



СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
SIBERIAN FEDERAL UNIVERSITY

В. И. Аникина
А. С. Сапарова

ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ

Учебное
пособие

УМО

ИНСТИТУТ ЦВЕТНЫХ МЕТАЛЛОВ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Металлургия

Министерство образования и науки Российской Федерации

Сибирский федеральный университет

В. И. Аникина

А. С. Сапарова

**ОСНОВЫ
КРИСТАЛЛОГРАФИИ
И ДЕФЕКТЫ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО
СТРОЕНИЯ**

Допущено Учебно-методическим объединением по образованию в области металлургии в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению 150100 «Металлургия», 21.05.2010

Красноярск
СФУ
2011

УДК 548.0(07)
ББК 22.37я73
А67

Р е ц е н з е н т ы: И. Г. Резников, канд. геолого-минерал. наук руководитель представительства Минусинской геологоразведочной экспедиции ОАО «Минусинская геологоразведочная экспедиция»;

В. Р. Бараз, д-р техн. наук, проф. кафедры «Металловедение» Уральского государственного технического университета – УПИ

Аникина, В. И.

А67 Основы кристаллографии и дефекты кристаллического строения : практикум / В. И. Аникина, А. С. Сапарова. – Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2011. – 148 с.
ISBN 978-5-7638-2195-6

Изложены теоретические основы и методические указания по проведению практических занятий при изучении дисциплины «Основы кристаллографии и дефекты кристаллического строения», выполняемых в форме сочетания теоретических учебных занятий в классе и изучения моделей дефектов кристаллической решетки.

Предназначен для студентов направления подготовки 150400.62 «Металлургия», обучающихся по специальностям 150104, 150105, 150106, 150400.

УДК 548.0(07)
ББК 22.37я73

ISBN 978-5-7638-2195-6

© Сибирский федеральный университет, 2011

ВВЕДЕНИЕ

Кристаллография – одна из главных фундаментальных наук о Земле, ее веществе. Это наука не только о кристаллах, о процессах их образования, об их внешней форме, внутреннем строении и физических свойствах, но и о закономерностях развития Земли, ее формах, о процессах, происходящих в глубинах геосфер.

Во всем мире кристаллографические знания приобретают все большее значение. Практически все научные и технические достижения последнего времени (компьютерная техника, электронная микроскопия, квазикристаллы, высокотемпературные сверхпроводники и т. д.) непосредственно связаны с кристаллографией.

В реальных кристаллах частицы располагаются не всегда так, как им «положено» из соображений минимальности энергии. Неправильное расположение атома или группы атомов, т. е. дефекты кристаллической решетки, увеличивает энергию кристалла. В принципе атомы, составляющие данный дефектный кристалл, могли бы перестроиться и создать энергетически более выгодную конфигурацию. Но для этого атомам пришлось бы преодолеть большие по сравнению с кВТ потенциальные барьеры. Поэтому дефектные кристаллы существуют и только специально принятые меры позволяют создать бездефектные или почти бездефектные кристаллы.

Положение современной кристаллографии во многом напоминает ситуацию с математикой, методы которой используются в многочисленных и самых разнообразных дисциплинах. Следует подчеркнуть, что кристаллография – вполне самостоятельная наука. Как и каждая наука, она обладает уникальным, только ей присущим методом. Применительно к кристаллографии это метод симметрии, который является общим методом познания закономерностей развития Земли, ее вещества.

Кристаллография может быть недоступной для непосредственного наблюдения. Но она существует в той или иной форме у всех материальных объектов.

Практическое занятие 1

ПОНЯТИЕ О КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СТРОЕНИИ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ СИМВОЛИКА

Цель работы: ознакомиться с основными свойствами кристаллических тел, практически овладеть методикой кристаллографического индицирования.

1. Основные свойства кристаллов. Закон постоянства граничных углов

Кристаллами обычно называют твёрдые тела, образующиеся в природных или лабораторных условиях в виде многогранников.

Поверхность таких многогранников ограничена более или менее совершенными плоскостями – гранями, пересекающимися по прямым линиям – рёбрам. Точки пересечения рёбер образуют вершины.

Примерами кристаллов могут служить кубики поваренной соли (NaCl), заострённые на концах шестигранные призмы горного хрусталя (SiO_2), восьмигранники алмаза (C) и др.

Величина подобных образований иногда достигает человеческого роста, длина одного кристалла может достигать несколько метров (лёд – H_2O , гипс – $\text{Ca}[\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). Однако обычно приходится иметь дело с мелкими, чаще всего микроскопическими кристаллами.

Искусственное получение кристаллов может быть легко осуществлено самим студентом. С этой целью достаточно растворить определённую навеску какой-нибудь соли в определённом количестве воды (например, при комнатной температуре на 100 см^3 воды берётся 15–17 г калиево-алюминиевых квасцов $\text{KAl}[\text{SO}_4]_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$). Если дать такому раствору возможность испаряться, то с течением времени из него выпадут и начнут расти кристаллики данной соли.

Геометрически правильная форма кристаллов обуславливается, прежде всего, их строго закономерным внутренним строением.

Таким образом, кристаллами называются твердые тела с упорядоченным внутренним строением на уровне атомов и молекул, т. е. тела, обладающие трехмерно-периодической пространственной атомной структурой и имеющие вследствие этого при определенных условиях образования форму многогранников.

Частицы, из которых сложены кристаллы (атомы, ионы, молекулы) образуют правильные симметричные ряды, сетки, решетки (рис. 1).



Рис. 1. Закономерное расположение атомов в кристалле золота.
(Снято в электронном микроскопе)

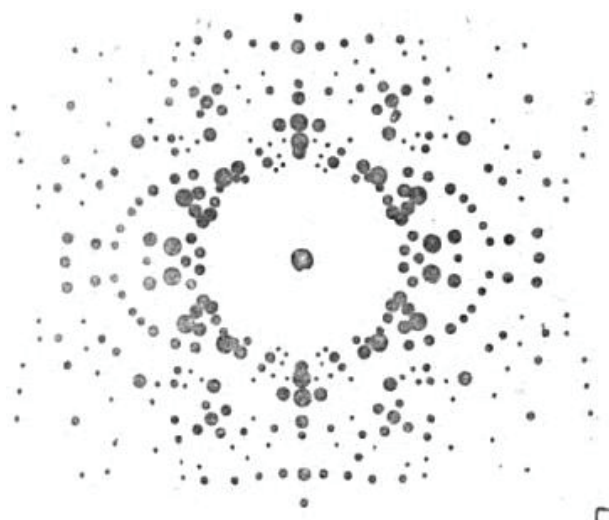


Рис. 2. Рентгенограмма кристалла топаза

Эти решетки являются естественными трехмерными дифракционными решетками для рентгеновских лучей. Структуру кристаллов исследуют по дифракции рентгеновских лучей (рис. 2), дифракции электронов, нейтронов, с помощью электронного микроскопа, ионного проектора (рис. 3) и другими методами.

Отдельные целостные кристаллы образуют монокристаллы; существуют также и поликристаллы – агрегаты многих мелких кристаллов, иногда столь мелких монокристалльных зерен, что у них уже нельзя различить характерных очертаний кристалла.

Расположение частиц (атомов, ионов, молекул) становится закономерным, упорядоченным, когда вещество переходит из аморфной фазы (газ, жидкость, стеклообразное состояние) в кристаллическую (рис. 4), соответствующую минимуму свободной энергии при данных условиях. Закономерность расположения частиц, их природа, их энер-

гетический спектр и силы связи между ними определяют физические свойства кристалла.

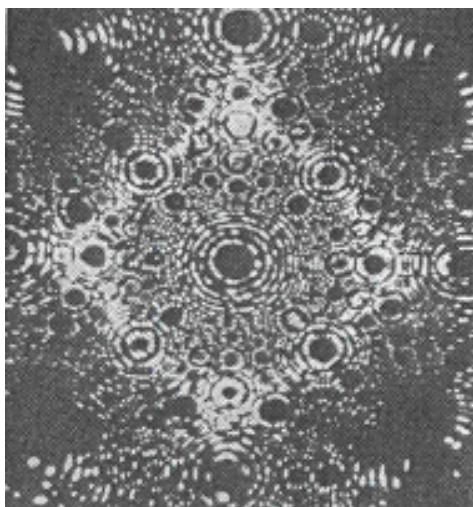


Рис. 3. Симметричное расположение атомов в монокристалле платины, сфотографированное с помощью ионного проектора

Следствием закономерности и симметрии структуры кристаллов являются их однородность, дискретность, симметричность и анизотропность.

Кристалл называется *однородным*, если для любой точки, взятой внутри него, найдется такая, что свойства кристалла в обеих этих точках совершенно аналогичны, причем вторая точка отстоит от первой на некотором конечном расстоянии. Из экспериментальных данных известно, что в кристаллах неорганических веществ это расстояние обычно составляет несколько десятых долей нанометра. Такие «одинаковые», или эквивалентные, точки периодически повторяются в пространстве, образуя бесконечные

ряды, сетки, решетки. Уже с самого начала видна двойственность подхода к описанию кристаллического вещества: кристаллы можно рассматривать как дискретные (прерывные) и как сплошные (непрерывные) среды.

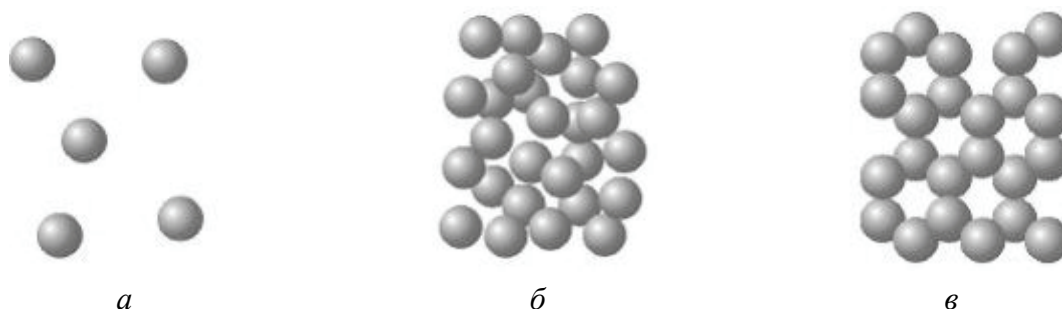


Рис. 4. Модель расположения частиц в веществе: *a* – газ; *б* – жидкость; *в* – кристалл.

Дискретность внутреннего строения означает, что свойства кристалла не могут быть одинаковыми там, где частица есть, и там,

где частицы нет, или в местах, в которых расположены частицы разных сортов. Однако для описания многих свойств кристалла достаточно ограничиться рассмотрением объемов значительно больших, чем собственный объем частицы, и значительно меньших, чем объем кристалла в целом. Именно в таком понимании рассматривают кристалл как среду сплошную и однородную.

Симметричностью называют одинаковость свойств кристалла в параллельных направлениях в нём. Симметрия – наиболее общая закономерность, присущая строению и свойствам кристаллического вещества, которая является одним из фундаментальных понятий физики и естествознания, лежащих в основе всей кристаллографии.

Анизотропией называется неодинаковость свойств кристалла в разных направлениях. Анизотропия связана с тем, что в структуре кристалла в разных направлениях различны расстояния и силы связи частиц (но одинаковы в симметричных направлениях). Характерный пример резко выраженной анизотропности представляет слюда, кристаллы которой легко расщепляются лишь по одному определённом направлению

Кристаллы способны *самоограняться*, т. е. при определенных условиях принимают естественную многогранную форму. Шарик, вырезанный из кристалла кварца или квасцов, в растворе этого же соединения покрывается гранями, в то время как шарик из кварцевого стекла остается неизменным. То же самое произойдет и с обломками этих веществ. Этот пример иллюстрирует не только способность кристаллов самоограняться, но и их анизотропию, проявляющуюся в различии скоростей роста по разным направлениям, а также симметрию. Процесс огранения – результат правильного внутреннего строения кристаллического вещества.

Каждый кристалл имеет определенную структуру, т. е. определенное расположение составляющих его материальных частиц. Все кристаллы одного и того же минерала имеют одинаковую структуру, а так как их внешняя форма есть следствие внутреннего строения, то они должны иметь одинаковые гранные углы.

В самом деле, если мы имеем различные кристаллы какого-либо минерала, например кварца, то независимо от величины кристалла, способов его образования, формы и размера граней, углы между соответственными гранями будут всегда постоянными (рис. 5).

Это положение, известное как закон постоянства гранных углов, формулируется следующим образом: углы между соответствующими

гранями во всех кристаллах одного и того же вещества при одинаковых условиях давления и температуры постоянны. Закон постоянства граничных углов был установлен Н. Стеноном на кристаллах гематита и горного хрусталя; впоследствии этот закон был подтвержден М. В. Ломоносовым и Роме де Лилем.

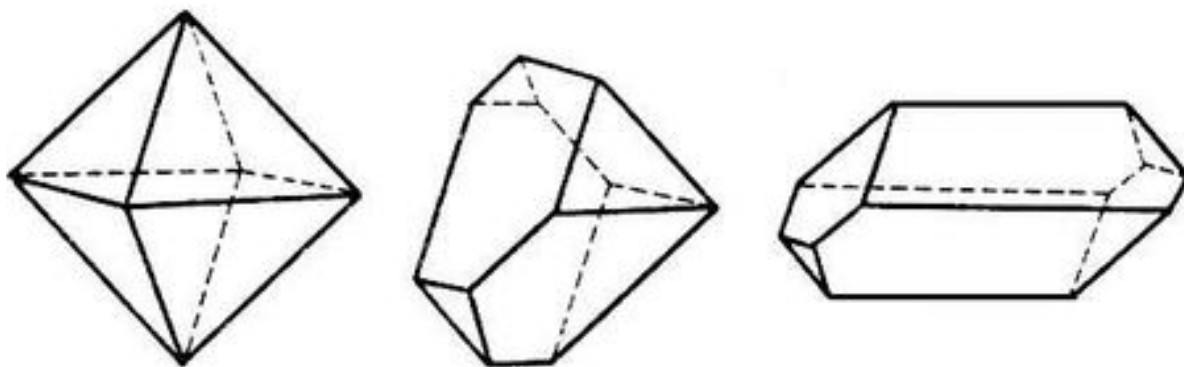


Рис. 5. Постоянство межгранных углов кристалла при разном развитии граней

Поскольку углы между соответствующими гранями кристаллов одного и того же минерала всегда равны, то эта закономерность может служить основанием для их диагностики.

Поскольку, симметрия, периодичность и закономерность структуры – основные характеристики кристаллического состояния вещества, то и основным методом кристаллографии является установление симметрии явлений, свойств, структуры и внешней формы кристаллов.

2. Кристаллографическая символика

В реальных кристаллах закономерное чередование частиц нарушается из-за теплового движения, возбуждения и ряда других причин.

В идеальном кристалле нет нарушений в структуре, все одинаковые частицы в нем расположены одинаковыми параллельными рядами. Расстояние в ряду между частицами составляет несколько ангстрем, поэтому даже на длине в 1 мм в кристалле может располагаться примерно 10^7 частиц, что практически можно считать бесконечным числом.

Кратчайшее из возможных расстояний между одинаковыми точками в ряду называется кратчайшей, или элементарной трансляцией, или периодом идентичности; иногда употребляют названия период трансляции, или параметр ряда (рис. 6).

Одинаковые точки, связанные между собой трансляциями a в бесконечном ряду, называются узлами ряда. Узел ряда так же, как в дальнейшем угол плоской сетки или пространственной решетки, не обязательно должен совпадать с материальной частицей (это могут быть и одинаковые точки между частицами вещества).

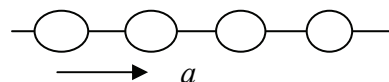


Рис. 6. Симметричный бесконечный ряд с трансляцией a

Если приложить к произвольной точке три не лежащие в одной плоскости (некомпланарные) элементарные трансляции и повторить ее бесконечно в пространстве, то образуется трехмерная система эквивалентных узлов (пространственная решетка). Основную тройку трансляций a , b и c пространственной решетки можно выбрать многими способами, но, как и для плоской сетки, принято выбирать трансляции кратчайшие и наилучшим образом отражающие симметрию решетки.

Параллелепипед, сторонами которого являются три элементарные трансляции, называется элементарной ячейкой, или элементарным параллелепипедом. Элементарный параллелепипед считают примитивным, если внутри у него нет узлов. Пространственную решетку можно рассматривать как систему параллельных элементарных ячеек, которые касаются друг друга целыми гранями и заполняют пространство без промежутков.

Принято обозначать длины элементарных трансляций (ребра элементарной ячейки) буквами a , b , c или a_1 , a_2 , a_3 ; углы между ними – греческими буквами α , β , γ (рис. 7). Шесть перечисленных величин называются параметрами, или постоянными решетки, а величины a , b , c – периодами решетки. Параметры кристалла являются материальными константами каждого кристаллического вещества. В общем случае в кристаллах $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$.

Объем примитивной элементарной ячейки в пространстве не зависит от ее формы и является величиной постоянной для данной решетки.

Пространственная решетка – это математическая абстракция, способ представления периодичности повторения в пространстве отдельных материальных частиц или групп частиц («пустых мест» между частицами).

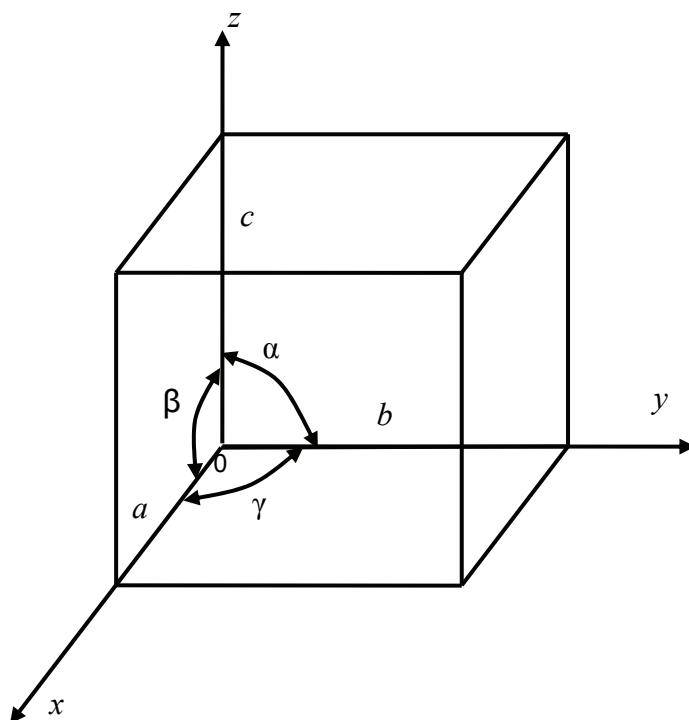


Рис. 7. Элементарный параллелепипед (стандартные обозначения)

Структура металла – это расположение конкретных и материальных частиц в пространстве.

Символы узлов

Если один из узлов решетки выбрать за начало координат, то любой другой узел определится радиус-вектором,

$$R = ta + nb + pc,$$

где t, n, p – три числа, которые называются *индексами* данного узла. Совокупность чисел t, n, p , записанная в двойных квадратных скоб-

ках $[[mnp]]$, в виде простых дробей называется *символом узла* (при необходимости знак минус ставится над числом сверху). Узлы, лежащие на одной прямой, имеют пропорциональные символы (рис. 8).

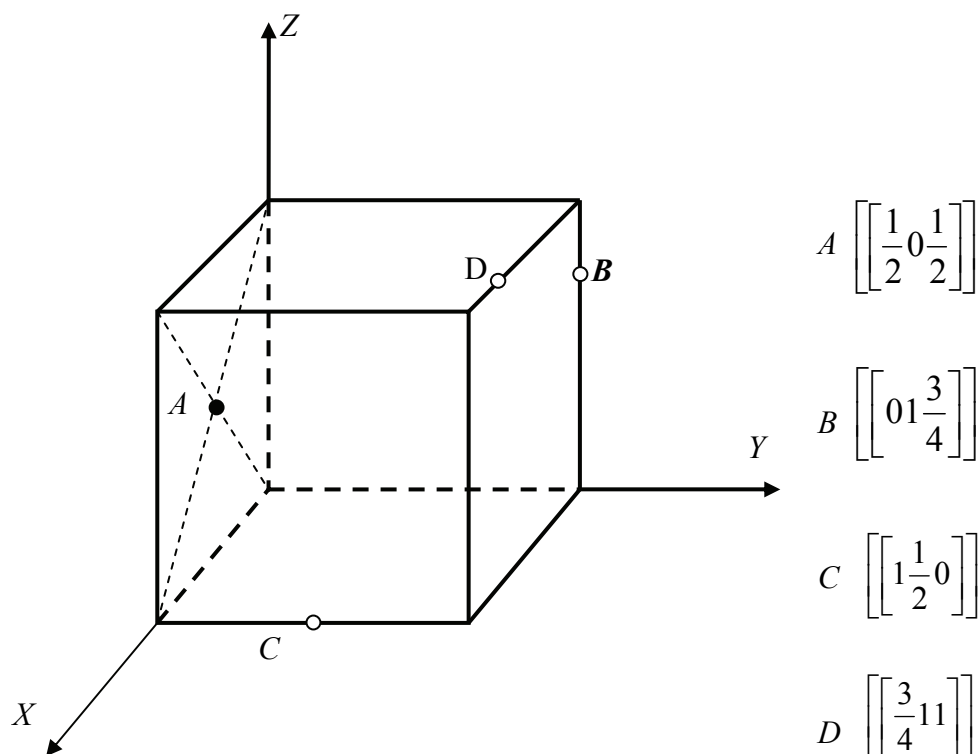


Рис. 8. Символы узлов

Символы плоскостей

Положение плоскости в пространстве однозначно определяется отрезками, отсекаемыми ею на координатных осях. За единицу измерения вдоль каждой кристаллографической оси принимают период решетки вдоль этой оси, т. е. длину ребра элементарной ячейки.

Величины, обратные отрезкам, отсекаемым плоскостью на осях, приведенные к целым числам, называются *индексами Миллера*: индексы Миллера, заключенные в круглые скобки, являются кристаллографическим символом плоскости (hkl) .

Для определения символа какой-либо плоскости необходимо сделать следующее:

- 1) определить величины отрезков, отсекаемых ею на координатных осях, приняв за единицы измерения соответствующие осевые единицы;
- 2) составить отношение величин, обратных величинам этих отрезков;
- 3) привести полученное отношение к отношению взаимно простых целых чисел.

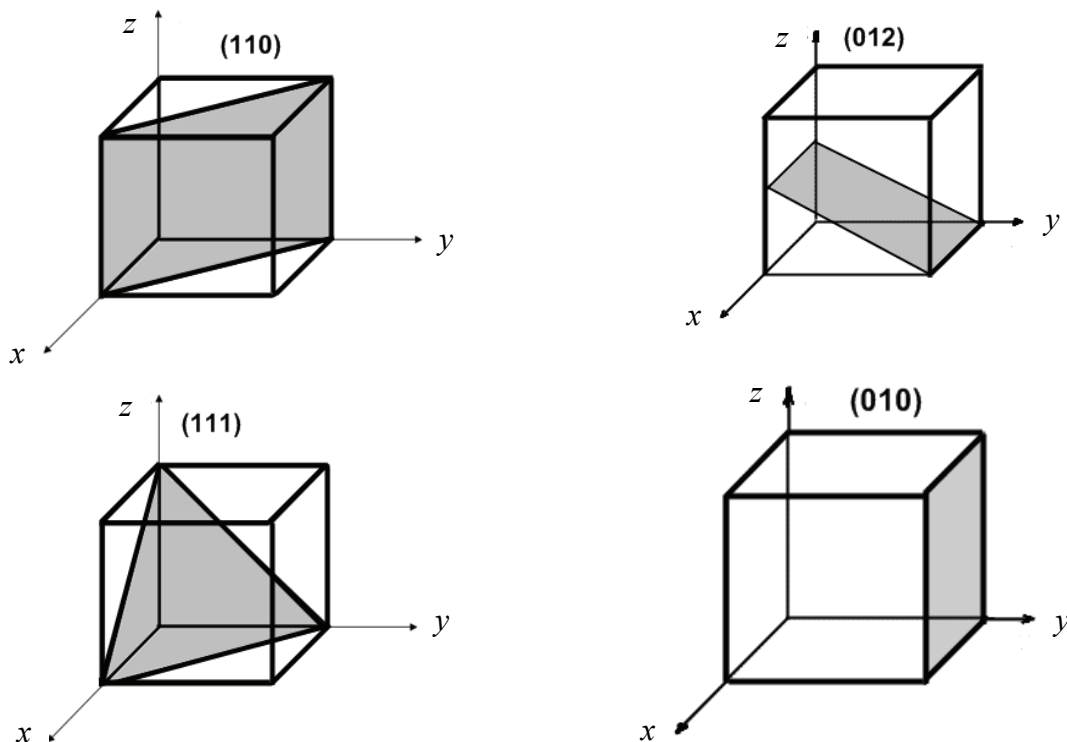


Рис. 9. Символы плоскостей

Если плоскость проходит через начало координат, то для определения ее индексов следует перенести начало координат в другую вершину элементарной ячейки или рассмотреть соседнюю плоскость, параллельную первой. На рис. 9 показано расположение некоторых плоскостей в кубической элементарной ячейке.

Символы направлений

Ориентация прямой однозначно определяется координатами двух ее точек. Если выбрать из семейства параллельных прямых ту, что проходит через начало координат, или же перенести параллельно

самой себе прямую в начало координат, то направление прямой определится координатами любой ее точки. За единицу измерения по каждой кристаллографической оси выбирают период решетки. Полученные значения координат точки приводят к отношению трех наименьших целых чисел. Эти числа, заключенные в квадратные скобки, являются индексами данного направления и всего семейства параллельных направлений $[uvw]$. Например, кристаллографические оси x , y , z имеют индексы $[100]$, $[010]$ и $[001]$ (рис. 10).

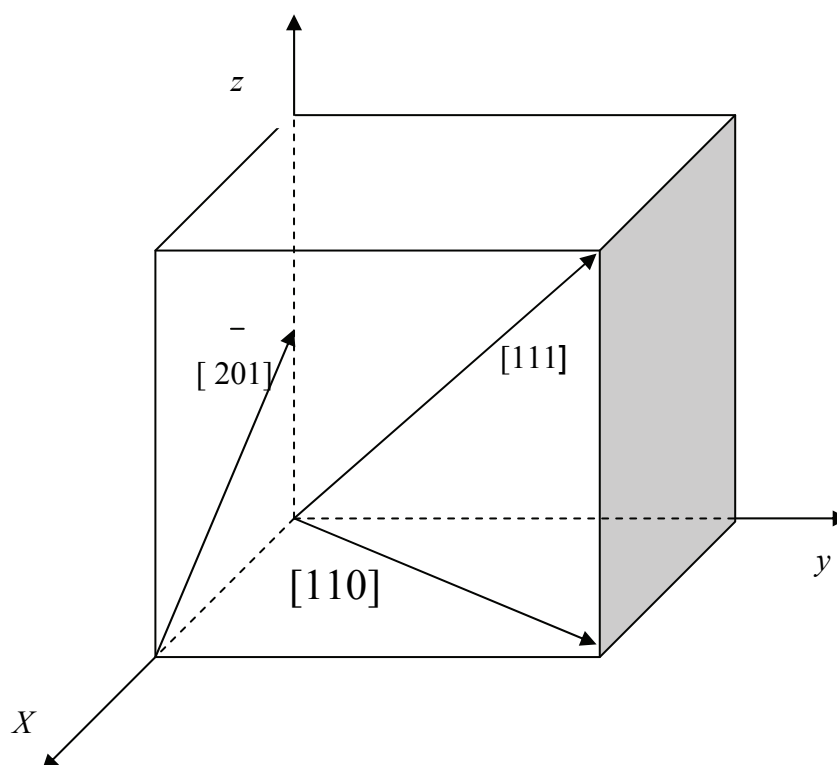


Рис. 10. Примеры кристаллографических направлений в кубической решетке

Знак «минус» ставится в случае, когда прямая пересекает кристаллографическую ось в отрицательном направлении. Семейство направлений (направления, связанные элементами симметрии) записывают в угловых скобках: $\langle mnp \rangle$ или $\langle uvw \rangle$. Например, для куба символ $\langle 100 \rangle$ обозначает прямые $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$, т. е. прямые, индексы которых отличаются либо перестановкой, либо знаком.

В кубической решетке индексы направления, перпендикулярно плоскости (hkl) , всегда точно такие же, как и у плоскости, $[uvw]$.

3. Символы плоскостей и направлений кристаллов гексагональной сингонии

В гексагональной решетке начало координат помещают в центр основания элементарной ячейки (рис. 11). Кристаллографические оси x и y проходят из этого центра через вершины шестиугольного основания элементарной ячейки, располагаясь под углом 120° одна к другой, а ось z является вертикальной осью гексагональной призмы. За единицу измерения вдоль осей x и y принимают период решетки a , а вдоль оси z – период c .

В гексагональной решетке, как и в кубической, индексами Миллера (плоскости) являются приведенные к наименьшим целым числам величины, обратные отрезкам, отсекаемым плоскостью на трех кристаллографических осях. Так, плоскость базиса элементарной ячейки имеет индексы (001) , передняя вертикальная грань – индексы (100) , а заштрихованная боковая грань – индексы (110) . Плоскости призмы (100) и (110) структурно эквивалентны, но они не имеют подобных индексов Миллера. Поэтому чаще пользуются четырехиндексной системой Миллера – Бравэ (рис. 11).

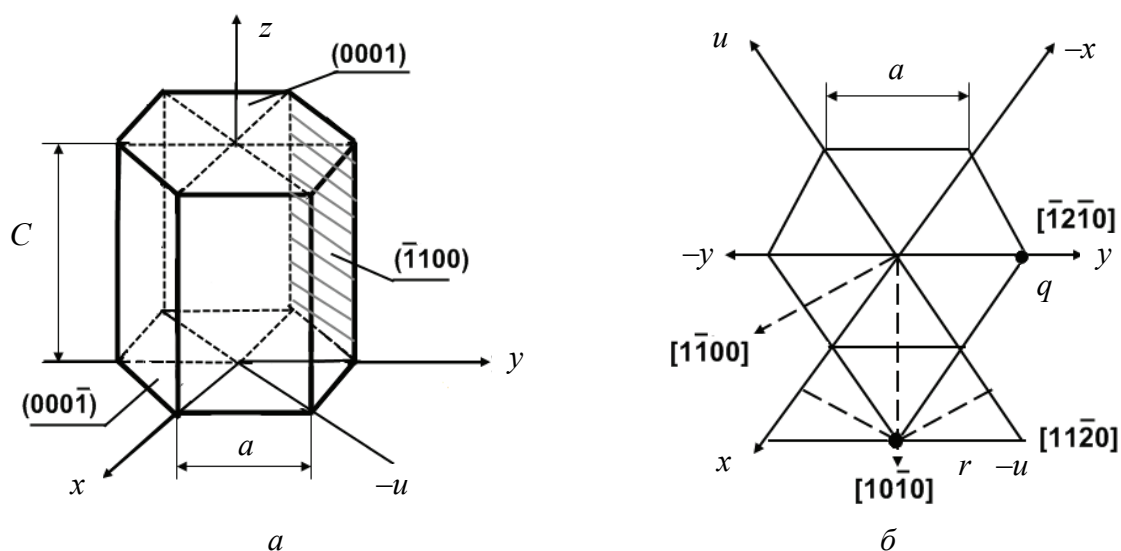


Рис. 11. Обозначение плоскостей и направлений в гексагональной решетке

В плоскости базиса проводят дополнительную ось u , расположенную под углом 120° к осям x и y . Направление u находится между

направлениями $+x$ и $+y$. Дополнительный индекс i определяют так же, как и индексы Миллера, и ставят на третьем месте (hki). В иностранной литературе четвертый индекс опускают, заменяют точкой и записывают ($hkil$).

Положение плоскости в пространстве задается тремя индексами. Поэтому новый индекс является зависимым: $i = -(h + k)$. Для проверки правильности написания индекса плоскости его можно не вычислять, а определять так же, как и другие индексы по величине, обратной отрезку, отсекаемому на оси z .

Для определения индексов направлений в гексагональной решетке чаще используют четырехиндексную систему. Для этого направление переносят параллельно самому себе в начало координат и из любой его точки опускают перпендикуляры на четыре кристаллографические оси.

Новый индекс t вводится условием $u + v + t = 0$, по которому в случае необходимости можно проверить правильность определения символа направления.

Структурно-эквивалентные индексы плоскости (направления) в гексагональной сингонии включают набор из четырёх чисел, три первых из которых можно поменять местами или знаками.

Примеры

Пример 1. Найти символы плоскостей, отсекающей на осях координат отрезки $4a$, $3b$, $2c$.

Запишем отношение $m:n:p = 4:3:2$, отсюда $(1/m):(1/n):(1/p) = (1/4):(1/3):(1/2) = 3:4:6$.

Символ плоскости (hkl) = (346).

Пример 2. Найти символ плоскости, параллельной осям x и z и отсекающей три единицы на оси y .

Имеем $m:n:p = \infty:3:\infty$, отсюда

$(1/m):(1/n):(1/p) = 0:(1/3):0 = (hkl) = (010)$.

Пример 3. Определить символ направления, проходящего через начало координат O и точку с координатами $(a/8, 3b/8, 5c/8)$.

Найдем целочисленные значения отношений координат:

$$(1/8):(3/8):(5/8) = 1:3:5$$

Это соответствует переносу заданной точки вдоль заданного направления в ближайший к началу координат узел кристаллической решетки с координатами (1,3,5). Символ заданного направления [135].

Пример 4. Определить символ направления, проходящего через точки A и B с известными координатами: $A(0 \ a/2 \ c/2)$ и $B(a/2 \ 0 \ c/2)$.

Вычитая соответственно координаты одной точки из координат другой, что соответствует параллельному переносу вектора AB в начало координат O , получают новые координаты вектора $(-a/2 \ a/2 \ 0)$. Таким образом, решение этой задачи сведено к решению предыдущей; заменяя полученное соотношение целочисленным $-(1/2):1/2:0 = -1:1:0$, находят символ направления $[110]$.

4. Связь между символами плоскостей и направлений в кристаллах. Ось зоны

Символы плоскости (hkl) и расположенного в нем ряда (направления) $[uvw]$ связаны между собой зависимостью

$$hu + kv + lw = 0, \quad (1)$$

которую выводят из уравнения плоскости и прямой, лежащей в этой плоскости.

Совокупность кристаллографических плоскостей, проходящих через одно направление, называют зоной плоскостей, их общее направление – осью зоны, а соотношение (1) – условием зональности.

Уравнение (1) помогает найти символ ребра, по которому пересекаются две грани и, наоборот, найти символ грани, находящейся между двумя ребрами:

Найдем символ ребра $[uvw]$, по которому пересекаются две грани $(h_1 \ k_1 \ l_1)$ и $(h_2 \ k_2 \ l_2)$. Для этого надо решить совместно уравнения

$$h_1 u + k_1 v + l_1 w = 0,$$

$$h_2 u + k_2 v + l_2 w = 0.$$

Решением этой системы уравнений являются детерминанты:

$$u = \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix}, \quad v = \begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix}, \quad w = \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}.$$

А отношение детерминантов дает символ грани

$$h:k:l = \left| \begin{array}{c|c} k_1 & l_1 \\ \hline k_2 & l_2 \end{array} \right| : \left| \begin{array}{c|c} l_1 & h_1 \\ \hline l_2 & h_2 \end{array} \right| : \left| \begin{array}{c|c} h_1 & k_1 \\ \hline h_2 & k_2 \end{array} \right|.$$

Детерминанты уравнения раскрывают следующим образом: выписывают индексы $h_1 k_1 l_1$ и $h_2 k_2 l_2$ в двух строках, повторяя их по два раза, затем откинув правые и левые столбцы, производят перекрестное умножение и берут разность полученных произведений по схеме

$$\begin{array}{c} h_1 | k_1 \times l_1 \times h_1 \times k_1 | l_1 \\ h_2 | k_2 \times l_2 \times h_2 \times k_2 | l_2 \end{array}$$

$$u = k_1 l_2 - k_2 l_1; \quad v = l_1 h_2 - l_2 h_1; \quad w = h_1 k_2 - h_2 k_1.$$

Пример: даны грани (320) и (110). Найти символ ребра, по которому они пересекаются.

Решение

$$\begin{array}{c} 3 | 2 \quad 0 \quad 3 \quad 2 | 0 \\ 1 | 1 \times 0 \times 1 \times 1 | 0 \end{array}$$

Ответ: символ ребра равен [001].

Если написать символы плоскостей в другом порядке

$$\begin{array}{c} 1 | 1 \quad 0 \quad 1 \quad 1 | 0 \\ 3 | 2 \times 0 \times 3 \times 2 | 0 \end{array}$$

то индексы ребра будут иметь значения $[00\bar{1}]$. Символы [001] и $[00\bar{1}]$ определяют один и тот же ряд в решетке.

Грани кристалла, пересекающиеся по параллельным ребрам, образуют пояс или зону, а общее направление этих ребер называется осью зоны. Символ $[uvw]$ характеризует ось зоны. Пояс называется законченным или первичным, если все входящие в него грани пересекаются друг с другом и дают на кристалле действительные ребра. Пояс называется незаконченным, если некоторые из его граней пересекаются лишь при своем продолжении, по ребрам, на кристалле не присутствующим, но возможным для него при ином развитии граней.

Существуют положения, которые известны в кристаллографии под именем «закона поясов»:

1) всякая плоскость, параллельная двум действительным или возможным ребрам кристалла, является действительной или возможной гранью кристалла;

2) всякое направление, параллельное линии пересечения двух действительных или возможных граней кристалла, всегда является действительным или возможным ребром кристалла.

Контрольные вопросы и задания

1. Дайте определение кристаллического вещества.
2. Дайте определение кристаллической решетки.
3. Дайте определение кристаллической структуры.
4. Назовите основные свойства кристаллических тел и поясните, на чем они основаны.
5. Почему аморфные вещества рассматривают как переохлаждённые жидкости?
6. Дайте определение закона постоянства граничных углов.
7. Что такое «ряд» в кристаллической решетке?
8. Какую величину принимают за параметр ряда (или элементарную трансляцию)?
9. Что такое элементарная ячейка вещества?
10. Что называют «метрикой» кристаллического вещества?
11. Объясните, почему по «метрике» можно идентифицировать вещество?
12. Зарисуйте элементарный параллелепипед и укажите стандартные обозначения осей координат, элементарных углов и элементарных трансляций.
13. Дайте определение символа узла.
14. Дайте определение символа плоскости, индекса плоскости.
15. Что такое структурно-эквивалентные плоскости, как записать их символы в кубической ячейке?
16. Какие плоскости входят в семейство структурно-эквивалентных плоскостей в кубической ячейке?
17. Дайте определение символа направления, его записи.
18. Какие направления входят в семейство структурно-эквивалентных направлений (как различаются, их индексы для кубической ячейки).

19. Какие индексы можно менять в семействе структурно-эквивалентных плоскостей в гексагональной ячейке?
20. Запишите, как можно определить третий индекс плоскости, зная два первых индекса в гексагональной ячейке.
21. Зарисуйте гексагональную ячейку, обозначьте кристаллографические оси, элементарные углы, элементарные трансляции.
22. Запишите, как раскрываются детерминанты уравнения для того, чтобы определить индексы направления, по которому пересекаются плоскости с известными индексами.
23. Дайте определение оси зоны.
24. Какие грани в кристалле образуют пояс (или зону)?
25. Объясните записи (110) , $\{110\}$.
26. Объясните записи: $[110]$, $\langle 110 \rangle$.
27. Определите индексы узла, находящегося на пересечении пространственных диагоналей куба.
28. Определите индексы узла, находящегося в правой верхней вершине куба передней грани.
29. Определите индексы узла на середине правого ребра, проходящего параллельно оси Z и находящегося на передней грани куба.
30. Определите индексы узла, находящегося в правой верхней вершине задней грани куба.
31. Определите индексы узла, находящегося на середине левой боковой грани кубической ячейки.
32. Запишите индексы узла, находящегося в центре нижней грани гексагональной ячейки.
33. Запишите индексы узла, находящегося в центре передней грани гексагональной ячейки.
34. Запишите индексы узла, находящегося в верхней правой вершине передней грани гексагональной ячейки.
35. Запишите индексы узла, находящегося на пересечении передней левой грани с осью Y в гексагональной призме.
36. Запишите индексы узла, находящегося в центре объема гексагональной ячейки.
37. Определите индексы плоскости, отсекающей два периода по оси Z и проходящей параллельно осям X и Y .
38. Определите индексы плоскости в кубе, отсекающей 2 периода от оси X и по одному периоду от осей Y и Z .
39. Определите индексы плоскости в кубе, отсекающей 2 периода по оси Y и по одному периоду от осей X и Z .

