

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 1

ЕЛЕМЕНТИ СТРУКТУРИ КРИСТАЛІЧНИХ ТІЛ

МЕТА РОБОТИ: ознайомитися з основними елементами симетрії кристалів.

ПРИЛАДИ І ОБЛАДНАННЯ: моделі кристалів.

1.1 Теорія

Кристалічні тіла відрізняються від інших тіл тим, що атоми або молекули в них утворюють у просторі періодичну структуру. Ознакою кристалічного тіла є наявність температури плавлення (кристалізації), а також характерних площин на зломі. Періодична структура називається **кристалічною ґраткою або решіткою**. Геометричні параметри кристалічних ґраток вивчають за допомогою дифракції рентгенівських променів, або дифракції електронів. Ці параметри обумовлені властивостями атомів та природою взаємодії між ними. Дослідженнями кристалічних тіл було встановлено, що за геометричними параметрами різні кристалічні ґратки можна розділити **на сім груп (сингоній)**.

В кристалічній ґратці існує такий найменший паралелепіпед (рис. 1.2), який має всі характерні ознаки даної періодичної структури. Якщо цей паралелепіпед послідовно переміщувати вздовж трьох його ребер, які виходять із однієї вершини, то можна побудувати кристалічну ґратку всього кристалу. Цей паралелепіпед називають **елементарною коміркою кристалічної ґратки**.

На рис. 1.1 показана кубічна кристалічна ґратка. Точками відображені центри атомів, які входять до даного кристалу. Кубик $ABCDOKLM$ являє собою елементарну комірку цієї структури.

Відстані OB , OK , OM називають **сталими кристалічної ґратки**. Для кубічної ґратки вони однакові, тобто:

$$OB = OK = OM = a.$$

де a – стала кубічної ґратки.

В атомних структурах для лінійних розмірів використовують одиницю довжини – ангстрем. $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$. Очевидно, що a – це величина порядку діаметра атома, що дорівнює декільком ангстремам. Впевнемось у цьому.

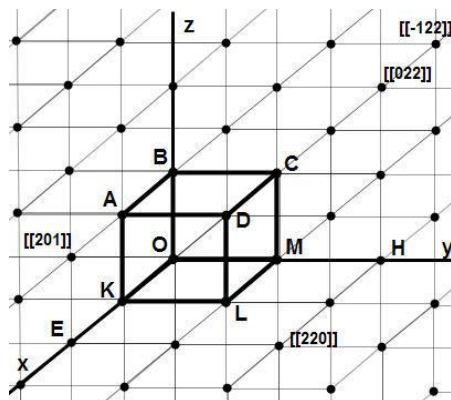


Рисунок 1.1

Будемо уявляти, що атоми твердого тіла – це кулі, які щільно заповнюють його об'єм. Візьмемо для прикладу кристал алюмінію. Густина алюмінію становить $2,7 \text{ г/см}^3$. Маса одного моля алюмінію – 27 г/моль . Тобто, в одному см^3 знаходиться $0,1$ моля алюмінію. Один моль кожної речовини має $6 \cdot 10^{23}$ атомів. Це значить, що в см^3 знаходиться $6 \cdot 10^{22}$ атомів алюмінію. На один атом припадає об'єм $1/(6 \cdot 10^{22}) \text{ см}^3 \approx 16,6 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3$. Звідси, лінійний розмір атома $\approx 2,6 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 2,6 \text{ \AA}$. За вимірами стала кристалічної ґратки алюмінію $\approx 4 \text{ \AA}$. Отже припущення, що стала ґратки одного порядку з розмірами атомів, підтверджується.

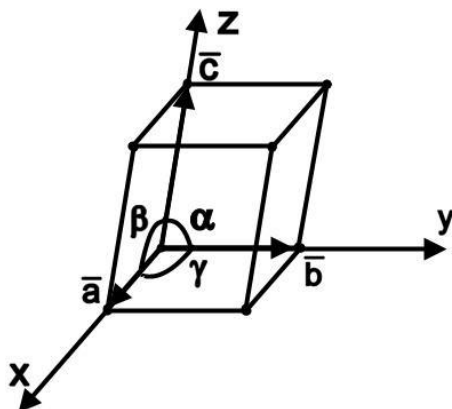


Рисунок 1.2

На рис. 1.2 показана примітивна елементарна комірка в загальному вигляді.

Вектори $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ – *вектори трансляції*.

Їх абсолютна величина визначає три сталіх кристалічної ґратки.

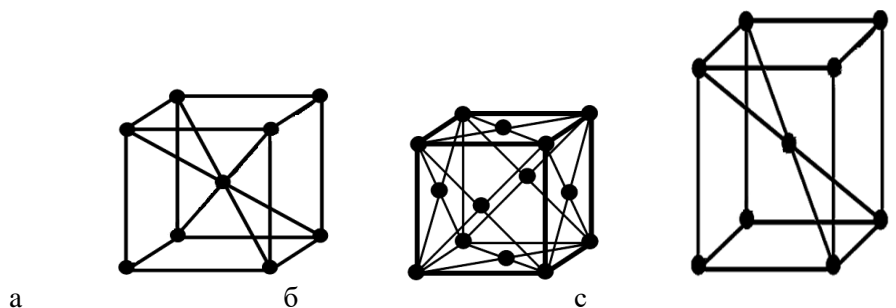
Ox, Oy, Oz – *основні кристалографічні напрямки*.

