположенных в центрах граней, принадлежит рассматриваемой ячейке только на $\frac{1}{2}$ часть).

Система симметрии, величина периодов решётки и базис полностью определяют кристаллическую структуру конкретного материала. Если известны эти параметры, то известной считается и структура кристалла. Однако для более полного описания структуры иногда используют такие дополнительные параметры как *координационное число* и *коэффициент компактности*. Координационным числом называют число ближайших равноудалённых соседей любого атома. Коэффициент компактности представляет собой отношение объёма, занятого атомами, ко всему объёму элементарной ячейки. Если плотность упаковки атомов выражена в процентах, то соответствующий показатель называют *степенью компактности*.

2. Кристаллическая структура металлов

Атомы металлов, находящихся в твёрдом стоянии, связаны между собой особым типом химической связи, которую называют *металлической связью*. Такая связь устанавливается посредством обобществления (коллективизации)

всех валентных электронов атомами вещества. Валентные электроны, потерявшие непосредственную связь со своим атомом, оказываются принадлежащими всему металлу в целом и образуют в объёме металла «газ» относительно свободных электронов или иначе «электронную жидкость». Сами атомы металла, при этом, становятся положительно заряженными ионами. Таким образом, на атомарном уровне металлы выглядят как совокупность положительно заряженных ионов, расположенных в узлах кристаллической решётки, которые «омываются электронной жидкостью». Наличием в металлах «электронной жидкости» («газа») объясняются такие их характерные свойства как высокая электро- и теплопроводность, а также металлический блеск. Кроме того, металлическая связь позволяет атомным слоям сравнительно легко скользить друг относительно друга при пластическом деформировании, что обеспечивает металлам достаточно высокую пластичность.

Металлическая связь, в отличие от ковалентной, не является строго направленной в пространстве и допускает произвольное число взаимодействующих частиц. В результате атомы металлов, стремясь к конфигурациям с наименьшей свободной энергией, наиболее компактно располагаются в пространстве. Таким плотным атомным упаковкам соответствуют следующие типы кристаллических структур: объёмцентрированная кубическая структура (ОЦК-структура), гранецентрированная кубическая структура (ГЦК-структура), гексагональная плотноупакованная структура (ГПУ-структура).

ОЦК-структура (рис. 2.) наблюдается у таких металлов как Cr, Mo, W, V и др. Координационное число в данном случае равно 8. Коэффициент компактности достигает величины 0,68. Это означает, что 68% объёма металла занято атомами, а остальную его часть составляют пустоты. Базис образуют два атома металла (один атом, расположенный в

центре ОЦК-ячейки, полностью ей принадлежит, и ещё один атом ($8 \text{ по } \frac{1}{8}$) дают узлы, расположенные в вершинах ячейки).

ГЦК-структура (рис. 3.) характерна для Al, Cu, Ni, Ag, Au и Pt. Координационное число здесь равно 12, а коэффициент компактности имеет значение 0,74. Базис образуют четыре атома металла (каждый атом, расположенный в центре грани принадлежит ячейке только наполовину).

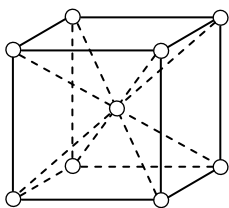


Рис. 2. Элементарная ячейка ОЦК-структуры.

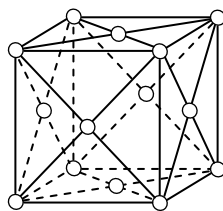


Рис. 3. Элементарная ячейка ГЦК-структуры.

ГПУ-структура наблюдается у таких металлов как Mg, Zn, Be и др. Эту структуру удобнее описывать с помощью ячейки в форме шестигранной призмы, которая состоит из трёх элементарных параллелепипедов. Такая ячейка лучше отражает гексагональную симметрию кристалла (рис. 4.).

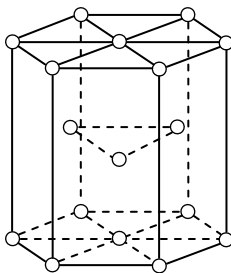


Рис. 4. Элементарная ячейка ГПУ-структуры.

