

**Міністерство освіти і науки України
Національний університет «Запорізька політехніка»**

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ТА ЗАВДАННЯ

до виконання лабораторних
і контрольних робіт
із дисципліни «Кристалографія
і мінералогія»

**для студентів спеціальності 136 «Металургія»
денної та заочної форми навчання**

2024

Методичні вказівки та завдання до виконання лабораторних і контрольних робіт із дисципліни «Кристалографія і мінералогія» для студентів спеціальності 136 «Металургія» денної та заочної форми навчання /Укл.: Л.П. Степанова, Ю.І. Кононенко, О.В. Лисиця. – Запоріжжя: НУ «Запорізька політехніка», 2024. – 74 с.

Укладачі: Л.П. Степанова, доцент, к.т.н.
Ю.І. Кононенко, ст. викладач
О.В. Лисиця, ст. викладач.

Рецензент: В.Ю. Ольшанецький, професор, д.т.н.

Відповідальний

за випуск: В.Ю. Ольшанецький, професор, д.т.н.

Рекомендовано до видання НМК
інженерно-фізичного факультету
Протокол № 5
від «23» 2024 р.

Затверджено на засіданні
кафедри «Фізичне матеріалознавство»
Протокол № 5
від «18» грудня 2023 р.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
ПРОГРАМА з дисципліни «Кристалографія і мінералогія»	6
Лабораторна робота №1 ОСОБЛИВОСТІ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ, МОРФОЛОГІЇ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ МІНЕРАЛІВ.....	7
Лабораторна робота №2 КРИСТАЛОГРАФІЧНІ ПРОЕКЦІЇ	20
Лабораторна робота №3 СИМЕТРІЯ КРИСТАЛІВ	25
Лабораторна робота № 4 ВИЗНАЧЕННЯ КРИСТАЛОГРАФІЧНИХ СИМВОЛІВ ВУЗЛІВ, НАПРЯМКІВ ТА ПЛОЩИН В КРИСТАЛІЧНИХ ГРАТКАХ	36
Лабораторна робота №5 ТИПИ ЕЛЕМЕНТАРНИХ КОМІРОК БРАВЕ ТА ЇХ КІЛЬКІСНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ	43
Лабораторна робота № 6 ВИЗНАЧЕННЯ НАЙБІЛЬШ ЩІЛЬНОПАКОВАНИХ НАПРЯМКІВ І ПЛОЩИН В ОСНОВНИХ ГРАТКАХ МЕТАЛІВ. ВИДИ ЩІЛЬНОПАКОВАНИХ СТРУКТУР	50
ЛІТЕРАТУРА	56
Додаток А ОСНОВНІ ФОРМУЛИ КРИСТАЛОГРАФІЇ	57
Додаток Б ПРИКЛАДИ МІНЕРАЛІВ.....	58

Додаток В	
КРИСТАЛІЧНІ СТРУКТУРИ ЕЛЕМЕНТІВ	64
Додаток Г	
МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ КОНТРОЛЬНОЇ РОБОТИ.....	66
Додаток Д	
ВАРІАНТИ ЗАВДАННЯ ДО ПУНКТУ 5 ЛАБОРАТОРНОЇ РОБОТИ №3	71

ВСТУП

Кристалографія – наука, що вивчає утворення кристалів, їх зовнішню та внутрішню будову, дефекти кристалічної структури реальних кристалів та їх вплив на властивості матеріалів. Вона тісно пов'язана з мінералогією: історично кристалографія виникла в рамках мінералогії, як наука, що описує ідеальні кристали.

Метою вивчення дисципліни «Кристалографія і мінералогія» є ознайомлення студента із закономірностями будови кристалічної речовини, структурою, формою та симетрією кристалів, типами кристалічних ґраток та їх характеристиками.

Важливість опанування цієї дисципліни студентами інженерно-технічних спеціальностей обумовлена тим, що всі метали та сплави мають кристалічну будову. Тому розуміння процесів кристалізації, перетворень сплавів металевих систем, а також їх властивостей неможливо без опанування закономірностей будови кристалічних структур.

Після вивчення дисципліни студенти повинні:

- розумітися в поняттях кристалічної речовини, кристалу та мінералу;
- знати морфологічні особливості мінералів та їх основні властивості;
- засвоїти основи геометричної та структурної кристалографії;
- знати основні типи кристалічних ґраток та їх характеристики;
- розуміти роль внутрішньої кристалічної будови у формуванні властивостей різних матеріалів.