Параметри комірки для різних кристалічних сингоній мають такі значення, дивись табл. 1.1.

Таблиця 1.1

1. Кубічна	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
2. Тетрагональна	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
3. Ромбічна	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
4. Ромбоедрична	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$;
5. Гексагональна	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$;
6. Моноклінна	$a \neq b \neq c$	$\beta = \gamma = 90^\circ; \alpha \neq 90^\circ$;
7. Триклінна	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$.

Крім примітивних існують більш складні елементарні комірки:



а – об'ємноцентрована кубічна (ОЦК); б – гранецентрована кубічна (ГЦК);
с – тетрагональна об'ємноцентрована.

Рисунок 1.3

Ромбічна сингонія крім примітивної має ще три типи:

а) об'ємноцентрована; б) гранецентрована; в) з центрованим базисом.

Моноклінна сингонія крім примітивної має решітку з центрованим базисом.

Вся сукупність примітивних і більш складних решіток становить 14 так званих *решіток Браве*.

Крім вказаних вище, кристалічна ґратка характеризується іншими параметрами.

Енергія кристалічної ґратки – це робота, яку необхідно виконати, щоб атоми кристалічної ґратки віддалити один від одного на нескінченність. Як правило, ця величина розраховується на 1 моль, або на один атом. Цю енергію називають також *енергією зв'язку*.

Координаційне число (K) – це число найближчих сусідів даного атома. Наприклад, у примітивній кубічній ґратці $K=6$, в ОЦК $K=8$, у ГЦК $K=12$.

Базис решітки – це число атомів, що припадає на одну елементарну комірку. Наприклад, для примітивної кубічної воно становить 1, для ОЦК – 2, а для ГЦК – 4. При підрахунках базису слід мати на увазі, що кожен атом входить до складу декількох сусідніх комірок.

Коефіцієнт компактності η – це відношення власного об'єму атомів до об'єму всієї ґратки. Чим більше координаційне число, тим більшим буде коефіцієнт компактності.

Наприклад, для кристалу алюмінію цей коефіцієнт становить $\eta = 4 \cdot V_{\text{ат}} / V_{\text{ком}}$. Об'єм атома $V_{\text{ат}} = \frac{1}{6} \pi d^3$, де $d = 2,6 \cdot 10^{-8}$ см. Об'єм комірки a^3 , де $a = 4 \cdot 10^{-8}$ см. Кристал алюмінію має ГЦК решітку, тому до неї належать чотири атоми. Маємо:

$$\eta = \frac{4 \cdot \frac{1}{6} \pi d^3}{a^3} = \frac{4 \cdot 3,14 \cdot (2,6)^3 \cdot (10^{-8})^3}{6 \cdot 4^3 \cdot (10^{-8})^3} = 0,86$$

Найбільший коефіцієнт компактності мають кристалічні структури з найбільшим координаційним числом. Це ГЦК і гексагональна щільноупакована.

Знаючи базис решітки і параметри елементарної комірки можна розрахувати густину кристалу за формулою:

$$\rho = \frac{n \cdot \mu}{N_A \cdot V} \quad (1.1)$$

де n – базис решітки, μ – молярна маса речовини, N_A – число Авогадро ($6,02 \cdot 10^{23}$ 1/моль), V – об'єм елементарної комірки.

Атомна або кристалічна площа – це площа в кристалі, що проходить через вузли кристалічної ґратки. Число атомів, що приходить на одиницю площі атомної площини називають **густиною упаковки**. Густина упаковки різних площин різна. Цим пояснюється неоднорідність фізичних властивостей кристалу вздовж різних напрямків. Ця неоднорідність називається **анізотропія**. Пряма лінія, що проходить через вузли кристалічної ґратки, називається **кристалографічним напрямком**.

Індекси Міллера. Якщо в кристалі який-небудь атом взяти за початок координат, то положення будь-якого іншого атома можна задати вектором:

$$\vec{r} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c} \quad (1.2)$$

де $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ – вектори трансляції, а m, n, p – цілі числа.

Приймаючи a, b і c за одиниці масштабу, координати будь-якого атома будуть цілими числами m, n, p . Ці числа записують у подвійних квадратних дужках $[[mnp]]$ і називають **індексами Міллера**.

Індекси деяких вузлів показані на рис. 1.1. Якщо координата вузла від'ємна, то над цифрою ставиться знак (–) мінус $[[\bar{1}22]]$.

Якщо в кристалі необхідно вказати певний напрямок, то використовують індекси двох сусідніх вузлів, через які проходить ця пряма. При цьому один із вузлів приймають за початок координат, тобто його індекси нульові $[[000]]$. Індекси напрямів записують в квадратних дужках $[\]$.