40. Определите индексы передней грани куба.
41. Определите символы структурно-эквивалентных плоскостей куба, которые проходят плоскостные диагонали.
42. Определите индексы передней стенки гексагональной ячейки.
43. Определите индексы нижней грани гексагональной ячейки.
44. Запишите символы семейства структурно-эквивалентных вертикальных граней гексагональной ячейки.
45. Запишите символы плоскости в гексагональной ячейке, проходящей параллельно оси Z и отсекающей один период от оси X и один период от оси Y .
46. Запишите символы плоскости в гексагональной ячейке, отсекающей 0,5 периода от оси X , один период от оси Y и проходящей параллельно оси Z .
47. Определите индексы пространственной диагонали куба, проходящей из начала координат в верхний правый угол передней грани.
48. Запишите символы направления, проходящего из правой верхней вершины передней грани куба в начало координат.
49. Определите индексы диагонали правой грани куба, проходящей из нижней вершины, ближней к наблюдателю.
50. Определите индексы прямой, проходящей из середины нижнего ребра передней грани в правую дальнюю вершину нижней грани куба.

Задания для самостоятельной работы

1. Определите символы атомных рядов, заданных следующими парами точек: а) $(0, 1/2, 0)$ и $(1, 1/2, 1)$; б) $(1/2, 0, 0)$ и $(1, 1/2, 1)$; в) $(1/2, 0, 1)$ и $(1, 1, 1/2)$; г) $(-1/2, 0, 1)$ и $(0, 1/2, 1/2)$; д) $(1, 1/2, 1)$ и $(1/2, 1, 1/2)$; е) $(1, 1, 1/2)$ и $(1/2, 1/2, 0)$; ж) $(1, 1/2, 0)$ и $(0, 1/2, 1)$.
2. Постройте наглядное пространственное изображение указанных направлений в кубе: а) $[1\bar{1}0]$; б) $[\bar{1}10]$; в) $[\bar{1}01]$; г) $[10\bar{1}]$; д) $[0\bar{1}1]$; е) $[011]$; ж) $[01\bar{1}]$; з) $[0\bar{1}\bar{1}]$; и) $[111]$; к) $[11\bar{1}]$; л) $[1\bar{1}1]$; м) $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$; н) $[212]$; о) $[211]$; п) $[21\bar{2}]$; р) $[2\bar{1}2]$.
3. Определите индексы направления диагонали нижней грани куба, проходящей из правой ближней к нам вершины в начало координат.

4. Запишите символы оси Y в гексагональной ячейке.
5. Запишите символы оси Z в гексагональной ячейке.
6. Запишите символы диагоналей вертикальных граней гексагональной ячейки.
7. Запишите символы структурно-эквивалентных осей симметрии гексагональной ячейки.
8. Укажите, какие из плоскостей являются структурно-эквивалентными: $(1\bar{2}10)$, $(\bar{1}210)$, (1210) , (2110) , (0121) , $(1\bar{2}01)$.
9. Найдите символ плоскости в кубе, отсекающей на осях координат отрезки \bar{a} , $b/2$, $2c$.
10. Приведите наглядное изображение заданных плоскостей в гексагональной призме: а) $(10\bar{1}0)$; б) $(1\bar{1}00)$; в) $(2\bar{1}\bar{1}0)$; г) $(10\bar{1}1)$; д) $(10\bar{1}2)$; е) $(2\bar{1}\bar{1}1)$; ж) $(2\bar{1}\bar{1}2)$.

Практическое занятие 2

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЕКЦИИ

Цель работы: ознакомиться с видами кристаллографических проекций, практически овладеть методикой построения кристаллографических проекций и решением задач по сетке Вульфа.

1. Сферическая проекция

Согласно закону постоянства граничных углов, характерными параметрами любого кристаллического вещества являются углы между гранями (между определенными сетками в структуре). Описание взаимного расположения граней кристалла, основанное на величине углов между ними, не даёт наглядной картины симметрии кристалла. Только графический способ описания расположения граней с помощью кристаллографических проекций позволяет выделить грани кристалла (а также направления), связанные элементами симметрии.

При аналитическом описании граней в кристалле важно фиксировать лишь наклон плоской грани относительно координатных осей, не обращая при этом внимания ни на размеры грани, ни на расстояния грани от начала координат, ни на форму грани.

Любую плоскость и любое направление можно мысленно переносить в кристаллографическом пространстве параллельно самим себе, в частности, можно путем такого параллельного переноса заменить кристалл совокупностью плоскостей и прямых линий, проходящих через одну точку в пространстве. Такая совокупность плоскостей и прямых носит название прямого кристаллического комплекса.

В кристаллографии чаще пользуются не углами между гранями, а углами между нормальными к граням, потому что именно эти углы определяют по гониометрическим измерениям и по рентгенограммам.

Зная узлы между нормальными к граням, можно мысленно заменить кристаллический многогранник его полярным комплексом или совокупностью полупрямых, перпендикулярных к граням кристалла и проходящих через одну точку O центра комплекса (рис. 13).

Опишем вокруг точки O сферу (рис. 14). Пересечение нормалей к граням кристалла с поверхностью сферы представляет собой сферическую проекцию нормалей граней кристалла. Полученные точки на сфере проекций называют полюсами граней. Каждой из точек сферической проекции соответствует одна из граней кристалла (рис. 13). Сферическую проекцию кристалла можно строить, не заменяя грани кристалла их нормальными. В этом случае все грани кристалла путем параллельного переноса перемещают в центр сферы проекции и строят следы пересечения этих граней со сферической проекцией. Каждая такая сферическая проекция представляет собой дугу большого круга.

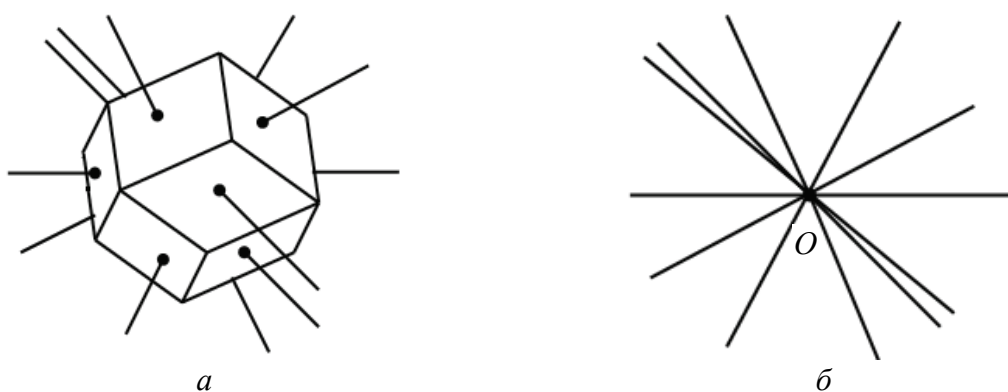


Рис. 13. Ромбический додекаэдр: a – нормали к граням; b – полярный комплекс

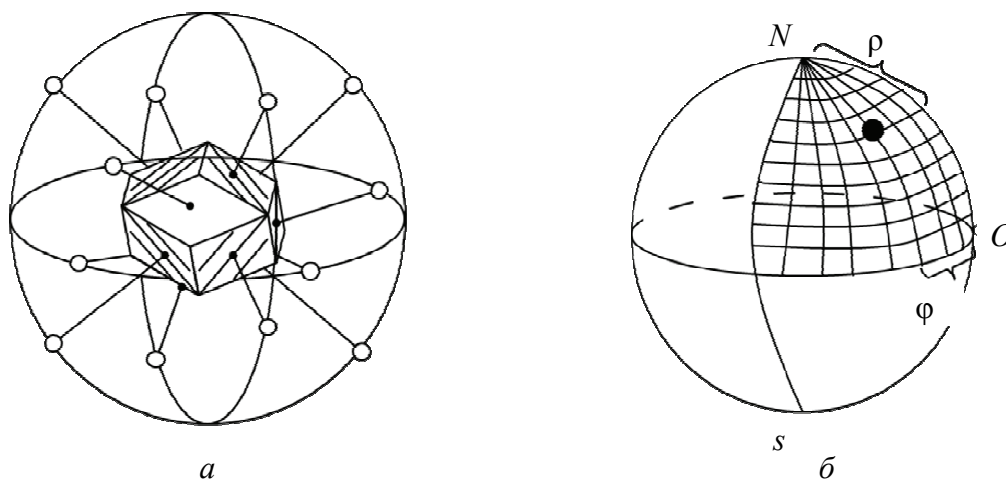


Рис. 14. Принцип построения сферической проекции: a – сферическая проекция; b – сферические координаты на поверхности сферы проекций

Положение любой точки на поверхности сферы можно охарактеризовать двумя сферическими координатами: широтой и долготой. Широта (полярное расстояние) отсчитывается по любому направле-

нию от нуля (северный полюс) до 180 (южный полюс), долгота – по экватору от меридиана, принятого за нулевой (рис. 14).

Между индексами плоскостей (hkl), сферическими координатами и нормали к этой плоскости существует строгая математическая зависимость. Вид зависимости отличен для разных сингоний и расположений кристалла. Для кубической сингонии при условии, что одна из плоскостей куба (001) находится в плоскости проекций, т. е.

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{h}{k}, \quad \operatorname{tg}\rho = \frac{\sqrt{h^2 + k^2}}{l}, \quad h : k : l = \sin \varphi : \cos \varphi : \operatorname{ctg} \rho,$$

сферическая проекция кристалла наглядна, но практика показала, что её удобнее проектировать на плоскость. При этом пользуются стереографическими, гномостереографическими проекциями.

2. Стереографическая проекция

За плоскость стереографической проекции Q выбираем экваториальную плоскость, на которую сфера проектируется в виде круга проекции. В одном из полюсов этого круга помещается точка зрения («глазная точка») S .

Чтобы спроектировать прямую OA , проводим линию AS от полюсной точки A этого направления на сфере проекций до точки зрения S . Точка a пересечения линии AS с кругом проекций и является стереографической проекцией направления OA (рис. 15).

Чтобы не загружать чертеж, обычно проектируются только пересечения линий с верхним полушарием сферы.

Стереографические проекции направления изображаются точками внутри круга проекций, причем вертикальное направление проектируется как точка в центре круга проекций, горизонтальное – как два выхода на окружность экватора.

Для нахождения стереографической проекции плоскости R необходимо перенести плоскость параллельно самой себе в центре проекций, затем продлить плоскость до пересечения её со сферой проекции. В результате пересечения на сфере получается дуга большого круга a, b, d . После соединения всех точек этой окружности с точкой зрения S образуется проекционный конус из лучей зрения Sa, Sb, Sd . Результат пересечения проектирующего конуса с плоскостью проекций Q соответствует стереографической проекции заданной плоскости (рис. 16).

Стереографические проекции горизонтальных плоскостей совпадают с окружностями круга проекций, проекции вертикальных плоскостей – с диаметром круга проекций, а проекции наклонных плоскостей изображают дугами, опирающимися на концы диаметра (рис. 17).

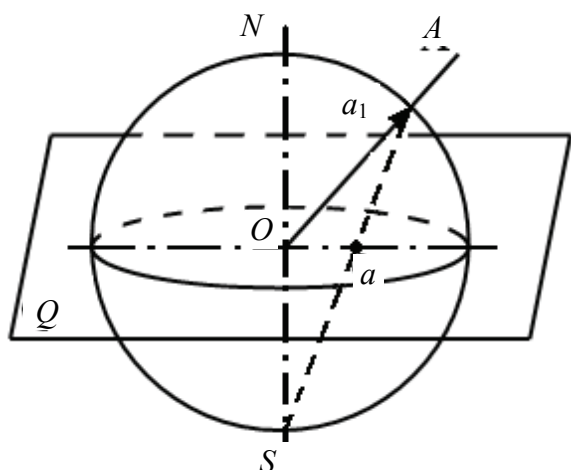


Рис. 15. Принцип построения стереографической проекции направления OA

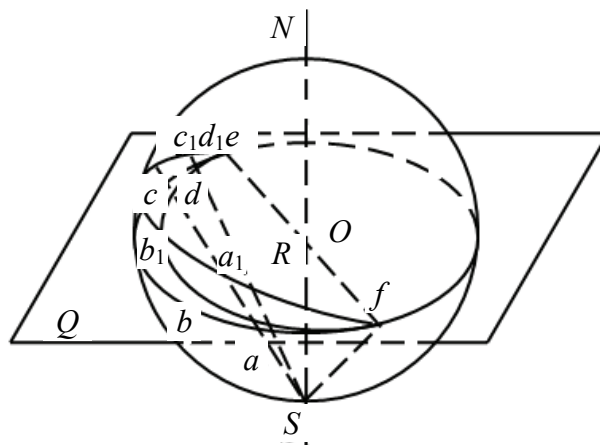


Рис. 16. Построение стереографической проекции плоскости R

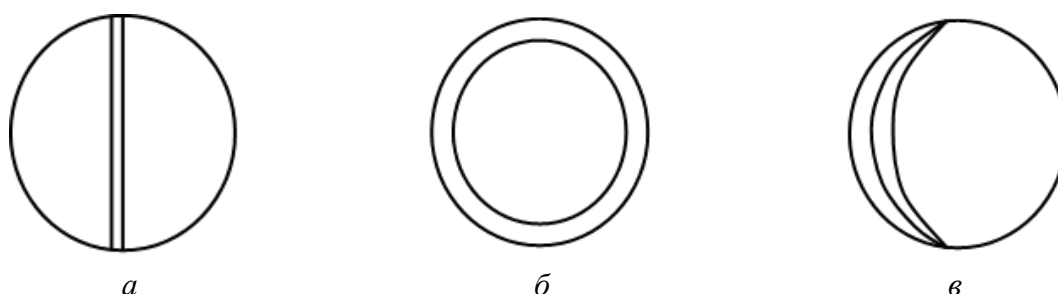


Рис. 17. Стереографические проекции плоскостей, ориентированных: a – перпендикулярно плоскости проекции; b – в плоскости проекции; c – под косым углом к плоскости проекции

Стереографические проекции применяются главным образом для изображения комплекса элементов симметрии кристалла.

Стереографические проекции характеризуются двумя наиболее важными свойствами: любая окружность, проведенная на сфере, изображается на стереографической проекции также окружностью (в частном случае прямой линией); на стереографической проекции не искажаются угловые соотношения. Угол между полюсами граней на сфере (измеренный по дугам больших кругов) равен углу между стереографическими проекциями тех же дуг.

3. Гномостереографическая проекция

Гномостереографическую проекцию применяют чаще всего для изображения кристаллических многогранников. При этом проектируют не многогранник, а его полярный комплекс.

Плоскостью гномостереографической проекции служит та же экваториальная плоскость сферы проекций, что и для стереографической проекции. Для построения гномостереографической проекции кристалла надо на все его грани опустить перпендикуляры, дающие возможность провести линию, соединяющую полюсные точки с точкой зрения (рис. 18), продолжить их до пересечения с поверхностью сферы проекций, описанной вокруг центра тяжести кристалла.

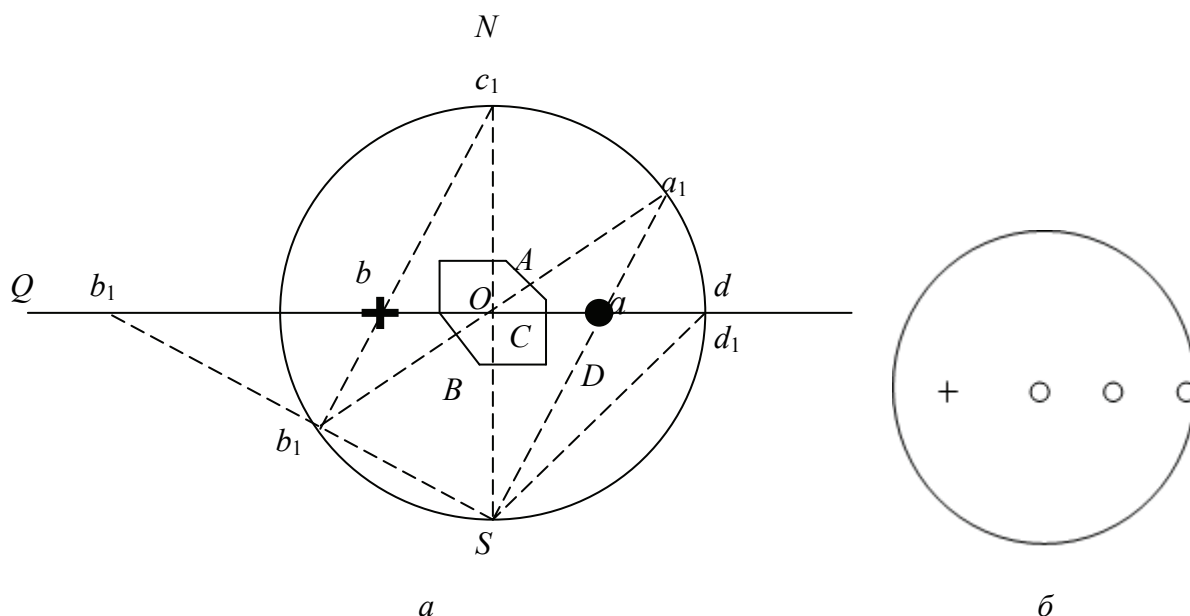


Рис. 18. Построение гномостереографической проекции граней *B*, *C*, *D* кристалла:
a – принцип построения проекции; *б* – изображение проекций граней

Нормали к граням, пересекающие шар проекции в верхней полусфере, проектируются внутри круга проекций (нормаль *OA*, *OC*, рис. 18, *a*). Нормали, пересекающие шар проекций в нижней полусфере, проектируются вне этого круга (нормаль *OB*, рис. 18, *б*).

Неудобство построения заставляет переносить для таких нормалей точку зрения в северный полюс сферы. В этом случае и проекции нижних граней окажутся внутри круга проекций. Чтобы отличить

друг от друга проекции нормалей к верхним и нижним граням, первые обозначают кружками, вторые – крестиками (рис. 18, б).

Гномостереографические проекции направлений (ребер кристалла) изображают так же, как и нормали к граням.

Комплекс граней, нормали к которым лежат в одной плоскости, образует зону проекций граней, принадлежащих одной зоне, и располагается на одной дуге большого круга.

4. Гномоническая проекция

Гномоническую проекцию применяют широко в рентгеноструктурном анализе. Полюсом в этой проекции является центр сферы, а плоскостью проекции – плоскость, касательная к северному полюсу сферы и параллельная плоскости стереографической и гномостереографической проекции.

Нормаль к грани кристалла, проведенная из центра сферы проекций, продолжается до пересечения с плоскостью проекции. Гномоническая проекция плоскости представляет собой точку, проекция направления – прямую. Проекция граней одной зоны лежат на одной прямой.

Недостатком гномонической проекции является то, что в ней не сохранены угловые соотношения: углы между линиями зон на проекции не равны углам между соответствующими плоскостями одной зоны на кристалле. Однако чрезвычайно большим преимуществом этой проекции является то, что координаты точек на ней прямопропорциональны индексам Миллера. Вот почему гномоническая проекция особенно удобна для расшифровки рентгенограмм монокристаллов. Соотношения между различными типами кристаллографических проекций сведены в табл. 1 и показаны на рис. 19.

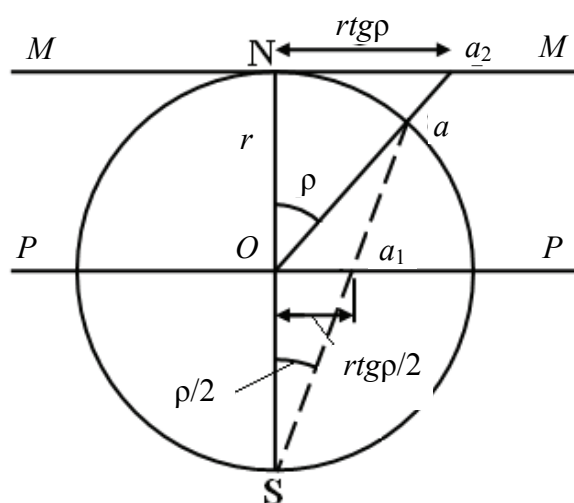


Рис. 19. Соотношения между гномонической, стереографической и гномостереографическими проекциями

Соотношение между кристаллографическими проекциями

Тип проекции	Изображение	
	Плоскости	Прямой
Стереографическая	Дуга большого круга	Точка
Гномостереографическая	Точка	Дуга большого круга
Гномоническая	Точка	Прямая

Проекция направления oa дает на сферической проекции точку a , гномонической проекции (плоскость MM) – точку a_2 , стереографической проекции (плоскость PP) – точку a_1 . На гномостереографической проекции (плоскость PP) точка a_1 – это проекция плоскости, перпендикулярной к направлению oa . Угловые соотношения находят по рис. 19.

5. Решение кристаллографических задач по сетке Вульфа

В 1897 г. знаменитым русским ученым Г. В. Вульфом (1863–1925) в кристаллографическую практику была введена сетка, образованная

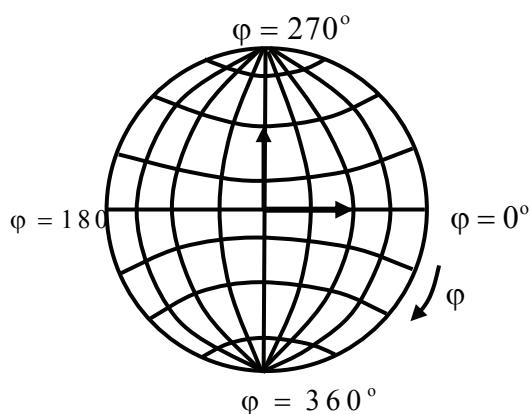


Рис. 20. Схема сетки Вульфа и отсчета углов на ней

стереографическими проекциями меридианов и параллелей и имеющая цену деления 2° . Плоскостью проекций является плоскость одного из меридианов. Образно можно представить себе, что сетка Вульфа – это та картина, которую можно увидеть на плоскости одного из меридианов, если смотреть из какой-нибудь точки экватора на сетку меридианов и параллелей, нанесенную на поверхность шара. Положение на сетке Вульфа любой точки определяется ее сферическими координатами ρ и φ (рис. 20).

Стандартная сетка Вульфа чертится на круге диаметром 20 см. Линии параллелей и меридианов проводят через каждые 2° . Разде-

лив это расстояние на глаз еще на 4 части, можно работать с точностью до $0,5^\circ$.

Для работы с сеткой Вульфа существуют определенные правила, к ним относятся следующие:

1) Приготавливают наклеенную на картон сетку Вульфа, кальку, остро отточенный твердый карандаш.

2) Сетку располагают так, чтобы ее экватор был горизонтальным. На сетку кладут кальку, крестиком отмечают центр проекции, а горизонтальной черточкой на правом конце экватора сетки – нулевую точку. По этим двум отметкам всегда можно привести чертеж в исходное положение.

3) Вся работа выполняется на кальке. Не допускаются никакие отметки на самой сетке.

4) Все построения проводят путем концентрических вращений сетки.

Задача 1

Построить стереографическую проекцию направления, заданного сферическими координатами ρ и φ . Пусть $\varphi = 165^\circ$, $\rho = 68^\circ$.

Решение

1. Накладываем кальку на сетку Вульфа и ставим на ней нулевые отметки ρ и φ .

2. От нулевого значения для φ по кругу проекций по часовой стрелке отсчитываем первую сферическую координату долготу φ (165°) и отмечаем результат на внешнем круге вспомогательной точкой.

3. Вращением кальки (центр кальки при этом всегда должен совпадать с центром сетки) совмещаем найденную вспомогательную точку с концом ближайшего диаметра сетки.

4. По этому диаметру от центра сетки в сторону вспомогательной точки отсчитываем вторую сферическую координату – полярное расстояние ρ (68°) и отмечаем найденную точку кружочком. Для углов $0^\circ \leq \rho \leq 90^\circ$ проекции обозначают кружочками.

Если $90^\circ < \rho \leq 180^\circ$, то отсчет продолжается за плоскость чертежа. Такую точку, находящуюся как бы под плоскостью чертежа, то есть «невидимую» для наблюдателя обозначают крестиком.

5. Возвращаем кальку в исходное положение и подписываем точку a (рис. 21). Эта точка является искомой стереографической проекцией направления A .

В кристаллографии удобнее решить задачи, если даны сферические координаты нормали к грани кристалла и требуется найти стереографическую проекцию нормали к грани, что то же самое, что гномостереографическую проекцию самой грани; даны сферические координаты ребра кристалла или какого-нибудь его характерного направления и требуется построить стереографическую проекцию этого ребра.

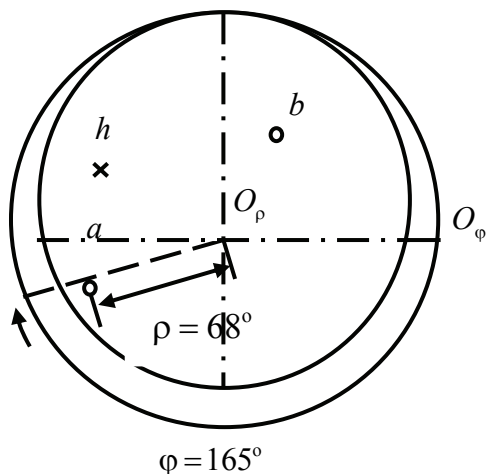


Рис. 21. Схема к задачам 1 и 2

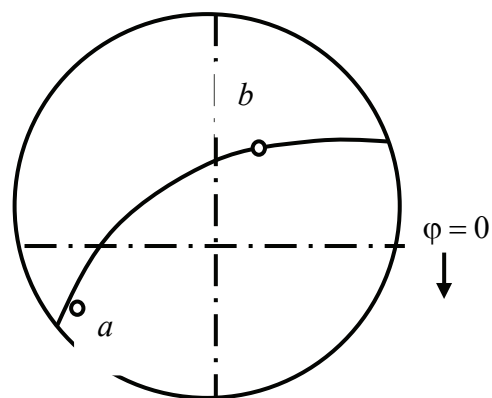


Рис. 22. Схема к задачам 3, 5, 6 и 7

Задача 2 (обратная)

Определить сферические координаты направления, заданного стереографической проекцией.

Решение

1. Вращением кальки привести заданную точку, являющуюся стереографической проекцией, на ближайший диаметр сетки. По этому диаметру от центра сетки до заданной точки отсчитать сферическую координату ρ и отметить вспомогательной точкой на круге проекции тот конец упомянутого диаметра, в направлении которого лежит точка.

2. Вращением привести кальку в исходное положение и по кругу проекции отсчитать сферическую координату φ от нулевого значения φ по часовой стрелке до вспомогательной точки.

Задача 3

Провести дугу большого круга через заданные стереографические проекции двух направлений (рис. 22).

Решение

Пусть точки a и b являются стереографическими проекциями направлений A ($\varphi = 168^\circ$ и $\rho = 68^\circ$) и B ($\varphi = 309^\circ$ и $\rho = 55^\circ$), тогда для решения задач надо выполнить следующее:

1. Вращением кальки добиться чтобы обе заданные точки a и b оказались на одном из вспомогательных меридианов сетки Вульфа.

2. Найденную дугу тщательно обвести карандашом и вернуть кальку в прежнее положение.

В данной задаче точки a и b лежат в одной половине сферы и обе изображены кружочками. Если же точки лежат в разных полушарах (обозначаются кружочком и крестиком), то следует вращением кальки привести точки на симметричные меридианы и обвести их, соответственно, сплошной и пунктирной линиями.

Если заданные точки изображают гномостереометрические проекции граней, то найденная дуга большого круга представляет гномостереографическую проекцию ребра, лежащего на пересечении обеих граней.

Если заданные точки изображают стереографические проекции ребер, то найденная дуга большого круга является стереографической проекцией грани, в плоскости которой лежат упомянутые ребра.

Задача 4

Измерить угол между направлениями A и B , заданными их стереографическими проекциями a и b соответственно (рис. 23, 24).

Решение

Для решения необходимо совместить заданные точки a и b с одним из меридианов сетки и отсчитать по этому меридиану количество градусов, заключенных между точками a и b .

Если заданные точки лежат в разных полушарах, то их (подобно решению задачи 3) поворотом кальки совмещают с меридианами, симметричными относительно центра сетки. Угол отсчитывают по одному меридиану от точки до полюса и по другому от полюса до точки.

Если заданные точки представляют собой гномостереографические проекции граней, то измеренный угол является углом между нормальными к этой грани.

Если заданные углы являются стереографическими проекциями ребер, то измеренный угол есть угол между этими ребрами.

Задача 5

Найти полюс дуги большого круга, то есть точку отстоящую от всех точек дуги на 90° .

Решение

Для решения необходимо дугу совместить с одним из меридианов и от точки пересечения дуги с экватором отсчитать 90° в сторону центра проекции. Найденная точка отсчета и есть полюс.

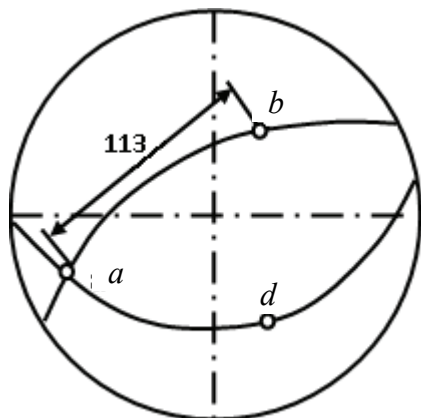


Рис. 23. Схема к задаче 4

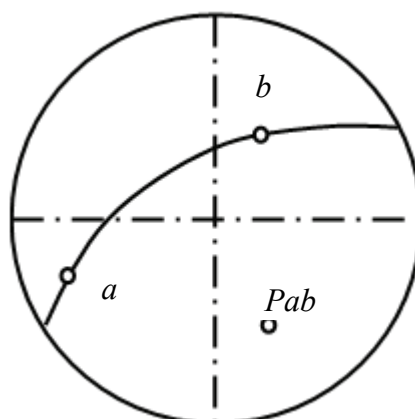


Рис. 24. Схема к задаче 4

Решение этой задачи дает возможность переходить от гномостереографической проекции к стереографической и обратно. Если заданная дуга является стереографической проекцией грани, то найденный полюс является стереографической проекцией нормали к грани, т. е. гномостереографической проекцией грани. Если заданная дуга есть гномостереографическая проекция ребер, то найденный полюс является гномостереографической проекцией грани, нормальной к этому ребру или стереографической проекцией этого ребра.

Задача 6 (обратная)

По заданному полюсу найти соответствующую ему дугу большого круга (экватор к полюсу).

Решение

1. Вращением кальки вывести данную точку на экватор сетки, отсчитать по экватору 90° в направлении центра сетки и отметить меридиан, проходящий через точку отсчета. Эта меридиальная дуга будет искомой меридиальной дугой относительно заданного полюса.

2. Если заданный полюс представляет собой гномостереографическую проекцию грани, то найденная дуга соответствует стереографической проекции самой грани.

3. Если заданный полюс есть стереографическая проекция ребра, то найденная дуга отвечает гномостереографической проекции этого же ребра.

Задача 7 (задача на построение малого угла)

Построить геометрическое место точек, отстоящих от данной точки на данный угол α .

Решение

Сущность задачи сводится к следующему. Вокруг некоторого направления, стереографическая проекция которого отвечает заданной точке, есть множество направлений, отклоненных от первоначального на один и тот же угол α и образующих в совокупности конус с углом раствора 2α . Пересечение этого конуса с поверхностью сферы дает малый круг, в центре которого находится точка пересечения заданного направления со сферой.

Пусть заданная точка лежит внутри круга проекции, например, точка v . Требуется построить вокруг нее как вокруг стереографического центра малый круг – геометрическое место точек, отстоящих от точки v на 30° .

Для решения задачи, заданную точку совмещают с какой-либо параллелью сетки Вульфа, затем по меридиану сетки, проходящему через исходную точку, вверх и вниз отсчитывают $\alpha = 30^\circ$ и отмечают полученные при этом две точки. Вращением кальки далее приводят заданную точку на какую либо другую параллель сетки и снова аналогичным путем получают пару новых точек. Такой прием повторяется до тех пор, пока полученные точки не будут совершенно отчетливо обрисовывать окружность.

В частном случае, когда заданная точка лежит на внешнем круге проекции ($\rho = 90^\circ$), достаточно привести ее повороты кальки на один из полюсов, изображенных на сетке Вульфа, отсчитать в любую сторону по кругу (или по любой вспомогательной меридиальной дуге сетки) требуемый угол и прочертить соответствующую параллель сетки.

Наконец, в случае совпадения заданной точки с центром проекции, условное расстояние отсчитывают по обоим диаметрам сетки и по четырем найденным точкам строят искомую окружность.

Построение малых углов широко используется при решении задач, когда по двум заданным точкам и углам между ними и третьей искомой точкой требуется определить эту искомую.

Контрольные вопросы и задания

1. Дайте понятие прямого кристаллического комплекса.
2. Что такое обратный (полярный) кристаллический комплекс?
3. Запишите, какими сферическими координатами характеризуют положение точки на поверхности сферы и как их определяют.
4. Опишите положительные и отрицательные моменты при применении сферической проекции.
5. Объясните, какие комплексы изображения кристалла применяют в сферической проекции.
6. Покажите на рисунке, что является плоскостью стереографической проекции, точкой зрения.
7. Опишите и зарисуйте (на любом примере) принцип построения стереографической проекции направления.
8. Опишите и зарисуйте (на любом примере) принцип построения стереографической проекции плоскости.
9. Какой кристаллический комплекс используют для построения стереографической проекции?
10. Что является стереографической проекцией направления?
11. Что является стереографической проекцией плоскости?
12. Какой кристаллический комплекс используют в гномостереографической проекции?
13. Покажите на примере принцип построения гномостереографической проекции плоскости.
14. Покажите на примере принцип построения гномостереографической проекции направления.
15. Что является плоскостью гномостереографической проекции?
16. Покажите, как производят отсчет координат на сетке Вульфа.
17. Что такое сетка Вульфа и для чего ее применяют?
18. Укажите, что является плоскостью гномонической проекции.
19. Зарисуйте принцип построения гномонической проекции плоскости.
20. Какой кристаллический комплекс используют в гномонической проекции?

21. Запишите, что является гномонической проекцией плоскости.
22. Запишите, что является гномонической проекцией направления.
23. В каких случаях для решения задач применяют сферическую проекцию?
24. При решении каких задач применяют стереографическую проекцию?
25. Укажите, для решения каких задач применяют гномостереографическую проекцию.
26. Укажите, для решения каких задач применяют гномоническую проекцию.
27. Укажите отличие при изображении прямой в стереографической и гномостереографической проекциях.
28. Укажите отличия при изображении плоскости в стереографической и гномостереографической проекциях.
29. Укажите, что является гномостереографической и гномонической проекцией плоскости.

Задания для самостоятельной работы

1. Постройте стереографические проекции и наглядное пространственное изображение следующих направлений в кубе: а) $[210]$; б) $[2\bar{1}0]$; в) $[021]$; г) $[0\bar{2}\bar{1}]$; д) $[201]$; е) $[\bar{2}01]$; ж) $[20\bar{1}]$; з) $[120]$; и) $[\bar{1}20]$; к) $[\bar{1}\bar{2}0]$; л) $[1\bar{2}0]$; м) $[100]$; н) $[010]$.
2. Определите символ атомной плоскости по символам двух принадлежащих ей атомных рядов и покажите её пространственное изображение на примере куба: а) $[210]$ и $[\bar{2}10]$; б) $[120]$ и $[110]$; в) $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ и $[1\bar{1}\bar{1}]$; г) $[1\bar{1}0]$ и $[110]$; д) $[112]$ и $[211]$.
3. Определите символ атомной плоскости, заданной указанными тремя точками: а) $(0,0,1/2)$, $(0,1/4,0)$ и $(0,0,0)$; б) $(-1/3,0,0)$, $(0,1/2,0)$ и $(0,0,1/2)$; в) $(1/2,0,0)$, $(0,1/2,0)$ и $(0,0,1/4)$; г) $(1/3,0,0)$, $(0,1/2,0)$, и $(0,0,1/2)$; д) $(1,0,0)$, $(0,1/2,0)$ и $(0,0,0)$; е) $(1,1/2,1)$, $(1/2,1,1)$ и $(1,1,1/2)$.
4. Определите символ нормали к заданной атомной плоскости кубического кристалла: а) (101) ; б) (210) ; в) $(12\bar{3})$; г) (111) ; д) (001) ; е) (112) ; ж) $(11\bar{2})$; з) (221) ; и) $(32\bar{1})$.

5. Изобразите стереографическую проекцию направления, если оно проходит перпендикулярно плоскости проекций.
6. Зарисуйте стереографическую проекцию направления, проходящего параллельно плоскости проекций.
7. Изобразите гномостереографическую проекцию плоскости, проходящей перпендикулярно плоскости проекций.
8. Изобразите гномостереографическую проекцию плоскости, проходящей параллельно плоскости проекций.
9. Зарисуйте сферическую проекцию направления $[021]$ и запишите их сферические координаты.
10. Зарисуйте сферическую проекцию направления $[101]$ и запишите ее сферические координаты.
11. Зарисуйте стереографическую проекцию направления $[011]$.
12. Зарисуйте стереографическую проекцию направления $[001]$.
13. Зарисуйте стереографическую проекцию направления $[111]$.
14. Зарисуйте стереографическую проекцию плоскости (001) .
15. Зарисуйте стереографическую проекцию плоскости (110) .
16. Зарисуйте стереографическую проекцию плоскости (111) .
17. Зарисуйте гномостереографическую проекцию плоскости (001) .
18. Зарисуйте гномостереографическую проекцию плоскости (110) .

Практическое занятие 3

ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ КОНЕЧНЫХ ФИГУР. СИММЕТРИЯ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ

Цель занятия: приобретение навыков определения центра зеркальной плоскости и поворотных осей симметрии на моделях кристаллических многогранников; составление формул симметрии и установление категории, сингонии и класса симметрии кристаллов; приобретение навыков выбора элементарных ячеек и определения типа решётки Бравэ, сингонии, числа единиц, приходящихся на ячейку, стехиометрического соотношения, координационных чисел и координационных многогранников на моделях кристаллических структур; приобретение навыков определения винтовых осей симметрии, плоскостей скользящего отражения.

1. Понятие симметрии. Элементы симметрии кристаллических многогранников

Одним из характерных признаков кристаллической решётки является то, что её различные части построены совершенно одинаково и периодически повторяются в пространстве.

Так, если симметричные тела состоят из закономерно повторяющихся равных частей, то кристаллические тела являются симметричными образованиями.

С точки зрения симметрии кристаллического вещества оказывается не безразличным то, о чём идёт речь: о симметрии конечного тела (кристаллического многогранника) или о симметрии тела бесконечного (кристаллической решётки). Поэтому рассматривают отдельно симметрию внешней формы кристаллов и симметрию их внутреннего строения.

Учение о симметрии играет исключительно важную роль в науке о кристаллах: на нём основаны все классификации кристалличе-

ских веществ, оно даёт ключ к пониманию ряда законов собственно кристаллографии, кристаллохимии и кристаллофизики (в том числе и некоторых закономерностей формирования или проявления наиболее важных для материаловедения физико-механических свойств кристаллических веществ).

Вспомогательные геометрические образы (точки, прямые или плоскости), относительно которых закономерно повторяются равные части тел, называют элементами симметрии.

Центр симметрии (C или I) – особая точка внутри тела, по обе стороны и на равном расстоянии от которой любая мысленно проведённая через неё прямая встречает одинаковые части тела (рис. 25).

При наличии центра симметрии каждой грани кристаллического многогранника соответствует другая грань, равная и параллельная (или антипараллельная).

Центр инверсии называют центром обратного равенства, потому что каждая грань при наличии центра инверсии должна иметь равную себе и обратно параллельную грань (рис. 26).

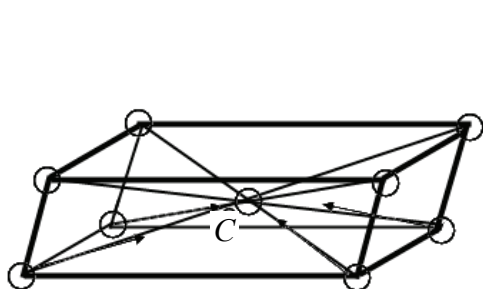


Рис. 25. Центр симметрии C в элементарном параллелепипеде

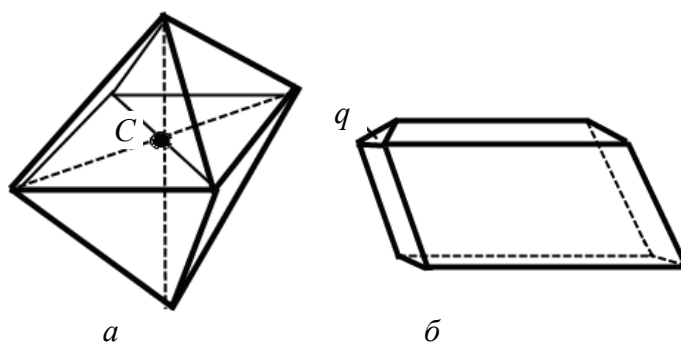


Рис. 26. Многогранник: a – с центром инверсии C (грани попарно равны и обратно параллельны); b – не имеет центра инверсии, т. к. для грани q нет парной параллельной грани

Следует отметить существенное различие между центром инверсии и центром симметрии, на которое довольно часто не обращают внимания. Если отражение в центре симметрии совмещает две эквивалентные точки фигуры и является законченным симметрическим преобразованием, то само по себе отражение в центре инверсии не приводит к такому совмещению, поскольку для завершения симмет-

рического преобразования необходимо еще произвести поворот фигуры на элементарный угол.