ПРОГРАМА

дисципліни «Кристалографія та мінералогія»

Основи мінералогії. Поняття кристалічної речовини. Кристал. Мінерал. Хімічний склад мінералів. Морфологічні особливості мінералів. Мінеральні агрегати та мінеральні індивіди. Властивості мінералів: фізичні, механічні, теплові, електричні, магнітні.

Геометрична кристалографія. Поняття атомного ряду, плоскої сітки і просторової ґратки. Побудова кристалічної ґратки. Елементарна комірка, її геометричні константи. Властивості кристалів. Утворення та особливості росту кристалів. Кристалографічні проєкції. Прямий та полярний кристалічні комплекси. Сферична проєкція, сферичні координати. Стереографічна проєкція, її властивості. Гномо-стереографічна проєкція. Симетрія кристалів. Елементи симетрії кристалів (центр симетрії, площина симетрії, прості осі симетрії, інверсійні осі симетрії). Елементи симетрії нескінчених кристалічних структур. Теореми складання елементів симетрії. Проектування елементів симетрії. 32 види симетрії. Сингонії, категорії і види симетрії.

Структурна кристалографія. Кристалографічні символи вузлів, напрямків, площин. Метод кристалографічного індиціювання. Особливості знаходження індексів Міллера-Браве в гексагональній сингонії. Симетрично-рівні напрямки, симетрично-рівні площини. Кристалографічна зона. Умова зональності Вейєса. Кристалографічний напрямок лінії перетину двох площин. Розрахунки кута між напрямками та площинами. Поняття про міжплощинну відстань. Характеристика і типи п'яти плоских сіток Браве. Чотири типи комірок кристалічної ґратки. Правило вибору елементарної комірки. 14 елементарних комірок Браве. Кількісні характеристики комірок (базис, базисна матриця, координаційне число, коефіцієнт компактності). Складні ґратки гексагональної та кубічної сингонії. Ретикулярна густина. Визначення найбільш щільнопакованих напрямків та площин в ґратках. Два типи найщільнішого пакування атомів в кристалічних структурах. Порожнини (пори) в щільнопакованих структурах. Розташування тетра-та октапор в ОЦК, ГЦК та ГЦП-ґратках, їх розміри. Дефекти пакування.

Лабораторна робота №1

ОСОБЛИВОСТІ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ, МОРФОЛОГІЇ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ МІНЕРАЛІВ

Мета роботи: ознайомитися з поняттями кристалу та мінералу, особливостями хімічного складу та морфології мінералів, їхніми основними властивостями. За допомогою літературних джерел навчитися характеризувати заданий мінерал.

План заняття

1. Засвоїти поняття кристалу та мінералу.
2. Ознайомитися з принципом запису хімічних формул, морфологічними особливостями та основними властивостями мінералів.
3. Охарактеризувати заданий мінерал:
 - пояснити походження назви;
 - вказати хімічну формулу;
 - вказати морфологічні особливості;
 - навести властивості (забарвлення, колір риски, блиск, спайність, прозорість, густина, твердість за Моосомтощо);
 - привести приклади використання.

Загальні положення

Кристали та мінерали. Стан речовини називають *кристалічним*, якщо в її будові спостерігається закономірне розташування частинок (молекул, атомів, іонів), які утворюють ряди, плоскі сітки, просторову ґратку, тобто спостерігається дальній порядок. В речовині, що знаходиться в *аморфному стані*, існує лише ближній порядок в розташуванні частинок.

Кристалічну будову мають гірські породи, мінерали, технічне каміння (цемент, вогнетриви, метали). В аморфному стані знаходиться склоприродне (обсидіан) та технічне, смоли, парафін, віск тощо.

Кристал – це фізичне тіло, частинки якого утворюють кристалічну ґратку, та має певну геометричну форму. В ідеальному кристалі вершина відповідає вузлу (атому, молекулі, іону); ребро – ряду вузлів; грань – плоскій сітці. В реальних кристалах при великих збільшеннях можна побачити, що вершина складається з багатьох вузлів (частинок), ребро – з багатьох рядів, грань – з багатьох плоских сіток, які паралельно розташовані. Закономірне розташування частинок обумовлює внутрішню та зовнішню *симетрію* (грец. *symmetria* – співрозмірність). Атомно-молекулярну будову, симетрію, фізичні властивості, утворення та ріст кристалів вивчає наука *кристалографія* (грец. *krystallos* – лід та *grapho* – пишу, описую).