Координационное число для такой структуры равно 12 (если за начало отсчёта принять атом, расположенный в центре грани, то на равном ближайшем расстоянии от него находится 6 атомов, плюс по 3 атома сверху и снизу). Коэффициент компактности, как и у ГЦК-структуры, имеет значение 0,74. Базис образуют 6 атомов металла (3 атома внутри призмы полностью ей принадлежат; атомы в центре верхней и нижней грани принадлежат ячейке только наполовину, а каждый из 12 атомов в вершинах призмы принадлежит рассматриваемой ячейке лишь на 1/6 часть, поскольку находится на пересечении 6 аналогичных ячеек).

Встречаются у металлов и другие, менее уплотнённые структуры, но гораздо реже, чем три вышеназванные.

Многие металлы и сплавы с изменением температуры или давления меняют тип кристаллической структуры. Такое явление, связанное с наличием у веществ различных кристаллографических модификаций, называют *полиморфизмом*. Полиморфизм характерен для Fe, Co, Ti, Sn и других металлов. Так, например, у железа при температурах до 911°C наблюдается ОЦК-структура, которая перестраивается в более плотную ГЦК-структуру при температурах выше 911°C. В интервале температур от 1392 до 1539°C у железа вновь наблюдается ОЦК-структура, но с большим периодом решётки. Эти кристаллографические модификации железа принято обозначать α -Fe, γ -Fe и δ -Fe.

3. Кристаллографические направления и атомные плоскости

В кристаллографии часто возникает потребность выделять то или иное направление в кристалле, обозначать те или иные атомные плоскости, отдельные атомы или узлы кристаллической решётки. Для этого необходимо, прежде всего, выбрать систему координат. Как было показано вы-

ше, в кристаллическом пространстве система координат органически связана с элементарной ячейкой: начало отсчёта совмещено с одним из узлов кристаллической решётки, а координатные оси направлены вдоль рёбер элементарной ячейки. При таком выборе системы координат каждому узлу (точке кристаллического пространства) может быть поставлен в соответствие радиус-вектор \vec{r} (рис. 5).

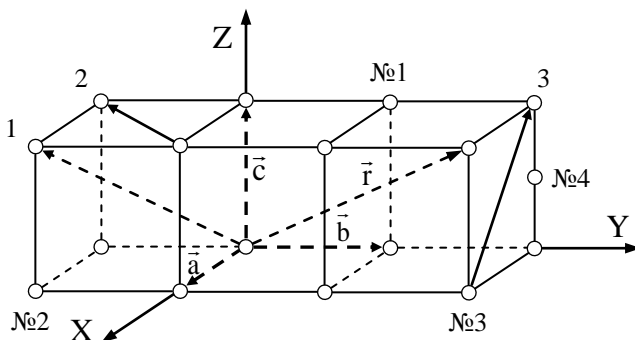


Рис. 5. Система координат в кристалле.

$$\vec{r} = n\vec{a} + m\vec{b} + p\vec{c} , \quad (1)$$

где $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ – векторы элементарных трансляций, по модулю равные периодам решётки, а n, m, p – числа. Эти числа могут быть целыми, если рассматриваемый узел находится в вершинах элементарного параллелепипеда, или дробными, если узел (точка) расположен на его гранях или внутри объёма. Числа n, m, p называют *координатами (индексами) узла* и помещают их в двойные квадратные скобки. Если индекс получается отрицательным, то знак минус ставится над соответствующим числом. Например, узел №1 на рис. 5 имеет координаты $[[0 \ 1 \ 1]]$, №2 - $[[1 \ \bar{1} \ 0]]$, №3 - $[[1 \ 2 \ 0]]$, а точка №4, расположенная в середине ребра элементарной ячейки, имеет координаты (индексы) $[[0 \ 2 \ 1/2]]$.