Поворотная ось симметрии n -го порядка (L_n или n) – это прямая, при одном полном повороте вокруг которой тело n раз совмещается само с собой всеми своими точками.

Наименьший угол поворота α_n , приводящий тело к самосовмещению, называется элементарным углом поворота оси симметрии: $\alpha_n = 360^\circ/n$.

Инверсионная ось симметрии n -го порядка (L_i или \bar{n}) – это прямая, при повороте вокруг которой на угол α_n с последующим (или предварительным) отражением в центральной точке тела (центре инверсии), как в центре симметрии, тело n раз приходит к самосовмещению. Следует помнить, что центр симметрии при этом может быть самостоятельным элементом симметрии.

В геометрических фигурах могут присутствовать оси любых порядков, начиная от оси первого порядка и кончая осью бесконечного порядка.

Элементарный угол поворота оси первого порядка ($n = 1$) равен 360° . Так как каждая фигура будучи повернута вокруг любого направления на 360° , совмещается сама с собой, то всякая фигура обладает бесконечным количеством осей первого порядка. Такие оси не являются характерными, поэтому они обычно не упоминаются.

Ось бесконечного порядка отвечает бесконечно малому элементарному углу поворота. Эта ось присутствует во всех фигурах вращения в качестве оси вращения.

Примерами осей третьего, четвертого, пятого, шестого и других порядков являются перпендикуляры к плоскости рисунка, проходящие через центры правильных многоугольников, треугольников, квадратов, пятиугольников и т. п.

Таким образом, в геометрии существует бесконечный ряд осей различных порядков.

В кристаллических же многогранниках возможны не любые оси симметрии, а только оси первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков (рис. 27).

Оси симметрии пятого и выше шестого порядка в кристаллах невозможны. Это положение является одним из основных законов кристаллографии и называется законом симметрии кристаллов.

Как и другие геометрические законы кристаллографии, закон симметрии кристаллов объясняется решетчатым строением кристал-

лического вещества. Действительно, раз симметрия кристалла есть проявление симметрии его внутреннего строения, то в кристаллах возможны только такие элементы симметрии, которые не противоречат свойствам пространственной решетки

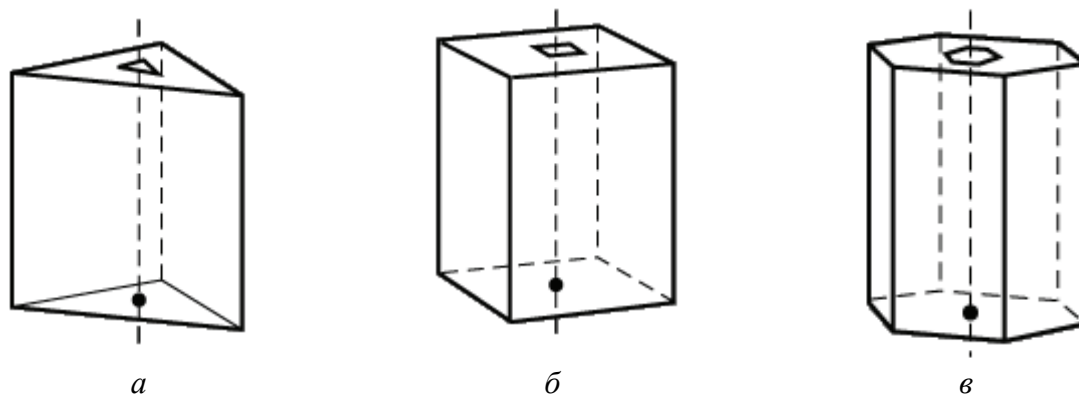


Рис. 27. Фигуры, имеющие оси симметрии: $a - L_3$; $b - L_4$; $c - L_6$

В кристаллических многогранниках оси симметрии могут проходить через вершины, в которых сходятся рёбра, через вершины, образованные чётным числом граней с попарно равными противоположными двугранными углами, через центры граней с числом рёбер, кратным порядку оси симметрии, а также перпендикулярно граням или через середины рёбер перпендикулярно рёбрам.

Инверсионные оси симметрии, обозначаемые буквой L_i , являются сложными элементами симметрии. Они представляют собой как бы совокупность совместно действующих оси симметрии и центра инверсии.

Рассмотрим пример инверсионной оси в правильной треугольной призме (рис. 28). В этой фигуре прямая gg является осью симметрии третьего порядка L_3 и одновременно инверсионной осью шестого порядка. Действительно, после поворота вокруг этой оси на 60° всех частей многогранника и последующего их отражения в центральной точке фигура самосовмещается.

Например, ребро AB в результате поворота вокруг gg на 60° займет положение A_1B_1 , а после отражения в центральной точке фигуры совместится с ребром A_1B_1 . При полном повороте на 360° будет всего шесть таких совмещений. Следовательно, прямая gg представляет собой инверсионную ось шестого порядка L_{i6} .

В кристаллических многогранниках возможны инверсионные оси первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков, т. е. $L_{i1}, L_{i2}, L_{i3}, L_{i4}, L_{i6}$.

На практике приходится иметь дело в основном с двумя последними инверсионными осями — L_{i4} и L_{i6} . Остальные инверсионные оси могут быть заменены другими уже знакомыми нам элементами симметрии.

Так, например, инверсионная ось первого порядка (L_{i1}) равнозначна центру инверсии (C). Действительно поворот на 360° оставляет фигуру на месте, поэтому самосовмещение фигуры произойдет только в результате отражения в центральной точке. Следовательно, $L_{i1} \equiv C$.

Инверсионная ось второго порядка по своему действию равнозначна перпендикулярной к ней плоскости симметрии, т. е. $L_{i2} \equiv P$.

Инверсионная ось третьего порядка L_{i3} равносильна одновременно действующим оси симметрии третьего порядка L_3 , совпадающей с L_{i3} , и центру инверсии C , т. е. $L_{i3} = L_3 C$. Так, например, в кубе, где присутствует совместно C и L_3 , каждая из четырех осей симметрии третьего порядка является в то же время тройной инверсионной осью. Наличие L_{i3} , всегда совпадающей с простой осью симметрии третьего порядка, обычно не указывается.

Инверсионная ось четвертого порядка L_{i4} является самостоятельным элементом симметрии и не может быть ничем заменена. В многогранниках, обладающих L_{i4} , центр инверсии отсутствует. Четвертая инверсионная ось всегда является одновременно осью симметрии второго порядка ($L_{i4} = L_2$), однако не любая двойная ось при отсутствии C отвечает L_{i4} .

Инверсионная ось шестого порядка L_{i6} может быть заменена осью симметрии третьего порядка, совпадающей с L_{i6} и перпендикулярной к ней плоскостью симметрии: $L_{i6} = L_3 P (P \perp L_3)$.

Кристаллические многогранники, обладающие L_{i6} , самостоятельного центра инверсии не имеют.

Хотя L_{i6} можно заменить другими элементами симметрии, ею приходится пользоваться при классификации кристаллов, поэтому она упоминается наряду с L_{i4} .

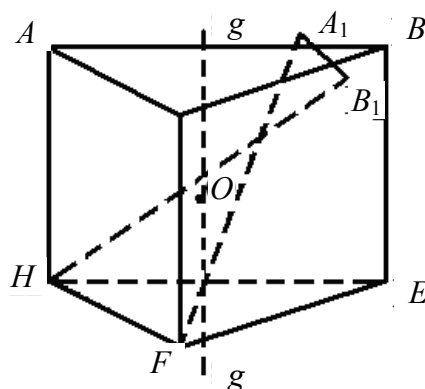


Рис. 28. Многогранник с инверсионной осью шестого порядка

Зеркальная плоскость симметрии (P или m) – это плоскость, которая делит тело на две зеркально равные части, связанные друг с другом как предмет и его зеркальное отражение (рис. 29, 30).

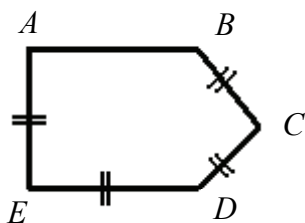


Рис. 29. Фигура несимметричная

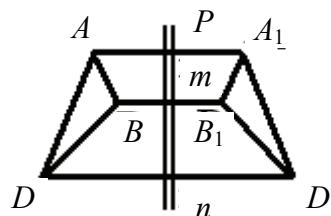


Рис. 30. Отражение точек фигуры в плоскости P

Зеркальные плоскости симметрии в кристаллических многогранниках проходят перпендикулярно граням или рёбрам через их середины или же идут вдоль рёбер, образуя равные углы с одинаковыми гранями и рёбрами.

Не каждая плоскость, делящая фигуру пополам, является плоскостью симметрии. Например, в прямоугольнике только две плоскости, параллельные его сторонам, являются плоскостями симметрии (рис. 31). Плоскости, идущие вдоль диагоналей прямоугольника, плоскостями симметрии не являются, т. к. образующиеся треугольники зеркально не равны.

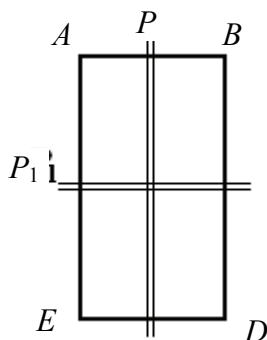
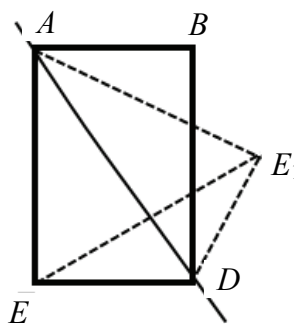


Рис. 31. Прямоугольник $ABDE$ имеет две плоскости (P и P_1) симметрии



Кристаллические многогранники могут иметь одну или несколько плоскостей симметрии. Число плоскостей симметрии указы-

ваются коэффициентом, стоящим перед буквой P . Например, куб имеет $9P$, т. е. девять плоскостей симметрии (рис. 30).

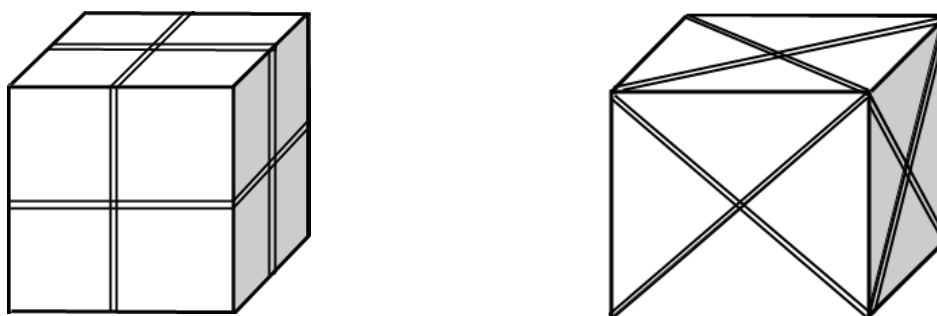


Рис. 30. Плоскости симметрии куба

Таким образом, в кристаллических многогранниках встречается всего девять элементов симметрии. Максимально возможное число каждого из элементов симметрии, которыми может обладать кристаллический многогранник, приведено ниже:

Центров симметрии	1
Поворотных осей симметрии второго порядка	6
третьего порядка	4
четвёртого порядка	3
шестого порядка	1
Инверсионных осей симметрии третьего порядка	4
четвёртого порядка	3
шестого порядка	1
Зеркальных плоскостей симметрии	9

2. Теоремы сложения элементов симметрии

Сочетание нескольких элементов симметрии не является произвольным, а подчиняется строгой геометрической закономерности, которая заключается в том, что при наличии двух элементов симметрии фигура обладает и третьим элементом симметрии, равнодействующим первым двум.

Равнодействующим называют элемент симметрии, действие которого приводит фигуру в то же положение, что и последовательное

действие двух других элементов симметрии. Например, в правильной четырёхугольной призме (рис. 31) плоскость симметрии P_2 является равнодействующей другой плоскости симметрии P_1 и оси симметрии L_4 .

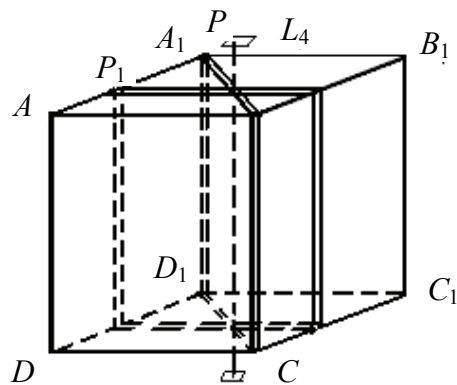


Рис. 31. Ось симметрии L_4 равнодействующая плоскостям симметрии P_1 и P_2

С другой стороны, L_4 является равнодействующей плоскостей симметрии P_1 и P_2 . Так как два элемента симметрии всегда дают третий, им равнодействующий, то в кристаллических многогранниках возможны либо только один элемент, либо больше двух.

Нахождение по двум элементам симметрии им равнодействующего называется сложением элементов симметрии.

Познакомимся с основными теоремами сложения элементов симметрии.

Теорема 1. Линия пересечения двух плоскостей симметрии является осью симметрии, равнодействующей этим плоскостям.

Теорема 2. Если через ось симметрии проходит плоскость симметрии, то через ту же ось должна проходить вторая плоскость симметрии под углом 90° к первой.

Следствие. Если через ось симметрии n -го порядка проходит плоскость симметрии, то всего через эту ось должно проходить n плоскостей симметрии. Пусть число плоскостей симметрии равно m , т. к. каждая плоскость, проходящая через L_n , повторяется через 180° , тогда число плоскостей симметрии должно быть равно

$$m = 180/(\alpha/2) = 360/\alpha = n,$$

где n – порядок данной оси симметрии.

Теорема 3. При наличие оси симметрии чётного порядка (L_{2n}) и центра инверсии (C), перпендикулярно к оси через центр инверсии проходит плоскость симметрии (P), равнодействующая данной оси и центра инверсии.

Теорема 4. При наличии плоскости симметрии и центра инверсии на ней фигура всегда обладает осью симметрии чётного порядка, проходящей через центр инверсии перпендикулярно к плоскости симметрии.

Теорема 5. При наличии оси симметрии чётного порядка и перпендикулярной к ней плоскости симметрии всегда присутствует центр инверсии, равнодействующей оси и плоскости симметрии.

Все три последние теоремы являются взаимнообратными.

Следствие. При наличии центра инверсии число плоскостей симметрии равно сумме всех чётных осей симметрии, причём каждая плоскость симметрии перпендикулярна соответствующей оси симметрии.

Например, в кубе имеется C , $3L_4$, $4L_3$ и $6L_2$. Так как сумма чётных осей симметрии равна 9, то всего куб должен иметь $9P$.

Теорема 6 (Теорема Эйлера). Равнодействующей двух пересекающихся осей симметрии является третья ось симметрии, проходящая через точку пересечения первых двух.

Следствие. При наличии оси симметрии n -го порядка (L_n) и перпендикулярной к ней оси симметрии второго порядка (L_2) имеется всего n осей второго порядка (nL_2), перпендикулярных к L_n и пересекающихся друг с другом под углом $\alpha/2$.

Пример формулы записи элементов симметрии многогранников, представленных на рис. 27: тригональная призма L_33L_23P ; куб $3L_44L_36L_29PC$; гексагональная призма L_66L_27PC .

3. Изображение элементов симметрии на плоскости стереографической проекции

Для обозначения симметрических преобразований и соответствующих элементов симметрии в кристаллографии пользуются условными символами, в которых наиболее распространены две нижеприведенные системы обозначений.

В табл. 2 показаны международная символика, принятая международным союзом кристаллографов, а также международные условные изображения элементов симметрии на плоскости стереографической проекции.

В случае стереографической проекции оси симметрии проектируются подобно нормальям к граням.

Вертикальные оси изображаются в центре круга проекций, а оси, наклонные к плоскости проекций, проектируются внутри круга проекций (рис. 32).

Обозначение элементов симметрии

Название	Обозначение		Изображение по отношению к плоскости	
	символ	симметрия	перпендикулярное	параллельное
Плоскость симметрии	M	P	$\parallel \not\parallel =$	
Центр симметрии	-1	C	$\subset \bullet \circ$	
Поворотная ось симметрии:	n	L_n		
двойная	2	L_2		
тройная	3	L_3		
четверная	4	L_4		
шестерная	6	L_6		
Инверсионная ось симметрии:	\bar{n}	$L_{\bar{n}} = L_{in}$		
тройная	$\bar{3}$	$L_{\bar{3}} = L_{i3}$		
четверная	$\bar{4}$	$L_{\bar{4}} = L_{i4}$		
шестерная	$\bar{6}$	$L_{\bar{6}} = L_{i6}$		

Горизонтальные оси, совпадая с плоскостью чертежа, дают два выхода на круге проекций (рис. 32). Косые оси проектируются внутри круга. Выходы осей симметрии на проекции отмечаются значками, отображающими их наименование (табл. 2).

При проектировании плоскостей симметрии куба соблюдают определенные условия.

Во-первых, учитывают, что вертикальная плоскость симметрии проектируется в виде прямой (двойной) линии, являющейся одним из диаметров круга проекций, что горизонтальная плоскость совпадает с плоскостью чертежа, представляется кругом проекций; проекция наклонной плоскости является дугой (рис. 33).

На чертеже плоскости симметрии отмечаются двойными линиями. Если в кристалле присутствует центр инверсии, вблизи центра проекций ставится буква *C*.

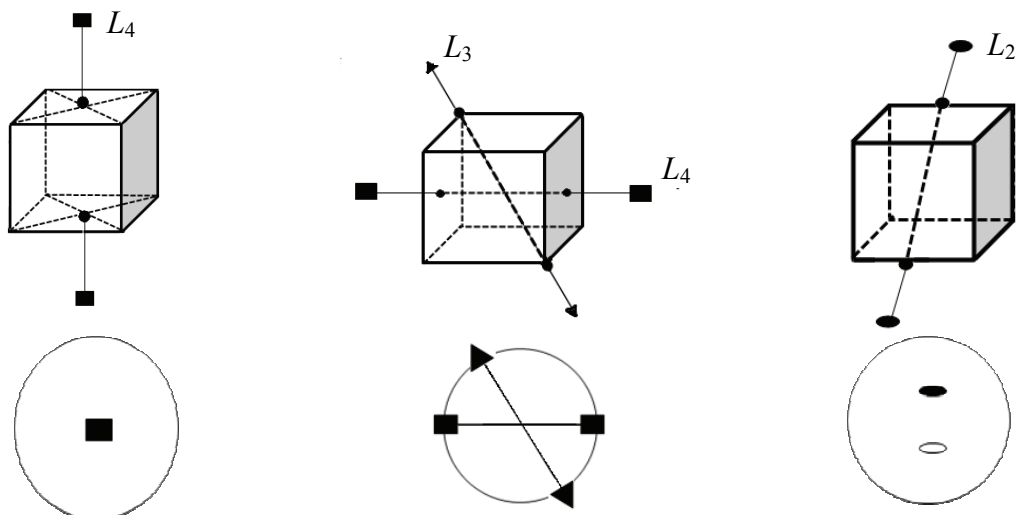


Рис.32. Стереографические проекции некоторых осей симметрии куба

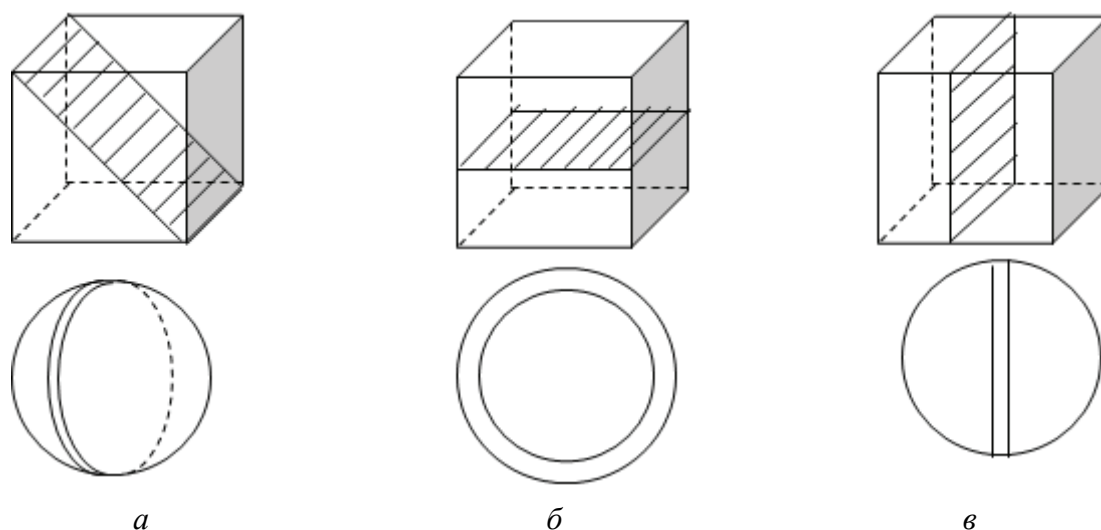


Рис. 33. Некоторые плоскости симметрии куба и их стереографические проекции: *a* – плоскость симметрии расположена под углом к плоскости проекции; *б* – горизонтальная плоскость симметрии; *в* – вертикальная плоскость симметрии

В кристаллах кубической сингонии, помимо $4L_3$, всегда имеются либо $3L_4$, либо $2L_2$. Эти оси взаимно перпендикулярны.

В кристаллах средних сингоний главная ось симметрии (L_3 , L_4 , L_6) ставится всегда вертикально и тем самым изображается в центре проекций.

Ромбические кристаллы ориентируются по трем взаимно перпендикулярным единичным направлениям.

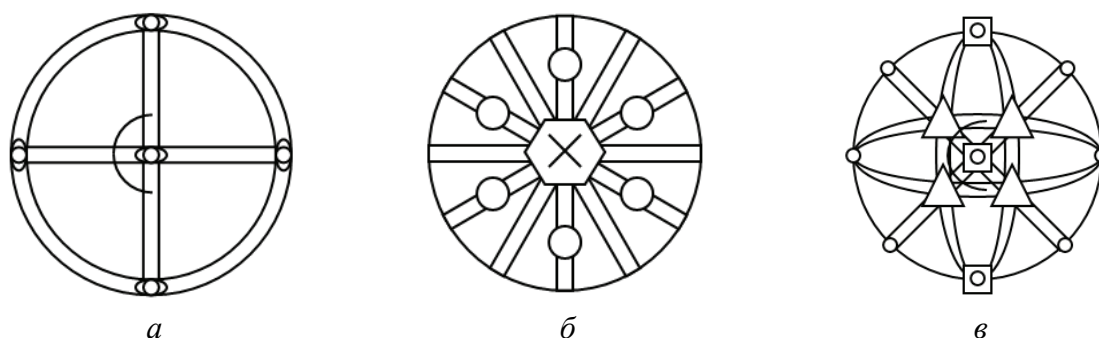


Рис. 34. Стереграфические проекции элементов симметрии и граней: *а* – многогранника; имеющего форму прямоугольного параллелепипеда; *б* – многогранника правильной шестиугольной пирамиды; *в* – куба

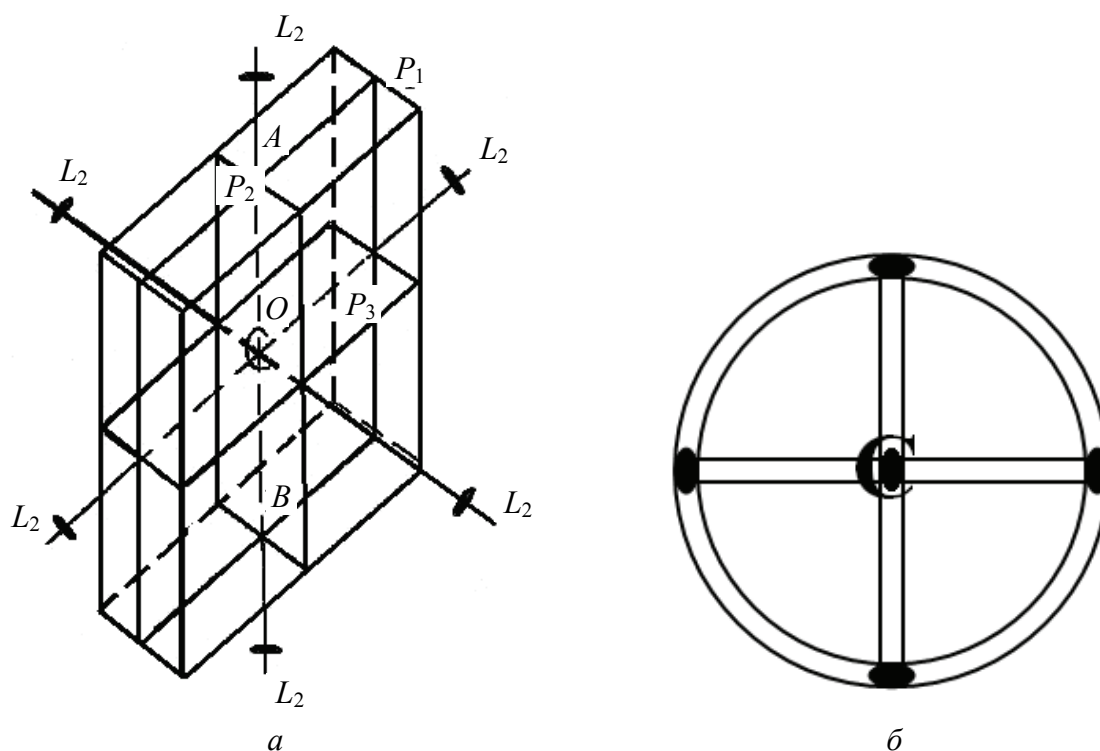


Рис. 35. Элементы симметрии прямоугольного параллелепипеда (*а*) и их стереографическая проекция (*б*)

В качестве примеров на рис. 34 и 35 представлены проекции элементов симметрии и граней моделей в виде кирпичика или спичечной коробки, шестигранной пирамиды с правильным шестиугольным основанием и куба.

4. Класс симметрии, сингонии и категории кристаллов

Классом симметрии называется полная совокупность элементов симметрии кристаллического многогранника.

Известный русский кристаллограф А. В. Гадолин первым теоретически доказал, что существует всего 32 класса симметрии кристаллов.

Отдельные классы симметрии объединяются в сингонии (системы).

Сингония – это группа классов симметрии, обладающая одним или несколькими сходными элементами симметрии (с обязательным учётом осей симметрии высшего, т. е. выше второго, порядка) при одинаковом числе единичных направлений (единичное – единственное, не повторяющееся направление).

Различают семь сингоний: триклинную, моноклинную, ромбическую, тригональную, гексагональную и кубическую. В свою очередь, сингонии делятся на три категории: низшую, среднюю и высшую. Данные о категориях, сингониях и классах симметрии кристаллов приведены в табл. 3.

Таблица 3

Классификация видов симметрии кристаллов

Категория	Сингония	Виды симметрии
Низшая	Триклинная (агирная)	$L_1 = -; L_{i1} = C$
	Моноклинная (моногирная)	$L_2; L_{i2} = P; L_2PC$
	Ромбическая (тригирная)	$3L_2; L_22L_{i2} = L_22P; 3L_23PC$
Средняя	Тригональная (ромбоэдрическая)	$L_3; L_3C(L_{i3}); L_33P; L_33L_2; L_33L_23PC$
	Тетрагональная (квадратная)	$L_4; L_4PC; L_44P; L_44L_2; L_44L_25PC; L_{i4}; L_{i4}2L_22P$
	Гексагональная	$L_6; L_6PC; L_66P; L_66L_2; L_66L_27PC; L_{i6}; L_{i6}3L_23P$
Высшая	Кубическая (полигирная)	$4L_33L_2; 4L_33L_23PC; 4L_33L_26P; 3L_44L_36L_2; 3L_44L_36L_29PC$

В низшую категорию объединяются триклинная, моноклинная ромбическая сингонии, характеризующиеся наличием нескольких единичных направлений и отсутствием осей симметрии высшего по-

рядка. Это кристаллы наименее симметричные с ярко выраженной анизотропией свойств.

В триклинную сингонию входят два вида симметрии, для которых характерно отсутствие осей выше первого порядка.

В моноклинную сингонию входят виды симметрии, имеющие не более одной оси второго порядка.

В ромбическую сингонию входят три вида симметрии, каждый из которых характеризуется присутствием трёх осей второго порядка.

К средней категории относятся тригональная, тетрагональная и гексагональная сингонии, имеющие одно единичное направление, совпадающее с осью высшего порядка. Характерные формы кристаллов, относящихся к средней категории, – это призмы, пирамиды и др.

В тригональную сингонию входят пять видов симметрии, главной осью которых является ось симметрии третьего порядка.

В тетрагональную сингонию входят семь видов симметрии, главной осью которых является ось симметрии четвёртого порядка.

В гексагональную сингонию входят семь видов симметрии, главной осью которых является ось симметрии шестого порядка.

Высшую категорию составляет кубическая сингония, не имеющая единичных направлений и характеризующаяся присутствием нескольких осей симметрии высшего порядка. Примерами кристаллов, относящихся к высшей категории, являются куб, октаэдр, тетраэдр.

Принадлежность кристаллического многогранника к тому или иному классу симметрии устанавливается путем нахождения всех его элементов симметрии. При определении полной совокупности элементов симметрии многогранника полезно учитывать следующие положения:

а) L_6 и L_{i6} могут присутствовать в кристаллах в единственном числе;

б) L_4 и L_{i4} могут встретиться или в единственном числе или в количестве трёх;

в) L_3 могут встретиться или в единственном числе или в количестве четырёх;

г) L_2 могут встретиться или в единственном числе или в количестве 2, 3, 4-х или 6-ти;

д) P могут встретиться или в единственном числе или в количестве 2, 3, 4-х, 5, 6-ти, 7-ми, 9-ти.

На практике приходится предварительно определять сингонию многогранника без нахождения всех его элементов симметрии. В таком случае необходимо пользоваться приведенными выше характеристиками сингоний.

5. Обозначение классов симметрии

Поскольку каждый класс симметрии характеризуется определенным комплексом элементов симметрии, то он может быть выражен соответствующей кристаллографической формулой. Формула симметрии состоит из записанных подряд всех элементов симметрии данного кристалла. На первом месте пишут оси симметрии от высших к низшим порядкам, на втором – плоскости симметрии, затем – центр инверсии. Например, полная формула элементов симметрии куба $3L_4 4L_3 6L_2 9PC$. Чтобы полностью ее расшифровать, установив их взаимное расположение, необходимо знать теоремы о сочетании элементов симметрии (теоремы сложения).

Международные (интернациональные) символы классов симметрии гораздо компактнее, поэтому по написанию символов можно установить взаимное расположение элементов симметрии, зная теоремы о сочетании элементов симметрии и правила установки каждой системы. В международном символе данного класса пишут не все, а только основные, так называемые «порождающие» элементы симметрии, а «порожденные» элементы симметрии, которые можно вывести из сочетаний порождающих элементов, не пишут. В качестве порождающих элементов симметрии предпочтение отдается плоскостям.

В международной символике приняты следующие обозначения:

n – ось симметрии n -го порядка;

\bar{n} – инверсионная ось симметрии n -го порядка;

m – плоскость симметрии;

nm – ось симметрии n -го порядка и n плоскостей симметрии, проходящих вдоль нее;

$\frac{n}{m}$ – ось симметрии n -го порядка и перпендикулярная ей плоскость симметрии;

n_2 – ось симметрии n -го порядка и n осей 2-го порядка ей перпендикулярных;

$\frac{n}{m} \cdot m$ – ось симметрии n -го порядка и плоскости m , параллельные и перпендикулярные ей.

В международной символике различают координатные элементы симметрии, которые проходят вдоль координатных плоскостей, и диагональные, проходящие по биссектрисам углов между ними.

Для низшей категории в символике остаются элементы симметрии данной точечной фигуры. Производные равнодействующие элементы симметрии при этом опускаются.

Пример. Дан класс симметрии $2/m$. Есть L_2 и перпендикулярная ей плоскость симметрии. Зная теорему 2, можно записать L_2PC .

Формула симметрии прямоугольного параллелепипеда $3L_23PC$. Международный символ будет $2/mmm$ (полный) или просто mmm (краткий). В полном символе наклонная черта за L_2 и последующий символ m обозначают вертикальную ось L_2 и перпендикулярную плоскость симметрии m . Два остальных символа « mm » обозначают две взаимноперпендикулярные вертикальные плоскости симметрии. Итак, $3L_23PC \equiv mmm$. Данная фигура относится к низшей категории, ромбической сингонии.

В символах всех классов средней категории на первой позиции стоит главная ось симметрии, на второй – координатные элементы симметрии, на третьей – диагональные.

6. Формы кристаллов

По формуле симметрии кристаллического многогранника нельзя представить его форму. Так, например, куб и октаэдр обладают абсолютно одинаковой симметрией, но формы их совершенно не похожи друг на друга.

В основе учения о формах кристаллических многогранников лежит понятие простой гранной формы.

Простой идеальной формой кристалла называется многогранник, все грани которого можно получить из одной грани с помощью преобразований симметрии, свойственных точечной группе симметрии данного кристалла. Для всех граней простой формы идеального кристалла скорости роста одинаковы, все грани кристаллографически равны.

Простую форму определяют так же, как и совокупность симметрично эквивалентных плоскостей, получаемых из одной плоскости, если размножить ее с помощью операций, свойственных данному классу симметрии.

Всего существует 47 простых форм. Для кристаллов низшей и средней категории возможны 22 простые формы (некоторые из них приведены на рис. 37). Моноэдр, диэдр, пинакоид, призмы, дипризмы, пирамиды являются незамкнутыми, открытыми формами, а тетраэдр, дипирамиды, скаленоэдр и ромбоэдр – закрытыми. Открытые формы могут существовать в кристалле лишь в комбинации с другими простыми формами.

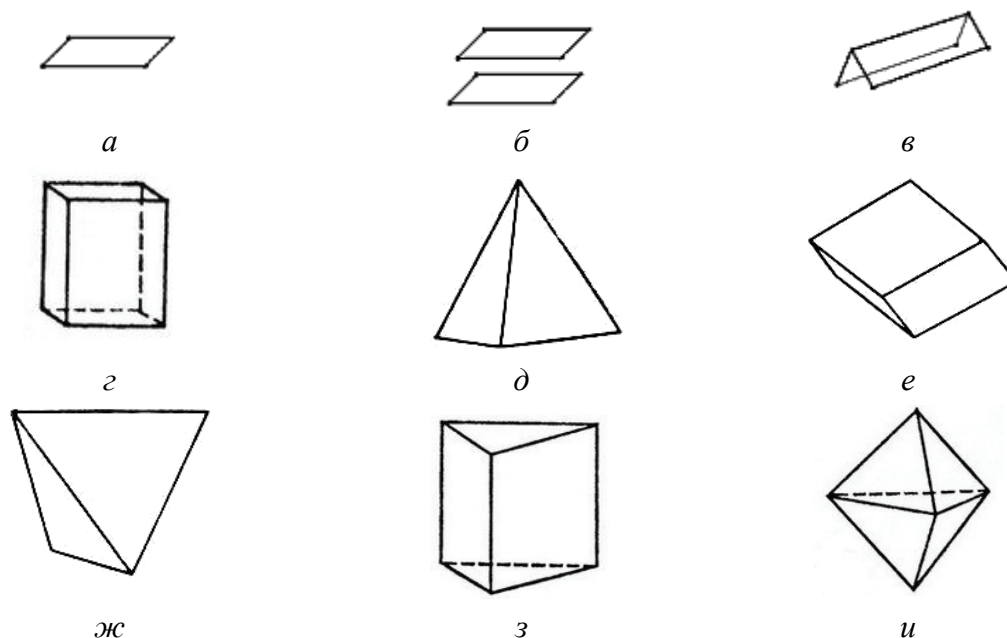


Рис. 37. Кристаллические формы: *а* – моноэдр; *б* – пинакоид; *в* – диэдр; *г* – тетрагональная призма; *д* – пирамида; *е* – ромбоэдр; *ж* – тетраэдр; *з* – трёхгранная призма; *и* – трёхгранная бипирамида

В высшей категории все простые формы закрытые. Основные из них – куб, октаэдр, тетраэдр. Остальные простые формы кубической сингонии можно получить из этих, удваивая, утраивая, учетверяя и ушестеряя число их граней.

При росте кристалла чаще образуются не простые формы, а их сочетания и преимущественно развитыми на кристалле оказываются грани тех простых форм, у которых скорости роста наименьшие (этим граням соответствуют самые простые символы).

7. Решетки Бравэ

Исходя из идеи о периодическом расположении центров тяжести сферических материальных частиц в кристаллическом веществе, Огюст Бравэ в 1848 г. показал, что все многообразие кристаллических структур можно описать с помощью 14 типов решеток (решеток Бравэ), отличающихся по форме элементарных ячеек и по симметрии.

На таблицах (табл. 4) изображают обычно только элементарные ячейки Бравэ, пространственная решетка получится при многократном повторении элементарной ячейки в трех измерениях. Ячейки Бравэ также называют трансляционными ячейками, или трансляционными группами.

Каждую ячейку Бравэ следует понимать как один из (14 возможных) законов расположения атомов в кристаллической решетке.

Для выбора ячейки Бравэ используют следующие условия:

1. Симметрия выбранной элементарной ячейки должна соответствовать симметрии решетки, вместе с тем ребра элементарного параллелепипеда должны быть трансляциями.

2. Число равных ребер и равных углов между ребрами элементарной ячейки должно быть наибольшим.

3. При наличии прямых углов между ребрами элементарной ячейки их число должно быть максимальным.

4. При соблюдении этих трех условий объем элементарной ячейки должен быть минимальным.

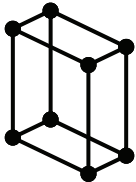
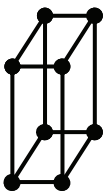
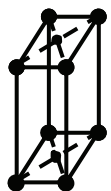
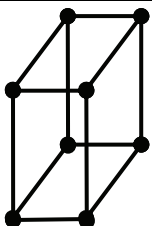
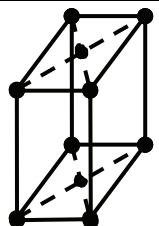
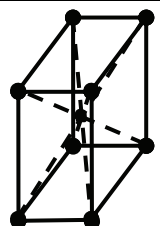
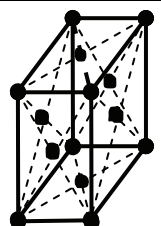
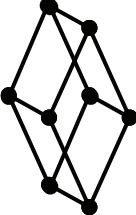
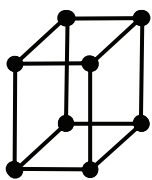
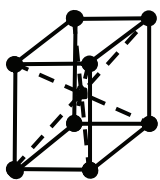
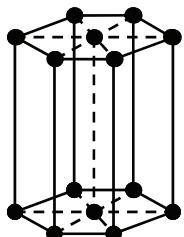
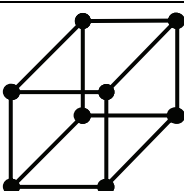
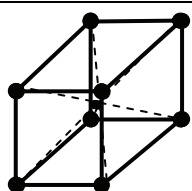
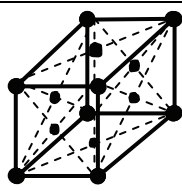
14 ячеек Бравэ (табл. 4) делятся на 4 типа:

1. Примитивные (P) – узлы имеются только по вершинам ячейки. Если выбрать один из узлов за начало координат, то все остальные можно получить, повторяя этот атом в пространстве периодически с помощью трех трансляций a , b , c .

2. Объемноцентрированные (J) – кроме узлов в вершинах ячейки, которые получают с помощью трансляций a , b , c , имеют узел в центре ячейки, который связан с началом координат трансляцией $(a + b + c) : 2$.

3. Гранецентрирование (F) – кроме узлов в вершинах ячейки, т. е. трансляций a , b , c , имеют узлы в центрах каждой грани, их характеризуют трансляции $(a + b) : 2$; $(b + c) : 2$; $(a + c) : 2$.

Тип ячейки Бравэ

Сингония	Тип решетки			
	Примитивная	Базоцентри- рованная	Объемно- центрирован- ная	Гранецен- три- рованная
Триклинная				
Моноклинная				
Ромбическая				
Тригональная (ромбоэдрическая)				
Тетрагональная				
Гексагональная				
Кубическая				

4. Базоцентрированные (A, B, C) – узлы располагаются в центрах двух противоположных граней. У решетки A центрирована грань, перпендикулярная оси x (набор трансляций $a, b, c, (b + c) : 2$); у решетки B центрирована грань, перпендикулярная оси y , ей соответствует набор трансляций $a, b, c, (a + c) : 2$; у решетки C центрирована грань, перпендикулярная оси z , набор трансляций $a, b, c, (a + b) : 2$. Эту решетку используют чаще.

Базисом кристаллической решетки называется совокупность значений координат всех атомов, входящих в элементарную ячейку.

