

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ПЕРМСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра «Металловедение, термическая и лазерная обработка металлов»

**Определение параметров кристаллического строения
металлов**

Методическое пособие к практическим занятиям
по дисциплине «Материаловедение»

Пермь 2015

Составители: Панов Д.О., Закирова М.Г.

Рецензент: к.т.н., доцент Силина О.В.

Методическое пособие предназначено для выполнения практических занятий по дисциплине «Материаловедение».

Методическое пособие рассмотрено и одобрено на заседании кафедры «Металловедение, термическая и лазерная обработка металлов» «22» октября 2014 года протокол № 7.

Методическое пособие согласовано с методической комиссией механико-технологического факультета «27» октября 2014 года протокол № 2.

Пермский национальный исследовательский
политехнический университет, 2015

Цели работы:

- ознакомиться с параметрами кристаллического строения металлов;
- научиться определять количество атомов, приходящихся на элементарную ячейку, координационные числа, периоды кристаллической решетки, коэффициент компактности.

Краткие теоретические сведения

Кристаллическая решетка – пространственное периодическое расположение атомов (ионов, молекул) в кристаллическом веществе.

Узлы кристаллической решетки – точки кристаллической решетки, в которых расположены атомы или ионы

Элементарная ячейка – минимальный объем кристаллической решетки, дающий представление об атомной структуре металла.

Грань – это плоскость многогранника. Для куба, каждая грань представляет собой квадрат.

Ребро – это место стыка граней. У куба их 12 шт.

Параметр элементарной ячейки – это расстояние между атомами по ребру элементарной ячейки. Параметры решетки измеряется в ангстремах ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$). Параметры кубических решеток характеризуются длиной ребра куба и обозначаются буквой *a*.

Координационное число – это количество ближайших соседей данного атома, или число атомов расположенных на равном и наиболее близком расстоянии от выбранного (взятого) за начало отсчета.

Плотность упаковки - число атомов, приходящееся на одну элементарную ячейку.

Все существующие в природе твердые тела можно разделить на кристаллические и аморфные.

Кристаллические тела на атомном уровне обладают кристаллической решеткой, то есть дальним порядком (на большие расстояния) в расположении атомов, ионов или молекул.

У аморфных тел кристаллическая решетка отсутствует, однако наблюдается ближний порядок, то есть упорядоченное расположение атомов, ионов или молекул на расстояниях, соизмеримых с размерами атома.

Элементом, характеризующим кристаллическую решетку, является *элементарная ячейка*.

Среди металлов наиболее часто встречаются следующие типы кристаллических решеток: примитивная кубическая – *P*-кубическая (рисунок 1 а); *объемно-центрированная кубическая* – ОЦК (рисунок 1, б), *ранецентрированная кубическая* - ГЦК (рисунок 1, в), *гексагональная – гексагональная компактная* – ГК (рисунок 1, г).

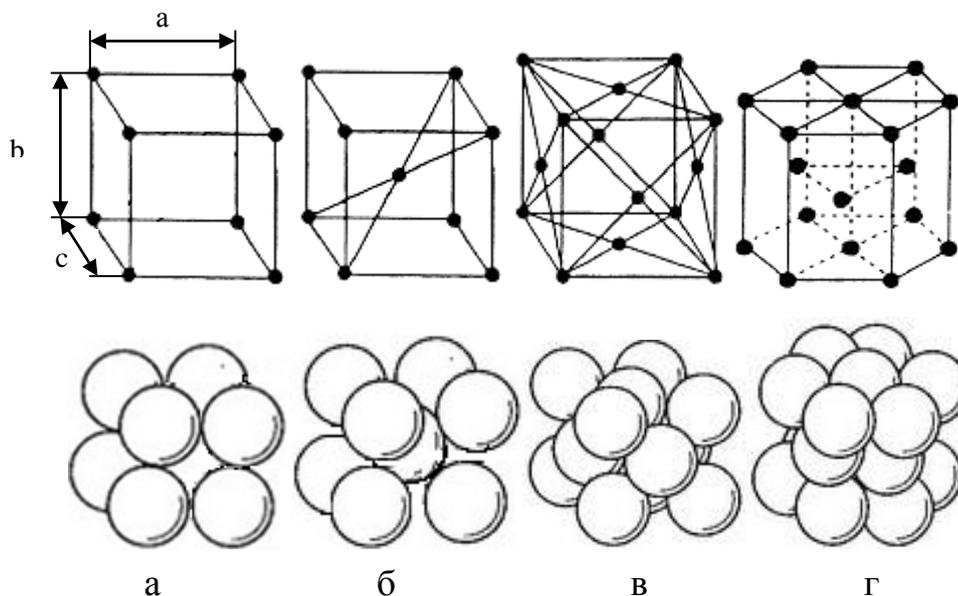


Рисунок 1. Типы кристаллических решеток:

а – *P*-кубическая; б – ОЦК; в – ГЦК; г – ГК

Главной характеристикой кристаллического строения является *параметр кристаллической решетки* (рисунок 1, а). Параметрами *P*-кубической решетки являются расстояния *a*, *b* и *c*. Следует отметить, что для кубических решеток эти параметры равны: $a=b=c$. Способы изображения *P*-кубической кристаллической решетки приведены на рисунке 2. В узлах изображены центры масс (рисунок 2, а) или реальные размеры атомов (рисунок 2, б). Для других кристаллических решеток параметр рассчитывается с учетом теоремы Пифагора для прямоугольных треугольников через металлические радиусы исходя из объемной конфигурации кристаллической решетки (рисунок 1).

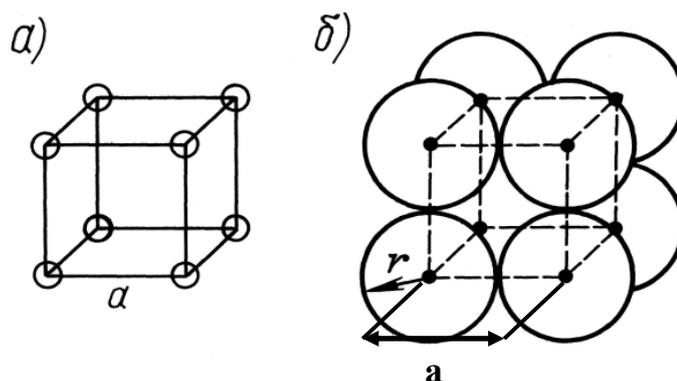


Рисунок 2. Р-кубическая кристаллическая решетка. Графическое изображение параметра **a**

Не все атомы, которые мы видим на рисунке 1, полностью принадлежат одной элементарной ячейке. Характеристика, отражающая это – *плотность упаковки*. Так каждый атом, расположенный в вершине куба, принадлежит данной элементарной ячейке только на $1/8$ или другими словами один такой атом одновременно принадлежит восьми ячейкам (рисунок 3). Если атом располагается в центре грани, то он только на $1/2$ принадлежит данной элементарной ячейке, то есть делится между двумя соседними ячейками. Атомы, расположенные в центре, полностью принадлежат данной ячейке.

Незаполненные атомами или ионами объемы в кристаллической решетке называются – *поры*. Поры присутствуют в любой кристаллической решетке, т.к. нет такого способа укладки сферических атомов, который позволит занять атомами весь объем без остатка.

Плотность укладки атомов характеризует *координационное число* и *коэффициент компактности*. На рисунке 3 приведена часть кристаллической решетки, состоящей из 8 элементарных ячеек. Определить координационное число можно, если относительно одного из узловых атомов (обозначенного «0») посчитать количество атомов непосредственно соприкасающихся с выбранным узловым атомом (атомы черного цвета) (рисунок 3).

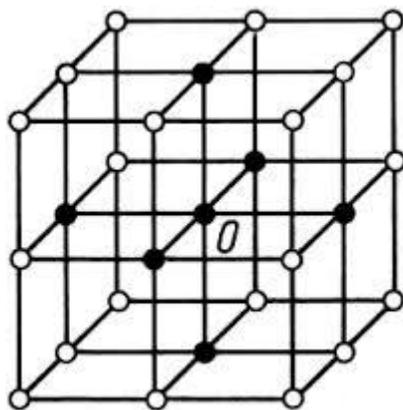


Рисунок 3. Графическое изображение определения координационного числа (КЧ) для атома, выбранного за начало отсчета и обозначенного «0», черным цветом обозначены ближайшие атомы

Из рисунка 3 видно, что для атома, принятого за «0», число ближайших соседей, находящихся на расстоянии одинаковом и наиболее близком, равно 6 (КЧ=6).

Коэффициент компактности η показывает долю объема занятую атомами в данной кристаллической решетке. Его величину можно вычислить по формуле 1:

$$\left. \begin{aligned} \eta &= V_{\text{ат}}/V_{\text{яч}} \\ V_{\text{ат}} &= V_0 \cdot N, \end{aligned} \right\} (1)$$

где $V_{\text{ат}}$ - объем занимаемый атомами в ячейке, V_0 - объем одного атома; N - количество атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку; $V_{\text{яч.}}$ - объем одной элементарной ячейки.