Любое направление, в том числе и в кристалле, может быть задано с помощью вектора или совокупности двух точек, являющихся начальной и конечной точками вектора. Если в качестве начальной точки вектора использовать начало системы координат, то для описания конкретного направления в кристалле будет достаточно одной точки, всегда задающей в кристаллическом пространстве конкретный радиус-вектор \vec{r} (рис.5). Координаты этой точки (узла), помещённые в квадратные скобки, называют *индексами кристаллографического направления*. Если координаты получаются отрицательными, то знак минус ставится над соответствующим индексом. Если радиус-вектор указывает на точку, имеющую дробные координаты, то дроби приводят к общему знаменателю, который затем отбрасывается. Например, направление 1 на рис. 5 имеет индексы $[1 \bar{1} 1]$, а направление, определяемое точкой №4, будет иметь индексы $[0 2 \frac{1}{2}] \rightarrow [0 4 1]$. Координатная ось OX имеет индексы $[1 0 0]$, OY – $[0 1 0]$, OZ – $[0 0 1]$.

Необходимо отметить, что параллельные векторы в кристаллическом пространстве являются эквивалентными и задают фактически одно и то же направление. Точно также являются физически эквивалентными все узлы кристаллической решётки. Поэтому, если вектор, задающий направление, исходит не из начала системы координат, его можно параллельным переносом мысленно переместить в начало системы координат, либо начало отсчёта совместить с начальной точкой вектора. Это упрощает процедуру нахождения индексов направления. Например, на рис. 5, векторы 2 и 3 исходят не из начала системы координат. После их параллельного переноса в начало системы отсчёта (а лучше мысленного переноса начала системы координат в начальную точку рассматриваемых векторов) не трудно установить, что направление 2 имеет индексы $[\bar{1} \bar{1} 0]$, а направление 3 – $[\bar{1} 0 1]$.

3.1. Индексы атомных плоскостей

Положение атомной плоскости в кристалле определяется по длине отрезков OA , OB и OC , которые плоскость отсекает на координатных осях OX , OY и OZ (рис. 6).

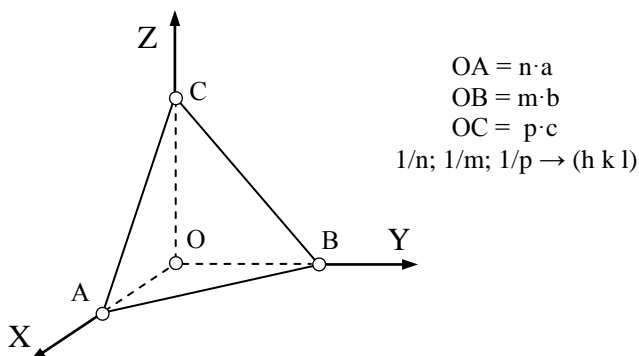


Рис. 6. Определение положения атомной плоскости.

Длину отрезков OA , OB и OC указывают в единицах, кратных периодам кристаллической решётки: $OA = n \cdot a$, $OB = m \cdot b$, $OC = p \cdot c$. Далее находят числа обратные n , m , p . Полученные дроби приводят к общему знаменателю, который затем отбрасывают. В результате получают три целых числа h , k , l , которые называют *индексами атомной плоскости* или *индексами Миллера* и помещают в круглые скобки. Так, если плоскость, изображенная на рис. 6, отсекает на координатных осях отрезки $OA = 1 \cdot a$, $OB = 2 \cdot b$ и $OC = 3 \cdot c$, то её индексами будут числа $(6 \ 3 \ 2)$, которые определяются по схеме: $1; 2; 3 \rightarrow 1/1; 1/2; 1/3 \rightarrow 6/6; 3/6; 2/6 \rightarrow 6 \ 3 \ 2$.

Поскольку все узлы кристаллической решётки эквивалентны и могут с равным правом выступать в роли центра координат, перемещение центра отсчёта или атомной плоскости на расстояние, кратное периодам решётки, не приводит к изменению индексов плоскости. Другими словами,

все параллельные атомные плоскости в кристалле идентичны и имеют одинаковые индексы. Это находит своё отражение в том, что при вычислении индексов атомной плоскости общий множитель выносится за скобки и отбрасывается. Например, плоскости типа $(\bar{1} \bar{1} \bar{1})$, $(2 \ 2 \ 2)$, $(3 \ 3 \ 3)$ и т.д., являются по сути одной и той же плоскостью, имеющей индексы $(1 \ 1 \ 1)$.