Координаты выражаются в долях элементарных трансляций (параметров решетки), а начало координат выбирается в вершинах элементарных ячеек.

8. Элементы симметрии кристаллических структур

Основное свойство кристаллической структуры и характеризующей ее пространственной решетки – бесконечная периодичность: любые два узла решетки можно совместить друг с другом при помощи трансляции.

В структурах, как и в многогранниках, возможны плоскости симметрии – простые и инверсионные оси 1, 2, 3, 4 и 6-го порядков. Но, кроме того, имеются элементы симметрии, возможные только в кристаллических структурах, которые мы рассматриваем как бесконечно повторяющиеся ряды, сетки, решетки из частиц, связанных между собой симметричными преобразованиями. Самым характерным элементом симметрии бесконечных фигур является трансляция, т.е. бесконечно повторяющийся перенос на некоторое определенное расстояние, называемое периодом трансляции.

Сочетание трансляции с плоскостями и осями симметрии дает еще два новых элемента симметрии – плоскости скользящего отражения и винтовые оси симметрии.

Плоскостью скользящего отражения называется совокупность совместно действующих плоскости симметрии и параллельной ей трансляции. При этом перенос производится на величину, равную половине периода трансляции.

Рассмотрим действие плоскости скользящего отражения на примере узора шахматной доски (рис. 38, a), считая узор бесконечно

протяженным в плоскости чертежа. Чтобы совместить белый квадрат 1 с аналогичным ему белым квадратом 2, нужно перенести квадрат 1 на место расположенного над ним квадрата и лишь затем отразить в плоскости b , перпендикулярной плоскости чертежа (или, наоборот, сначала отразить в плоскости b и затем перенести на $b/2$). При таком совместном переносе на $b/2$ и отражении в плоскости b не только квадрат 1 совместится с квадратом 2, но и квадрат 2 займет место квадрата 3 и вообще весь бесконечно протяженный шахматный узор совместится сам с собой. Аналогичные плоскости скользящего отражения с компонентами скольжения $a/2$ проходят и вдоль линии a . Вдоль линии t проходят обычные зеркальные плоскости симметрии: шахматный узор совмещается сам с собой целиком при отражении в плоскостях без дополнительной трансляции. Число плоскостей a , b , t бесконечно (если считать шахматный узор бесконечным).

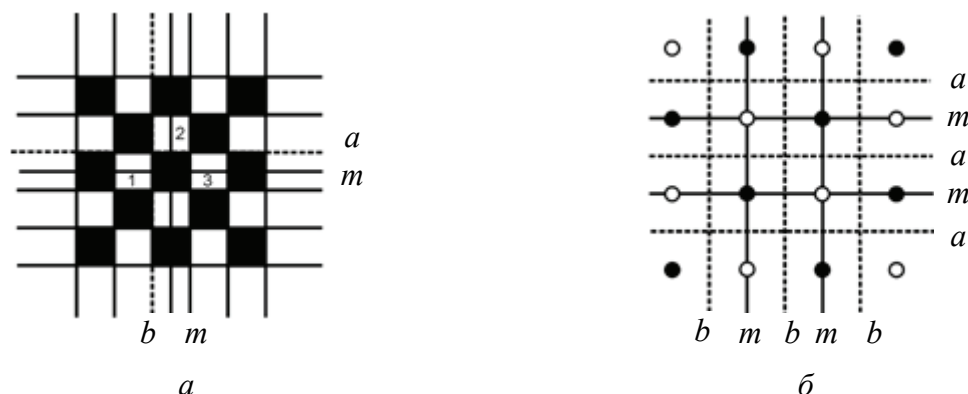


Рис. 38. Плоскости симметрии t и плоскости скользящего отражения a , b :
 a – в узоре шахматной доски; \bar{b} – в плоской сетке структуры NaCl

Плоскости скользящего отражения можно найти в плоскостной сетке структуры NaCl (рис. 38, б); ион Na (черный кружок) совместится с другим ионом Na, если его отразить в плоскости скользящего отражения b и перенести вдоль плоскости на $b/2$ или если его отразить в плоскости a и перенести вдоль нее на $a/2$. При таком преобразовании симметрично совместятся друг с другом и все остальные ионы Na, а также все ионы Cl (светлые кружки).

На рис. 38, б показана лишь одна плоская сетка структуры NaCl. Рассматривая эту структуру в пространстве надо представлять себе бесконечную последовательность таких же сеток, параллельных этой, над плоскостью чертежа и за ней. Тогда обнаруживается еще одна плоскость скользящего отражения – плоскость типа c , которая пер-

пендикулярна плоскости чертежа, и перенос в ней происходит на $1/2$ периода трансляции вдоль оси Z , нормальной к плоскости XU .

Плоскости скользящего отражения условно изображают пунктирными или штрихпунктирными линиями и обозначают символами a, b, c , когда скольжение направлено соответственно вдоль осей X, Y, Z и величина его составляет $a/2, b/2, c/2$ соответственно вдоль осей X, Y, Z .

Примеры преобразований с помощью плоскостей скользящего отражения показаны на рис. 39. При отражении в плоскости скользящего отражения a , перпендикулярной плоскости чертежа, фигурка в виде запятой перемещается в плоскости чертежа на половину длины трансляции a в направлении $[100]$. Так же происходит преобразование в плоскости b лишь только с той разницей, что перемещение происходит на $1/2$ длины трансляции b в направлении $[010]$.

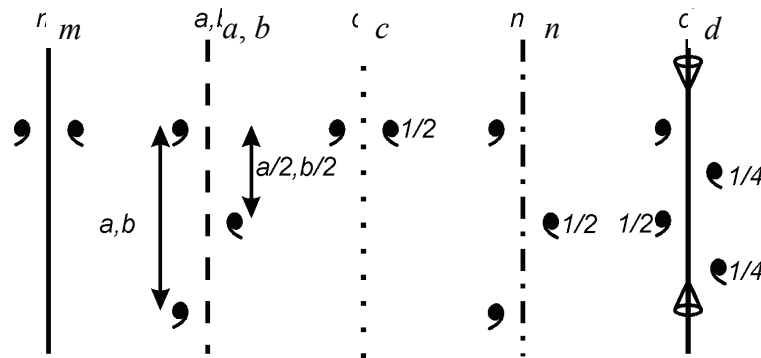


Рис. 39. Действие плоскостей симметрии m и плоскостей скользящего отражения a, b, c, n, d

При отражении в плоскости с фигурка перемещается на половину длины трансляции c вдоль $[001]$. Чтобы показать, что фигурка расположена на высоте $c/2$ над плоскостью чертежа, около нее пишут $1/2$. При следующем отражении фигурка сместится еще на $c/2$ вдоль оси Z . Это указывать уже не нужно, т. к. при изображении плоской сетки подразумевается, что аналогичные точки повторяются в параллельных плоскостях, отстоящих друг от друга на период трансляции.

Еще один тип плоскости скользящего отражения – это плоскость типа n , или клиноплоскость, которую можно обнаружить, например, в объемно-центрированной кубической решетке ОЦК (рис. 40, а). Проекция ОЦК на грань куба показана на рис. 40, б: если атомы по вершинам ячейки находятся в плоскости чертежа, то атом в центре нахо-

дится над плоскостью чертежа на расстоянии $c/2$, т. е. на $1/2$ трансляции вдоль оси Z . Это обозначено на чертеже значком $1/2$. Атом в вершине ячейки можно совместить с атомом в центре, если осуществить одновременно отражение в плоскости n , нормальной к плоскости чертежа, и скольжение в этой плоскости на $(a + c)/2$ или $(b + c)/2$.

Плоскость n – это плоскость скользящего отражения, у которой компонента скольжения направлена по диагонали параллелограмма, построенного на элементарных трансляциях, лежащих в этой плоскости, и равна $1/n$ длины этой диагонали. Например, для плоскости n -типа на рис. 40 величина трансляции равна $(a + c)/2$.



Рис. 40. Объемноцентрированная кубическая ячейка (а) и ее проекция на плоскость (001) (б)

Плоскости скользящего отражения типа d , или так называемые алмазные, характерны только для гранецентрированных решеток. Их можно увидеть, например, в структуре алмаза. Компоненты скольжения плоскостей d направлены вдоль плоскостей диагонали элементарного параллелограмма, расположенного в плоскости отражения, а величина переноса составляет $1/4$ длины диагонали: $(a + b)/4$, $(a + c)/4$, $(b + c)/4$.

Элементарная ячейка структуры алмаза (рис. 41, а) – это гранецентрированная кубическая ячейка, внутри которой есть еще четыре атома – два на высоте $1/4$ и два на высоте $3/4$, причем высота здесь измеряется в долях параметра ячейки по оси c . Атомы размещаются в центрах октантов, на которые мысленно можно разбить куб, проведя плоскости через середины граней параллельно координатным плоскостям. На рис. 41, б видно, что атом, находящийся в вершине куба, можно совместить с атомом в центре октанта, если отразить его в плоскости d и сместить на $(b + c)/4$.

Винтовая ось симметрии – линия, при вращении вокруг которой на определенный угол и последующей (или предшествующей повороту) трансляции вдоль этой линии на определенное расстояние, фигура со-

вмещается с себе равной при повороте на 360° со своим исходным положением в пространстве (совмещается сама с собой).

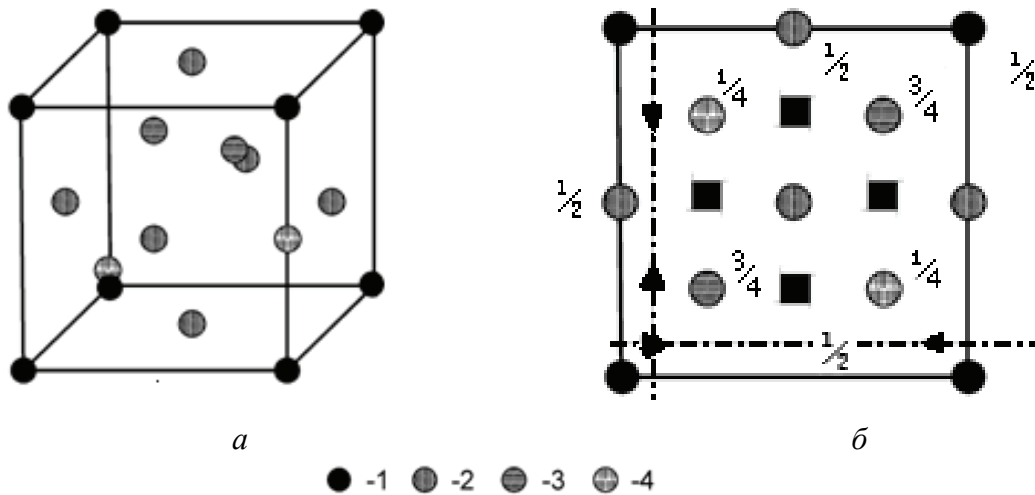


Рис. 41. Элементарная ячейка структуры алмаза (а) и ее проекция на плоскость (001) (б)

Наименьший угол, при повороте на который и последующей (или предшествующей повороту) трансляции фигура совмещается сама с собой, называется элементарным углом поворота α (элементарный угол может быть равен 360 , 180 , 120 , 90 и 60°).

Величина трансляции, соответствующая элементарному углу поворота, называется ходом, шагом, компонентой скольжения или элементарной трансляцией винтовой оси.

Число самосовмещений фигуры при повороте ее вокруг винтовой оси на 360° называется порядком винтовой оси (n). Винтовые оси, как поворотные и инверсионные оси симметрии, могут быть первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков.

Различают правые и левые винтовые оси. Винтовая ось называется правой, если поворот (по направлению трансляции) происходит по движению часовой стрелки, и левой, если – против часовой стрелки.

Винтовая ось обозначается двумя цифрами (например 6_1). Первая большая цифра (6) указывает порядок оси. Частное от деления маленькой цифры (1) на большую (6) впереди стоящую ($1/6$) дает величину переноса (трансляции) вдоль оси по отношению к элементарной трансляции структуры в направлении, параллельном данной оси.

На рис. 42 изображены тройные оси: простая поворотная (L_3) и две винтовые – 3_1 и левая 3_2 .

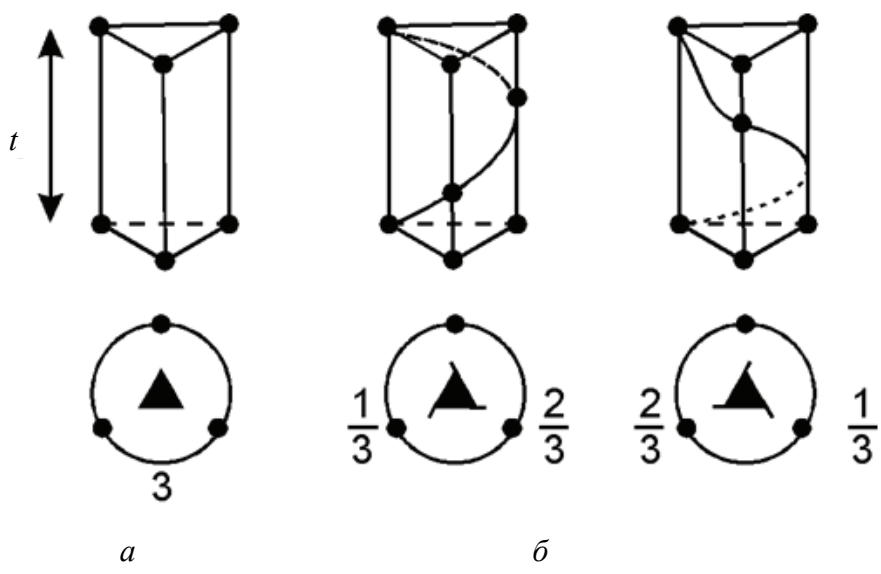


Рис. 42. Действие поворотной оси симметрии 3 (а) и винтовых осей симметрии 3_1 (б, правая), 3_2 (в, левая)



Рис. 43. Условные обозначения элементов симметрии структуры кристаллов

Действие правой тройной винтовой оси состоит в повороте точек на 120° по часовой стрелке с последующим поступанием вдоль оси на одну треть элементарной трансляции. В случае левой винтовой оси поворот на 120° производится против часовой стрелки. Обозначение 3_2 выясняется с помощью рис. 42, б и в.

Условные обозначения в международной системе винтовых осей и плоскостей скользящего отражения представлены на рис. 43.

Комбинируя элементы симметрии конечных фигур, можно вывести 32 вида симметрии кристаллов. Комбинируя же элементы симметрии бесконечных фигур, можно вывести 230 пространственных групп симметрии.

9. Координационное число. Координационный многогранник

Координационным числом (к.ч.) данного атома (иона) называется число ближайших равноудалённых соседних атомов (ионов). Если центры этих ближайших атомов или ионов мысленно соединить друг с другом прямыми линиями, то в общем случае получается координационный многогранник (рис. 44).

Ионы могут быть отрицательно заряженными (анион) и положительно заряженными (катион).

При изучении структуры кристалла обращают внимание на расстояние между структурными единицами (ионами, атомами). В связи с этим важно установить те минимально допустимые расстояния, на которые могут приблизиться друг к другу две такие структурные единицы. С этой целью мысленно каждому атому или иону присваивают некоторую сферу действия, внутрь которой никакие другие атомы или ионы проникать не могут. Такая сфера действия называется атомной или ионной, а ее радиус – атомным или ионным эффективным радиусом (не смешивать эффективный радиус с расстоянием наружной электронной оболочки атома (или иона) от ядра).

Теоретически рассчитаны для каждого координационного многогранника те отношения радиуса центрального атома (иона) к радиусу окружающих атомов (ионов), в пределах которых структура должна еще обладать устойчивостью (если структура не устойчива, то происходит ее перестройка до более устойчивой с иным координационным числом).

Ниже приводятся пределы отношений r_a/r_x (r_a – радиус катиона, r_x – радиус аниона), при которых будут устойчивы структуры с известным координационным числом (табл. 5). Примерно $\frac{3}{4}$ металлов кристаллизуются в трех почти одинаково часто встречающихся решетках: ГПУ, ГЦК, ОЦК (гексагональная плотноупакованная, гранцентрированная кубическая, объемцентрированная кубическая). Остальные обладают решетками примерно 12 различных типов.

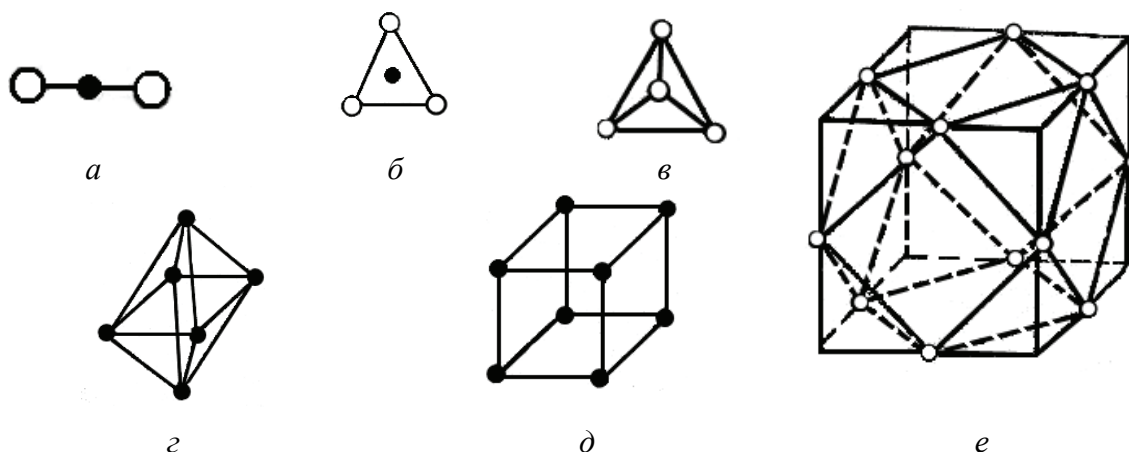


Рис. 44. Координационные многогранники: *a* – гантель, к.ч. = 2; *b* – треугольник, к.ч. = 3; *c* – тетраэдр, к.ч. = 4; *d* – куб, к.ч. = 8; *e* – кубооктаэдр, к.ч. = 12

Для металлов характерно к.ч., равное 12 (ГПУ и ГЦК решетки) и к.ч., равное 8 (ОЦК решетка).

Таблица 5

Координационное число для некоторых структур

Координационное число	Координационные многогранники	Примеры структур	r_a/r_x	
			От	До
2	Гантель		0	0,115
3	Треугольник		0,115	0,225
4	Тетраэдр	ZnS, алмаз	0,225	0,414
6	Октаэдр	NaCl	0,414	0,732
8	Куб (гексаэдр)	W, Mo, Nb, Ta	0,732	1,000
12	Кубооктаэдр	Медь и многие металлы	1,00	

Вопросы, связанные с координацией атомов, приобретают исключительное значение благодаря влиянию их на решение проблемы теоретического определения атомных расположений в кристаллических структурах, проблемы устойчивости соединений, проблемы химической связи.

Нередко координационные многогранники принимают за основную характеристику при классификации химических соединений.

Контрольные вопросы и задания

1. Что такое центр инверсии?
2. Дайте определение оси симметрии.
3. Дайте определение плоскости симметрии.
4. Что такое инверсионная ось симметрии?
5. Дайте определение понятия элементарного угла поворота.
6. Дайте понятие порядка оси симметрии.
7. Каких порядков бывают оси симметрии и каким углам поворота они соответствуют?
8. Почему не существует осей симметрии 5-го порядка и выше шестого?
9. Укажите возможное число существующих осей симметрии в конечной фигуре.
10. Какую фигуру называют конечной?
11. Каким элементам симметрии равносильны инверсионные оси порядков 1, 2, 3, 4, 6?
12. Зарисуйте, как обозначают элементы симметрии конечных фигур на плоскости стереографической проекции.
13. Объясните, что такое теоремы сложения и для чего их применяют.
14. Укажите, какое направление называют единичными.
15. Дайте определение симметрично-равного направления.
16. Объясните что такое категория кристаллов.
17. Объясните, что такое сингония.
18. Укажите, какие различают сингонии.
19. Укажите, на какие категории делятся кристаллы.
20. Что такое кристаллографическая формула?

21. Как записывают кристаллографическую формулу по элементам симметрии?
22. Объясните, что такое класс симметрии кристаллов.
23. Укажите, что такое простая форма кристаллов.
24. Дайте определение кристаллической решетки.
25. Дайте определение ячейки (решетки) Бравэ.
26. Какими параметрами характеризуется решетка Бравэ?
27. Объясните, что такое сингония.
28. Запишите правила выбора ячейки Бравэ.
29. На какие типы подразделяются ячейки Бравэ?
30. Дайте определение базиса кристаллической ячейки и правила его записи.
31. Зарисуйте базоцентрированную ячейку Бравэ и укажите ее базис.
32. Зарисуйте ячейку ГЦК и запишите ее базис.
33. Зарисуйте ячейку ОЦК и запишите ее базис.
34. Укажите отличия в элементах симметрии конечных фигур и бесконечных.
35. Дайте определение бесконечной фигуры.
36. Чем отличаются плоскости скользящего отражения от зеркальной плоскости симметрии?
37. Чем отличаются плоскости типов a , b , c ?
38. Объясните, чем отличаются плоскости типов n и d .
39. Запишите, для каких типов решетки характерны плоскости скользящего отражения типов n и d .
40. Объясните чем отличается винтовая ось симметрии от поворотной.
41. Объясните чем отличается инверсионная ось симметрии от поворотной.
42. Укажите отличия правой и левой винтовых осей симметрии.
43. Запишите обозначения винтовых осей симметрии.
44. Дайте определение хода (шага, элементарной трансляции) винтовой оси симметрии.
45. Запишите обозначения винтовых осей, плоскостей симметрии в Международной системе.
46. Дайте понятие пространственной группы симметрии.
47. Дайте определение координационного числа, координационного многогранника.
48. Зарисуйте простые координационные многогранники.

Задания для самостоятельной работы

1. Зарисуйте стереографическую проекцию плоскостей симметрии прямоугольного параллелепипеда.
2. Зарисуйте стереографическую проекцию осей симметрии прямоугольного параллелепипеда.
3. Запишите символы структурно-эквивалентных осей симметрии 4-го порядка в кубе.
4. Запишите символы структурно-эквивалентных осей симметрии 3-го порядка в кубе.
5. Запишите символы структурно-эквивалентных осей симметрии 2-го порядка в гексагональной призме.
6. Зарисуйте фигуру, имеющую три оси 2-го порядка, являющихся единичными направлениями.
7. Зарисуйте фигуру, имеющую одно единичное направление и обозначьте его.
8. Запишите формулу по элементам симметрии модели спичечного коробка. Зарисуйте фигуру и укажите на ней элементы симметрии.
9. Запишите формулу по элементам симметрии модели куба. Зарисуйте фигуру и укажите на ней элементы симметрии.
10. Запишите формулу по элементам симметрии модели тетраэдра. Зарисуйте фигуру и укажите на ней элементы симметрии.
11. Запишите формулу по элементам симметрии модели гексагональной призмы. Зарисуйте фигуру и укажите на ней элементы симметрии.
12. Запишите формулу по элементам симметрии модели гексагональной пирамиды. Зарисуйте фигуру и укажите на ней элементы симметрии.
13. Запишите формулу по элементам симметрии модели гексагональной бипирамиды. Зарисуйте фигуру и укажите на ней элементы симметрии.
14. Запишите формулу по элементам симметрии модели тетрагональной пирамиды. Зарисуйте фигуру и укажите на ней элементы симметрии.
15. Запишите формулу по элементам симметрии модели тетрагональной бипирамиды. Зарисуйте фигуру и укажите на ней элементы симметрии.
16. Приведите примеры простых форм кристаллов и их комбинаций, обладающих элементами симметрии: $3L_2$; L_33P ; $4L_33L_26P$;

L_22P ; L_33L_2 ; L_66P ; L_2PC ; $3L_44L_36L_2$; L_66L_2 ; L_44P ; L_6PC ; L_32P ; L_22PC ; $4L_33L_23PC$; L_66L_27PC ; C ; L_2 ; L_44L_2 ; $3L_23PC$; L_44L_25PC ; $4L_33PC$; L_6 ; $3L_44L_36L_29PC$.

17. Зарисуйте фигуру, содержащую ось симметрии 6-го порядка. Обозначьте ее.

18. Зарисуйте фигуру, имеющую ось симметрии 6_3 . Обозначьте ее.

19. Зарисуйте фигуры, имеющие ось 4_2 , 4_3 , 3 , 3_1 .

23. Зарисуйте фигуру, в которой возможны оси L_3 , L_{i6} , 3_1 . Обозначьте эти оси.

24. Запишите стехиометрическую формулу вещества, элементарной ячейкой которого является ГЦК, в вершинах которой находятся атомы A , а в центрах граней атомы B .

25. Зарисуйте элементарную ячейку NaCl и подсчитайте количество атомов, принадлежащих ей.

26. Запишите стехиометрическую формулу вещества, элементарной ячейкой которого является ОЦК, в вершинах расположены атомы A , в центре – атомы B .

27. Запишите стехиометрическую формулу соединения, если атомы Al находятся в вершинах кубической ячейки и в центрах всех её граней; атомы Fe – в серединах всех рёбер ячейки, в её центре, а также в центрах восьми октантов.

28. Запишите стехиометрическую формулу вещества, если атомы Re находятся в вершинах кубической ячейки, атомы O – в серединах всех её рёбер.

29. Запишите стехиометрическую формулу соединения, если атомы A находятся в вершинах гексагональной ячейки, атомы B – в центрах обеих тригональных призм, на которые делится гексагональный параллелепипед плоскостью, проходящей через малые объёмные диагонали ячейки.

ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ

Цель занятия: изучить виды точечных дефектов, искажение решётки вокруг точечных дефектов, возможности оценки количества точечных дефектов, перераспределение точечных дефектов и методы определения их концентрации.

1. Классификация дефектов кристаллической решётки

Искажения решётки, связанные с тепловыми колебаниями так же, как и упругие деформации, отличающие реальный кристалл от идеального, не относят к несовершенствам. Следует различать идеальный кристалл, являющийся застывшей схемой, в которой неподвижные атомы образуют правильную систему точек, и реальный несовершенный кристалл, содержащий точечные, линейные, поверхностные и объёмные дефекты или один из этих видов дефектов.

Дефекты (несовершенства) кристаллического строения подразделяют по геометрическим признакам следующим образом:

- а) на точечные (нульмерные);
- б) линейные (одномерные);
- в) поверхностные (двумерные);
- г) объёмные (трёхмерные).

Точечные дефекты малы во всех трёх измерениях. Их размеры по всем направлениям равны не больше нескольких атомных диаметров. К точечным дефектам относятся вакансии, межузельные атомы, примесные атомы и их комплексы.

Точечные дефекты могут быть собственными (структурными) и примесными. К элементарным собственным дефектам относят вакансии и межузельные атомы, к примесным – атомы примеси, растворенной по способу замещения или внедрения (рис. 45).

Вакансия образуется при удалении атома из его нормального положений в узле кристаллической решетки.

Межузельный атом – это собственный атом, втиснувшийся между атомами, которые расположены в узлах кристаллической решетки.

Вакансии и атомы замещения могут находиться в любых узлах решетки, причем атомы замещения занимают места атомов основного металла.

Межузельные атомы и примесные атомы внедрения, расположенные между атомами основного металла, размещаются не в любом междоузлии, а преимущественно в таких местах (пустотах), где для них имеется больше свободного пространства. Размеры и расположение этих пустот можно определить, если рассматривать атомы как жесткие сферы.

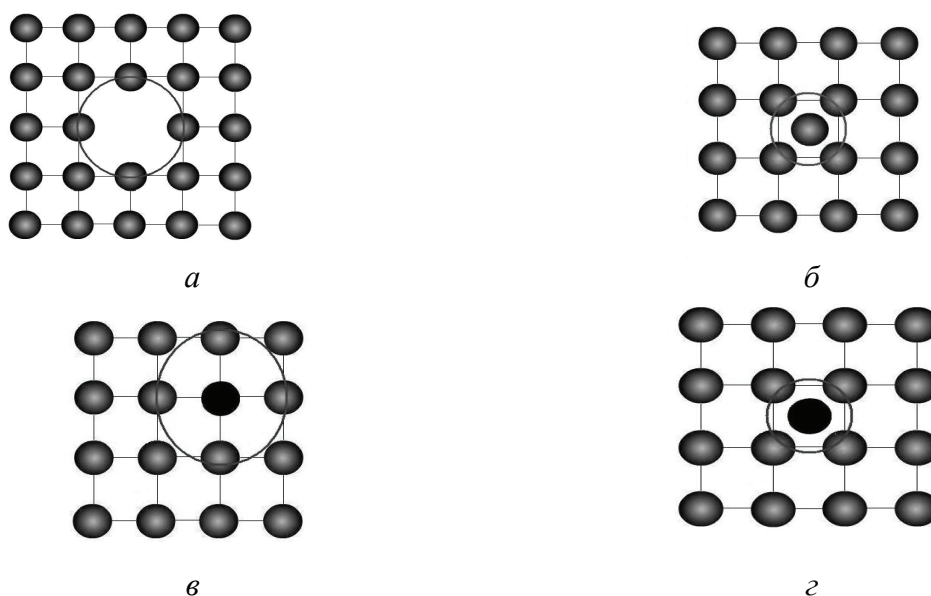


Рис. 45. Виды точечных дефектов: *a* – вакансия; *б* – атом в междоузлии; *в* – атом примеси замещения; *г* – атом примеси внедрения

Вакансии образуются: а) в результате флуктуаций энергии при хаотичном тепловом движении атомов; б) при пластической деформации; в) при ядерном облучении металлов, а также при других процессах (рис. 46).

Тепловые вакансии образуются по механизму Шоттки: атом поверхностного слоя, приобретая избыток энергии от соседей, испаряется из кристалла или, что еще легче, переходит в адсорбционный слой. В последнем случае не происходит полного разрыва всех межатомных связей. Через некоторое время на место ушедшего атома поверх-

ностного слоя переходит соседний атом из более глубокого слоя и т. д. Таким путем образуется вакансия, переходящая в глубь кристалла. Источниками тепловых вакансий являются свободные поверхности кристалла, пустоты и трещины внутри него, границы зерен и дислокации.

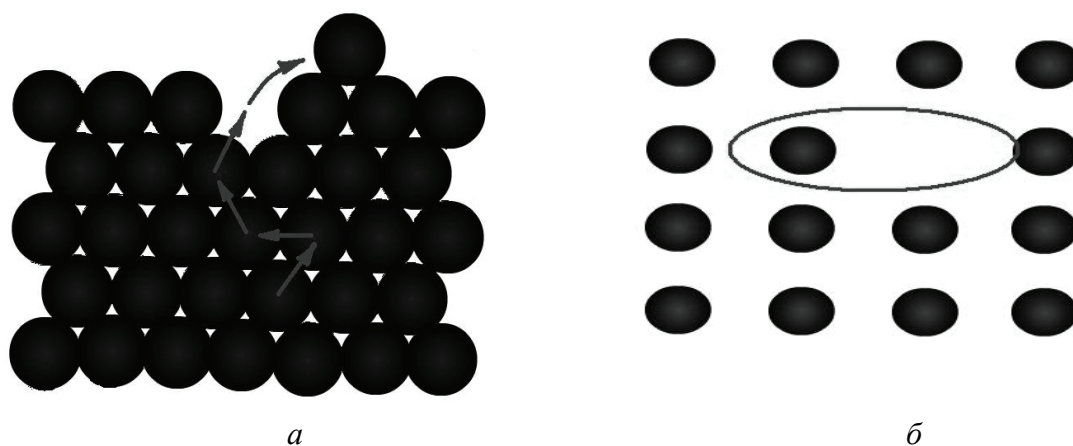


Рис. 46. Образование точечных дефектов: *a* – по механизму Шоттки; *б* – по механизму Френкеля

При облучении металлов частицами с большой энергией атомы выбиваются из узлов решетки, в результате чего образуется френкелевская пара – межузельный атом и вакансия.

В ГЦК решетке вокруг вакансии ближайшие соседи смещены в ее сторону. Второй слой атомов смещен по направлению от вакансии.

Быстрое затухание атомных смещений при удалении от точечного дефекта означает, что межатомные силы являются силами близкого действия, резко падающими при увеличении расстояния. Поскольку вакансия стремится стянуть решетку вокруг себя, то ее следует рассматривать как центр всестороннего растяжения. Межузельный атом – это центр напряжений сжатия.

2. Термодинамика точечных дефектов

Реальный металл никогда не имеет идеально правильной кристаллической решетки. Ему одновременно необходимы и порядок, и беспорядок, который оценивают не числом дефектов, а их концентра-

цией, т. е. например, об отношении числа вакантных узлов n , к числу всех узлов кристаллической решётки N : $C_v = n_v/N$.

В сложном переплетении процессов рождения и исчезновения вакансий при данной температуре в кристалле автоматически поддерживается строго определенная, необходимая ему их концентрация. Именуют ее равновесной. С ростом температуры равновесная концентрация вакансий будет возрастать. Это подобно тому, что происходит в объеме под колпаком, где стоит открытый сосуд с водой. С поверхности воды некоторые молекулы испаряются, а иные конденсируются на нее, но при каждой данной температуре давление водяного пара под колпаком вполне определенное. Если считать, что образование одной вакансии предполагает необходимость во флуктуации энергии U_v и если воспользоваться известным в физике законом (он называется экспоненциальным), который утверждает, что вероятность флуктуации определенной энергии U равна $e^{-U/kT}$, то концентрация вакансий определится формулой

$$C_v = e^{-U/kT} \quad (1)$$

Для примера оценим значения C_v в золоте при двух температурах: комнатной ($T = 300$ К) и температуре плавления ($T = 1336$ К). В этом случае энергия образования вакансии в золоте $U_v = 1,6 \cdot 10^{12}$ эрг. Вспомнив, что постоянная Больцмана $k = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг/К, легко получить интересующие нас величины. При комнатной температуре одна вакансия приходится на 10^{15} атомов, а при температуре плавления одна вакансия – на 10^4 атомов.

Формула (1) для расчета равновесной концентрации собственных точечных дефектов проста, но количественные значения при ее использовании можно получить, только зная величину энергии образования дефекта. Рассчитать же теоретически эту величину, исходя из теории сил межатомной связи, весьма трудно.

3. Миграция вакансий

Атомы, совершающие колебательное движение, непрерывно обмениваются энергией. Из-за хаотичности теплового движения энергия неравномерно распределена между разными атомами. В какой-то момент атом может получить от соседей такой избыток энергии, что

он займет соседнее положение в решетке, если оно свободно. Так осуществляется миграция (перемещение) вакансий в объеме кристаллов.

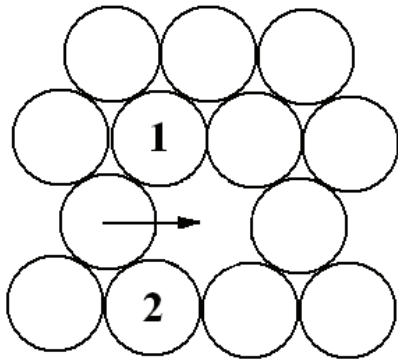


Рис. 47. Перемещение атома

Если один из атомов, окружающих вакансию, переместится в вакантный узел, то вакансия соответственно переместится на его место (рис. 47). Последовательные элементарные акты перемещения определенной вакансии осуществляются разными атомами.

«Протискивание» между четырьмя соседями необходимо для перехода любого из атомов в вакантный узел в ГЦК решетке (рис. 48). Следовательно, для перехода из положения в узел, где энергия атома минимальна, в соседний вакантный узел, где энергия также минимальна, атом должен пройти через состояние с повышенной потенциальной энергией, преодолеть энергетический барьер (рис. 49). Высота энергетического барьера E_M называется *энергией миграции вакансии*.

минимальна, атом должен пройти через состояние с повышенной потенциальной энергией, преодолеть энергетический барьер (рис. 49). Высота энергетического барьера E_M называется *энергией миграции вакансии*.

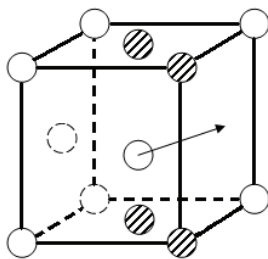


Рис. 48 Перемещение атома в вакантный узел

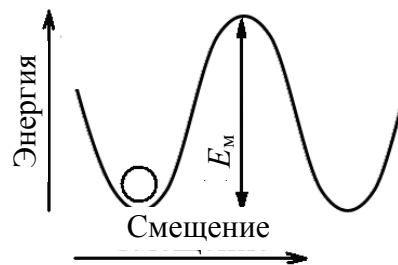


Рис. 49. Изменение энергии атома

Частота перескоков в новое положение, совершаемых дефектом в 1 с:

$$\Gamma = \nu_0 \exp(S_M/k) \exp(-E_M/kT), \quad (2)$$

где ν_0 – частота колебаний в направлении перевальной точки, т. е. «частота попыток» перехода в соседний узел ($\sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$); S_M и E_M – энтропия и энергия активации миграции вакансий.

В случаях, когда вакансионный механизм диффузии – главный, коэффициент самодиффузии пропорционален концентрации и подвижности вакансий, а энергия активации самодиффузии E_d равна сумме энергий образования и миграции вакансий,

$$E_d = E_0 + E_m. \quad (3)$$

4. Миграция межузельных атомов

Механизм миграции гантельной конфигурации межузельного атома из исходного положения 1–2 в новое положение 5–6 показан на рис. 50.

В миграции гантели в соседнее положение участвуют три атома: атомы 1 и 2 исходной гантельной конфигурации и атом из исходного нормального положения в узле 3. Гантельный атом 1 смещается в ближайший узел решетки 4, а атомы 2 и 3 – в положения 5 и 6, свойственные новой гантели. При этом ось гантели $\langle 100 \rangle$ в ГЦК решетке поворачивается на 90° .

Краудинная конфигурация межузельного атома должна легко передвигаться вдоль оси краудина путем эстафетных перемещений атомов.

Энергия активации миграции гантели в ГЦК. металлах по механизму, изображенному на (рис. 50), составляет около 0,1 эВ. Экспериментальные значения находятся в интервале от 0,01 (Pb) до 0,15 эВ(Ni). Эти величины намного меньше энергии активации миграции вакансий. В ОЦК металлах положение аналогичное.

Гантели очень подвижны даже при температурах ниже 100 К, когда подвижность вакансий резко уменьшена. Но это совсем не означает, что в процессах самодиффузии, т. е. перемещения атомов металла в своей решетке, основным является механизм миграции межузельных атомов. Из-за высокой энергии образования межузельных атомов их равновесная концентрация несоизмеримо мала по сравнению с равновесной концен-

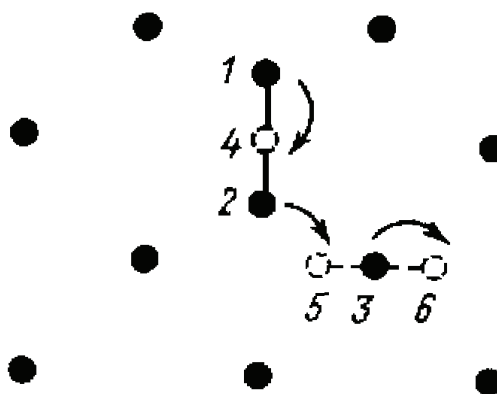


Рис. 50. Миграция гантели $\langle 100 \rangle$

трацией вакансий, которые и играют главную роль в процессах самодиффузии, особенно при температурах выше комнатной.

5. Миграция примесных атомов

Атомы примесей замещения мигрируют с помощью вакансионного механизма так же, как и атомы основного металла.

Маленькие атомы примесей внедрения в отличие от больших межузельных атомов могут интенсивно мигрировать в решетке, т. к. при их перемещении из одной пустоты в соседнюю требуется, чтобы соседние атомы немного раздвинулись. Особенно легко мигрируют маленькие атомы примесей внедрения в ОЦК. решетке.

Внедренные атомы примесей могут диффундировать по междоузлиям быстрее, чем атомы основного металла, перемещающиеся с помощью вакансионного механизма.

Контрольные вопросы и задания

1. Как делятся дефекты кристаллической решетки по геометрическим признакам?
2. Что такое «ядро дефекта» и как изменяются поля напряжений вокруг вакансии и вокруг межузельного атома?
3. Объясните, с чем связана основная доля энергии образования точечного дефекта.
4. Запишите формулу, по которой рассчитывают изменение свободной энергии в кристалле при введении вакансий.
5. Почему невозможно точно рассчитать равновесную концентрацию точечных дефектов?
6. Определите, в чем заключается отличие равновесной и неравновесной концентрации точечных дефектов.
7. Дайте понятие энергии активации миграции точечных дефектов.
8. Объясните механизм миграции гантельной конфигурации межузельного атома в ГЦК решетке.
9. С помощью какого механизма мигрируют атомы примесей замещения, внедрения?
10. Объясните образование вакансий по механизму Шоттки.
11. Объясните образование вакансий по механизму Френкеля.

12. Зарисуйте направления смещения атомов вокруг межузельного атома.