Мінерал – це природне тверде тіло з певним хімічним складом, фізичними властивостями та кристалічною структурою, яке утворюється в результаті природних фізико-хімічних процесів в земній корі, в космосі або створених людиною. Мінерали є складовою частиною земної кори, гірських руд, метеоритів. Вивченням мінералів займається наука *мінералогія*. *Мінералогія* (лат. *minera* – руда та грец. *logos* – слово, вчення) – наука про природні хімічні сполуки – мінерали; вивчає їхній склад, властивості, морфологію, особливості структури, процеси утворення та зміни, закономірності спільного знаходження в природі.

Мінерали часто складаються з декількох мінеральних видів (наприклад, олівін (рис.1.1) – мінерал класу силікатів, складається з форстериту $Mg_2[SiO_4]$ та фаяліту— $Fe_2[SiO_4]$). Кожний мінеральний вид володіє певним хімічним складом та структурою, що мають тісний взаємозв'язок та визначають його конституцію, яка і обумовлює властивості прияманні мінералу, та його морфологію. Властивості, які можна визначити візуально або за допомогою простих випробувань, називають *зовнішніми ознаками*. Зовнішні ознаки можуть бути настільки специфічними, що дають змогу точно визначити мінерал. В інших випадках вони дозволяють виділити групу мінералів, в якій визначення конкретного виду вимагає ретельного аналізу.



Рисунок 1.1 – Олівін

Розміри кристалів різних мінералів можуть бути коливатися від часток міліметра до декількох сотень метрів.

Хімічний склад мінералів. Природні мінерали являють собою або хімічні сполуки, або окремі хімічні елементи. Найбільш поширеними є мінерали з вмістом води в різному стані.

Хімічна формула мінералу показує його хімічний склад у вигляді послідовності символів хімічних елементів з підрядковими стехіометричними індексами, які вказують відносні кількості атомів різних сортів, що входять до його

складу,

Порядок написання формул мінералів:

- спочатку записують катіони (позитивно-заряджені частинки) в порядку зростання їхньої валентності такількісного вмісту. Для позначення ізоморфних заміщень використовують круглі дужки, в яких катіони, які заміщують один одного, записують через кому у вказаному порядку;

- потім записують аніони (від'ємно-заряджені частинки) (прості аніони, аніонні групи, комплексні аніони, радикали).

- останніми записують додаткові аніони O^{2-} , $(OH)^{1-}$, F^{1-} , котрі пишуть після радикалів в порядку зменшення валентності.

Наприклад: $Ca_5[PO_4]_3(F, Cl, OH)$ – апатит.

Серед мінералів немає хімічно чистих речовин. До їхньої структури входять різноманітні хімічні домішки. В деяких мінералах кількість таких домішок незначна (*мінерали постійного складу*), наприклад, кварц (чистота на рівні 99,99%), галіт (чистота не менше 99,9%); однак більшість мінералів містить домішки (*мінерали змінного складу*), наприклад, кількість домішки заліза (Fe) в сфалериті (ZnS) коливається від 0 до 20 ат.%. Причиною існування мінералів змінного складу є *ізоморфізм* – явище заміни в кристалічній ґратці мінералу одних хімічних елементів іншими з утворенням гомогенного (однорідного) змішаного кристалу змінного складу; тобто ізоморфізм передбачає зміну хімічного складу мінералу при збереженні його кристалічної структури. Умовою таких заміщень є близькість хімічних властивостей та розмірів атомів, які заміщують один одного.

Якщо мінерал складається з одного хімічного елемента, його називають самородним елементом, наприклад, самородне золото, самородне срібло, самородна мідь тощо.

Морфологічні особливості мінералів. Більша частина мінералів в природі зустрічається у вигляді *агрегатів* різного виду, які можуть бути кристалічної, прихованокристалічної та аморфної будови. Зовнішній вигляд мінералів зазвичай є характерною особливістю при їх визначенні.

Усю різноманітність форм мінералів умовно розділяють на три основні групи, кожна з яких характеризується властивим їй зовнішнім видом, який полягає в різному співвідношенні їхньої довжини, ширини та товщини, а саме:

- *ізометричні* кристали, які однаково розвинуті за усіма трьома напрямками (наприклад, кубічні кристали піриту, флюориту, галеніту);

- *подовжені*, тобто витягнуті в одному напрямку – стовпчасті, призматичні, голчасті (наприклад, призматичні кристали антимоніту або гірського кришталю);

- *сплощені*, тобто витягнуті в двох напрямках при збереженні третього – пластинчасті, листові, лускаті, табличчасті (тальк, гіпс, біотит).