Чем ближе к началу координат находится точка пересечения атомной плоскости с координатной осью, тем больше численное значение соответствующего индекса, и наоборот. Если атомная плоскость не пересекает координатную ось, т.е. располагается параллельно ей (пересекает в ∞), то соответствующий индекс принимает значение 0. Так, плоскость F на рис. 7 имеет индексы $(1 \ 0 \ 0)$, а плоскость G – $(1 \ \bar{1} \ 0)$.

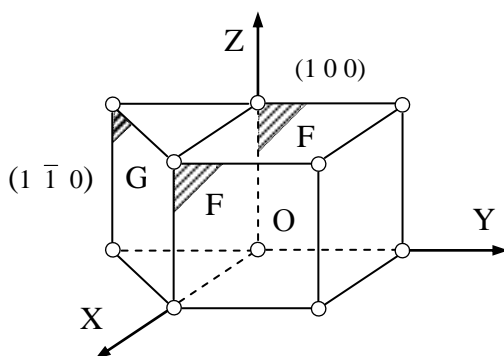


Рис. 7. Примеры атомных плоскостей.

Совокупность физически эквивалентных и не параллельных атомных плоскостей называют *семейством плоскостей*. Индексы семейства плоскостей помещают в фигурные скобки. Если взять в качестве примера кристалл с кубической симметрией, то здесь физически эквивалентными являются атомные плоскости $(1 \ 0 \ 0)$, $(0 \ 1 \ 0)$ и $(0 \ 0 \ 1)$, которые образуют семейство с индексами $\{1 \ 0 \ 0\}$.

Задание (практическая часть)

Задание для каждого студента является индивидуальным, включает 7 пунктов и выполняется в форме письменного отчёта. Отчёт должен содержать краткую теоретическую часть, предусматривающую ответы на приведенные в конце брошюры вопросы, а также индивидуальную практическую часть, которая выполняется по вариантам. Номер варианта соответствует порядковому номеру студента в списке учебной группы, либо выдаётся преподавателем. Пункты задания должны содержать пояснительные рисунки, отражающие узлы, направления и плоскости, индексы которых определяют в соответствии с вариантом.

1. Используя рис. 8, определить в соответствии с вариантом индексы (координаты) узлов (точек), номера которых указаны в столбце 2 таблицы 1.

2. Обозначив буквами А, В, С, показать на рисунке узлы, индексы которых приведены в столбце 3 таблицы 1.

Таблица 1

Вариант	Номера узлов	Координаты узлов
1	2	3
1	1, 7, 11, 19, 23	$[[1 \bar{1} 1]]$, $[[1/2 \ 0 \ \bar{1}]]$, $[[1 \bar{2} 0]]$
2	2, 8, 12, 20, 24	$[[1 \ 1 \bar{1}]]$, $[[0 \ 1/2 \ \bar{1}]]$, $[[1 \ 0 \bar{2}]]$
3	3, 9, 13, 21, 25	$[[\bar{1} \ 1 \ 1]]$, $[[\bar{1} \ 0 \ 1/2]]$, $[[1 \ 0 \ 2]]$
4	4, 10, 14, 22, 15	$[[1 \ 1 \ 1]]$, $[[\bar{1} \ 1/2 \ 0]]$, $[[1 \ 2 \ 0]]$
5	5, 11, 15, 23, 17	$[[1 \ 1 \ 0]]$, $[[1/2 \ \bar{1} \ 0]]$, $[[1/2 \ \bar{2} \ 0]]$
6	6, 12, 16, 24, 19	$[[1 \ 0 \ 1]]$, $[[0 \ \bar{1} \ 1/2]]$, $[[\bar{2} \ 0 \ 0]]$
7	7, 13, 17, 25, 20	$[[0 \ 1 \ 1]]$, $[[1/2 \ 0 \ 1]]$, $[[\bar{2} \ 1 \ 0]]$
8	8, 14, 18, 10, 21	$[[1 \ 0 \ 0]]$, $[[1/2 \ 1 \ 0]]$, $[[\bar{2} \ 0 \ 1]]$
9	9, 15, 19, 11, 22	$[[0 \ 1 \ 0]]$, $[[1 \ 1/2 \ 0]]$, $[[1/2 \ \bar{2} \ 0]]$
10	10, 16, 20, 1, 23	$[[0 \ 0 \ 1]]$, $[[0 \ 1/2 \ 1]]$, $[[1 \ 1 \ 2]]$
11	11, 17, 21, 2, 24	$[[0 \ \bar{1} \ 1]]$, $[[0 \ 1 \ 1/2]]$, $[[1 \ 1 \ \bar{2}]]$
12	12, 18, 22, 3, 25	$[[\bar{1} \ 0 \ 1]]$, $[[1 \ 0 \ 1/2]]$, $[[1 \ \bar{2} \ 1]]$

