Элементарная ячейка. Параметры решетки

- Молярный объем кристаллов

$$V_m = \frac{M}{\rho}, \qquad (6.1)$$

где M – молярная масса вещества; ρ – плотность кристалла.

- Объем элементарной ячейки:

кубическая сингония - $V = a^3$; (6.2)

гексагональная сингония - $V = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$. (6.3)

Где a и c – параметры решетки.

Теоретическое значение параметра c для гексагональной сингонии определяется параметром решетки a соотношением $\tilde{n} = \sqrt{\frac{8}{3}}a$, тогда объем элементарной ячейки будет равен $V = \sqrt{2}a^3$.

- Число элементарных ячеек в одном моле кристалла

$$Z_m = \frac{V_m}{V}, \text{ или } Z_m = \frac{kN_A}{n}, \qquad (6.4)$$

где k – число одинаковых атомов в химической формуле соединения, N_A – число Авогадро, n – число одинаковых атомов, приходящихся на элементарную ячейку.

- Число элементарных ячеек в единице объема кристалла

$$Z = \frac{Z_m}{V_m}, \text{ или } Z = \rho\frac{k}{n}\frac{N_A}{M}. \qquad (6.5)$$

- Параметр кубической решетки:

$$a = \sqrt[3]{\frac{nM}{k\rho N_A}}. \qquad (6.6)$$

- Расстояние между соседними атомами в кубической решетке:

гранецентрированной - $d = \frac{a}{\sqrt{2}}$; (6.7)

объемно центрированной - $d = \frac{\sqrt{3}}{2}a$. (6.8)

- Узлы, направления и плоскости обозначаются в кристаллах специальными символами – индексами:
- Узлы в кристаллах обозначаются индексами в двойных квадратных скобках: $[\![mnp]\!]$ если узел положительный и $[\![\overline{m}\overline{n}\overline{p}]\!]$ если узел отрицательный.

Направления записываются в одинарных квадратных скобках $[mnp]$. Они задают не одну линию в кристалле, а семейство параллельных линий.

- Изменение всех индексов на обратные $[\overline{m}\overline{n}\overline{p}]$, задает то же самое направление в кристалле.
- Период идентичности l вдоль прямой заданной индексами $[mnp]$, в кубической решетке

$$l = a\sqrt{m^2 + n^2 + p^2}\,, \tag{6.9}$$

здесь a – параметр решетки.

- Угол между направлениями $[m_1 n_1 p_1]$ и $[m_2 n_2 p_2]$ в кубической решетке выражается формулой

$$\cos\varphi = \frac{m_1 m_2 + n_1 n_2 + p_1 p_2}{\sqrt{m_1^2 + n_1^2 + p_1^2} \cdot \sqrt{m_2^2 + n_2^2 + p_2^2}}\,. \tag{6.10}$$

- Плоскости записываются индексами (индексами Миллера) в круглых скобках (hkl). Изменение всех индексов на обратные $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ отвечает тому же семейству плоскостей.
- Индексы Миллера соответствуют минимальным расстояниям (отрезкам), отсекаемым плоскостями на осях координат. Для нахождения отрезков следует взять обратные величины от индексов Миллера $\left(\frac{1}{h};\frac{1}{k};\frac{1}{l}\right)$ и привести их наименьшему целому, кратному каждому из полученных чисел. Это и будут наименьшие отрезки, отсекаемые плоскостью (hkl) на осях координат.
- Угол между плоскостями (hkl) и (hkl) находится по формуле

$$\cos\varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}\,. \tag{6.11}$$

- Угол между прямой $[mnp]$ и плоскостью (hkl)

$$\cos\varphi = \frac{hm + kn + lp}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \cdot \sqrt{m^2 + n^2 + p^2}}\,. \tag{6.12}$$

Общие методические указания

Элементарная ячейка. Параметры кристаллической решетки

- Решая задачи в данном разделе необходимо помнить о том, что все кристаллы обладают анизотропией.
- Кристаллическая решетка это трехмерная периодическая структура.
- Кристаллическая решетка любого кристалла может быть отнесена к одной из семи кристаллографических систем – сингоний.
- Любой кристалл построен из элементарных ячеек, которые характеризуется набором параметров a, b, c, α, β, γ. Первые три параметра ребра элементарной ячейки, оставшиеся три углы между ними.
- Транслируя элементарные ячейки, мы, тем самым, создаем весь кристалл.
- Узлы, направления и плоскости определяются кристаллографическими символами – индексами.
- Следует помнить, что индексы узлов принято заключать в двойные квадратные скобки, направления в одинарные квадратные скобки, а плоскости в круглые скобках.