13. Расположите элементы Al, Nb, Ni и Sn в ряд в порядке предположительного возрастания энергии образования вакансий. Дайте необходимые пояснения.

14. При температуре вблизи точки плавления равновесная концентрация вакансий в магнии равна $7,2 \cdot 10^{-4}$. Приблизительно оцените равновесную концентрацию вакансий в магнии при комнатной температуре.

15. Приблизительно оцените энергию образования вакансии в ГЦК металле, если экспериментально определенная равновесная концентрация вакансий при 927°C равна $1 \cdot 10^{-5}$.

16. В меди, закаленной с 600°C , содержится $1,1 \cdot 10^{-5} \%$ (ат.) вакансий. Какую температуру закалки следует выбрать, чтобы концентрация вакансий возросла на 2 порядка?

17. Сравните равновесные концентрации вакансий в кристалле при 700°C и 20°C .

Задания для самостоятельной работы

1. Дайте определение коэффициента компактности упаковки. Укажите, чему он равен для типичных металлических решеток.

2. Зарисуйте тетраэдрические и октаэдрические пустоты в решетке ГП.

3. Зарисуйте тетраэдрические и октаэдрические пустоты в решетке ГЦК.

4. Зарисуйте тетраэдрические и октаэдрические пустоты в решетке ОЦК.

5. Объясните, как определить равновесную концентрацию комплексов вакансия – примесный атом в случае разбавленных растворов замещения.

6. Объясните, при каких условиях закалки более 50 % вакансий превращаются в дивакансии и другие вакансионные комплексы.

7. Перечислите и кратко охарактеризуйте методы определения равновесной концентрации вакансий

8. Энергия активации миграции вакансий в никеле равна 1,50 эВ, а энергия активации самодиффузии 3,03 эВ. Определите отношение равновесной концентрации вакансий при 1027°C к равновесной концентрации вакансий при 27°C .

Практическое занятие 5

ОСНОВНЫЕ ВИДЫ ДИСЛОКАЦИЙ И ИХ ДВИЖЕНИЕ

Цель занятия: изучить основные виды дислокаций, искажение кристаллической решётки вокруг дислокаций; механизмы перемещения дислокаций.

1. Основные типы дислокаций

Основными линейными дефектами являются дислокации. Априорное представление о дислокациях впервые использовано в 1934 г. Орована и Тейлером при исследовании пластической деформации кристаллических материалов, для объяснения большой разницы между практической и теоретической прочностью металла.

Дислокации – это дефекты кристаллического строения, представляющие собой линии, вдоль и вблизи которых нарушено характерное для кристалла правильное расположение атомных плоскостей.

Подробное изучение линейных дефектов кристаллической решетки, называемых дислокациями, связано с их сильным влиянием на прочность и пластичность практически всех конструкционных кристаллических материалов. Теории прочности кристаллов, не учитывающие этот тип дефектов, не могли даже приближенно объяснять наблюдающиеся механические свойства как монокристаллических, так и поликристаллических веществ.

Дислокации принято разделять на *краевые* и *винтовые*, хотя, строго говоря, наблюдаемые дислокации только иногда могут быть отнесены к одному из этих модельных типов дислокаций, поскольку обычно содержат элементы и того и другого типа. Начнем рассмотрение с этих двух наглядных модельных дислокаций. Для удобства будем рассматривать простую кубическую решетку, хотя полученные результаты справедливы с незначительными изменениями и для решеток других типов.

Краевая дислокация представляет собой особое расположение атомов, изображенное для случая простой кубической решетки на

рис. 51. На этом рисунке изображена «лишняя половинка» плоскости, помещенная между двумя другими целыми соседними плоскостями типа (100). Атомы этих целых плоскостей являются восстановителями связи друг с другом, при этом вблизи края вставленной полуплоскости возникли очень сильные деформации. Линию, проходящую через край лишней полуплоскости, называют *линией краевой дислокации*, а иногда просто краевой дислокацией. По этой причине дислокацию относят к линейным дефектам. Она проходит через места, находящиеся около границы лишней полуплоскости (экстраплоскости), с наиболее сильными искажениями кристаллической решетки, вызванными этой полуплоскостью. Область сильных искажений вблизи дислокации простирается на 2-3 периода кристаллической решетки. На больших расстояниях искажения они малы и их можно описывать в рамках теории упругости.

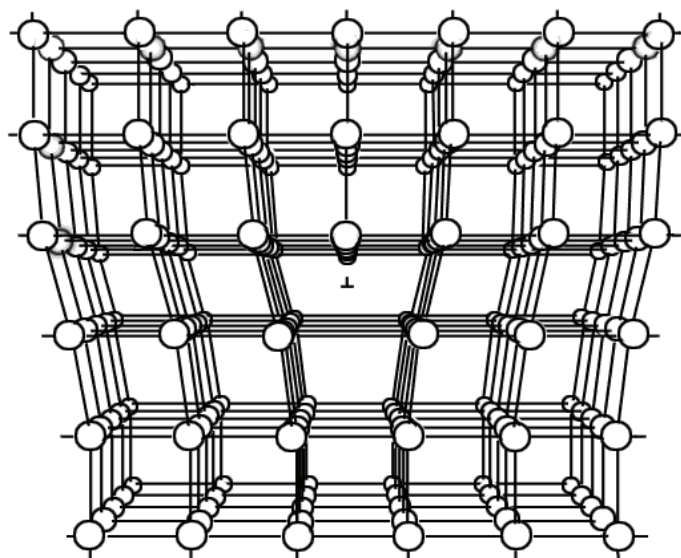


Рис. 51. Схема расположения атомов вблизи краевой дислокации

Появляется краевая дислокация чаще всего при деформации кристалла по схеме, изображенной на рис. 52. Прежде всего, заметим, что появляются дислокации при сдвиговых деформациях в плоскостях, наиболее густо занятых атомами, называемых плоскостями скольжения. Мы будем рассматривать случай простой кубической решетки и ее плоскость типа $\{100\}$. Отметим, что для ОЦК решетки плоскостями скольжения являются $\{110\}$, $\{112\}$, и $\{123\}$, а для ГЦК

решетки – $\{111\}$. Если на кристалл воздействовать силой (рис. 52, а), то плоскости (100) в месте, отмеченном пунктиром, могут «разорваться» (рис. 52, б), после чего верхняя половина плоскости 1 присоединится к нижней половине плоскости 2 (рис. 52, в), а верхняя половина плоскости 2 станет лишней.

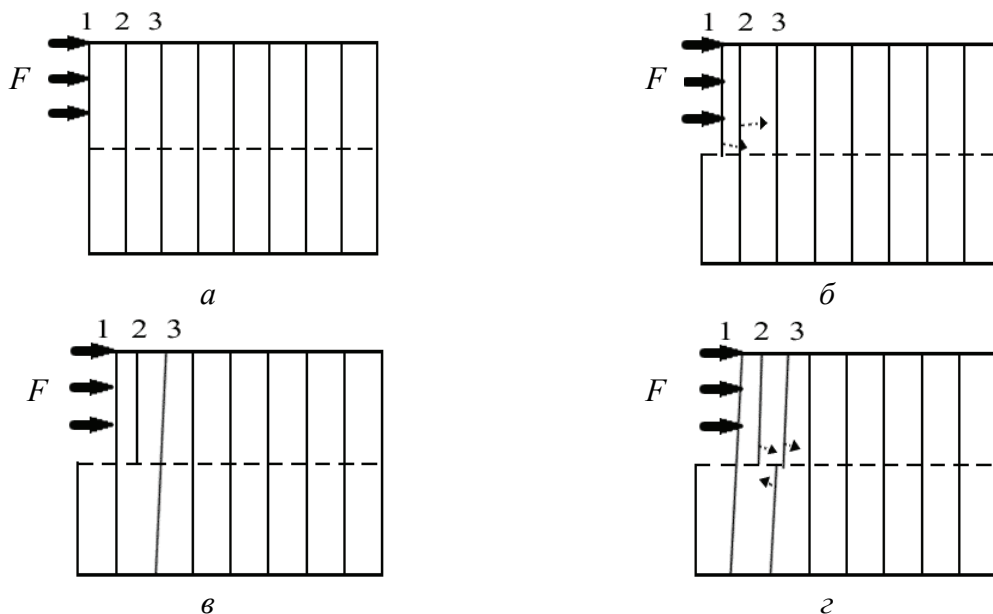


Рис. 52. Схема зарождения и перемещения краевой дислокации при сдвиговой деформации кристалла

Если продолжать воздействие на кристалл, то следующая плоскость разорвется, после чего верхняя половина плоскости 2 присоединится к нижней половине плоскости 3 (рис. 52, г) и так далее. Таким образом, в кристалле появится лишняя полуплоскость (100), которая под воздействием силы сможет перемещаться вдоль плоскости скольжения за счет разрыва-соединения соседних половинок плоскостей. Заметим, что разрыв новой плоскости происходит как раз на линии дислокации, поскольку именно на ней искажения кристаллической решетки наибольшие (рис. 51).

Условно подразделяют краевые дислокации на положительные и отрицательные. Положительная дислокация соответствует случаю, когда сверху есть лишняя атомная полуплоскость. Отрицательная дислокация соответствует случаю, когда верхняя половина кристалла растянута, нижняя сжата. Две эти дислокации различаются лишь поворотом на 180° . Поэтому не имеет смысла говорить о знаке дислока-

ции, если эта дислокация одна: знак существен, если рядом есть другая дислокация. Силы упругого взаимодействия между дислокациями зависят от знака дислокации: одноименные дислокации отталкиваются, разноименные притягиваются.

Винтовая дислокация. Винтовая дислокация представляет собой особое расположение атомов, изображенное на рис 53, для случая простой кубической решетки. На этом рисунке атомы, расположенные слева от половины плоскости A , остались на месте, а атомы справа от нее смещены вниз на одно межплоскостное расстояние. При этом вблизи линии B возникли очень сильные деформации. Линию B , проходящую через границу полуплоскости A и оставшейся полуплоскости также называют винтовой дислокацией. На рис. 53 видно, что по горизонтальной теперь уже деформированной плоскости типа (001) можно при повороте вокруг линии B подняться на 1 период кристаллической решетки, а совершив несколько оборотов вокруг линии B , подняться на несколько периодов решетки.

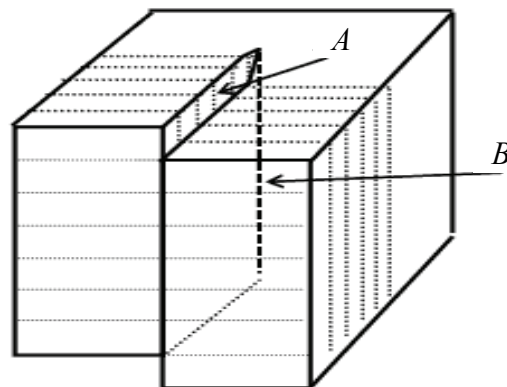


Рис. 53. Схема расположения атомных плоскостей вблизи винтовой дислокации

Подъем похож на движение по винтовой автодороге, отсюда и название винтовая дислокация. Заметим, что в случае винтовой дислокации все плоскости (010) перестали быть обособленными, они как бы слились в одну сложную винтовую поверхность с осью B . Изображенная на рис. 53 поверхность, обеспечивает подъем при движении против часовой стрелки вокруг линии B (если смотреть сверху). Может быть построена такая же поверхность, которая обеспечивает подъем при движении по часовой стрелке вокруг линии B (для этого надо было правую часть кристалла на рис. 55 смещать не вниз, а вверх). Поэтому винтовые дислокации бывают правовинтовые и левовинтовые.

Появляется винтовая дислокация при деформации кристалла по схеме, изображенной на рис. 54. Рассмотрим в случае простой кубической решетки плоскость типа $\{100\}$. Если на кристалл воздействовать силой (рис. 54, a), то плоскость $A1$ в месте, отмеченном стрелоч-

кой, может «разорваться» по линии B , после чего нижняя и верхняя половинки плоскости $A1$ соединятся со сдвигом на 1 период решетки (рис. 54, б). Если продолжать воздействие на кристалл, то следующая плоскость разорвется, после чего нижняя и верхняя половинки плоскости $A2$ соединятся со сдвигом (рис. 55, в) и так далее.

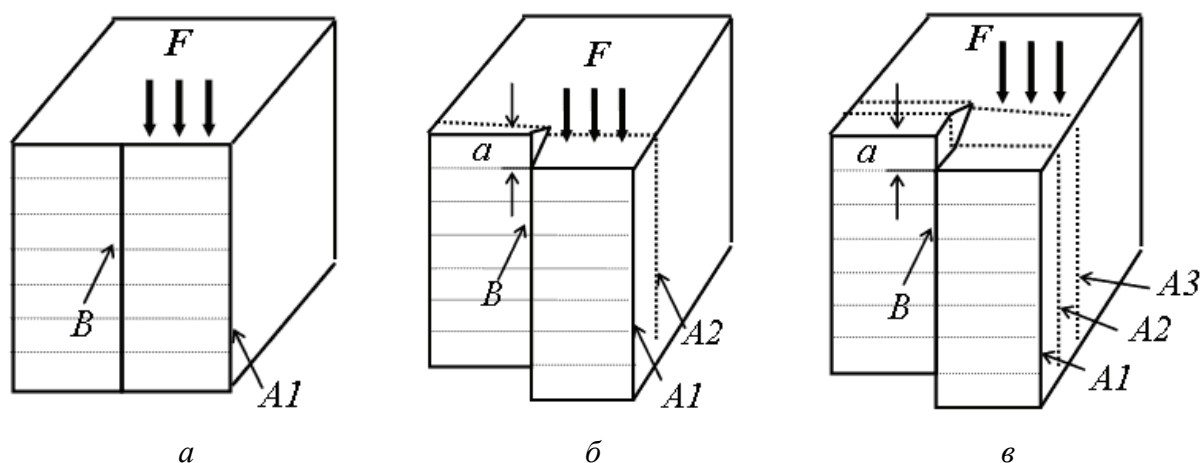


Рис. 54. Схема зарождения и перемещения винтовой дислокации при сдвиговой деформации кристалла

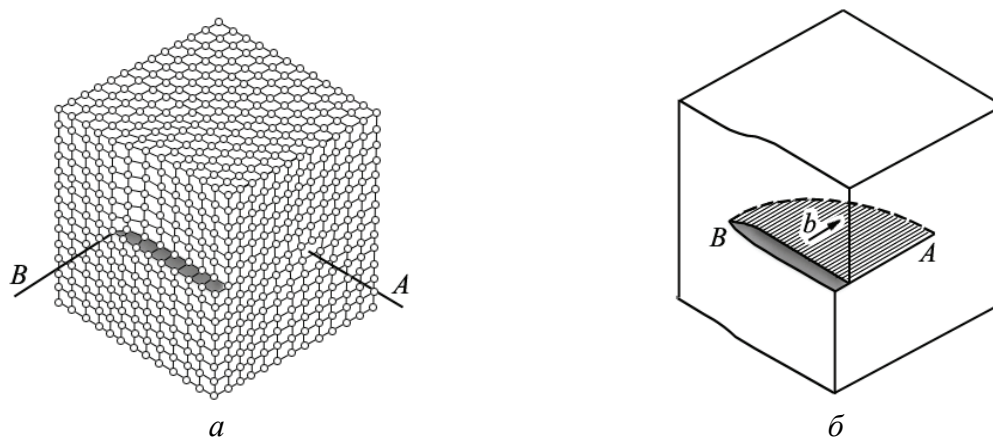


Рис. 55. Криволинейная дислокация смешанного типа

Таким образом, в кристалле появится винтовая дислокация, которая при воздействии на кристалл будет перемещаться вдоль плоскости скольжения за счет разрыва-соединения соседних половинок плоскостей. Заметим, что разрыв новой плоскости происходит как раз на линии дислокации, поскольку именно на ней искажения кристаллической решетки наибольшие (рис. 55).

Дислокации смешанного типа. На рис. 55 приведен пример криволинейной дислокации смешанного типа, соединяющей точки A и B . Видно, что в точке A расположение атомов отвечает краевой, а в точке B – винтовой дислокации. Такая дислокация может быть получена сдвиговой неоднородной деформацией под действием силы \vec{F} в направлении \vec{b} (рис. 55), в результате которой только часть атомных связей в местах, отмеченных на рис. 55 штриховкой, разорвутся и соединятся со смещением на вектор. При продолжении воздействия дислокация A – B будет перемещаться, а заштрихованная площадь расширяться. Именно такие сложные дислокации смешанного типа обычно встречаются в кристаллах.

2. Движение дислокаций, переползание и скольжение

В случае краевой деформации различают два типа движения: скольжение и переползание.

Перемещение дислокации в плоскости скольжения называется *скольжением*. В результате скольжения одной дислокации через кристалл происходит пластический сдвиг на одно межатомное расстояние b (рис. 56). При перемещении дислокации в плоскости скольжения в каждый данный момент разрываются и пересоединяются связи не между всеми атомами на плоскости скольжения (рис. 56, *а*), а только между теми атомами, которые находятся у оси дислокации (рис. 56, *б*). Поэтому скольжение дислокации происходит при сравнительно малых внешних напряжениях. Эти напряжения на несколько порядков ниже, чем напряжение, при котором может пластически деформироваться совершенный кристалл без дислокации (теоретическая прочность на сдвиг). Сдвиговую прочность, близкую к теоретической, могут иметь, например, нитевидные кристаллы (усы), не содержащие дислокаций. Скольжение дислокации не вызывает локального изменения объёма или плотности кристалла и поэтому называется *консервативным движением*.

В отличие от краевой дислокации у винтовой дислокации плоскостью скольжения является любая кристаллографическая плоскость, проходящая через линию АВ. Кристалл с винтовой дислокацией уже не состоит из параллельных атомных плоскостей, скорее его можно рассматривать состоящим из одной атомной плоскости, закрученной в виде геликоида или винтовой лестницы без ступенек (рис. 57, *б*).

На рис. 57, *a* показано расположение атомов выше (белые кружки) и ниже (чёрные кружки) плоскости скольжения в простой кубической решётке с винтовой дислокацией. Если винтовая дислокация выходит на внешнюю поверхность кристалла, то в точке выхода *A* (рис. 57, *б*) обрывается ступенька *AD* высотой в толщину одного атомного слоя. Эта ступенька активно проявляет себя в процессе кристаллизации. Атомы вещества, выпадающие из пара или раствора, легко присоединяются к ступеньке на поверхности растущего кристалла. Количество атомов, захватываемых ступенькой, и скорость смещения ступеньки по поверхности кристалла больше вблизи выхода дислокации. Поэтому ступенька закручивается вокруг оси дислокации. Ступенька последовательно поднимается с одного кристаллического «этажа» на другой, что приводит к спиральному росту кристалла.

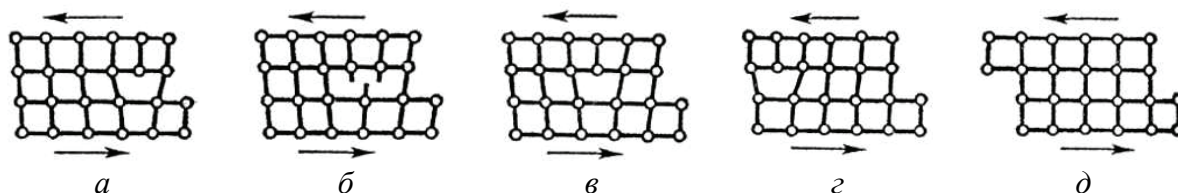


Рис. 56. Схема пластического скольжения, осуществляемого перемещением краевой дислокации

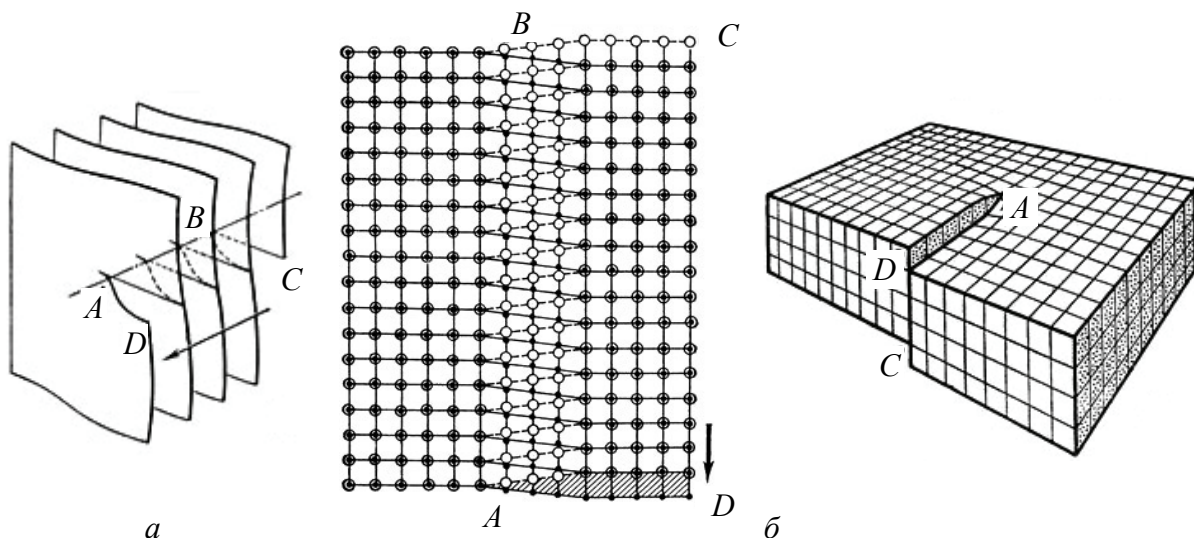


Рис. 57. Винтовая дислокация: *a* – схема образования винтовой дислокации; *б* – расположение атомов в кристалле с винтовой дислокацией

Перемещение краевой или смешанной дислокации в направлении, перпендикулярном к плоскости скольжения, называется пере-

ползанием (восхождением). Оно связано с неупругим изменением плотности кристалла вдоль линии дислокации и происходит путём «наращивания» или «растворения» атомных рядов на краю «лишней» атомной полуплоскости, что, в свою очередь, сопровождается образованием или исчезновением вакансий и межузельных атомов (рис. 58).

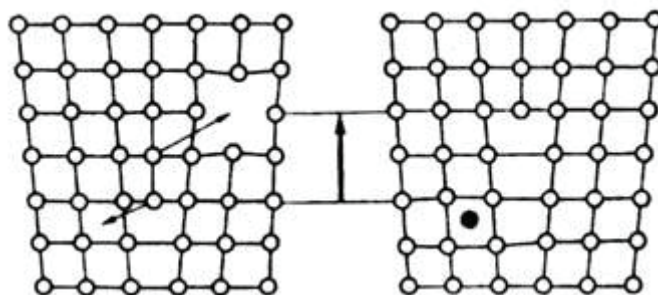


Рис. 58. Переползание краевой дислокации, сопровождающееся изменением числа точечных дефектов в кристалле

Если переползание вызвано постоянным сдвиговым напряжением, то связанный с этим перенос материала осуществляется за счёт диффузии атомов или вакансий из кристалла к линиям дислокации и направление диффузионных потоков задаётся тензором напряжений. Так как коэффициент диффузии резко уменьшается с понижением температуры, то переползание дислокаций с заметной скоростью происходит только при достаточно высоких температурах. Согласованное переползание системы дислокаций обеспечивает механизм дислокационно-диффузионного течения кристаллов.

3. Призматическая дислокация

На рис. 59. показан результат вдавливания пуансона прямоугольного сечения в боковую грань кристалла. Сдвиг проходил по четырём плоскостям: $A'ABB'$, $B'BCC'$ и т. п.

Четырёхугольник $ABCD$ – граница зоны сдвига внутри кристалла, т. е. он является дислокацией. Вектор сдвига перпендикулярен линии дислокации и, следовательно, отрезки AB , BC , CD и DA – это краевые дислокации. Так как вектор сдвига, создавшего дислокацию, не лежит в плоскости дислокационной петли, то дислокация не может

скользить в этой плоскости. Поверхность скольжения представляет собой боковую поверхность призмы. Такое скольжение называют призматическим, а соответствующую дислокацию с краевой ориентацией по всей ее длине – призматической дислокацией.

Призматическая дислокация – не обязательно результат сдвига. Она может появиться при формировании внутри кристалла атомной экстраплоскости в виде многоугольника (рис. 60) или круглого диска.

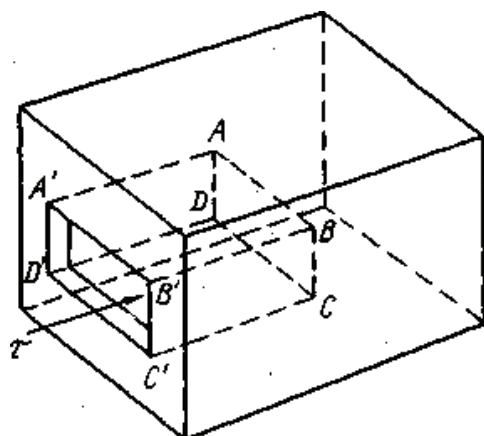


Рис. 59. Призматическая дислокация, образовавшаяся в результате вдавливания пуансона в кристалл

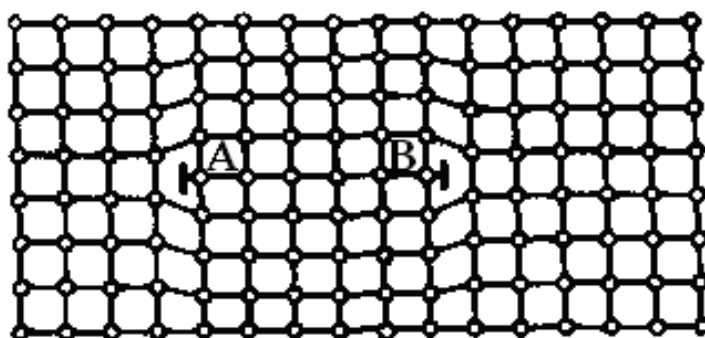
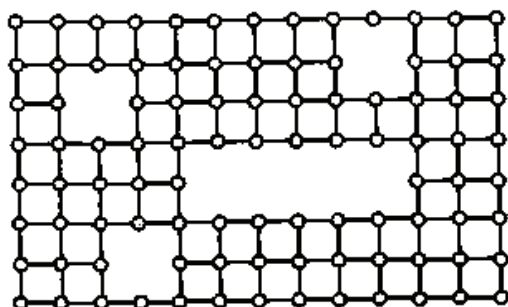
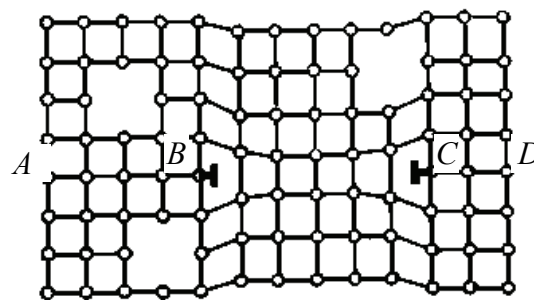


Рис. 60. Формирование призматической дислокации



a



б

Рис. 61. Формирование призматических петель

Формирование призматической дислокации наблюдается при ядерном облучении металлов, когда образовавшиеся в избытке междузельные атомы образуют плоские скопления.

Другой весьма часто встречающийся механизм образования призматических дислокационных петель – скопление («конденсация») закалочных вакансий в виде вакансионных дисков на определенных

кристаллографических плоскостях (рис. 61). При превышении некоторого критического диаметра такой «диск пустоты» самоустраниется сближением его берегов под действием сил межатомного притяжения. Это явление называют захлопыванием диска вакансий. Кромка захлопнувшегося вакансионного диска представляет собой петлю призматической дислокации.

В своей плоскости призматическая дислокационная петля способна передвигаться только переползанием. Например, на рис. 61 петля будет сужаться при «растворении» кромок диска АВ, т. е. при уходе межузельных атомов, из которых состоит диск, в окружающий объем кристалла. На рис. 61, б призматическая петля сужается, наоборот, при подходе атомов, достраивающих изнутри вакансионные стоки рядом с призматической дислокацией. Переползание может свести призматическую петлю в точку, т. е. устранить ее. При неравновесном же избытке вакансий в решетке на рис. 61, б призматическая петля будет увеличиваться в диаметре из-за подхода к ней вакансий.

Контрольные вопросы и задания

1. Дайте определение дислокации.
2. Объясните наиболее простой способ введения дислокации в кристалл.
3. Дайте понятие критически скалывающего напряжения.
4. Укажите расположение линии краевой дислокации по отношению к касательному напряжению.
5. Объясните механизм скольжения краевой дислокации.
6. Почему скольжение дислокации называют консервативным движением?
7. Какие условия необходимы для скольжения краевой дислокации?
8. Дайте определение механизма переползания краевой дислокации.
9. Объясните, какие факторы влияют на скольжение краевой дислокации.
10. Объясните, какие факторы влияют на переползание краевой дислокации.
11. Объясните варианты положительного и отрицательного переползания краевой дислокации.

12. Почему переползание относят к диффузионному процессу?
13. От чего зависит скорость переползания краевой дислокации?
14. Что такое пороги на линии дислокации?
15. Зарисуйте введение винтовой дислокации в кристалл.
16. Укажите отличия положительной и отрицательной краевой дислокации
17. Как расположены атомы в ядре винтовой дислокации?
18. В каком направлении по отношению к касательному напряжению скользит винтовая дислокация?
19. Укажите отличие правой винтовой дислокации и левой.
20. Поясните, от чего зависит скольжение винтовой дислокации.
21. Укажите особенности скольжения винтовой дислокации по сравнению с краевой.
22. Чем отличается линия смешанной дислокации от винтовой и краевой дислокаций?
23. Может ли скользить смешанная дислокация?
24. Опишите механизм введения в кристалл призматической дислокации.
25. Объясните возможность перемещения призматической дислокации.

Задания для самостоятельной работы

1. Объясните, как будут расположены атомные слои под плоскостью скольжения и над ней, если у параллелепипеда сдвинута верхняя часть кристалла относительно нижней на одно межатомное расстояние, при этом сдвиг охватил не всю плоскость скольжения от правой части параллелепипеда до левой (рис. 62); откуда берется экстраплоскость; где образуется линейный дефект, называемый линией дислокации.
2. Опишите, как располагаются атомы в ядре краевой дислокации.
3. Опишите механизм консервативного движения (скольжения) краевой дислокации, показанный на рис 63. Укажите расположение линии краевой дислокации по отношению к вектору касательно напряжения, покажите, по какой плоскости проходит скольжение дислокации.
4. Пользуясь моделью рис. 58 поясните механизм переползания краевой дислокации, укажите факторы, влияющие на скорость переползания. В каком случае переползание считают положительным или отрицательным? Что такое порог дислокации?

5. Пользуясь моделью, изображенной на рис. 57, укажите способы введения в кристалл винтовой дислокации. Покажите расположение линии винтовой дислокации относительно вектора касательного напряжения. Поясните механизм скольжения винтовой дислокации.

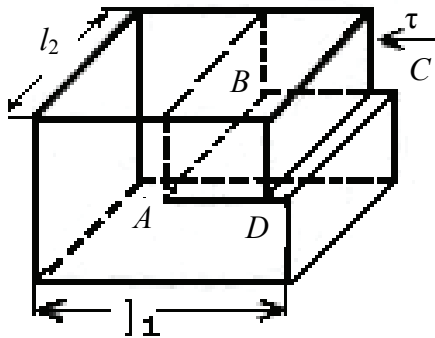


Рис. 62. Сдвиг, создавший краевую дислокацию

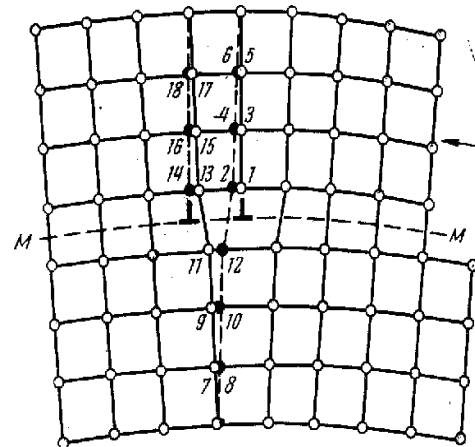


Рис. 63. Смещения атомов при скольжении краевой дислокации

6. Опишите принципиальное отличие между скольжением винтовой дислокацией и краевой дислокацией.

7. Пользуясь моделью, представленной на рис. 64, дайте понятие о поперечном скольжении винтовой дислокации и докажете, почему оно возможно.

8. Объясните отличие смешанной дислокации от краевой и винтовой, пользуясь моделью, представленной на рис. 55. Как будет происходить перемещение плоской петли смешанной дислокации, если вектор сдвига находится в ее плоскости.

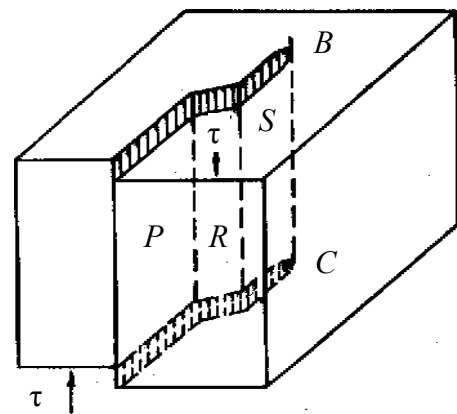


Рис. 64 Двойное поперечное скольжение винтовой дислокации BC

9. Дайте понятие призматической дислокации (рис. 60, 61). Пользуясь моделью, представленной на рис. 60 и 61, поясните возможность перемещения такого вида дислокаций. Перечислите и поясните варианты введения призматической дислокации в кристалл.

10. Покажите с помощью схемы, что круглая призматическая дислокационная петля во время скольжения может стать овальной.

Практическое занятие 6

КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИСЛОКАЦИЙ

Цель работы: получить практические навыки оценки меры искажённости решётки за счёт присутствия в кристалле дислокаций, уметь рассчитывать энергию дислокации, сил, действующих на дислокацию; определять упругое взаимодействие дислокаций между собой, плотность дислокаций.

1. Вектор Бюргерса

Вектор Бюргерса является мерой искаженности кристаллической решетки, обусловленной присутствием в ней дислокации. Он определяет энергию дислокации, действующую на дислокацию силы, величину связанного с дислокацией сдвига, влияет на подвижность дислокации. Следовательно, вектор Бюргерса – главная количественная характеристика дислокации.

Чтобы оценить степень искаженности решетки, вызванной дислокацией, следует сравнить несовершенный кристалл, содержащий дислокацию, с совершенным кристаллом. Для этого строят так называемый контур Бюргерса – замкнутый контур произвольной формы, построенный в реальном кристалле путем последовательного обхода дефекта от атома к атому в совершенной области кристалла или к области, где содержится дислокация.

На рис. 65 показано построение контура Бюргерса вокруг краевой дислокации.

Вокруг дислокации атомы в совершенной области, где проходит контур Бюргерса $ABCD$, несколько смещены по сравнению с расположением их в совершенном кристалле без дислокации. Сумма всех упругих смещений, накопившаяся при обходе по контуру Бюргерса $ABCD$, проявляется в виде невязки, когда соответствующий контур строят в совершенном кристалле. Поэтому вектор Бюргерса, замыкающий в совершенном кристалле контур Бюргерса, является мерой

той искаженности решетки в несовершенном кристалле, которая вызвана дислокацией.

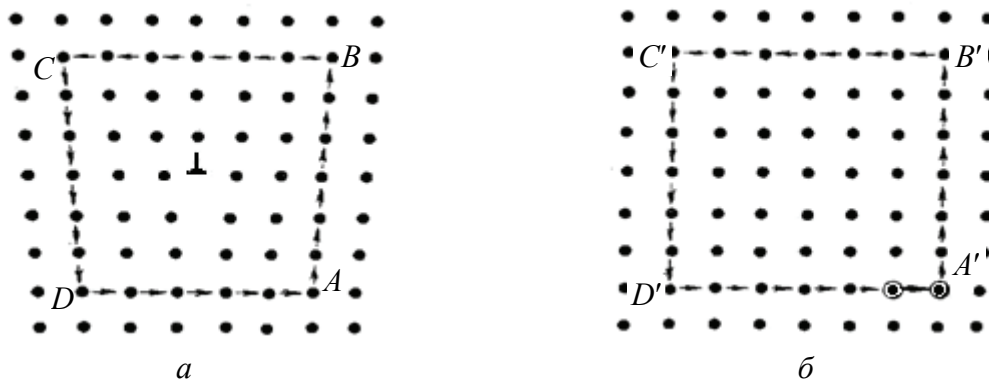


Рис. 65 . Контур Бюргера вокруг краевой дислокации (а) и эквивалентный контур в совершенном кристалле (б): b – вектор Бюргера

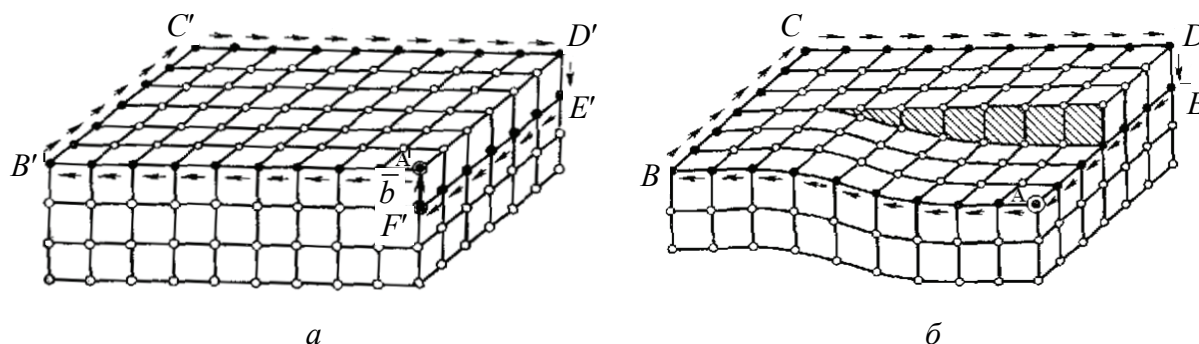


Рис. 66. Контур Бюргера в совершенном кристалле (а) и в кристалле, содержащем линию дислокации (б)

Величина вектора Бюргера не зависит от того, насколько контур Бюргера удален от дислокации. Чем дальше от дислокации мы располагаем этот контур, тем меньше упругие смещения атомов в совершенной области, но тем длиннее контур, и сумма всех упругих смещений, накопившаяся при его обходе, неизменна. Весьма удобно, что искаженность решетки несовершенного кристалла выражается через период решетки идеального кристалла, т. е. через константу. Векторы Бюргера, полученные на рис. 65, 66, являются векторами сдвига.

Вектор Бюргера смешанной дислокации можно разложить на краевую и винтовую компоненты, которые зависят от угла ϕ между вектором Бюргера и линией смешанной дислокации (рис.67).

Поскольку вектор Бюргерса – столь важная количественная характеристика дислокации, то необходимо уметь обозначать его так, чтобы его запись отражала направление и величину вектора. Если вектор b по трем координатным осям x , y и z имеет составляющие b_x , b_y и b_z , то это записывается так: $b = [b_x b_y b_z]$.

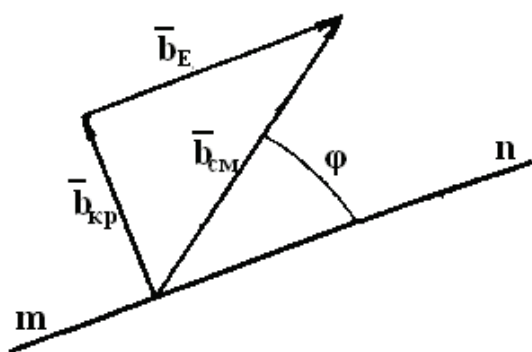


Рис. 67. Краевая и винтовая составляющие вектора Бюргерса смешанной дислокации

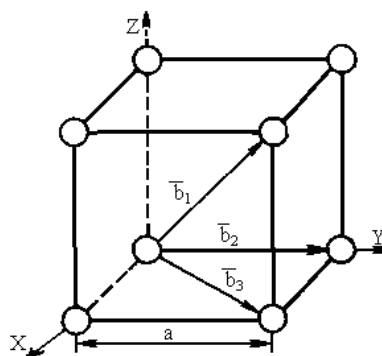


Рис. 68. Векторы Бюргерса в примитивной кубической решетке

Величину вектора Бюргерса или, как часто говорят, его мощность легко определить по формуле

$$b = |\bar{b}| = \sqrt{b_x^2 + b_y^2 + b_z^2} . \quad (4)$$

За направления осей x , y и z обычно принимают кристаллографические направления ребер элементарной ячейки данной решетки. В случае кубической решетки составляющие по осям b_x , b_y и b_z можно выразить через период элементарной ячейки a . Этот период войдет в общий наибольший делитель na , где n – некоторое число. Тогда

$$\bar{b} = na[uvw] , \quad (5)$$

где u , v и w – целые числа, а $[uvw]$ является символом кристаллографического направления вектора Бюргерса. Мощность же

$$b = na\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} . \quad (6)$$

На рис. 68 приведена форма записи трех векторов Бюргерса $\overline{b_1}, \overline{b_2}, \overline{b_3}$ в примитивной кубической решетке (рис. 68).