Продолжение таблицы 1

1	2	3
13	13, 19, 23, 4, 9	$[[\bar{1} \bar{1} 0]]$, $[[1 0 3/2]]$, $[[\bar{1} \bar{2} 0]]$
14	14, 20, 24, 5, 8	$[[\bar{1} 0 0]]$, $[[1 3/2 0]]$, $[[\bar{1} 0 2]]$
15	15, 21, 25, 6, 7	$[[0 \bar{1} 0]]$, $[[3/2 1 0]]$, $[[1 2 \bar{1}]]$
16	16, 22, 1, 7, 10	$[[0 0 \bar{1}]]$, $[[3/2 0 1]]$, $[[0 2 \bar{1}]]$
17	17, 23, 2, 8, 11	$[[\bar{1} \bar{1} 1]]$, $[[0 3/2 1]]$, $[[0 1 2]]$
18	18, 24, 3, 9, 12	$[[1 \bar{1} \bar{1}]]$, $[[0 1 3/2]]$, $[[0 2 1]]$
19	19, 25, 4, 7, 13	$[[\bar{1} 1 \bar{1}]]$, $[[0 1 5/2]]$, $[[0 2 2]]$
20	20, 1, 5, 10, 14	$[[\bar{1} \bar{1} 0]]$, $[[0 5/2 1]]$, $[[0 \bar{1} 2]]$
21	21, 2, 6, 11, 15	$[[\bar{1} 0 \bar{1}]]$, $[[5/2 0 1]]$, $[[1 2 1]]$
22	22, 3, 7, 12, 16	$[[0 \bar{1} \bar{1}]]$, $[[5/2 1 0]]$, $[[1 \bar{1} 2]]$
23	23, 4, 8, 13, 17	$[[0 1 \bar{1}]]$, $[[1 5/2 0]]$, $[[0 \bar{2} 1]]$
24	24, 5, 9, 13, 18	$[[1 0 \bar{1}]]$, $[[1 0 5/2]]$, $[[0 1 \bar{2}]]$
25	25, 6, 8, 14, 19	$[[1 \bar{1} 0]]$, $[[0 0 5/2]]$, $[[0 0 0]]$

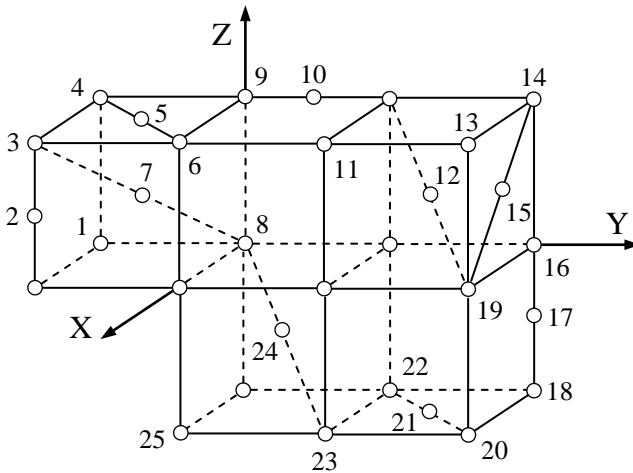


Рис. 8. Узлы и точки кристаллического пространства.

3. Используя рис. 9, определить индексы направлений, номера которых указаны в столбце 2 таблицы 2.

4. Обозначить и изобразить кристаллографические направления, индексы которых приведены в столбце 3 таб. 2.