Для определения $V_{\text{яч.}}$ рассмотрим Р-кубическую кристаллическую решетку (рисунок 4). Элементарная ячейка такой решетки - куб с ребром равным периоду ячейки a . Объем элементарной ячейки при этом равен объему куба:

$$V_{\text{яч}} = a^3 (2)$$

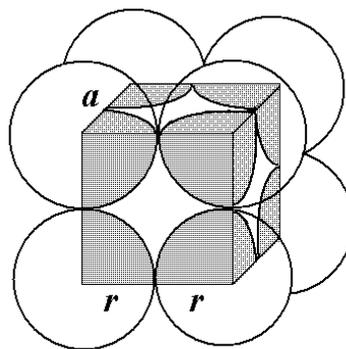


Рисунок 4. Р-кубическая элементарная ячейка. Серым цветом отмечены части атомов приходящиеся на данную элементарную ячейку.

Необходимо помнить, что элементарную ячейку Р-кубической решетки формируют 8 атомов (см. рисунок 2, а), но они принадлежат ячейке не целиком, а 1/8 частью каждый (см. рисунок 4). Поэтому число атомов, входящих в одну ячейку Р-кубической решетки равно:

$$N = 8 \cdot \frac{1}{8} = 1 \quad (3)$$

Объем одного атома V_0 равен объему шара с радиусом r :

$$V_0 = \frac{4}{3} \pi r^3 \quad (4)$$

Объем, занимаемый атомами равен произведению числа атомов N , приходящихся на одну ячейку, и объема одного атома V_0 :

$$V_{ат} = NV_0 \quad (5)$$

Далее необходимо подставить полученные результаты в формулу для вычисления *коэффициента компактности* η :

$$\eta = V_{ат}/V_{яч}$$

Порядок выполнения практической работы:

Практическое задание выполняется по вариантам (табл. 1). Номер варианта соответствует порядковому номеру в журнале группы.

1. Получить задание.
2. Изобразить графически кристаллическую решетку в соответствии с вариантом.
3. Вычислить количество атомов (N), приходящихся на элементарную ячейку кристаллической решетки металла (плотность упаковки).
4. Определить координационное число (K) кристаллической решетки металла.
5. Определить параметр (a) кристаллической решетки металла.
6. Вычислить коэффициент компактности (η) кристаллической решетки металла.

Таблица 1. Варианты заданий для практического занятия

№	Металл	Символ	Кристаллическая решетка	Металлический радиус, Å
1.	Литий	Li	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,57
2.	Никель	Ni	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,25
3.	γ - Железо	γ -Fe	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,26
4.	Калий	K	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	2,38
5.	Медь	Cu	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,28
6.	β -титан	β -Ti	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,45
7.	Алюминий	Al	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,43
8.	α -железо	α -Fe	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,28
9.	Рубидий	Rb	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,49

№	Металл	Символ	Кристаллическая решетка	Металлический радиус, Å
10.	Ниобий	Nb	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,47
11.	α -Скандий	α -Sc	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,60
12.	Платина	Pt	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,38
13.	β -цирконий	β -Zr	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,61
14.	Вольфрам	W	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,41
15.	Золото	Au	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,44
16.	Кобальт	γ -Co	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,26
17.	Свинец	Pb	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,75
18.	Молибден	Mo	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,40
19.	Стронций	Sr	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	2,15
20.	Хром	Cr	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,28
21.	Никель	Ni	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,25
22.	Серебро	Ag	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,44
23.	Ванадий	V	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,36
24.	Платина	Pt	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,38
25.	β -цирконий	β -Zr	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,61
26.	Натрий	Na	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,92
27.	Барий	Ba	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	2,24
28.	Иридий	Ir	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,35
29.	β -лантан	β -La	Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	1,87
30.	Тантал	Ta	Объемноцентрированная кубическая (ОЦК)	1,47

Контрольные вопросы

1. Что такое кристаллическая решетка?
2. Что такое элементарная ячейка?
3. Что такое поры кристаллической решетки?
4. Типы кристаллических решеток?
5. Определение плотности упаковки и координационного числа?
6. В каких единицах измерения определяют параметр кристаллической решетки?
7. Методика вычисления количества атомов приходящихся на одну элементарную ячейку.
8. Что такое коэффициент компактности?

Список используемой литературы

1. Материаловедение и технология конструкционных материалов: учебник для вузов / В. Б. Арзамасов [и др.]; Под ред. В. Б. Арзамасова, А. А. Черепашкина. - 2-е изд., стер. - Москва: Академия, 2003-2009. - 447 с.
2. Материаловедение: учебник для вузов / Ю. М. Лахтин, В. П. Леонтьева. - 5-е изд., стер. - Москва: Альянс, 2009, 2011 - 528 с.
3. Материаловедение : учебник для вузов / Ю. П. Солнцев, Е. И. Пряхин ; Под ред. Ю. П. Солнцева .— 3-е изд., перераб. и доп .— Санкт-Петербург : Химиздат, 2004, 2007 .— 735 с.