2. Плотность дислокаций

Плотность дислокаций в кристаллах характеризуют числом дислокаций, пронизывающих единицу поверхности, выбранной внутри кристалла, или же, что почти то же самое, суммарной длиной дислокаций в единице объема кристалла:

$$\rho = (\sum l / V), \quad (7)$$

где $\sum l$ – суммарная длина всех линий дислокаций в кристалле, см; V – объем кристалла, см³.

Типичные значения плотности дислокаций и применяемые для данной плотности дислокаций методы их наблюдения приведены в табл. 7.

Таблица 7

Типичные значения плотности дислокаций и методы их наблюдения

Метод изучения дислокаций	Толщина образца, мкм	Ширина изображения дислокации, мкм	Максимальная плотность дислокаций на 1 см ²
Электронная микроскопия	10 ⁰ –10 ⁻¹	10 ⁻²	10 ¹¹ –10 ¹²
Рентгеновская топография (на пропускание)	10 ² –10 ³	5	10 ⁴ –10 ⁵
Рентгеновская топография (на отражение)	2–50	2	10 ⁶ –10 ⁷
Оптическая микроскопия (по ямкам травления)	Любая	0,3–0,5	10 ⁶ –10 ⁷

Наблюдать дислокации можно с помощью электронных микроскопов практически при любой их плотности, а в достаточно совершенных монокристаллах – и с помощью рентгеновской топографии – метода, основанного на измерении (фотографировании) интенсивно-

сти аномального прохождения рентгеновского излучения через совершенный кристалл или же дифракционного отражения от совершенного монокристалла. Заметим, что методы наблюдения дислокаций «видят» не саму дислокацию, а искажения кристаллической решетки вблизи нее.

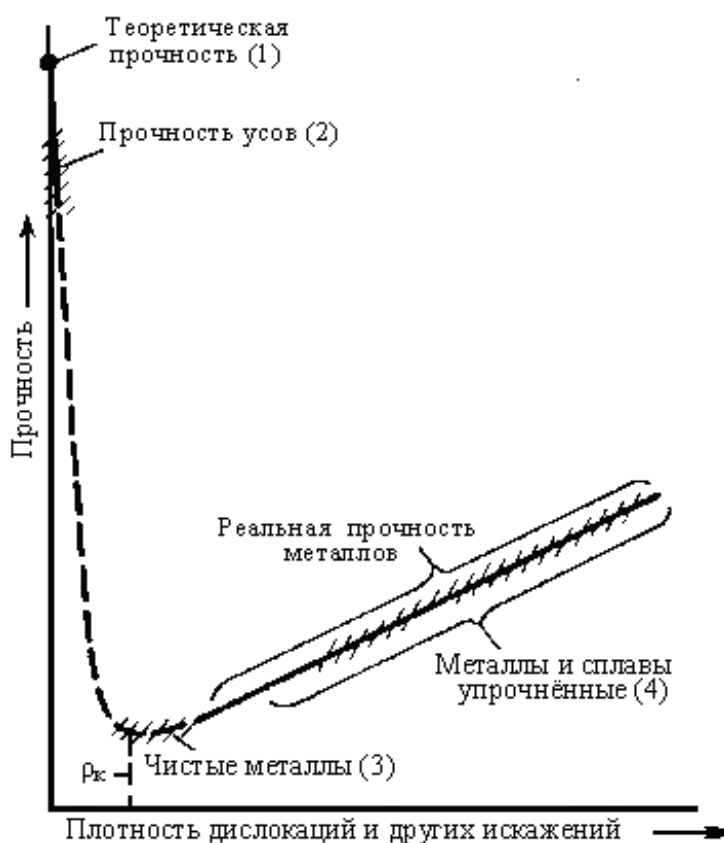


Рис. 69. Влияние плотности дислокаций на прочность

Иногда следы дислокаций удается наблюдать на поверхности хорошо отшлифованного и протравленного в специально подобранном химическом травителе кристалла по «ямкам травления». Метод основан на том, что травитель сильнее растворяет искаженные участки кристаллической решетки вблизи дислокации, поэтому в месте выхода дислокации на поверхность кристалла будет видна ямка. При использовании светового микроскопа следует учитывать, что предел его разрешения достигает 0,5–1 мкм, значит «ямки травления», расположенные примерно на таком же расстоянии, будут видны как отдельные, при большей плотности дислокаций они будут неразличимы.

Плотность дислокаций изменяется в широких пределах и зависит от состояния материала. После тщательного отжига плотность дислокаций составляет 10^5-10^7 м^{-2} , в кристаллах с сильно деформированной кристаллической решеткой плотность дислокаций достигает $10^{15}-10^{16} \text{ м}^{-2}$.

Плотность дислокации в значительной степени определяет пластичность и прочность материала (рис. 69). Минимальная прочность определяется критической плотностью дислокаций $\rho = 10^5-10^7 \text{ м}^{-2}$.

Если плотность меньше значения ρ_k , то сопротивление деформированию резко возрастает, а прочность приближается к теоретической. Повышение прочности достигается созданием металла с бездефектной структурой, а также повышением плотности дислокаций, затрудняющим их движение. В настоящее время созданы кристаллы без дефектов – нитевидные кристаллы длиной до 2 мм, толщиной 0,5–20 мкм – «усы» с прочностью, близкой к теоретической: для железа $\sigma_B = 13000 \text{ МПа}$, для меди $\sigma_B = 30000 \text{ МПа}$. При упрочнении металлов увеличением плотности дислокаций, она не должна превышать значений $10^{15}-10^{16} \text{ м}^{-2}$. В противном случае образуются трещины.

Дислокации влияют не только на прочность и пластичность, но и на другие свойства кристаллов. С увеличением плотности дислокаций изменяются оптические свойства, повышается электросопротивление металла. Дислокации увеличивают среднюю скорость диффузии в кристалле, ускоряют старение и другие процессы, уменьшают химическую стойкость, поэтому в результате обработки поверхности кристалла специальными веществами в местах выхода дислокаций образуются ямки.

3. Упругие свойства дислокаций. Энергия дислокации

Дислокация повышает энергию кристалла. Она является центром поля внутренних напряжений, убывающих с увеличением расстояния от дислокации. В ядре дислокации смещения атомов настолько велики, что рассчитать энергию здесь с помощью методов теории упругости не удастся. За пределами ядра дислокации деформации

описываются линейными уравнениями теории упругости, и поле напряжений и соответствующую энергию легко вычислить.

Для оценки энергии винтовой дислокации вводят допущение, что в процессе ее образования кристалл ведет себя как упругое изотропное тело.

Под энергией дислокации понимают связанную с ней упругую энергию кристалла, приходящуюся на единицу длины дислокации. Следовательно, энергия винтовой дислокации

$$E_B = (Gb^2/4\pi) \ln(R/r_0), \quad (8)$$

где G – модуль сдвига; b – вектор Бюргера дислокации; l – ее длина; r_0 – радиус ядра дислокации (несколько межатомных расстояний); R – расстояние, на которое распространяется упругая деформация от дислокации.

Расчет энергии краевой дислокации более сложен, так как поле напряжений вокруг нее не обладает цилиндрической симметрией, как поле вокруг винтовой дислокации (с одной стороны от плоскости скольжения – растяжение, а с другой – сжатие).

Для расчета касательных напряжений используем следующий прием. Мысленно подразделим кристалл на ряд цилиндрических слоев с общей осью. Возьмем один такой цилиндрический слой (рис. 70) с радиусом r и толщиной dr , разрежем его вдоль образующей цилиндра l с одной стороны и сместим на величину b одну часть этого слоя по отношению к другой. При условии, что толщина слоя мала, величина силы, препятствующей указанному смещению, не изменится, если цилиндрический слой развернуть в плоскую пластину.

Для энергии краевой дислокации

$$E_{кр} = [Gb^2/4\pi(1 - \mu)] \ln(R/r_0), \quad (9)$$

где μ – коэффициент Пуассона.

Большинство дислокаций в реальных металлах – смешанные. Вектор Бюргера смешанной дислокации можно разложить на краевую и винтовую компоненты: $b_{кр} = b_{см} \sin\varphi$, $b_B = b_{см} \cos\varphi$. Формула для расчёта энергии смешанной дислокации:

$$E_{см} = [Gb_{см}^2/4\pi(1 - \mu)] (1 - \mu \cos^2\varphi) \ln(R/r_0). \quad (10)$$

Энергия дислокации зависит от расстояния R , на которое от нее распространяется упругая деформация. Обычно R принимают равным половине среднего расстояния между соседними дислокациями. Для оценочных расчетов весьма благоприятно то, что энергия дислокаций очень слабо зависит от величины R в реальных кристаллах. Так, например, если увеличить R с 1 мкм до 1 см, т. е. в 10000 раз, то энергия винтовой дислокации в кристалле должна возрасти лишь в 2, 3 раза. Для наиболее типичных интервалов значений R , γ_0 и μ формулы приобретают вид, очень удобный при оценках энергии дислокации любого типа:

$$E = \alpha G b^2 l, \quad (11)$$

где $\alpha = 0,5-1,0$, l – длина дислокации

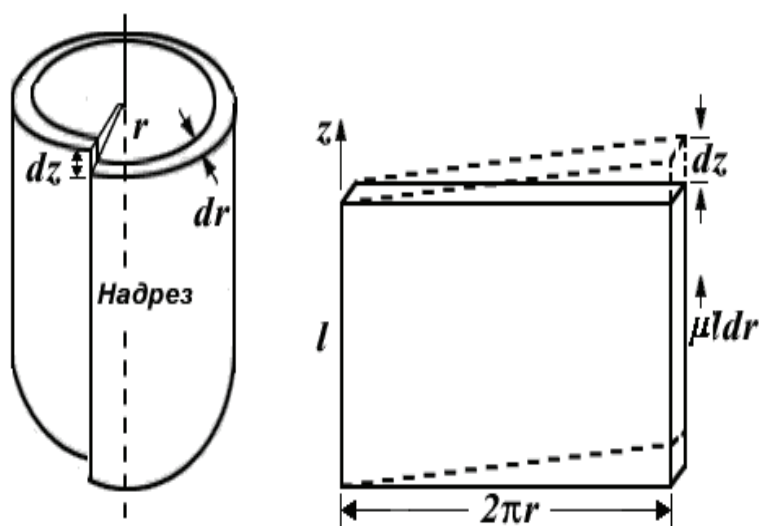


Рис. 70. Картина деформации кристалла
вблизи винтовой дислокации

Увеличение длины дислокации приводит к росту ее упругой энергии. Поэтому линия дислокации ведет себя как упругая нить, всегда стремящаяся выпрямиться, чтобы сократить свою длину. Энергию дислокации, приходящуюся на единицу ее длины, называют линейным натяжением дислокации:

$$T = \alpha G b^2. \quad (12)$$

Сила линейного натяжения направлена вдоль линии дислокации. Поля напряжений движущейся и неподвижной дислокаций различны, что объясняется возникновением инерциальных сил от движения элементов тела, вызванного движением дислокации. Уравнения движения дислокации сходны с уравнениями движения частицы, приводимыми в теории относительности. Здесь скорость звука в данном материале является такой же предельной скоростью, как скорость света в теории Эйнштейна. Энергия винтовой дислокации

$$E_B = E_0 (1 - v^2/c^2)^{-1/2}, \quad (13)$$

где E_0 – энергия покоящейся дислокации.

Следовательно, дислокация не может двигаться в кристалле быстрее звука ($\sim 10^5$ см/с).

Смещения атомов в ядре дислокации и упругие смещения в поле вокруг дислокации за пределами этого ядра сильно повышают энергию кристалла U . Вместе с тем дислокации увеличивают неупорядоченность и соответственно энтропийный член TS в формуле для свободной энергии ($F = U - TS$).

Введение дислокации увеличивает число возможных способов размещения атомов в решетке, так как дислокация может располагаться в кристалле разными способами. Это обуславливает повышение конфигурационной энтропии. Возрастает также колебательная энтропия, так как вблизи дислокации оказывается измененной частота колебаний атомов.

Уменьшение свободной энергии при росте энтропии намного меньше, чем повышение свободной энергии вследствие образования поля упругих напряжений при введении дислокации в кристалл. Поэтому в отличие от точечных дефектов, которые в определенном числе (концентрации) являются равновесными для данной температуры, дислокации при любых температурах и в любом числе повышают свободную энергию кристалла и всегда являются термодинамически неравновесными дефектами. В отличие от точечных дефектов, равновесная концентрация которых растет с температурой пропорционально фактору Больцмана $e^{-E_0/kT}$, количество дислокаций не зависит от температуры. Это объясняется большой величиной упругой энергии их образования. Флуктуации энергии не способны создать новую дислокацию; фактор Больцмана здесь не играет существенной роли.

4. Силы, действующие на дислокацию

Движение дислокации вызывает пластическую деформацию кристалла, т.е. дислокация совершает работу. Учитывая это, можно оперировать представлением о действии некоторой силы на линию дислокации как на самостоятельный физический объект.

Сила, действующая на единицу длины дислокации (f), равна произведению вектора Бюргерса на касательное напряжение в плоскости скольжения. Эта сила перпендикулярна линии дислокации и направлена к той части плоскости скольжения, где скольжение еще не происходило (рис. 71, 72):

$$f = b\tau. \quad (14)$$

Если направление приложенных касательных напряжений не совпадает с направлением вектора Бюргерса, то в формуле (12) величина τ представляет собой проекцию касательного напряжения на направление вектора Бюргерса

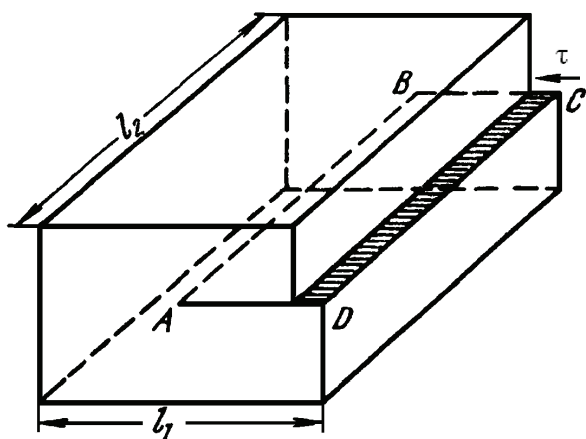


Рис. 71. Сдвиг, создавший краевую дислокацию AB (стрелка – вектор сдвига (l_1 и l_2 – длина и ширина кристалла соответственно))

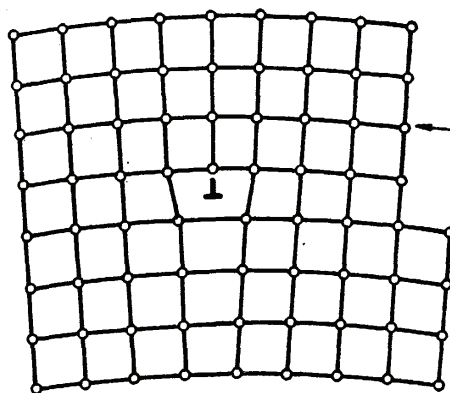


Рис. 72. Краевая дислокация в примитивной кубической решетке: стрелка – вектор сдвига

Когда разные участки дислокации лежат в не параллельных плоскостях, то проекция касательного напряжения на направление вектора Бюргерса в разных плоскостях может быть неодинаковой и соответственно разной будет сила f .

5. Упругое взаимодействие дислокаций

Вокруг дислокации решетка деформирована и имеется поле напряжений, которое является источником силы, действующей на соседнюю дислокацию. Так же, как и в случае действия внешних сил, приложенных к поверхности кристалла, внутренние напряжения от одной дислокации обуславливают наличие силы, действующей на единицу длины другой дислокации и равной произведению вектора Бюргерса на составляющую касательного напряжения в направлении этого вектора.

Поле напряжений вокруг краевой дислокации не обладает такой простой симметрией, как поле напряжений вокруг винтовой дислокации. С одной стороны от плоскости скольжения имеется область гидростатического (всестороннего) сжатия, а с другой стороны – статического растяжения.

Для анализа сил взаимодействия дислокаций наиболее важны касательные напряжения, действующие в плоскости скольжения.

В поле напряжений вокруг краевой дислокации в точке с координатами x и y касательное напряжение в плоскости, параллельной плоскости скольжения,

$$\tau = [Gb/2\pi(1 - \mu)][x(x^2 - y^2)/(x^2 + y^2)^2], \quad (15)$$

где x – координата в направлении вектора Бюргерса; y – координата в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения; G – модуль сдвига; μ – коэффициент Пуассона; b – вектор Бюргерса.

Рассмотрим две дислокации одного знака, расположенные в параллельных плоскостях скольжения (рис. 73, а). Начало координат поместим в точку O и будем рассматривать силу воздействия первой дислокации в точке O на вторую дислокацию, имеющую координаты x, y в параллельной плоскости скольжения. Учитывая, что сила, действующая на единицу длины второй дислокации, $f = b\tau$, а также выражение (13) для τ , можно записать для силы взаимодействия параллельных краевых дислокаций одного знака следующее выражение:

$$f = [Gb^2/2\pi(1 - \mu)] [x(x^2 - y^2) / (x^2 + y^2)^2]. \quad (16)$$

Сложный характер зависимости этой силы от x обусловлен отмеченной выше асимметрией поля напряжений вокруг краевой дис-

локации. Эта зависимость изображается кривой на рис. 73, построенной в координатах $f - x$. Началом координат для этой кривой является точка А, от которой вверх отложены значения $+f$, соответствующие отталкиванию. Вправо от точки А отложено расстояние между дислокациями в направлении скольжения. Таким образом, на (рис. 73, а) совмещены две схемы: одна показывает расположение одноименных краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения, находящихся на расстоянии y одна от другой, а другая – зависимость силы взаимодействия этих дислокаций f от расстояния между ними в направлении скольжения x . За единицу длины в направлении x принята величина y .

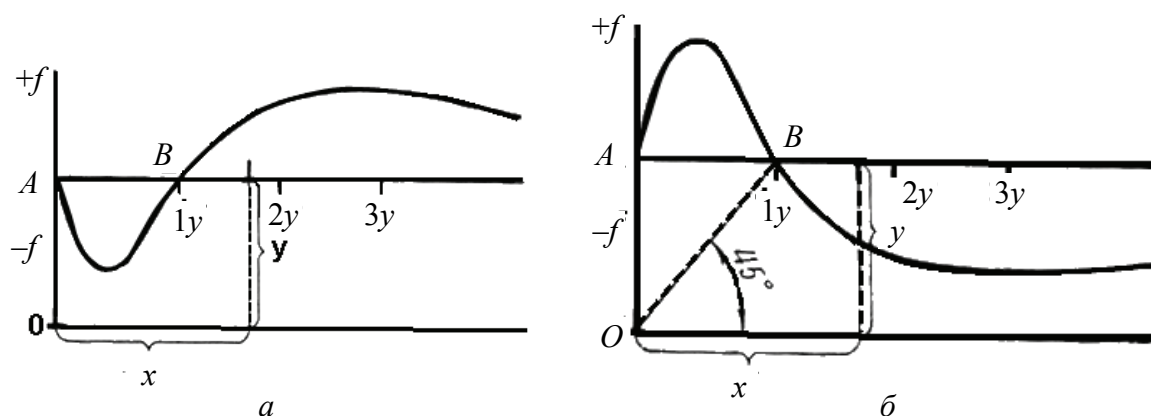


Рис. 73. Силы отталкивания ($+f$) и притяжения ($-f$) краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения: a – одноименные дислокации; $б$ – разноименные дислокации

Краевые дислокации одного знака, расположенные одна над другой, представляют собой механически устойчивую конфигурацию. Обусловлено это тем, что под областью растяжения от одной дислокации находится область сжатия от другой дислокации.

Если одноименные дислокации находятся в одной плоскости скольжения, т. е. $y = 0$, то формула для силы их взаимодействия приобретает следующий вид:

$$f = [Gb^2/2\pi(1-\mu)]x^{-1} \quad (17)$$

Следовательно, между одноименными дислокациями, находящимися в одной плоскости скольжения, действует только сила взаимного отталкивания, обратно пропорциональная расстоянию между ними.

Перейдем к рассмотрению взаимодействия разноименных краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения (рис. 73, б). Сила воздействия дислокации, помещенной в точке O , на дислокацию противоположного знака с координатами x, y выражается следующей формулой:

$$f = - [Gb^2/2\pi(1 - \mu)]x (x^2 - y^2)/(x^2 + y^2)^2. \quad (18)$$

Это выражение отличается от рассмотренного ранее для силы взаимодействия одноименных дислокаций только знаком минус.

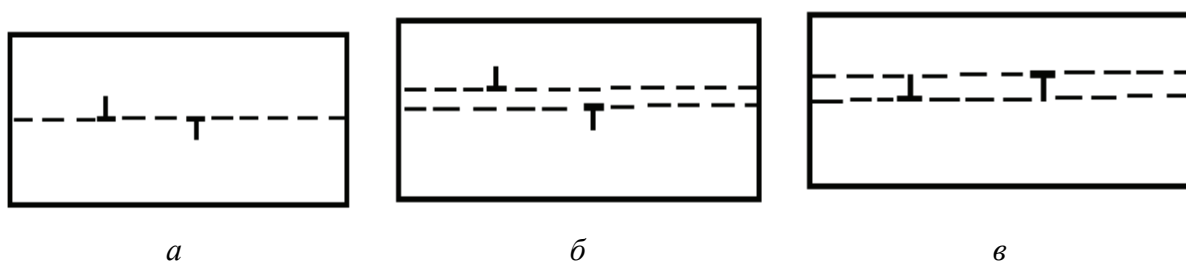


Рис. 74. Расположение разноимённых дислокаций в кристалле: a – разноименные краевые дислокации в одной плоскости скольжения; b, v – разноименные краевые дислокации в соседних плоскостях скольжения

При $x > y$ $f < 0$, т. е. разноименные дислокации взаимно притягиваются. При $x < y$ $f > 0$, т. е. они взаимно отталкиваются. При $x = 0$ и $x = y$ $f = 0$. В точке A равновесие неустойчиво, так как небольшое отклонение от этой точки вызывает появление силы, стремящейся удалить одну дислокацию от другой. В точке B ($x = y$) равновесие устойчиво; отклонение вправо и влево от точки B вызывает появление силы, стремящейся вернуть дислокацию в эту точку. Таким образом, линия, соединяющая разноименные дислокации, образующие устойчивую конфигурацию, находится под углом 45° к плоскости скольжения. Если разноименные краевые дислокации находятся в одной плоскости скольжения ($y = 0$), то между ними действует только сила взаимного притяжения, обратно пропорциональная расстоянию между дислокациями:

$$f = -[Gb^2/2 \pi (1 - \mu)] x^{-1}. \quad (19)$$

6. Упругое взаимодействие параллельных винтовых дислокаций

Решетка вокруг винтовой дислокации испытывает чисто сдвиговую деформацию. Поле упругих напряжений винтовой дислокации в отличие от поля напряжений краевой дислокации содержит только касательные составляющие напряжения. Нормальные составляющие равны нулю, и областей гидростатического сжатия и растяжения вокруг винтовой дислокации нет. Поле винтовой дислокации обладает осевой симметрией. В любой точке на расстоянии r от оси дислокации в плоскости, проходящей через эту ось и заданную точку, действует касательное напряжение $\tau = Gb/2 \pi r$ (рис. 70).

Если две параллельные винтовые дислокации находятся на расстоянии r одна от другой, то одна дислокация действует на другую с силой

$$f = b \tau = \pm Gb^2 / 2 \pi r \quad (20)$$

Знак плюс относится к параллельным векторам Бюргерса (одноименным дислокациям), а знак минус – к антипараллельным векторам (разноименным дислокациям). Сила взаимодействия параллельных винтовых дислокаций приложена центрально, а величина ее обратно пропорциональна расстоянию между дислокациями. Плоскость, проходящая через линии двух винтовых дислокаций, является плоскостью скольжения (как любая другая плоскость, проходящая через линию винтовой дислокации).

В заключение обратим внимание на то, что сила взаимодействия параллельных краевой и винтовой дислокаций равна нулю. Это легко понять, если представить себе, что рядом с краевой находится параллельная ей винтовая дислокация. Вектор Бюргерса такой винтовой дислокации перпендикулярен плоскости чертежа. Касательные напряжения от краевой дислокации перпендикулярны вектору Бюргерса винтовой дислокации. Следовательно, сила воздействия краевой дислокации на винтовую, равная произведению вектора Бюргерса винтовой дислокации на составляющую касательного напряжения в направлении этого вектора, равна нулю.

Контрольные вопросы и задания

1. Что такое контур Бюргерса?
2. Укажите расположение вектора Бюргерса относительно линий краевой и винтовой дислокаций.
3. Чему равна мощность вектора Бюргерса?
4. Дайте определение плотности дислокации и запишите размерность.
5. Укажите параметры, влияющие на плотность дислокаций.
6. Покажите разложение вектора Бюргерса смешанной дислокации на краевую и винтовую компоненты.
7. Запишите, по какой формуле можно вычислить энергию краевой дислокации.
8. Укажите, от каких факторов зависит энергия дислокации.
9. Что такое линейное натяжение дислокации и по какой формуле его рассчитывают?
10. Объясните, почему дислокации являются термодинамически неравновесными дефектами.
11. Запишите формулу, по которой рассчитывают силу, действующую на единицу длины дислокации.
12. От чего зависит упругое взаимодействие краевых дислокаций?
13. Объясните причину устойчивости конфигурации, которую называют дислокационной стенкой.
14. Рассмотрите взаимодействие краевых дислокаций разного знака, когда они вплотную подходят друг к другу, когда находятся в соседних плоскостях скольжения, разделенных одним межатомным расстоянием.
15. Чему равна сила, с которой одна винтовая дислокация действует на другую, ей параллельную?
16. Чему равна сила, с которой винтовая и краевая параллельная ей дислокация действует друг на друга?

Задания для самостоятельной работы

1. Оцените величину критического скалывающего напряжения по додислокационной теории скольжения.
2. Рассмотрите механизм скольжения плоской петли смешанной дислокации при условии, что вектор сдвига лежит в ее плоскости.

3. Рассмотрите механизм скольжения плоской петли смешанной дислокации при условии, что вектор сдвига лежит вне петли, но в одной плоскости с петлей.

4. Покажите разложение вектора Бюргерса смешанной дислокации на краевую и винтовую компоненты.

5. Зарисуйте расположение векторов Бюргерса в примитивной ячейке, в гранецентрированной ячейке и в объёмно-центрированной ячейке.

6. Укажите расположение вектора Бюргерса относительно краевой и винтовой дислокации.

7. Объясните величины, входящие в формулу

$$E_v = \int \frac{\tau}{2} ds \cdot b,$$

и запишите, какой она примет вид, если при малых сдвиговых деформациях справедлив закон Гука.

8. Объясните, как вычислить энергию краевой дислокации, смешанной дислокации.

9. Укажите, от чего зависит энергия дислокаций.

10. Объясните, что такое линейное натяжение дислокации, по какой формуле его рассчитывают.

11. Объясните, как рассчитать энергию движущейся винтовой дислокации.

12. Объясните, почему дислокации являются термодинамически неравновесными дефектами.

13. Покажите с помощью построения, что вектор Бюргерса прямолинейной цепочки межузельных атомов, расположенной в направлении $\langle 100 \rangle$ кубической решетки, равен нулю.

14. После резкого охлаждения алюминия в воде с 630°C внутри зерен появляется множество призматических петель, лежащих в плоскостях $\{111\}$, причем в зонах шириной около $1\ \mu\text{m}$ по обе стороны от границ зерен указанные петли не возникают. Чем обусловлено существование таких зон и как должна влиять скорость охлаждения с 630°C на их ширину?

15. Покажите с помощью схемы, что при скольжении призматической дислокационной петли, имевшей краевую ориентацию, могут появиться участки с винтовой ориентацией (допустите, что отдельные участки исходной петли подвижны).

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ДЕФЕКТЫ. ДИСЛОКАЦИИ В ТИПИЧНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Цель занятия: изучить геометрию поверхностных дефектов – границ зёрен и дефектов упаковок, геометрию образования полных частичных дислокаций в типичных металлических структурах, оценить энергию дефектов упаковок, изучить малоугловые и высокоугловыми границы в кристаллах, различие между границами кручения и наклона.

1. Дефекты упаковки

Геометрия и основные особенности характерных дислокаций в типичных металлических решетках тесно связаны с особенностями плотнейших упаковок.

В чередовании плотноупакованных слоев возможны отступления от того порядка, который свойствен ГП и ГЦК решеткам. Прослойку с нарушенным чередованием плотноупакованных слоев называют дефектом упаковки.

Дефект упаковки можно создать разными путями: сдвигом в плоскости плотнейшей упаковки, удалением или, наоборот, внедрением одной плотноупакованной плоскости (или части ее) и другими способами.

Если в ГЦК. решетке изъять одну из плоскостей B (или часть ее) и сблизить по нормали две половинки кристалла, чтобы исключить образовавшуюся пустоту, то получим чередование слоев $ABCACABC...$ (рис. 75, a).

Здесь также получается прослойка $CACA$ ГП. решетки в ГЦК решетке. Такой дефект называют дефектом упаковки вычитания.

В ГП решетке недостаточно только изъять одну из плотноупакованных плоскостей и сблизить по нормали две половинки кристалла, так как при этом в соседнее положение попадают одинаковые плоскости (AA или BB) и упаковка не получается плотнейшей. Необ-

ходимо еще тангенциальное смещение одной части кристалла по отношению к другой.

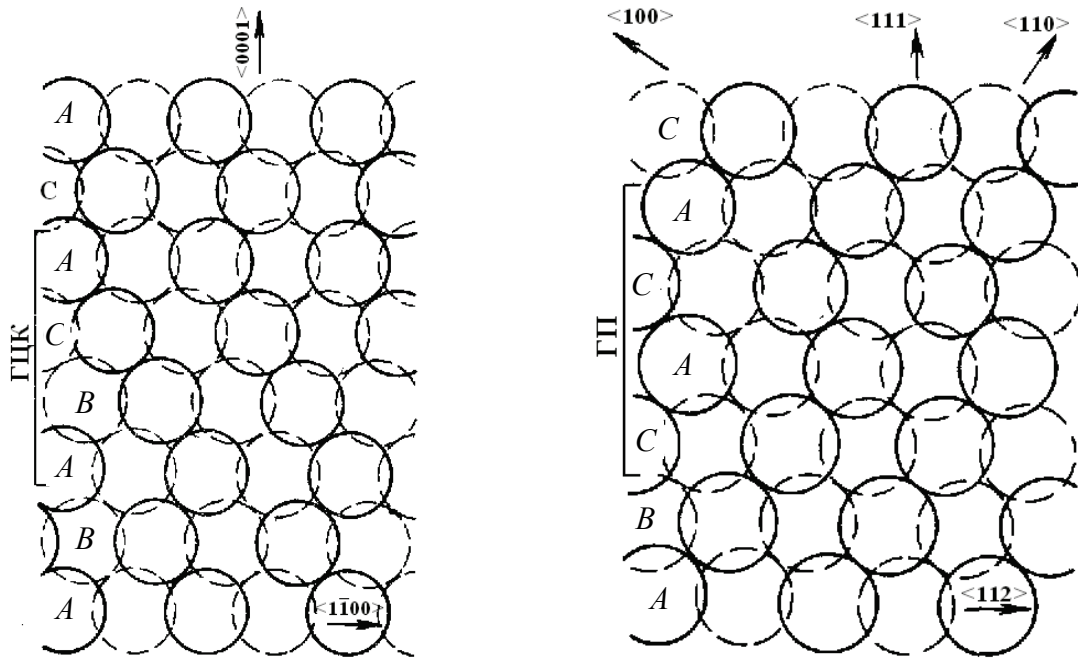


Рис. 75. Дефекты упаковки в ГП и ГЦК решётках в плоскостях, перпендикулярных плоскости плотнейшей упаковки

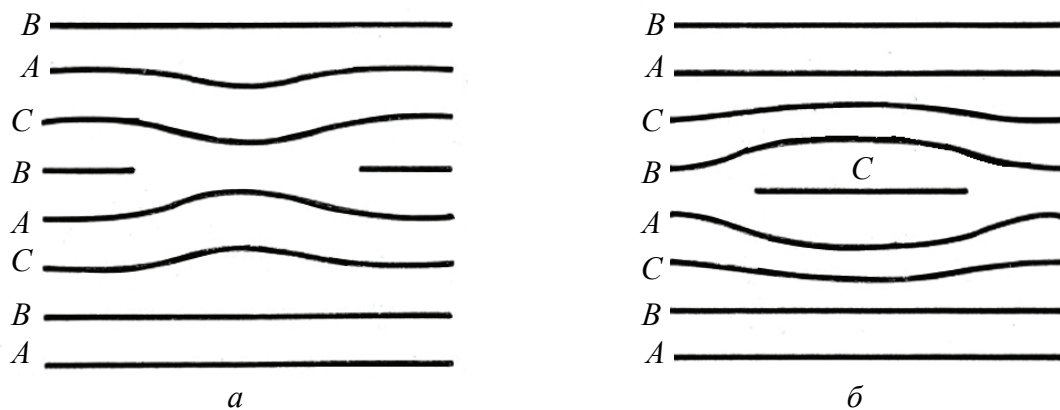


Рис. 76 Дефекты упаковки в ГЦК решётке: *a* – вычитания; *б* – внедрения

Дефект упаковки имеет атомные размеры в одном измерении и значительно большие размеры в двух других измерениях, т. е. является представителем поверхностных (двумерных) дефектов.

Под энергией дефекта упаковки подразумевают избыточную свободную энергию единицы площади дефекта упаковки.

Экспериментально энергию дефекта упаковки можно оценить косвенным путем по энергии двойниковой границы.

Легирование может сильно изменить энергию дефекта упаковки. В растворах на основе меди γ снижается при росте электронной концентрации. Например, у меди $\gamma = 27$ мДж/м², а у бронз, содержащих 2,25; 4,5 и 7 % Al, $\gamma = 20; 5$ и 2 мДж/м² соответственно.

2. Границы кручения и наклона

Границей зерен, а также субзерен называют поверхность, по обе стороны от которой кристаллические решетки различаются пространственной ориентацией. Эта поверхность является двумерным дефектом, имеющим макроскопические размеры в двух измерениях и атомные – в третьем измерении.

Если ось вращения лежит в плоскости границы зерен (субзерен), то такую границу называют границей наклона (рис. 77, а), а если ось вращения перпендикулярна плоскости границы, то мы имеем дело с границей кручения (рис. 77, б). В более общем случае граница смешанного типа состоит из элементов и наклона, и кручения.

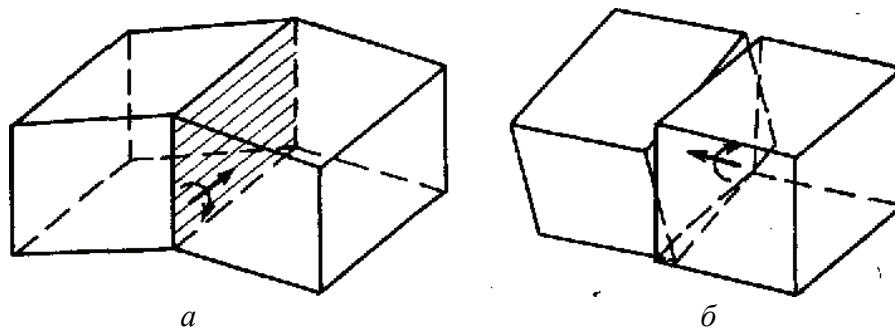


Рис. 77. Границы наклона и кручения:
а – граница наклона; б – граница кручения

Границы с разориентацией соседних зерен менее $\sim 10^\circ$ относят к малоугловым, а с большей разориентацией – к высокоугловым (большеугловым).

Малоугловые границы образованы системами дислокаций (рис. 78, 79). Решетки двух зерен или субзерен упруго сопрягаются за исключением мест, где оканчиваются неполные атомные плоскости,

т. е. где находятся краевые дислокации. Такая граница является стенкой дислокаций одного знака.

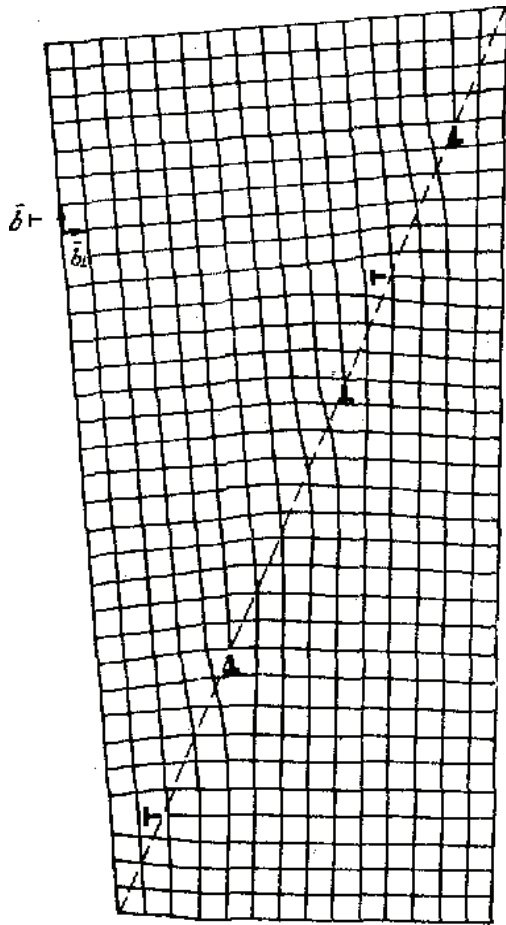


Рис. 78. Граница наклона

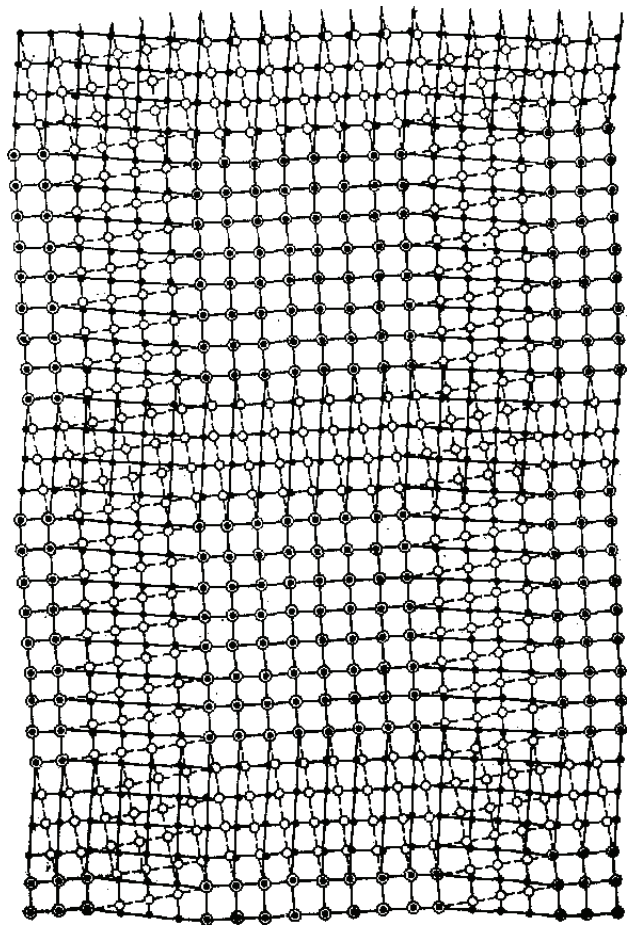


Рис. 79. Граница кручения

Симметричная граница наклона, являющаяся стенкой краевых дислокаций одного знака с параллельными векторами Бюргерса и параллельными плоскостями скольжения, может легко перемещаться при коллективном скольжении всех дислокаций, входящих в стенку. Такую границу называют скользящей.

Угол разориентировки зерен или субзерен θ определяет энергию малоугловой границы:

$$E_{\text{гр}} = E_0 \theta (A - \ln \theta), \quad (21)$$

где E_0 , A – константы (E_0 пропорциональна модулю сдвига и вектору Бюргерса).

Малоугловые границы – стенки дислокаций – возникают при росте кристаллов из расплава, при пластической деформации и при дорекристаллизационном отжиге после холодной деформации.

Поля упругих напряжений отдельных дислокаций в стенке, накладываясь, в значительной степени взаимно уничтожаются (на рис. 80 под областью растяжения от одной дислокации находится область сжатия от другой дислокации). Этим и обеспечивается стабильность стенки.