Таблица 2

Вариант	Направления	Индексы направлений
1	2	3
1	16, 1, 7, 10	$[\bar{1} 1 0]$, $[1 0 3]$, $[\bar{1} 2 0]$
2	17, 2, 8, 11	$[\bar{1} 0 0]$, $[1 3 0]$, $[\bar{1} 0 2]$
3	18, 3, 9, 12	$[0 \bar{1} 0]$, $[3 1 0]$, $[1 2 \bar{1}]$
4	19, 4, 10, 1	$[0 0 \bar{1}]$, $[3 0 1]$, $[0 2 \bar{1}]$
5	20, 5, 12, 2	$[\bar{1} \bar{1} 1]$, $[0 3 1]$, $[0 1 2]$
6	1, 6, 13, 17	$[1 \bar{1} \bar{1}]$, $[0 1 3]$, $[0 2 1]$
7	2, 7, 14, 18	$[\bar{1} 1 \bar{1}]$, $[0 1 4]$, $[1 2 2]$
8	3, 8, 15, 19	$[\bar{1} \bar{1} 0]$, $[0 4 1]$, $[0 \bar{1} 2]$
9	4, 9, 16, 20	$[\bar{1} 0 \bar{1}]$, $[4 0 1]$, $[1 2 1]$
10	5, 10, 17, 1	$[0 \bar{1} \bar{1}]$, $[4 1 0]$, $[1 \bar{1} 2]$
11	6, 11, 18, 2	$[0 1 \bar{1}]$, $[1 4 0]$, $[0 \bar{2} 1]$
12	7, 12, 19, 3	$[1 0 \bar{1}]$, $[1 0 4]$, $[0 1 \bar{2}]$
13	8, 13, 20, 4	$[1 \bar{1} 0]$, $[0 1 4]$, $[0 1 2]$
14	9, 10, 19, 5	$[1 \bar{1} 1]$, $[3 0 \bar{1}]$, $[1 \bar{2} 0]$
15	10, 8, 18, 6	$[1 1 \bar{1}]$, $[0 3 \bar{1}]$, $[1 0 \bar{2}]$
16	11, 9, 17, 7	$[\bar{1} 1 1]$, $[\bar{1} 0 3]$, $[1 0 2]$
17	12, 7, 18, 8	$[1 1 1]$, $[\bar{1} 3 0]$, $[1 2 0]$
18	13, 6, 19, 9	$[1 1 0]$, $[3 \bar{1} 0]$, $[2 \bar{2} 0]$
19	14, 5, 20, 7	$[1 0 1]$, $[0 \bar{1} 3]$, $[2 0 1]$
20	15, 4, 19, 6	$[0 1 1]$, $[3 0 1]$, $[\bar{2} 1 0]$
21	16, 3, 18, 5	$[1 0 0]$, $[3 1 0]$, $[\bar{2} 0 1]$
22	17, 2, 10, 6	$[0 1 0]$, $[1 3 0]$, $[1 \bar{2} 0]$
23	18, 1, 11, 7	$[0 0 1]$, $[0 3 1]$, $[1 1 2]$
24	19, 2, 12, 8	$[0 \bar{1} 1]$, $[0 1 3]$, $[1 1 \bar{2}]$
25	20, 3, 13, 9	$[\bar{1} 0 1]$, $[1 0 3]$, $[1 \bar{2} 1]$

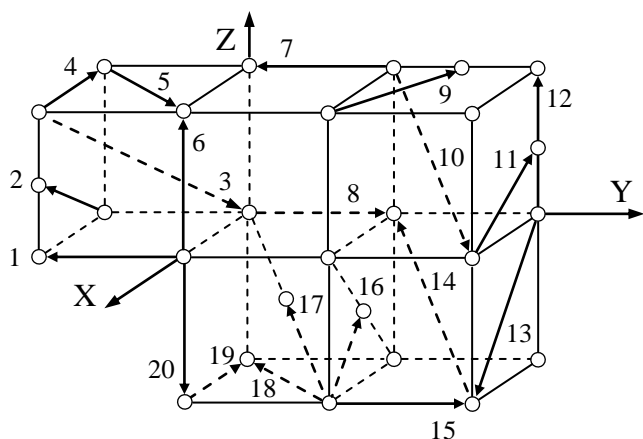


Рис. 9. Кристаллографические направления.