Наприклад, вісь (кристалографічний напрямок) OX має індекси $[100]$, вісь OY – $[010]$ напрямок OD на рис. 1.1 – $[111]$ і т.д.

Для визначення індексів атомної площини необхідно встановити координати точок перетину цієї площини з осями координат; взяти обернені значення цих величин; привести їх до найменшого цілого кратного. Отримані значення цілих чисел, що не мають загального множника, називаються **індексами Міллера для кристалографічної (атомної) площини**. Індекси площин записуються (hkl) .

На рис. 1.1 атомна площа, частиною якої є грань $KADL$, має індекс (100) , відповідно $DCLM$ має індекси (010) , а $ABDC$ – (001) .

Знайдемо індекси атомної площини, яка перетинає осі координат в точках E, H і B . Ці точки мають координати $2, 2$ і 1 . Візьмемо обернені значення $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$. Приводимо до найменшого кратного (це буде 2). Тоді $h = 1/2 \times 2 = 1$, $k = 1/2 \times 2 = 1$, $l = 1 \times 2 = 2$. Індекси цієї площини будуть (112) . Читається: один, один, два.

Еквівалентні площини – це такі, розміщення атомів на яких однаково, тобто після суміщення площини всі атоми суміщуються.

1.2 Завдання

- 1 Обчислити густину конкретного кристалу за відомою молярною масою та типом решітки.
- 2 Обчислити відстань між найближчими сусідами в цьому кристалі.
- 3 Знайти густину атомів в атомних площинах (100) , (110) , (111) .
- 4 Визначити індекси кристалографічного напрямку, що проходить через вказані в таблиці вузли.
- 5 Визначити індекси атомної площини, що перетинає осі координат в точках, координати яких вказані в таблиці 1.2.

6 Обчислити розмір атома та порівняти його з відстанню до найближчого сусіда. Зробити висновок.

Дані для виконання завдання взяти з приведені нижче таблиці відповідно до номера робочої групи.

Таблиця 1.2

№ п/п	Речовина	Тип решітки	Молярна маса, г/моль	Стала решітки, Å	Координати вузлів для визначення напрямлення	Координати точок перетину атомної площини з осями координат
1	Алюміній	ГЦК	26,98	4,04	101, 121	100, 020, 0,02
2	Барій	ОЦК	137,3	5,01	111, 111	101, 021, 002
3	Ванадій	ОЦК	50,91	3,03	000, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	100, 030, 003
4	Вольфрам	ОЦК	183,8	3,16	011, 022	100, 010, 002
5	Залізо	ОЦК	55,84	2,86	001, 022	100, 040, 003
6	Золото	ГЦК	196,96	4,07	023, 122	200, 010, 001
7	Мідь	ГЦК	63,54	3,61	110, 021	200, 020, 002
8	Молібден	ОЦК	95,9	3,14	110, 141	200, 030, 001
9	Натрій	ОЦК	22,99	4,28	220, 111	200, 040, 003
10	Платина	ГЦК	195	3,92	211, 111	300, 010, 001
11	Свинець	ГЦК	207,2	4,94	312, 211	300, 020, 001
12	Срібло	ГЦК	107,87	4,08	423, 523	300, 030, 001
13	Тантал	ОЦК	180,95	3,30	132, 231	300, 030, 003
14	Хром	ОЦК	51,99	2,88	212, 123	300, 020, 002

Контрольні запитання

1. Що називають кристалічною ґраткою?
2. Дати визначення елементарної комірки.
3. Що таке стала кристалічної ґратки?
4. Привести значення геометричних параметрів кристалічних сингоній.
5. Дати визначення енергії ґратки, координаційного числа, базису та компактності.
6. Що таке атомна площина?
7. Що називають індексами Міллера вузлів, напрямлень, площин?

Література

1. Говорун Т.П. Фізика конденсованого стану матеріалів / Т.П. Говорун, В.О. Пчелінцев, В.М. Радзієвський, Л.В. Носонова. навч. посіб. - Суми: СумДУ, 2015. - 236 с.
2. Поплавко Ю. М. Фізичне матеріалознавство , Ч. 3. Провідники та магнетики. /Ю. М. Поплавко, С. О. Воронов, Ю. І. Якименко.. Навчальний посібник. К.: НТУУ «КПІ», 2011. - 372 с.
3. Подопригора Н.В., Садовий М.І., Трифонова О.М.. Фізика твердого тіла / Н.В. Подопригора, М.І. Садовий, О.М. Трифонова: навчальний посібник для студентів фізичних спеціальностей педагогічних університетів, – Кіровоград: ПП «Центр оперативної поліграфії «Авангард», 2014. – 416 с. Д
4. Кшнякин, В.С. Основи фізичного матеріалознавства [Електронний ресурс] / В.С. Кшнякин, А.С. Опанасюк, К.О. Дядюра. - Електронне вид. каф.: Електроніки і комп'ютерної техніки; ПМіТКМ. - Суми: СумДУ, 2015. - 466 с.