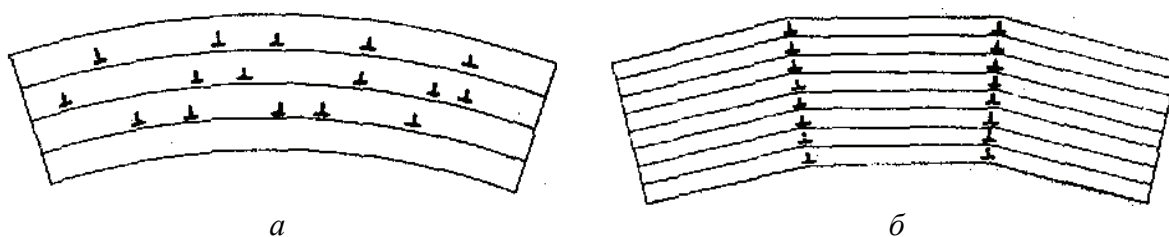


Рис. 80. Схема полигонизации: а – хаотическое расположение краевых дислокаций в изогнутом кристалле; б – вертикальные стенки из дислокаций после полигонизации

Зернограничная дислокация (ЗГД) отделяет ту часть межзеренной границы, где сдвиг уже прошел и восстановилось исходное периодическое строение границы, от той части, где он еще не начался.

На рис. 81 показана краевая ЗГД, являющаяся областью линейного несовершенства на границе зерен вокруг края двух «лишних» плоскостей в верхнем зерне. Вектор Бюргера такой ЗГД лежит в плоскости границы, и ЗГД может скользить в этой плоскости.

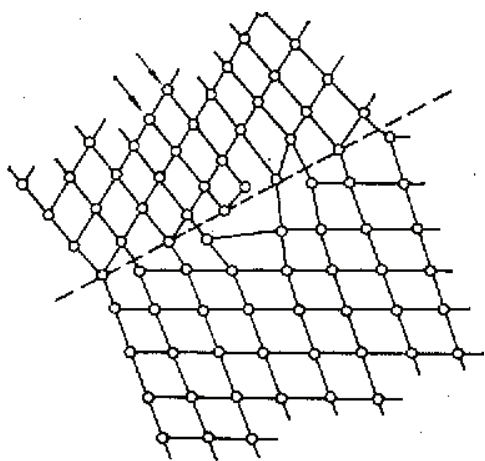


Рис. 81. Модель строения границы зерен со скользящей зернограничной дислокацией (стрелками отмечены две экстраплоскости)

Продвижение одной дислокации по поверхности раздела соседних зерен вызывает их взаимное смещение на величину вектора Бюргера ЗГД.

Кроме полных ЗГД, после продвижения которых восстанавливается исходная структура высокоугловой границы существуют частичные ЗГД, скольжение которых приводит к изменению строения границы.

Зернограничные дислокации подразделяют на два типа: собственные (вторичные) и несобственные (внесенные, избыточные, сторонние) ЗГД.

Уступы, изломы границ и тройные стыки зерен являются наиболее вероятными местами испускания решеточных дислокаций, так как около них, как у барьеров, образуются скопления ЗГД затем объединяющихся под действием приложенной нагрузки в решеточную дислокацию.

3. Подразделение дислокаций на полные и частичные

Ранее геометрия основных типов дислокаций (краевой, винтовой и смешанной) рассматривалась на примере простой кубической решетки, в которой вектор Бюргерса является одним из трансляционных векторов решетки, характеризующих тождественную трансляцию – перенос решетки таким образом, что конечное ее положение нельзя отличить от начального.

В случае примитивной кубической решетки тождественную трансляцию характеризует не только ребро элементарного куба $a\langle 100 \rangle$. Если всю решетку сместить вдоль диагонали грани куба $\langle 110 \rangle$ на ее величину (на $a\sqrt{2}$), то также полностью восстановится расположение атомов по узлам исходной кубической решетки. Тожественная трансляция обеспечивается и при смещении решетки вдоль пространственной диагонали куба $\langle 111 \rangle$ на величину этой диагонали ($a\sqrt{3}$). Схема строения кристалла с краевой дислокацией соответствует вектору Бюргерса $a\langle 100 \rangle$.

Тожественную трансляцию в простой кубической решетке характеризуют не только единичные векторы $a\langle 100 \rangle$, $a\langle 110 \rangle$ и $a\langle 111 \rangle$, но и любые другие векторы, которые в целое число раз $[n]$ больше единичных и имеют с ними одинаковое направление (например, па $\langle 100 \rangle$, где $n = 1, 2, 3, 4, \dots$). В принципе возможны дислокации, у которых вектор Бюргерса в целое число раз больше единичного. Такие дислокации называются дислокациями n -кратной мощности (рис. 82). Ясно, что при мощности вектора Бюргерса больше единичной энергия искажений решетки очень велика, и такая дислокация n -кратной мощности неустойчива; она стремится разделиться на n единичных дислокаций. В случае, когда вместо одной дислокации вблизи краев

двух соседних экстраплоскостей образуются две отдельные дислокации, каждой из них будет соответствовать одна экстраплоскость.

Единичные дислокации с векторами Бюргерса $a <100>$, $a <110>$ и $a <111>$ имеют разную энергию. В кристалле должны преобладать единичные дислокации с минимальной энергией, т. е. с наименьшим вектором Бюргерса.

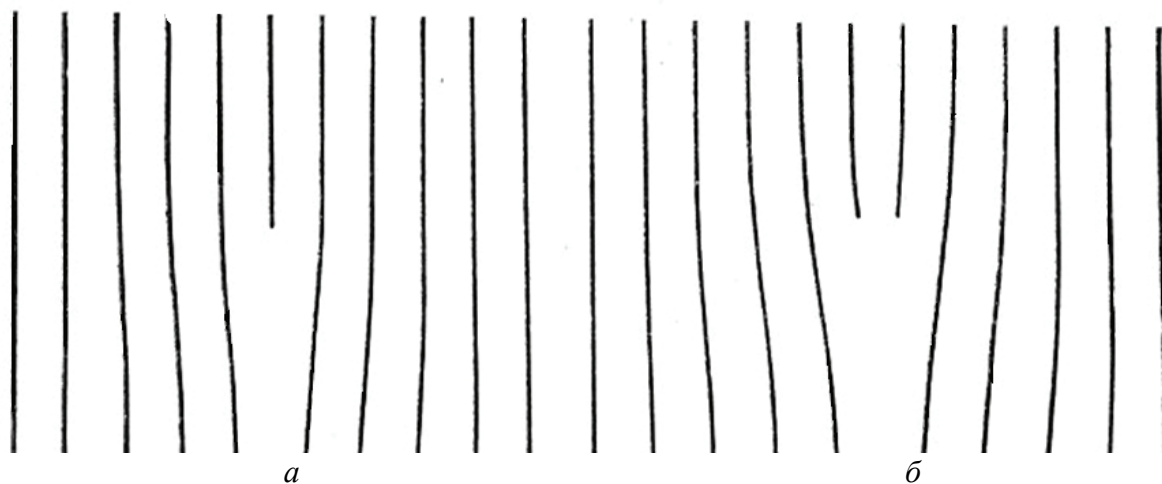


Рис. 82. Краевые дислокации: a – единичной мощности; b – двухкратной мощности

Единичные дислокации и дислокации n -кратной мощности обеспечивают при пробеге через кристалл тождественную трансляцию решетки. Такие дислокации называют полными.

Типичные кристаллические решетки металлов существенно отличаются от простой кубической. В ГЦК, ОЦК и ГП решетках существуют дислокации с такими векторами Бюргерса, что перемещение их не приводит к тождественной трансляции в зоне сдвига, хотя и обеспечивает новое механически стабильное положение атомов. Обычно вектор Бюргерса этих дислокаций и соответственно энергия бывают меньше, чем у единичной дислокации минимальной мощности в данной решетке.

Дислокации с вектором Бюргерса, не являющимся вектором тождественной трансляции, называют неполными или частичными. Каждый тип кристаллической структуры характеризуется своими единичными и частичными дислокациями, которые называют характерными.

Подразделение дислокаций на краевые, винтовые и смешанные, с одной стороны, и полные и частичные, с другой, основано на раз-

ных признаках. В основу подразделения дислокаций на краевые, винтовые и смешанные положена ориентация линии дислокации по отношению к вектору Бюргерса. В основу же подразделения дислокаций на полные и частичные положена величина вектора Бюргерса (в сопоставлении с единичным вектором тождественной трансляции решетки).

4. Энергетический критерий дислокационных реакций

Полная дислокация может расщепляться (диссоциировать) на частичные ($b_1 = b_2 + b_3$); частичные дислокации могут объединяться в полную ($b_1 + b_2 = b_3$). Одни частичные дислокации могут рекомбинировать, давая другие частичные дислокации ($b_1 + b_2 = b_3 + b_4$). Полная и частичная дислокации могут дать частичную дислокацию ($b_1 + b_2 = b_3$). Возможны и другие варианты дислокационных реакций. В приведенной форме записи дислокационных реакций слева от знака равенства стоят векторы Бюргерса исходных дислокаций, вступающих в реакцию, а справа – векторы Бюргерса дислокаций, получающихся в результате реакции. Сумма векторов Бюргерса исходных дислокаций должна быть равна сумме векторов Бюргерса дислокаций, получающихся в результате реакции. Поэтому, если, например, протекает дислокационная реакция $k_1\langle U_1V_1W_1 \rangle = k_2\langle U_2V_2W_2 \rangle + k_3\langle U_3V_3W_3 \rangle$, где $k_1\langle U_1V_1W_1 \rangle$ и т. д. – векторы Бюргерса в кристаллографических символах, то

$$k_1u_1 = k_2u_2 + k_3u_3, \quad k_1v_1 = k_2v_2 + k_3v_3, \quad k_1w_1 = k_2w_2 + k_3w_3.$$

Разнообразные дислокационные реакции подчиняются простому критерию Франка: реакция возможна в том случае, когда сумма квадратов векторов Бюргерса исходных дислокаций больше суммы квадратов векторов Бюргерса дислокаций, являющихся результатом реакции. Критерий Франка основывается на двух положениях: 1) энергия дислокации пропорциональна квадрату вектора Бюргерса; 2) реакция должна приводить к уменьшению энергии системы. Например, дислокация может диссоциировать на две ($b_1 = b_2 + b_3$), если $b_1^2 > b_2^2 + b_3^2$. Если $b_1^2 < b_2^2 + b_3^2$, то реакция диссоциации невозможна. Если же $b_1^2 = b_2^2 + b_3^2$, то возникает неопределенность – критерий Франка не

позволяет предсказать, возможна ли диссоциация. Однако, учитывая рост энтропии при диссоциации, следует признать возможность этой реакции.

Неустойчивость полной дислокации n -кратной мощности (nb) и распад ее на n единичных дислокаций с вектором Бюргера b согласуется с тем, что $n^2b^2 > nb^2$.

Объединение двух дислокаций в одну ($b_1 = b_2 + b_3$) возможно в том случае, когда $b_1^2 + b_2^2 > b_3^2$.

5. Полные дислокации в ГП решетке

Элементарная ячейка ГП решетки представлена на рис. 83. Единичные векторы тождественной трансляции – b_1 , b_2 и b_3 .

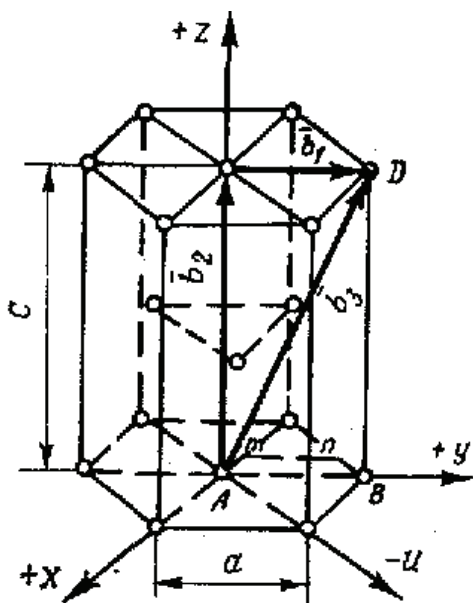


Рис. 83. Элементарная ячейка ГП решётки с векторами Бюргера единичных дислокаций

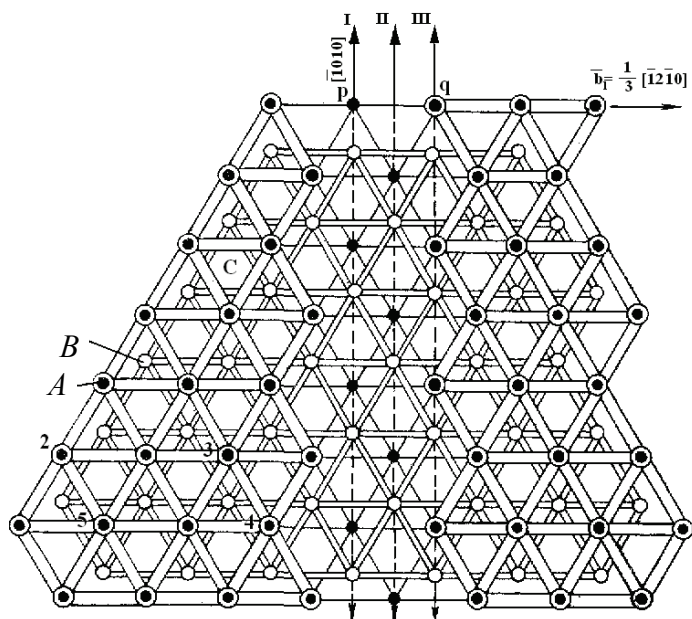


Рис. 84. Единичная краевая дислокация в плоскости (0001)

Плоскостью плотнейшей упаковки является плоскость базиса (0001), а направлением плотнейшей упаковки $\langle 1210 \rangle$. В этом направлении и находится минимальный единичный вектор тождественной трансляции ГП решетки $b_1 = a/3 \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$. Докажем, что его мощность равна a .

Единичным вектором тождественной трансляции является любой отрезок, соединяющий соседние положения атомов A или B в одном слое плотнейшей упаковки, ГП равный периоду решетки a . В частности, единичным вектором тождественной трансляции является отрезок pq на рис. 84.

Если разрезать верхний слой по линии I – I и сдвинуть часть его вправо на величину единичного вектора трансляции так, чтобы атом третьего слоя p оказался в положении q , то в правой части после сдвига восстанавливается исходное чередование слоев. При этом обнажаются ряды атомов в положениях A и B из первого и второго слоя, находящиеся в вертикальных плоскостях I – I и II – II.

Согласно сказанному, вдоль линий I – I и II – II проходит единичная краевая отрицательная дислокация (экстраплоскости находятся в нижней половине кристалла).

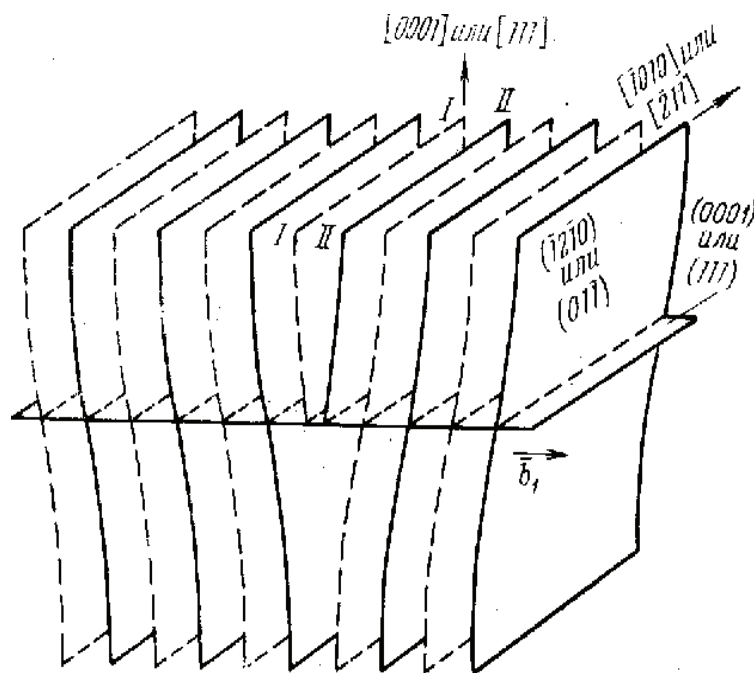


Рис. 85. Единичная краевая дислокация в ГП и ГЦК решётках

Аналогичный результат можно получить, если сделать в кристалле несквозной надрез перпендикулярно плоскости плотнейшей упаковки и вставить в него две неполные плоскости, состоящие из атомов в положениях A и B (рис. 85).

6. Частичные дислокации Шокли в ГП решетке

Перемещение атомов не вдоль единичного вектора тождественной трансляции, а вдоль вектора меньшей мощности приводит к образованию не полной, а частичной дислокации. Схема ее образования приведена на рис. 86.

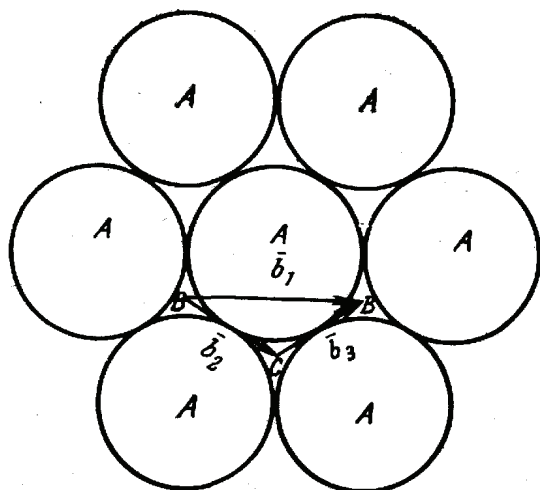


Рис. 86. Схема плотнейшей упаковки атомов и векторы Бюргерса единичной и частичных дислокаций

Расположение атомов в результате таких смещений в средней части характерно не для ГП, а для ГЦК решетки (ABC...). Хорошо видно, что ни в одном из трех слоев в средней части (рис. 86) ни один из атомов не находится над атомом из другого слоя: в нижнем слое атомы занимают положения *A*, в среднем – *B* и в верхнем – *C*.

Граница между областью кристалла с нормальным для ГП. решеткой чередованием плотноупакованных слоев и возникшим дефектом упаковки является дислокацией. Ее вектор Бюргерса $b_2 = 1/3 [0110]$ меньше минимального единичного вектора тождественной

трансляции $b_1 = 1/3[\bar{1}2\bar{1}0]$. Такая дислокация называется частичной дислокацией Шокли.

Две частичные дислокации Шокли, связанные между собой полосой дефекта упаковки, называют растянутой дислокацией (рис. 87, 88).

Энергия растянутой дислокации равна сумме энергий двух частичных дислокаций, энергии их упругого отталкивания и энергии дефекта упаковки.

Энергия, приходящаяся на единицу площади дефекта упаковки, является поверхностным натяжением. Размерность энергии дефекта упаковки Дж/м². Отсюда получаем Н·м/м² = Н/м. Это и есть размерность поверхностного натяжения.

Поверхностное натяжение дефекта упаковки γ стремится стянуть частичные дислокации, преодолевая силу их упругого отталкивания. Поверхностное натяжение дефекта упаковки не зависит от расстояния между частичными дислокациями, а сила их упругого оттал-

квивания уменьшается с увеличением расстояния d между ними. Поэтому при определенном расстоянии d_0 между частичными дислокациями устанавливается равновесие силы их стягивания, вызванной поверхностным натяжением дефекта упаковки, и силы упругого отталкивания частичных дислокаций.

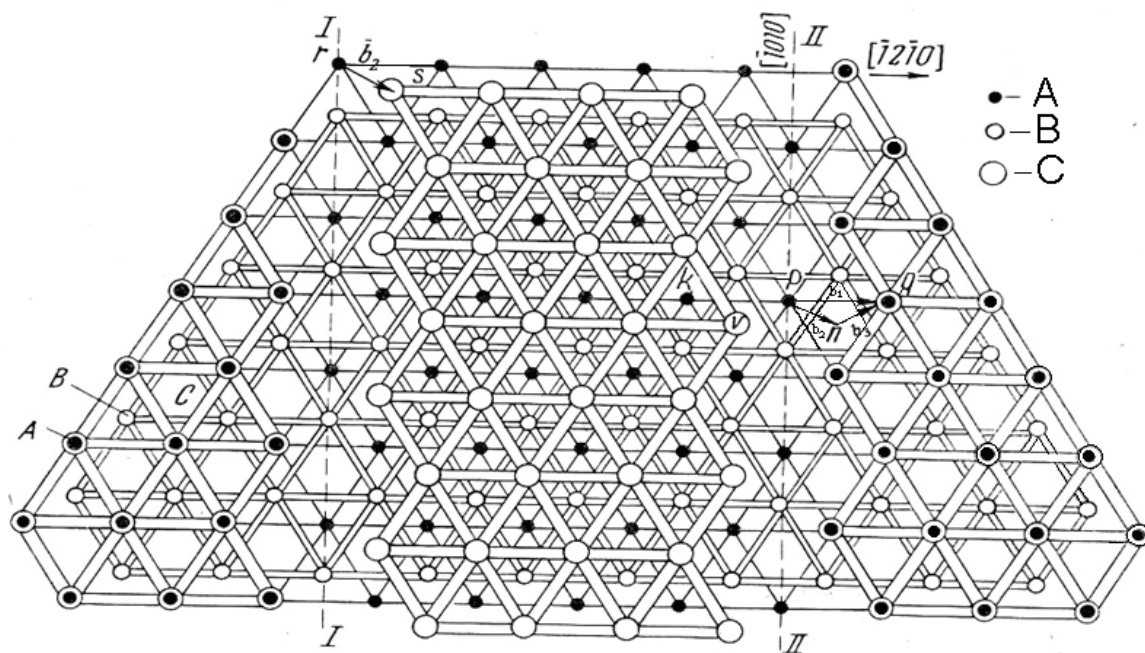


Рис. 87. Растянутая дислокация в плоскости (0001) ГП решётки

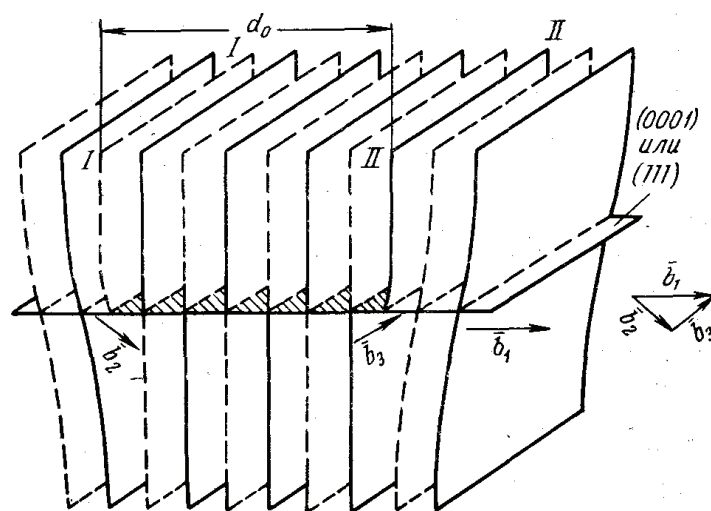


Рис. 88. Краевая дислокация в ГП и ГЦК решётках

Частичная дислокация Шокли является границей дефекта упаковки и находится в плоскости дефекта упаковки. Единичная дисло-

кация может быть любой пространственной кривой, а частичная дислокация Шокли должна быть плоской кривой или прямой. Вектор Бюргерса частичной дислокации Шокли находится в плоскости дефекта упаковки. Частичная дислокация Шокли, как и растянутая дислокация, является скользящей, причем кристаллографическая плоскость скольжения совпадает с плоскостью дефекта упаковки.

7. Частичные дислокации Франка

Если в ГЦК решетке удалить часть плотноупакованного слоя и ликвидировать образовавшуюся «щель», сблизив по нормали соседние плотноупакованные слои, то возникнет дефект упаковки вычитания. Граница его внутри кристалла – линейное несовершенство, называемое частичной дислокацией Франка.

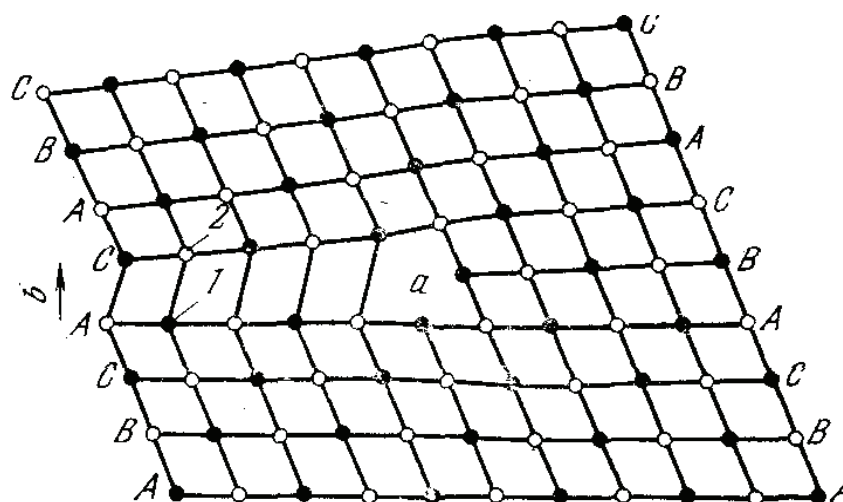


Рис. 89. Дислокация Франка в ГЦК решётке

Схема атомного строения кристалла вблизи частичной дислокации Франка показана на рис. 89. Дислокация Франка расположена перпендикулярно плоскости чертежа, и мы видим только ее выход на эту плоскость. Область несовершенства на рис. 89 тянется вдоль края неполной атомной плоскости. Сблизение атомов, которое было необходимо для ликвидации «щели», происходило на величину вектора $a/3\langle 111 \rangle$, т. е. на $a\sqrt{3}/3$ по нормали к плоскости плотнейшей упаков-

ки. Следовательно, вектор Бюргера дислокации Франка перпендикулярен линии дислокации, т. е. дислокация Франка – краевая.

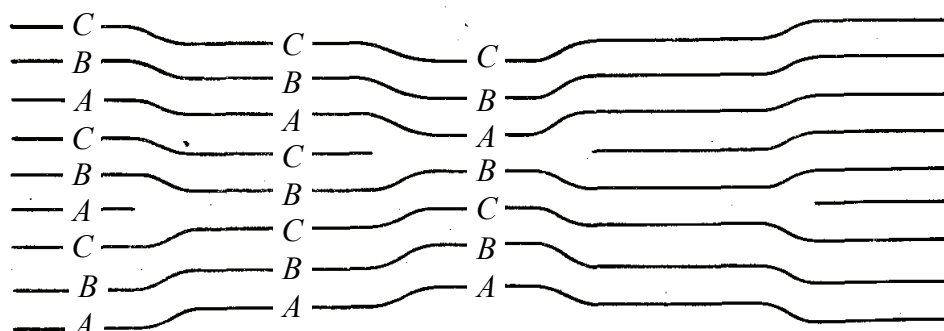


Рис. 90. Дислокационная петля Франка в ГЦК решётке

Плоскую петлю, внутри которой заключен дефект упаковки, называют сидячей дислокационной петлей Франка (рис. 90). Ее вектор Бюргера перпендикулярен плоскости петли. Этим петля Франка схожа с призматической дислокационной петлей, которая, однако, не содержит дефекта упаковки и потому может совершать призматическое скольжение. Дислокационная петля Франка привязана к своему дефекту упаковки и скользить вообще не может.

8. Стандартный тетраэдр Томпсона

Векторы Бюргера характерных дислокаций в ГЦК решетке принято представлять, используя специальное геометрическое построение – так называемый стандартный тетраэдр Томпсона.

Стандартный тетраэдр (рис. 91) состоит из четырех равносторонних треугольников – плоскостей $\{111\}$. Его вершины совпадают с узлами ГЦК решетки, в которых находятся четыре соседних атома (рис. 92). Ребра тетраэдра расположены вдоль кристаллографических направлений $\langle 110 \rangle$. Ребра AB , BC , AC , AD , BD и CD представляют собой все возможные векторы Бюргера единичных дислокаций $a/2\langle 110 \rangle$ в ГЦК решетке, а боковые грани – все плоскости скольжения $\{111\}$.

Буквами α , β , γ и δ на рис. 91 обозначены точки центра тяжести треугольных граней, противоположных вершинам A , B , C , D соответственно. Например, β находится в плоскости ACD , а γ – в плоскости

BA , $A\delta$ и δA , $D\delta$ и δD и т. п. Если, например, вектор Бюргерса $A\delta = a/6 [111]$, то $\delta A = a/6 [\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$ (знак каждого индекса изменен на противоположный $[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$).

С помощью стандартного тетраэдра можно легко записывать разнообразные дислокационные реакции в ГЦК решетке (рис. 93).

Например, реакцию расщепления единичной дислокации на две частичные дислокации Шокли при использовании символики Томпсона записывают в следующей форме:

$$AC = A\delta + \delta C. \quad (22)$$

Эта реакция происходит в плоскости ABC с индексами (111) . В этой же плоскости возможна реакция расщепления единичной дислокации AB на две дислокации Шокли $A\delta$ и δB , т. е. $AB = A\delta + \delta B$ или при другой форме записи

$$a/2[110] = a/6[121] + a/6[211].$$

Контрольные вопросы и задания

1. Покажите векторы тождественной трансляции на рисунке кубической, примитивной ячейки.
2. По какому признаку отличается единичная дислокация от частичной и от n -кратной мощности?
3. По какому критерию проверяют возможность прохождения дислокационной реакции? Ответ обоснуйте.
4. В каком случае возможно объединение дислокаций, используя критерий Франка?
5. Используя критерий Франка, поясните, в каком случае возможна реакция диссоциаций.
6. Используя критерий Франка, поясните неустойчивость дислокации n -кратной мощности (nb) и распад её на n единичных дислокаций.
7. Что называют границей зерен и субзерен, и к каким дефектам они относятся?
8. Какую границу называют границей наклона?
9. Объясните, какую границу называют границей кручения.

10. Какие границы относят к малоугловым, а какие к высокоугловым?
11. Объясните, какая малоугловая граница образуется из краевых дислокаций одного знака.
12. Какую малоугловую границу называют симметричной границей наклона?
13. Почему все субзеренные (блочные) границы являются малоугловыми?
14. Объясните, какую малоугловую границу называют скользящей.
15. Каким образом возникают стенки дислокации?
16. Сравните величину дефекта упаковки одновалентных и многовалентных металлов.
17. Зарисуйте дефекты упаковки внедрения и вычитания в ГП и ГЦК решетках.
18. Запишите символы векторов Бюргерса единичных дислокаций ГЦК решётки.
19. Поясните образование частичных дислокаций в кристалле, используя рис. 86.
20. Как связана ширина растянутых дислокаций с энергией дефекта упаковки и какое влияние легирующие элементы оказывают на ширину дефекта упаковки?
21. Покажите, как образуется частичная дислокация Франка (рис. 89).
22. Поясните, что такое тетраэдр Томпсона. Покажите на нем вектора Бюргерса полных дислокаций, дислокаций Франка и Шокли.
23. Поясните, как называется зона в кристалле, ограничивающая дефект упаковки. Поясните на примере.
24. Почему дефект упаковки вычитания в ГП решетке нельзя получить, ограничившись только изъятием одного плотноупакованного слоя и сближением по нормали двух половинок кристалла?
25. В плоскости (111) монокристалла алюминия в направлении $[01\bar{1}]$ действует касательное напряжение, равное 20 МПа. Чему равна сила, действующая на единицу длины винтовой дислокации $a/2 [\bar{1}10]$ при скольжении её в плоскости (111).
26. Поясните отличие дислокации Франка от призматической дислокации.
27. Поясните отличие дислокаций Франка и Шокли.

Задания для самостоятельной работы

1. Объясните, как образуется полная дислокация в ГЦК решетке и укажите по рисунку ее линию.

2. Объясните, почему дислокацию Ломер-Коттрелла называют барьером.

3. Объясните, что нужно для того, чтобы произошло поперечное скольжение растянутых дислокаций.

4. Поясните образование единичной винтовой дислокации в ГЦК решетке (рис. 94).

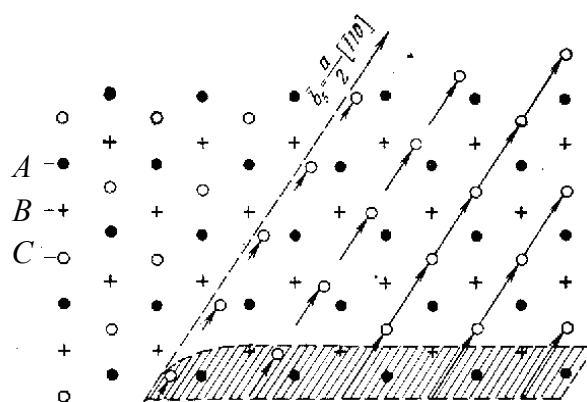


Рис. 94. Единичная винтовая дислокация

5. Запишите символы векторов Бюргерса единичных дислокаций в ОЦК решетке (рис. 95).

6. Объясните, почему дислокация Шокли может быть плоской кривой или прямой.

7. Докажите, почему дислокацию Франка называют «сидячей петлей Франка».

8. Укажите, в каком случае может быть одна частичная дислокация.

9. Проверьте возможность прохождения дислокационной реакции $\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0] = \frac{1}{3}[01\bar{1}0] + \frac{1}{3}[\bar{1}100]$.

10. Проверьте возможность прохождения дислокационной реакции $\frac{a}{6}[1\bar{1}2] + \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] = \frac{a}{6}[011]$.

11. Проверьте возможность прохождения дислокационной реакции $\frac{a}{2}[01\bar{1}] = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6}[11\bar{2}]$.

12. Проверьте возможность прохождения дислокационной реакции $\frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}1] = \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}1] + \frac{a}{3}[\bar{1}\bar{1}1] + \frac{a}{3}[\bar{1}\bar{1}1]$.

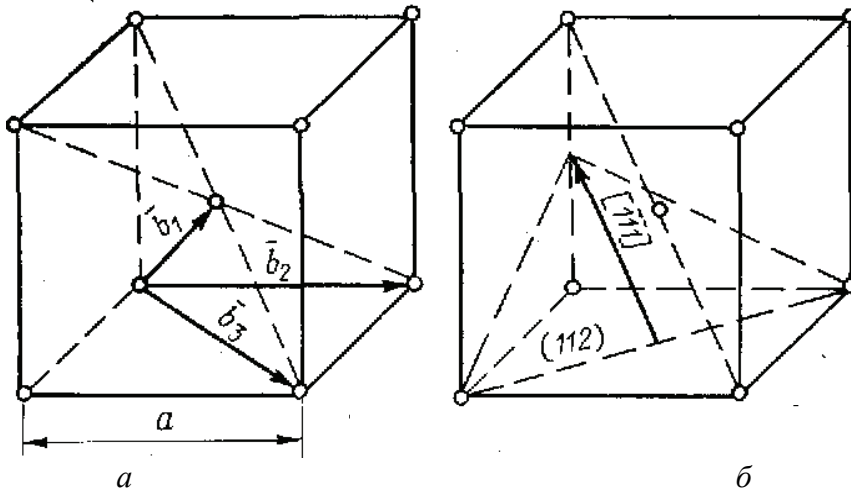


Рис. 95. Элементарные ячейки ОЦК решетки: a – (стрелки) векторы Бюргерса единичный дислокаций; b – (пунктирный треугольник) плоскость скольжения

13. Проверьте возможность прохождения дислокационной реакции $\frac{a}{2}[\bar{1}10] = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6}[\bar{2}11]$.

14. В плоскости $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ монокристалла меди в направлении $[10\bar{1}]$ действует касательное напряжение, равное 30 мПа. Чему равна сила, действующая на единицу длины винтовой дислокации $a/2 [\bar{1}01]$ при скольжении её в плоскости $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$?

(Ответ: $7,58 \cdot 10^{-3}$ Н/м).

15. Напишите в кристаллографических индексах реакцию расщепления дислокации $1/3 [21\bar{0}]$ на частичные дислокации в плоскости (0001) ГП решетки и докажите, что расщепление энергетически выгодно.

16. Объясните, как ведут себя растянутые дислокации в скоплениях около барьера Ломер – Коттрелла.

17. Объясните, почему дислокация Ломер – Коттрелла является эффективным барьером для скользящих дислокаций.

18. Объясните, как ведет себя малоугловая граница с точечными дефектами, в том числе с примесными атомами.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДЕФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ МЕЖДУ СОБОЙ

Цель занятия: рассмотреть пересечение дислокаций, взаимодействие их между собой, с границами зёрен и с точечными дефектами.

1. Пересечение дислокаций

При пересечении дислокаций на них возникают пороги, являющиеся одним из важнейших элементов дислокационной структуры.

На рис. 96 и 97 изображено пересечение краевых дислокаций, результат которого получается разным. Он зависит от взаимной ориентации линий дислокаций и их векторов Бюргера (это же относится и к пересечению других видов дислокаций).

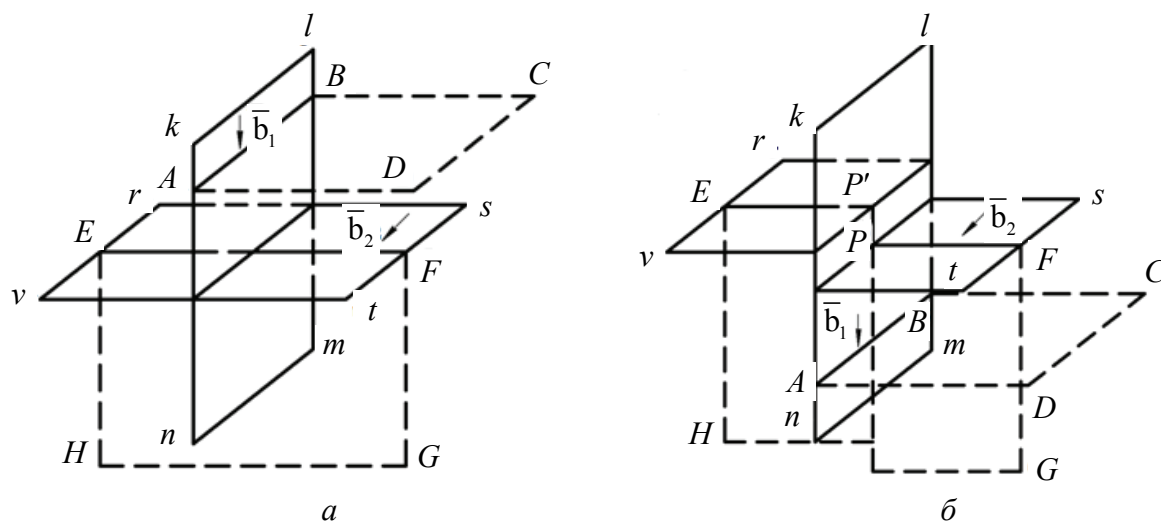


Рис. 96. Пересечение краевых дислокаций AB и EF со взаимно перпендикулярными векторами Бюргера: a – до пересечения; $б$ – после пересечения

Для пересечения любых дислокаций можно сформулировать правило: при пересечении двух дислокаций на каждой из них образу-

ется порог, причем порог одной дислокации равен по величине вектору Бюргера другой дислокации и одинаков с ним по направлению.

Пороги на дислокациях в зависимости от их высоты подразделяют на короткие (элементарные) и длинные (составные). Высота элементарного порога равна вектору Бюргера пересекающей дислокации. Пороги на рис. 96, 97 – элементарные.

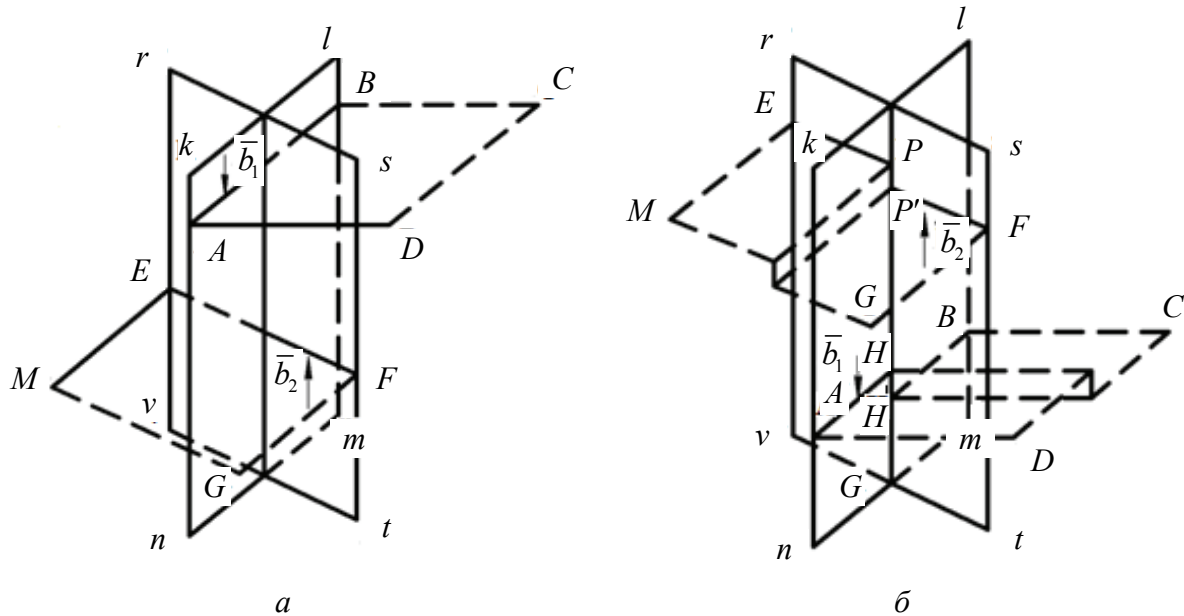


Рис. 97. Пересечение краевых дислокаций AB и EF с параллельными векторами Бюргера: a – до пересечения; b – после пересечения

Если же дислокацию последовательно пересекает ряд дислокаций, скользящих в одной плоскости, то возникает длинный (составной) порог размером в несколько векторов Бюргера.