5. Определить индексы всех изображенных на рис. 10 атомных плоскостей.

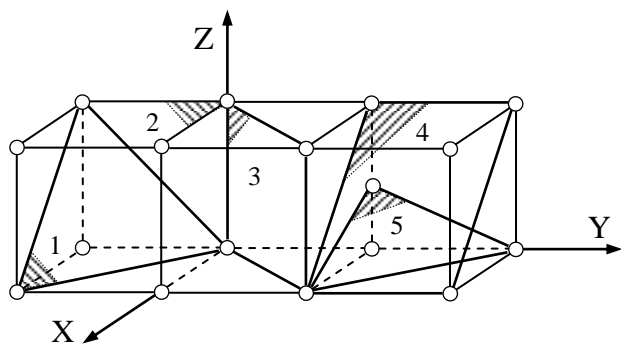


Рис. 10. Различные атомные плоскости.

6. Изобразить атомные плоскости, пересекающие координатные оси в указанных точках (таблица 3 столбец 2) и определить индексы этих плоскостей.

7. Изобразить на отдельных рисунках атомные плоскости, индексы которых приведены в столбце 3 таблицы 3.

Таблица 3

Вариант	Точки пересечения	Индексы плоскостей
1	2	3
1	2a, b, c; -a, 1/2b, c	$(1\bar{1}1)$, $(30\bar{1})$, $(1\bar{2}0)$
2	a, b, 3c; -a, b, 1/2c	$(11\bar{1})$, $(03\bar{1})$, $(10\bar{2})$
3	a, b, 2c; -a, b, 3/2c	$(\bar{1}11)$, $(\bar{1}03)$, (102)
4	a, 3b, 3c; -a, 3/2b, c	(111) , $(\bar{1}30)$, (120)
5	a, 3b, 2c; -a, 1/2b, 1/2c	(110) , $(3\bar{1}0)$, $(2\bar{2}0)$
6	a, 2b, 3c; -a, 3/2b, 1/2c	(101) , $(0\bar{1}3)$, (201)
7	a, 2b, 2c; -a, 2b, 1/2c	(011) , (301) , $(\bar{2}10)$
8	a, 3b, c; -a, 1/2b, 3/2c	(100) , (310) , $(\bar{2}01)$
9	a, 2b, c; -a, 3/2b, 3/2c	(010) , (130) , $(1\bar{2}0)$
10	a, b, c; -a, 3/2b, 5/2c	(001) , (031) , (112)
11	2a, b, 2c; -a, 3b, 1/2c	$(0\bar{1}1)$, (013) , $(11\bar{2})$
12	2a, b, 3c; -a, b, -1/2c	$(\bar{1}01)$, (103) , $(1\bar{2}1)$
13	2a, 2b, 2c; -a, b, -2c	$(\bar{1}10)$, (103) , $(\bar{1}20)$
14	2a, 2b, c; -a, -b, 1/2c	$(\bar{1}00)$, (130) , $(\bar{1}02)$
15	2a, 2b, 3c; -a, -2b, 2c	$(0\bar{1}0)$, (310) , $(12\bar{1})$
16	a, -b, c; -2a, -b, 1/2c	$(00\bar{1})$, (301) , $(02\bar{1})$
17	a, b, -c; 2a, b, -1/2c	$(\bar{1}\bar{1}1)$, (031) , (012)
18	a, -2b, c; -2a, b, 3/2c	$(1\bar{1}\bar{1})$, (013) , (021)
19	a, -2b, -c; -2a, -b, 3/2c	$(\bar{1}1\bar{1})$, (014) , (122)
20	a, -b, 2c; 1/2a, b, 1/2c	$(\bar{1}\bar{1}0)$, (041) , $(0\bar{1}2)$
21	a, -b, -c; 1/2a, b, 3/2c	$(\bar{1}0\bar{1})$, (401) , (121)
22	a, -b, -2c; 1/2a, 3/2b, c	$(0\bar{1}\bar{1})$, (410) , $(1\bar{1}2)$
23	a, -2b, -2c; 1/2a, 1/2b, c	$(01\bar{1})$, (140) , $(0\bar{2}1)$
24	a, -b, 3c; 1/2a, b, 2c	$(10\bar{1})$, (104) , $(01\bar{2})$
25	a, -2b, 2c; 1/2a, 2b, -c	$(1\bar{1}0)$, (014) , (012)

Пояснения к выполнению заданий

Рисунки, отображающие искомые атомные плоскости, кристаллографические направления и узлы, должны содержать не только оси системы координат, но и координатную сетку, т.е. фрагмент кристаллической решётки. При этом масштаб координатной сетки и направление координатных осей выбираются такими, чтобы отчётливо были видны изображаемые объекты.