Примеры решения задач в разделе «Элементарная ячейка. Параметры кристаллической решетки»

Пример 6.1. Определить параметр решетки и плотность кристалла кальция, если известно ближайшее расстояние между атомами кристалла 0,393 нм. Решетка кристалла имеет гранецентрированный тип кубической сингонии.

Дано:
d = 0,393 нм

Определить:
1. a - ?
2. ρ - ?

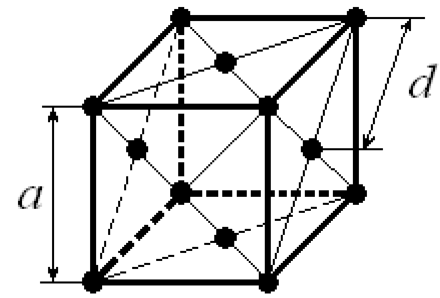

Рис. 1

Решение

1. Расстояние d между соседними атомами в гранецентрированной решетке равно

$$d = \frac{a}{\sqrt{2}}. \tag{1}$$

Это соотношение следует из геометрических соотношений, см. рис.1.

2. Найдем параметр решетки из соотношения (1)

$$à = \sqrt{2}d. \tag{2}$$

3. Проведем вычисления $a = \sqrt{2} \cdot 0{,}393 = 0{,}556$ нм.

4. Объем элементарной гранецентрированной ячейки можно определить по известному параметру a.

$$V = a^3. \tag{3}$$

5. С другой стороны объем элементарной ячейки легко выразить через молярный объем V_m и число ячеек в одном моле Z_m

$$V = \frac{V_m}{Z_m}. \tag{4}$$

6. Приравняем правые части уравнений (3) и (4)

$$a^3 = \frac{V_m}{Z_m}. \tag{5}$$

7. Выразим молярный объем через молярную массу M и плотность кальция ρ

$$V_m = \frac{M}{\rho}. \tag{6}$$

8. Число ячеек найдем из числа атомов N_A в одном моле и числа атомов приходящихся на одну ячейку n

$$Z_m = \frac{N_A}{\rho}. \tag{7}$$

9. Подставив в формулу (5) выражения (6) и (7) для V_m и Z_m, получим

$$a^3 = \frac{nM}{\rho N_A}. \tag{8}$$

10. Из (8) найдем искомую плотность

$$\rho = \frac{nM}{a^3 N_A}. \qquad (9)$$

11. Выражение (9) является решением в общем виде.
12. Проведем расчет плотности, учитывая, что n=4, M=39·10^{-3} кг/(моль)

$$\rho = \frac{4\cdot(39\cdot10^{-3})}{(0{,}556)^3\cdot10^{-27}\cdot6{,}02\cdot10^{23}} = 1{,}55\cdot10^3 \text{ кг/м}^3.$$

Ответ: 1. a=0,556 нм; 2. ρ=1,55·10^3 кг/м^3.

<u>Пример 6.2.</u> Написать направления прямой, проходящей через узлы $[[011]]$ и $[[001]]$ простой кубической решетки.

Дано:	
Первый узел $[[011]]$	
Второй узел $[[001]]$	
Определить:	
Направление прямой $[mnp]$	

Решение

1. Выпишем индексы каждого узла:

   для первого – m_1=0; n_1=1; p_1=1;

   для второго - m_2=0; n_2=0; p_2=1.
2. Напишем уравнение прямой проходящей через две точки

$$\frac{x-m_1}{m_2-m_1} = \frac{y-n_1}{n_2-n_1} = \frac{z-p_1}{p_2-p_1}. \qquad (1)$$

3. Знаменатели уравнения (1) пропорциональны направляющим косинусам прямой. Поскольку данные целочисленные они и будут являться индексами направления.
4. Подставим в уравнение (1) значения индексов узлов и найдем индексы направления

$$m = m_2 - m_1 = 0 - 0 = 0$$
$$n = n_2 - n_1 = 1 - 0 = 1$$
$$p = p_2 - p_1 = 1 - 1 = 0$$

5. Запишем в общепринятой форме индексы искомого направления - $[010]$.

Ответ: Индексы направления: $[010]$.