Порог PP' краевой дислокации на рис. 97, b имеет краевую ориентацию и лежит в плоскости $klmn$, являющейся одной из плоскостей скольжения в кристалле. Поэтому порог PP' может скользить вместе со своей краевой дислокацией EP , которая скользит в плоскости $rstv$.

Значительно многообразнее и важнее поведение порогов на винтовых дислокациях. Эти пороги (рис. 98, b и рис. 99, b) имеют краевую ориентацию. Они способны скользить только вдоль линии винтовой дислокации в направлении вектора Бюргера.

Перед моментом пересечения растянутых дислокаций их головные частичные дислокации из-за упругого взаимодействия прогибаются назад в сторону хвостовых частичных дислокаций (рис. 100, a, b).

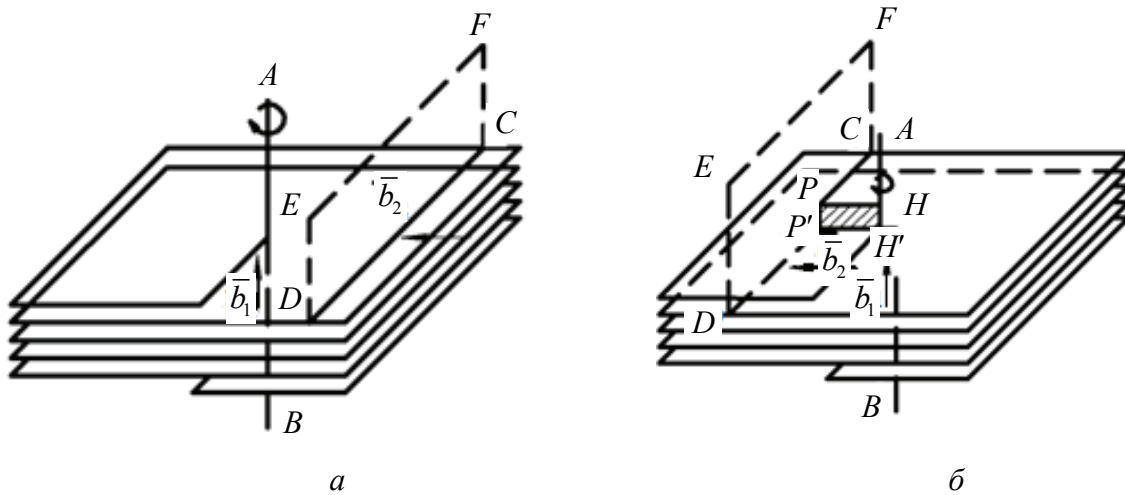


Рис. 98. Пересечение винтовой дислокации AB с краевой CD :
 a – до пересечения; b – после пересечения; HH' и PP' – пороги
с краевой ориентацией на дислокациях AB и CD

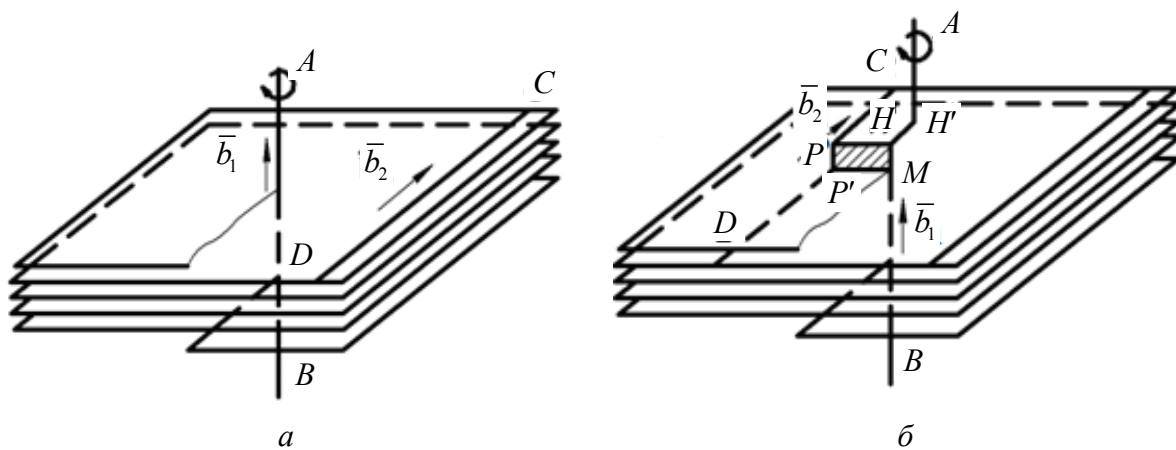


Рис. 99. Пересечение винтовых дислокаций AB и CD :
 a – до пересечения; b – после пересечения

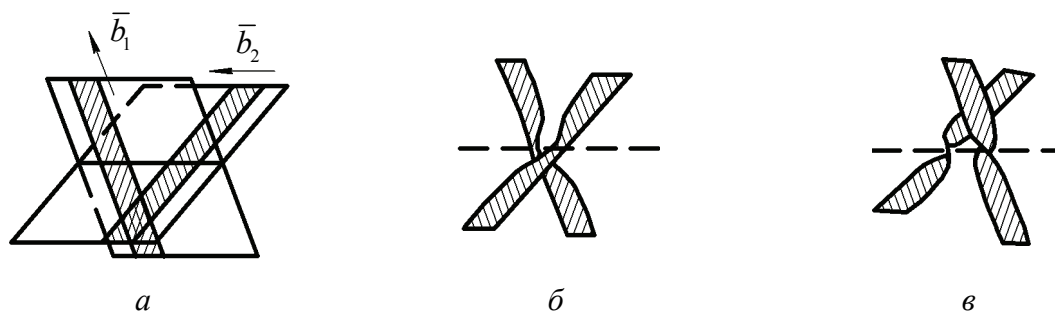


Рис. 100. Пересечение растянутых дислокаций

К моменту пересечения на обеих дислокациях возникают пере-тяжки дефектов упаковки. Сразу же после своего образования пороги являются единичными дислокациями (рис. 100, в). В металлах с низкой энергией дефекта упаковки, т.е. большой шириной растянутых дислокаций, для их пересечения требуются повышенные напряжения.

2. Взаимодействие дислокаций с примесными атомами

Притяжение атомов примесей, вызванное разными причинами, приводит к «осаждению» этих атомов в виде цепочки вдоль края экстраплоскости, которая называется атмосферой Коттрелла.

Область упорядоченного расположения примесных атомов внедрения вокруг линии дислокации называют атмосферой Снука. Их образование уменьшает энергию Гиббса кристалла. В отличие от несравненно более медленного образования атмосферы Коттрелла, связанного с диффузией атомов на значительные расстояния, снуковское упорядочение быстро возникает при перескоках атомов из одних октаэдрических пустот в соседние (рис. 101, б).

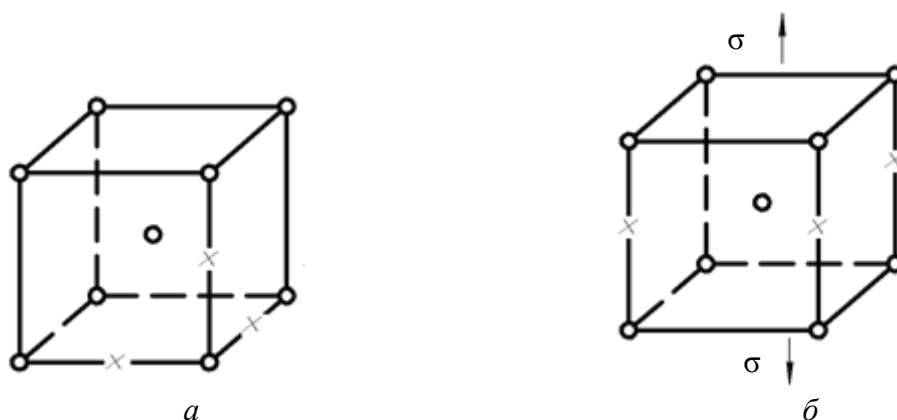


Рис. 101. Расположение атомов внедрения (X) в октаэдрических пустотах ОЦК решетки без напряжений (а) и при растягивающих напряжениях σ (б)

Такой эффект упорядочения в расположении атомов – эффект Снука – должен наблюдаться и в поле напряжений вокруг винтовой и краевой дислокаций.

При достаточно высокой температуре атомы перераспределяются диффузионным путем между дефектом упаковки и решеткой металла аналогично перераспределению элементов между двумя фазами. Поэтому такое перераспределение атомов называют Сузуки химическим взаимодействием растянутой дислокации с растворенными атомами.

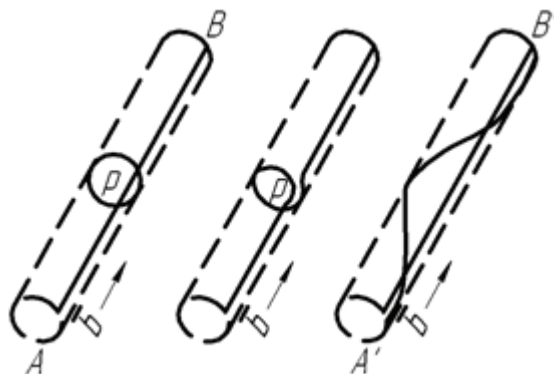


Рис. 102. Схема этапов объединения вакансий P с винтовой дислокацией AB в геликоидальную дислокацию $A'B'$

Притяжением вакансий к винтовой дислокации объясняют образование геликоидальных дислокаций, у которых линия дислокации закручена в правильную спираль (рис.102).

3. Размножение дислокаций при пластической деформации. Источник Франка – Рида

Источником дислокаций является дислокация, концы которой DD' закреплены. На рис. 103, a плоскость чертежа является плоскостью скольжения, содержащей линию дислокации DD'' .

Однородные напряжения τ выгибают линию дислокации в дугу, а линейное натяжение дислокации стремится ее выпрямить. В условиях, когда приложенная сила уравнивает восстанавливающую, радиус дуги r определяется из соотношения $\tau = \alpha Gh/r$. По мере роста касательного напряжения дуга все больше выгибается, и радиус ее уменьшается. Когда дуга становится полуокружностью, ее радиус

$r = l/2$, где l – длина дислокации. Это минимальный радиус, которому соответствует максимальное значение касательного напряжения $T_{кр} = 2\alpha Gb/l$. Принимая $\alpha = 0,5$, получаем

$$\tau_{кр} = Gb/l. \quad (22)$$

Если в формулу (22) подставить значения G , b и $l = 10^{-4}$ см, типичные для отожженных монокристаллов цветных металлов, то $\tau_{кр} \approx 1$ МПа. Эта величина хорошо согласуется с экспериментально определенными значениями критического скалывающего напряжения.

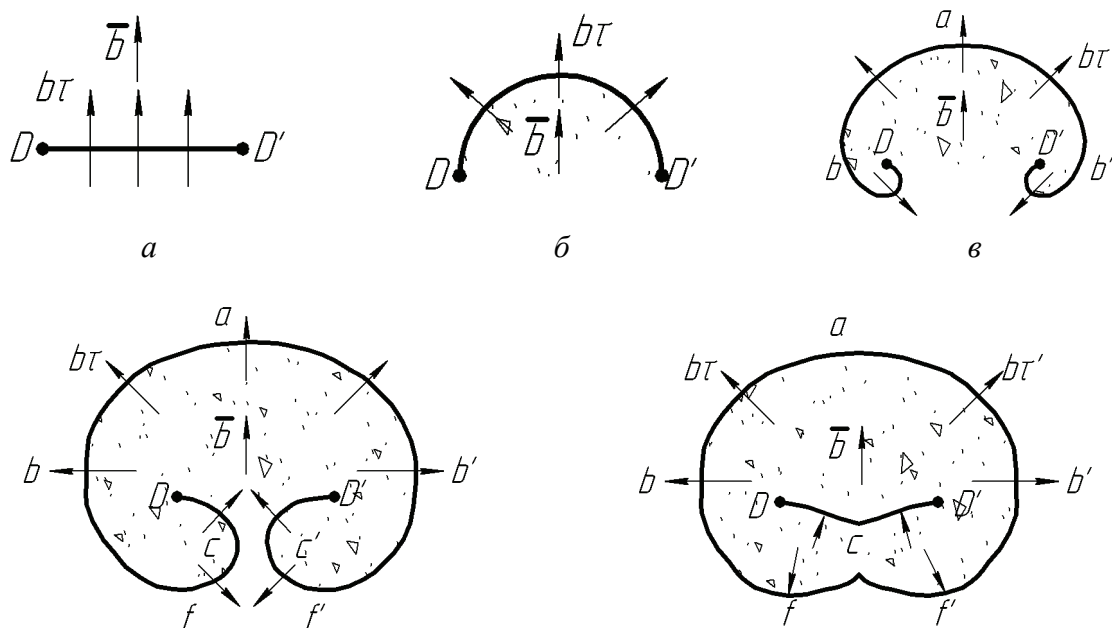


Рис. 103. Этапы образования дислокационной петли плоским источником Франка – Рида

Источник Франка – Рида может образоваться также при двойном поперечном скольжении, а также при множественном поперечном скольжении.

4. Сила Пайерлса

Чтобы дислокация преодолела потенциальный барьер, разделяющий два соседних её положения в энергетических ямах, необходи-

ма определенная сила. Она называется силой Пайерлса (или силой Пайерлса – Набарро). Для силы Пайерлса $f_{\pi} = b\tau_{\pi}$, где b – вектор Бюргерса, а τ_{π} – минимальное касательное напряжение, необходимое для скольжения дислокации в совершенном кристалле (напряжение Пайерлса).

Метод анализа, созданный Пайерлсом и развитый Набарро, при синусоидальном законе для силы взаимодействия соседних сдвигаемых по отношению одна к другой атомных плоскостей дает следующее выражение для напряжения Пайерса:

$$\tau_{\pi} = \frac{2G}{1-\mu} \exp\left(-\frac{2\pi}{1-\mu} \cdot \frac{d}{b}\right), \quad (23)$$

где G – модуль упругости при сдвиге; μ – коэффициент Пуассона; d – расстояние между соседними атомными плоскостями, в которых происходит скольжение; b – межатомное расстояние в направлении скольжения.

5. Торможение дислокаций при их взаимодействии с другими дислокациями и границами зерен

Проходя через лес дислокаций, скользящая дислокация испытывает торможение, обусловленное разными причинами. Если скользящая дислокация была растянута, то перед моментом пересечения возникают перетяжки дефекта упаковки, для чего требуется повышенное напряжение.

Тормозящее действие оказывают пороги на винтовых дислокациях, образующиеся в большом количестве при пересечении дислокаций леса. Протаскивание таких порогов за дислокацией, связанное с затратой энергии на генерирование точечных дефектов, требует повышенного напряжения.

Нерасщепленные пороги на краевой дислокации, имеющие краевую ориентацию, могут скользить вместе с дислокацией, но если они диссоциированы, то необходимо дополнительное напряжение для их стягивания, чтобы стало возможным скольжение. Растянутые пороги должны очень эффективно тормозить дислокации.

На каждую приближающуюся к барьеру дислокацию действуют результирующие напряжения от ранее остановившихся дислокаций.

Поэтому каждая новая дислокация останавливается на более далеком расстоянии от предыдущей (рис. 104, *a*).

Межзеренная граница – эффективный барьер для движущихся дислокаций. Захваченная границей решеточная дислокация, обладая дальнедействующим полем напряжений, упруго отталкивает приближающуюся к ней другую решеточную дислокацию. Каждая следующая дислокация останавливается результирующим полем напряжений от ранее остановленных у границы дислокаций и поэтому сама останавливается на более далеком расстоянии.

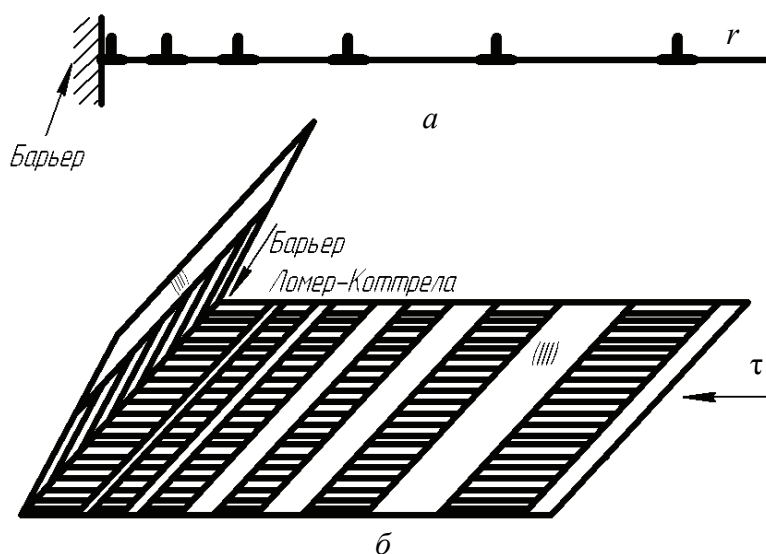


Рис.104. Нагромождение единичных (*a*) и растянутых (*б*) дислокации у барьера Ломер – Коттрелла

Поскольку граница зерен является барьером для скользящих дислокаций, то развитие пластической деформации поликристалла, начинающейся в наиболее благоприятно ориентированных зернах, происходит эстафетным способом.

6. Торможение дислокаций дисперсными частицами

Если расстояние между частицами второй фазы достаточно велико, то дислокация под действием касательного напряжения от приложенной нагрузки выгибается между ними (рис. 105). Напряжение,

необходимое для проталкивания дислокации между частицами, разделенными расстоянием l :

$$\tau_{\text{пр}} = Gb/l. \quad (24)$$

При напряжении $\tau > \tau_{\text{пр}}$ линия дислокации выгибается между частицами, ее участки смыкаются за каждой частицей и, оставив вокруг частиц петли, дислокация продолжает скользить в прежнем направлении.

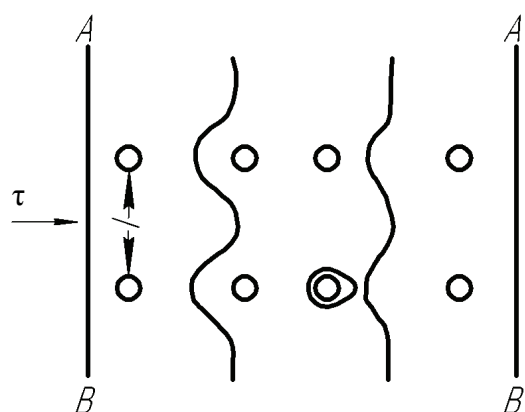


Рис. 105. Стадии выгибания скользящей дислокации между частицами второй фазы с образованием петель

Механизм смыкания двух изогнутых ветвей дислокации вокруг частицы с образованием петли аналогичен механизму смыкания двух спиральных участков с образованием петли, генерируемой источником Франка – Рида.

7. Перерезание дислокациями дисперсных частиц

С уменьшением расстояния между частицами возрастает напряжение, необходимое для проталкивания между ними дислокаций, и может наступить момент, когда более легким путем оказывается прохождение дислокации через тело частиц – перерезание частиц дислокациями (рис. 106).

Дислокациями могут перерезаться небольшие когерентные частицы, например зоны Гинье – Престона. Возможно, что в состаренном сплаве, находящемся в состоянии максимального упрочнения, дислокации не обходят частицы, а только перерезают их. Чем прочнее частицы и больше модуль упругости, тем труднее они перерезаются дислокациями.

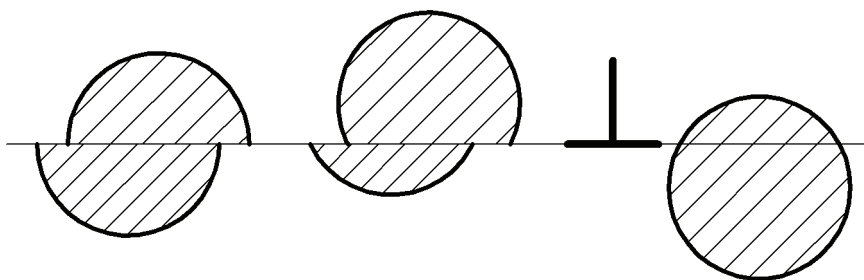


Рис. 106. Перерезание дисперсной частицы скользящей дислокацией

Большие некогерентные частицы, находящиеся на значительном расстоянии одна от другой, обычно обходятся дислокациями с образованием петель. Это свойственно перестаренным и отожженным сплавам.

Контрольные вопросы и задания

1. К какой области краевой дислокации притягиваются атомы элемента, растворенного по способу внедрения?
2. К какой области краевой дислокации притягиваются атомы элемента, растворенного по способу замещения?
3. Почему атомы элемента, растворенного по способу внедрения, притягиваются к области гидростатического растяжения и размещаются в ней?
4. Объясните, что называют атмосферой Коттрелла.
5. Объясните образование атмосферы Коттрелла.
6. Почему винтовая дислокация неспособна притягивать единичные точечные дефекты?
7. Объясните, какой атом может притягиваться к винтовой дислокации.

8. Объясните, чем отличается винтовая дислокация от геликоидальной дислокации.
9. Объясните, как влияет повышение и понижение температуры на атмосферу Коттрелла.
10. Что называют атмосферой Снука?
11. Чем отличаются атмосферы Коттрелла и Снука?
12. Объясните, что называют атмосферой Сузуки.
13. Объясните перераспределение атомов в атмосфере Сузуки.
14. В каком случае вакансии и межузельные атомы могут образовывать атмосферу вокруг линии дислокации типа коттрелловской?
15. Какие факторы влияют на торможение дислокаций?
16. Что называют силой Пайерлса?
17. Напишите и поясните формулу силы Пайерлса.

Задания для самостоятельной работы

1. Объясните образование винтовой дислокации на фронте кристаллизации.
2. Объясните, что служит подложкой для зарождения кристалла.
3. Объясните, какие дислокации называют структурными или дислокациями несоответствия.
4. Объясните образование дислокаций в полностью затвердевшем металле в непосредственной близости от фронта кристаллизации и вдали от него.
5. Объясните возникновение дислокации при концентрации напряжений в отдельных участках кристаллов (около включений, трещин, границ двойников и т. д.).
6. Объясните, что называют дислокационной сеткой.
7. Объясните механизм размножения дислокаций в процессе пластической деформации.
8. Объясните, что является зоной при размножении дислокаций при пластической деформации.
9. Объясните, как ведет себя замкнутая дислокационная петля.
10. Объясните, почему при напряжении, действующем в одном направлении, сначала спиральные участки дислокации, а затем замкнутая петля распространяются во все стороны, в том числе и в направлении прямо противоположном приложенному напряжению.

11. Объясните источник размножения дислокаций – R дислокация, возникающих в результате захлопывания вакансионных дисков.
12. Объясните образование источника Франка – Рида при двойном поперечном скольжении.
13. Объясните тормозящее действие, которое оказывают пороги на винтовых дислокациях.
14. Взаимодействие скользящей дислокации и порогов.
15. Объясните образование барьера Ломер – Коттрелла.
16. Объясните, чем обусловлено барьерное действие межзеренной границы.
17. Объясните механизм смыкания двух изогнутых ветвей дислокации вокруг частиц с образованием петли.
18. Объясните механизм Орована.
19. Объясните механизм локального поперечного скольжения.
20. Объясните торможение дислокаций атмосферами Коттрелла.
21. Объясните торможение дислокаций атмосферами Сузуки.
22. Объясните торможение скользящих дислокаций атмосферами Снука.
23. Объясните торможение дислокаций в твердом растворе с дальним порядком.

СЛОВАРЬ ТЕРМИНОВ

Кристаллография

Анизотропность – различие физических свойств кристаллов (теплопроводность, твердость, упругость и другие) по параллельным и непараллельным направлениям кристаллической решетки. Свойства одинаковы по параллельным направлениям, но неодинаковы по непараллельным направлениям. В противоположность анизотропным изотропные тела имеют одинаковые свойства во всех направлениях.

Базис ячейки – совокупность координат узлов, входящих в элементарную ячейку.

Вещество кристаллическое – вещество, у которого наблюдается закономерное расположение частиц (атомов, ионов, молекул, гидроксильных групп), из которых они состоят, в пространстве.

Гониометр – угломерный прибор для измерения углов между гранями.

Грань – поверхность многогранников, ограниченная более или менее совершенными плоскостями.

Группа симметрии

– пространственная – совокупность всех возможных элементов симметрии кристаллической структуры;

– точечная – см. класс симметрии.

Группа трансляционная – совокупность основных трансляций элементарной ячейки.

Дисимметрия – нарушение, расстройство симметрии.

Дискретность – кристалл не имеет одинаковые физические свойства там, где есть частица, там, где нет частицы или есть частица другого сорта.

Долгота – полярное расстояние, отсчитываемое по экватору от меридиана, принятого за нулевой.

Единичное направление – это единственное, не повторяющееся в кристаллическом многограннике направление.

Индекс Миллера – (hkl) три числа, с помощью которых можно определить любую кристаллическую плоскость или грань кристалла.

Категория – группа деления кристаллов по симметрии и по числу единичных направлений:

- высшая – относятся кристаллы, имеющие несколько осей симметрии порядка выше второго, единичных направлений в них нет;
- низшая – кристаллы, у которых нет осей симметрии выше второго порядка и есть несколько единичных направлений (это кристаллы наименее симметричные, с ярко выраженной анизотропией свойств);
- средняя – кристаллы, у которых имеется главная ось порядка выше второго (и она одна) и есть одно единичное направление, совпадающее с главной осью.

Класс симметрии – полное сочетание элементов симметрии кристаллического многогранника.

Комплекс

– прямой кристаллический – набор прямых (ребер) и плоскостей (граней), перенесенных самим себе в какую-то точку, принятую за нулевую;

– обратный кристаллический – образуется при замене граней кристалла нормалью к ним, а рёбра – перпендикулярными к ним плоскостями.

Коэффициент компактности – отношение объёма шаров к общему рассматриваемому объёму.

Кратность правильной системы точек – число точек в элементарной ячейке, симметрично-эквивалентных друг другу.

Кристалл – твёрдое тело, в котором частицы расположены закономерно в виде узлов пространственных решёток.

Кристаллография – наука, изучающая процессы образования, форму, структуру и физико-химические свойства кристаллов.

Монокристалл – отдельный, целостный кристалл.

Направление симметрично-равное – такое направление, которое можно получить с помощью элементов симметрии и которому есть равное в кристаллическом многограннике.

Объём элементарный – объём, построенный на трех элементарных трансляциях.

Однородность – свойство кристалла, когда он во всем своем объёме обнаруживает одинаковые свойства.

Ось

– зоны – общее направление поясов, образующихся при пересечении параллельных граней кристалла;

– симметрии – воображаемая прямая линия, при повороте вокруг которой на некоторый угол, одинаковые части фигуры самосовмещаются;

– симметрии винтовая – совокупность оси симметрии и параллельного ей переноса, действующих совместно (правая – поворот (по движению трансляции), происходит по часовой стрелке; левая – поворот против часовой стрелки);

– симметрии главная – простая ось симметрии, или инверсионная ось, совпадающая с единичным направлением;

– симметрии инверсионная – прямая линия, при повороте вокруг которой на определенный угол с последующим (или предварительным) отражением повернутых точек в точке, лежащей на этой линии, как в центре инверсии, фигура совмещается сама с собой;

– симметрии поворотная – прямая линия, при повороте вокруг которой на некоторый угол фигура совмещается сама с собой.

Параллелепипед повторяемости – элементарный объем, повторяющийся в пространстве воспроизводится весь образ кристаллической решетки.

Параметры решетки – три основные некопланарные трансляции

Параметр ряда – минимальное расстояние между одинаковыми точками в ряду.

Период трансляции – бесконечно повторяющийся параллельный перенос на некоторое определенное расстояние.

Плоскость

– симметрии – плоскость, которая делит фигуру на две зеркально-равные части, расположенные относительно друг друга как предмет и его зеркальное отражение;

– скользящего отражения – совокупность совместно-действующих плоскости симметрии и трансляции вдоль неё на определённое расстояние.

Поликристалл – агрегаты многих мелких кристаллов.

Порядок винтовой оси – число самосовмещений фигуры при повороте ее вокруг винтовой оси n (n – число самосовмещений фигуры при ее повороте вокруг оси на 360°).

Радиус атомный (ионный) – расстояние от центра ядра данного элемента до того места, к которому может приблизиться этот атом, то есть до другого атома.

Решетка Бравэ – группа трансляций, характеризующих расположение материальных частиц в пространстве:

– базоцентрированная – кроме узлов в вершинах ячейки с трансляциями ABC , имеются узлы в центрах двух противоположных граней. У решетки A – центрированная грань, перпендикулярная оси x , у решетки B – оси y , у решетки C – оси z ;

– гранецентрированная – кроме узлов в вершинах ячейки, то есть имеются узлы в центре каждой грани трансляции: $\frac{a+b}{2}$, $\frac{b+c}{2}$, $\frac{a+c}{2}$;

– объемно-центрированная – кроме узлов в вершинах ячейки, которые получаются с помощью трансляций, имеется узел в центре ячейки, который связан с началом координат трансляции $\frac{a+b+c}{2}$;

– примитивная – узлы имеются только по вершинам ячейки, если выбрать один из узлов за начало координат, то все остальные можно получить повторяя его в пространстве, периодически с помощью трансляций a , b , c .

Решетка кристаллическая – геометрический образ расположения частиц в пространстве, если материальную частицу представить в виде точки.

Сетка Вульфа – стереографическая проекция всей системы меридианов и параллелей, нанесенных на поверхность сферы.

Символ

– направления – координаты любой точки, находящиеся на данном направлении, выходящем из начала координат, приведенные к отношению целых чисел, записанных в квадратных скобках $[uvw]$;

– плоскости – обратные отрезки, отсекаемые плоскостью на кристаллографических осях, приведенные к отношению целых чисел, записанные в круглых скобках (hkl) ;

– точки – ее координаты, выражаемые в простых дробях, записанные в двойных квадратных скобках.

Симметрия – закономерная повторяемость равных частей

Сингония (в переводе с греч. «сходноугольность») – кристалл, принадлежащий к классам одной сингонии, свойственна совокупность характерных углов.

Система точек правильная – совокупность симметрично-эквивалентных позиций (точек), связанных между собой симметричными преобразованиями пространственной группы.

Структура кристалла – конкретное расположение материальных частиц, из которых состоит вещество в пространстве.

Точка глазная – точка зрения, размещенная в одном из полюсов сферы.

Узел – точка пересечения трансляций, слагающих пространственную решетку.

Угол поворота элементарный – наименьший угол, при повороте на который и последующий (или предшествующий) повороту трансляции, фигура совмещается сама с собой.

Фигура

– конечная – имеет конечное число элементов симметрии, которые пересекаются в одной точке;

– симметричная – фигура, которая может совмещаться сама с собой в результате симметричных преобразований.

Форма вещества стехеометрическая – количество атомов данного сорта, приходящееся на элементарную ячейку.

Центр инверсии – точка внутри фигуры, характеризующаяся тем, что любая проведенная через нее прямая по обе стороны от нее и на равных расстояниях встречает одинаковые части фигуры.

Число координатное – число ближайших однотипных соседних атомов (ионов) в кристаллической структуре.

Широта – полярное расстояние, отсчитывается от северного полюса по направлению к южному полюсу.

Элемент симметрии – вспомогательные геометрические образы (точки, прямые, плоскости), с помощью которых обнаруживается симметрия фигур.

Ячейка

– элементарная – элементарный объем, построенный на трех элементарных трансляциях;

– примитивная – ячейка, внутри которой нет узлов; узлы расположены только в вершинах.

Дефекты кристаллического строения

Атмосфера

– Котрелла – атомы примеси, осевшие вдоль кромки экстраплоскости.

– Снука – осаждение атомов примеси в областях гидростатического растяжения.

– Сузуки – концентрирование примесных атомов в дефектах упаковки.

Атом

– межузельный – точечный дефект, образованный при внедрении атома в междоузлие;

– примесный – атом примеси, растворенной по способу замещения или внедрения.

Вакансии – дефекты, образованные при удалении атома из его нормального положения.

Вектор Бюргерса – мера искаженности кристаллической решетки (перпендикулярен краевой дислокации; параллелен для винтовой дислокации; равен 0 для точечных дефектов).

Граница

– антифазная – область в сверхструктурах, у которой в соседстве оказались атомы одного сорта;

– высокоугловая – имеет угол разориентации более десяти градусов;

– зерен – поверхность, отделяющая кристаллические решетки, различающиеся пространственной ориентацией;

– зоны сдвига – линия дислокации, отделяющая часть плоскости скольжения, где сдвиг уже прошел, от той части, где он еще не начался;

– межзеренная – разориентация не более десяти градусов;

– специальная – имеет пониженную энергию и разориентировку соседних зерен;

– субзеренная – разориентация меньше одного градуса.

Двойникование – симметричная переориентация областей кристаллической решетки, относительно какой-то плоскости.

Дефект

– линейный – составляет несколько атомных диаметров в двух направлениях, образуя растянутую линию;

– поверхностный – дефект, образованный на поверхности кристалла;

– точечный – составляет несколько атомных диаметров во всех трех измерениях;

– упаковки – прослойка с нарушенным чередованием плотноупакованных слоев (бывает вычитания и внедрения).

Дислокационная стенка – расположение одноименных дислокаций, находящихся в одной плоскости скольжения, одна под другой.

Дислокация – линейное несовершенство, образующее внутри кристалла границу зоны сдвига:

- вершинная – образованная в результате встречи двух частичных дислокаций в пересекающихся плоскостях;
- винтовая – граница зоны сдвига в кристалле, расположенная параллельно касательному напряжению;
- геликоидальная – имеет винтовую линию, вокруг которой атомы закручены по винтовой лестнице (вектор Бюргерса расположен под разными углами к частям дислокации в разных плоскостях);
- двойникообразующая – скользящая частичная дислокация, представляющая собой область ступенчатого перехода двойниковой границы с одной плоскости на соседнюю;
- единичная – дислокация, вектор Бюргерса которой равен вектору тождественной трансляции;
- Ломер – Коттрелла – дислокация, образующаяся скольжением в пересекающихся плоскостях в ГЦК решетке при встречном движении растянутых дислокаций;
- краевая – граница зоны сдвига в кристалле вокруг края экстраплоскости, расположенная перпендикулярно касательному напряжению;
- n -кратной мощности – дислокация, вектор Бюргерса которой в целое число раз больше единичного;
- призматическая – замкнутая петля, ветви которой являются частями краевой дислокации;
- растянутая – две частичные дислокации, соединенные дефектом упаковки;
- сверхструктурная – пара дислокаций, соединенных плоской антифазной границей;
- смешанная – линии дислокации, находящиеся в одной плоскости, расположены под углом к касательному напряжению;
- частичная – дислокация с вектором Бюргерса меньше вектора тождественной трансляции.

Зернограничные уступы (ступеньки) – вид линейных дефектов в структуре границ зерен, органически связанных с зернограничными дислокациями.

Комплексы точечных дефектов – объединение точечных дефектов между собой в пары, кластеры и т. д.

Критерий Франка – дислокационная реакция возможна, если сумма квадратов в Б исходных дислокаций больше суммы квадратов в Б дислокаций, являющихся результатом реакции.

Механизм Орована – смыкание изогнутых ветвей дислокации вокруг частицы с образованием петли.

Миграция точечных дефектов – энергия перехода из одного положения дефекта в другое.

Напряжение критически скальвающее – минимальное напряжение, при котором дислокация вводится в кристалл.

Натяжение – энергия дислокации, приходящаяся на единицу ее длины ($T = aGb$).

Перегиб на дислокации – расположение дислокации в соседних канавках потенциального рельефа.

Переползание – диффузионное перемещение дислокации по нормали к линии дислокации.

Перетяжка дефекта упаковки – единичная дислокация, образованная за счет смятия дефектов упаковки при слиянии двух частичных дислокаций.

Плоскость двойникования – плоскость зеркального отражения решетки внутри двойниковой прослойки.

Плотность дислокаций – суммарная длина всех линий дислокаций в единице объема.

Порог – часть линии дислокации, связывающая ее части в разных плоскостях.

Протягивание порогов – оставление за ними цепочки вакансий или межузельных атомов.

Сила Пайерлса – сила, необходимая для преодоления дислокацией потенциального барьера.

Скольжение – бездиффузионное перемещение дислокаций.

– двойное поперечное (винтовая дислокация) – перемещение ее в другую плоскость, после которой она скользит параллельно первоначальной;

– локальное поперечное – винтовые сегменты, которые, имея разный знак, выгибаются навстречу друг другу и аннигилируют, оставляя позади частицы призматическую петлю и образуя двойную ступеньку на продолжающей скользить дислокации;

– поперечное – перемещение винтовой дислокации в другую плоскость.

Стандартный тетраэдр Томпсона – геометрическое построение на векторах Бюргерса в ГЦК решётке, по которому можно описать дислокационную реакцию (по развертке с указанием индексов вектора).

Стоки – места миграции и исчезновения вакансий.

Субзерно – рост соседних зерен из одного центра.

Тождественная трансляция – перенос решетки таким образом, что конечное ее положение нельзя отличить от начального.

Условие скольжения дислокации – нахождение линии дислокации и вектора сдвига в одной плоскости.

Френкелевская пара – точечный дефект, состоящий из межузельного атома и вакансии.

Ширина растянутой дислокации – расстояние между двумя частичными дислокациями.

Экстраплоскость – неполная атомная плоскость, существующая в одной части кристалла и не имеющая продолжения в другой его части.

Энергия дефекта упаковки – избыток энергии электронного газа.

Энергия растянутых дислокаций – сумма энергий поверхностного натяжения дефекта упаковки и энергии частичных дислокаций.

Ядро дислокации – область дислокации, внутри которой не соблюдаются законы линейной теории упругости.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Доливо-Добровольский, В. В. Кристаллохимия : учеб. пособие для вузов / В. В. Доливо-Добровольский. – СПб. : Санкт-Петербургский горный институт, 1999. – 118 с.

2. Егоров-Тисменко, Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия : учеб. пособие для вузов / Ю. К. Егоров-Тисменко. – М. : КДУ, 2005. – 582 с.

3. Князев, Г. Б. Введение в кристаллографию : учеб. пособие для вузов / Г. Б. Князев. – Томск. гос. ун-т, 1999. – 219 с.

4. Розин, К. М. Практическая кристаллография : учеб. пособие для вузов / К. М. Розин. – М. : МИСиС, 2005. – 488 с.

5. Новиков, И. И. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки : учеб. пособие для вузов / И. И. Новиков, К. М. Розин. – М. : Металлургия, 1990. – 335 с.

6. Новиков, И. И. Дефекты кристаллического строения металлов: учеб. пособие для вузов / И. И. Новиков. – М. : Металлургия, 1983. – 232 с.

7. Шаскольская, М. П. Кристаллография: учебное пособие для вузов / М. П. Шаскольская. – М. : Высш. шк., 1984. – 375с.

8. Попов, Р. М. Кристаллография : учеб. пособие для вузов / Р. М. Попов, И. И. Шафрановский. – М. : Высш шк., 1972. – 352 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
<i>Практическое занятие 1. Понятие о кристаллическом строении. Кристаллографическая символика.....</i>	4
<i>Практическое занятие 2. Кристаллографические проекции...</i>	22
<i>Практическое занятие 3. Элементы симметрии конечных фигур. Симметрия структуры кристаллов.....</i>	37
<i>Практическое занятие 4. Точечные дефекты.....</i>	68
<i>Практическое занятие 5. Основные виды дислокаций и их движение.....</i>	76
<i>Практическое занятие 6. Количественные характеристики дислокаций.....</i>	88
<i>Практическое занятие 7. Поверхностные дефекты. Дислокации в типичных металлических структурах.....</i>	104
<i>Практическое занятие 8. Взаимодействие дефектов кристаллического строения между собой</i>	123
СЛОВАРЬ ТЕРМИНОВ.....	136
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	135

Учебное издание

**Аникина Валентина Ильинична
Сапарова Анастасия Сергеевна**

**ОСНОВЫ
КРИСТАЛЛОГРАФИИ
И ДЕФЕКТЫ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО
СТРОЕНИЯ**

Практикум

Редактор Л. Х. Бочкарева
Компьютерная верстка Н. Г. Дербеновой

Подписано в печать 27.09.2011. Печать плоская. Формат 60x84/16
Бумага офсетная. Усл. печ. л. 8,6. Тираж 70 экз. Заказ № 3411

Редакционно-издательский отдел
Библиотечно-издательского комплекса
Сибирского федерального университета
660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79
Тел./ факс (391) 244-82-31, e-mail: rio@lan.kras.ru

Отпечатано полиграфическим центром
Библиотечно-издательского комплекса
Сибирского федерального университета
660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 82а