При изображении атомных плоскостей и кристаллографических направлений выбор начала системы координат произвольный, а в случае узлов – строго фиксированный. Кроме того, необходимо помнить, что умножение или деление на одно и то же число индексов кристаллографического направления самого направления не меняет (просто вектор, указывающий направление, становится длиннее или короче). Точно также можно умножать или делить на одно и то же число индексы атомных плоскостей.

Практика показывает, что любую атомную плоскость и любой вектор, указывающий направление, можно вписать в одну элементарную ячейку.

Контрольные вопросы

1. Чем отличается кристаллическое состояние твёрдых тел от аморфного?
2. Что представляет собой кристаллическая решётка?
3. Что вкладывают в понятие «элементарная ячейка»?
4. Что такое система симметрии, периоды решётки и базис кристаллической структуры?
5. Как выглядят металлы на атомарном уровне?
6. Какие кристаллические структуры наиболее часто встречаются у металлов?
7. Как вы понимаете полиморфизм?

Рекомендуемая литература

1. Аникина В. И. Основы кристаллографии и дефекты кристаллического строения: Практикум / В. И. Аникина, А. С. Сапарова. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2011. – 148 с. – Режим доступа: <http://znanium.com/catalog/product/441367>.

2. Новоселов К.Л. Основы геометрической кристаллографии: Учебное пособие / К.Л. Новоселов – Томск: Изд-во Томского политех. университета, 2015. – 73 с. – Режим доступа: <http://znanium.com/bookread2.php?book=701517>.

3. Томилин В. М. Физическое материаловедение – Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2012. – 280 с. – Ч. 1. Пассивные диэлектрики. – Режим доступа: <http://znanium.com/go.php?id=440908>.

4. Стрекалов Ю. А. Физика твердого тела: учебное пособие / Ю. А. Стрекалов, Н. А. Тенякова. – Москва: Издательский Центр РИОР, 2013. – 307 с. – Режим доступа: <http://znanium.com/go.php?id=363421>.

5. Материаловедение и технология материалов: учебное пособие / под ред. А.И. Батышева, А.А. Смолькина. – Москва: НИЦ ИНФРА-М, 2013. – 288 с. – Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php?book=397679>.

6. Материаловедение и технология материалов: Учебник / Г. П. Фетисов, Ф. А. Гарифуллин. – Москва: ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2014. - 397 с. – Режим доступа: <http://znanium.com/go.php?id=413166>.

7. Тарасенко Л. В. Материаловедение: учебное пособие для вузов / Л.В. Тарасенко, С.А. Пахомова и др. под ред. Л. В. Тарасенко. – М.: НИЦ Инфра-М, 2012. – 475 с. – Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php?book=257400>.

8. Материаловедение: Учебное пособие / Давыдова И. С., Максина Е.Л., 2-е изд. – М.: ИЦ РИОР, НИЦ ИНФРА-М, 2016. – 228 с. – ISBN 978-5-369-01222-2. – Режим доступа: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=536942>.

Отпечатано в Издательско-полиграфическом центре
Набережночелнинского института
Казанского (Приволжского) федерального университета

Подписано в печать 18.05. 2018г.
Формат 60х84/16. Печать ризографическая.
Бумага офсетная. Гарнитура «Times New Roman».
Усл. п. л. 1,3. Уч.-изд. л. 1,3.
Тираж 50 экз. Заказ № 1039.

423810, г. Набережные Челны, Новый город, проспект Мира, 68/19
тел./факс (8552) 39-65-99 e-mail: ic-nchi-kpfu@mail.ru