В природі мінерали часто мають яскраво виражений зовнішній вигляд або *габітус* (лат. habitus – зовнішність), що дозволяє легко визначити їхні назви. Розрізняють призматичний, кубічний, ромбоєдричний, дипірамідальний, октаєдричний та інші габітуси. Однак низка мінералів (наприклад, кальцит, кварц) володіє здатністю кристалізуватися у вигляді різних форм.

Головна відмінність мінералів у вигляді *агрегатів* від *індивідів* полягає у тому, що вони виникають з багатьох центрів росту, в яких окремі кристали починають зростати самостійно та незалежно один від одного. Далі настає фаза колективного росту: індивіди об'єднуються в агрегат та зростають разом згідно загальним законам розвитку. Мінеральні індивіди часто знаходяться в мономінеральних (складені одним мінералом) або полімінеральних (складені декількома мінералами) зрощеннях.

Найбільш розповсюдженою формою мінеральних агрегатів є *зернисті агрегати* (рис. 1.2, а). За величиною зерен, з яких вони складаються, їх поділяють на крупнозернисті (від 5 мм), середньозернисті (від 1 до 5 мм), дрібнозернисті (менше 1 мм). За характером розподілу зерен в межах мінерального агрегату розрізняють рівномірнозернисті та нерівномірнозернисті.

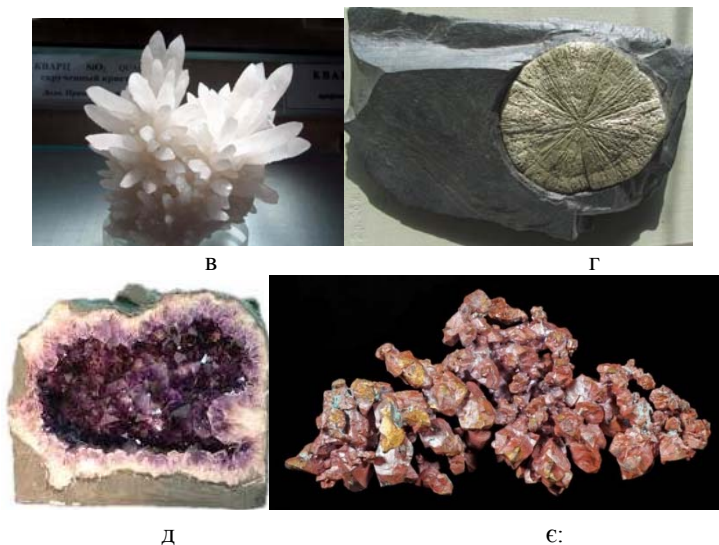
Двійниками (рис. 1.2, б) називають закономірні зростання кристалів змаксимальною ретикулярною густиною. Прикладами є двійник гіпсу («ластівковий хвіст»), двійники флюориту, ортоклазу тощо. Поряд з двійниками існують і трійники (наприклад, арагоніт), а у ставроліту спостерігаються хрестоподібні двійники.

Друзи – група кристалів, що щільно зрослися в основі (рис. 1.2, в). В природі зустрічаються друзи кварцу, кальциту, гіпсу, топазу тощо. Якщо кристали погано розвинуті, мають невеликі розміри, друзу називають щіткою.



а

б



а – зернистий агрегат граніту; б – двійник проростання піриту; в – друзи кварцу (гірського кришталю); г – конкреція піриту в сланці; д – секреція аметисту; е – дендрити самородної міді

Рисунок 1.2 – Форми мінеральних агрегатів

Конкреції (рис.1.2, г) утворюються при концентрації речовини навколо центру кристалізації (кальцит, флюорит); концентрична будова кристалу відображає його стадійність формування. Зазвичай конкреції мають радіально-променеву будову; їх розміри можуть змінюватися від декількох міліметрів до метрів.

Секреції (рис.1.2, д) – це форми відкладення мінералів в порожнинах гірських порід (гірський кришталю, кальцит). Ріст індивідів спрямований від країв до центру, тому формується форма мінеральних зрощувань, що має щільно зарослі краї та порожнистий центр. Крупні секреції, розмір яких перевищує 2 см в діаметрі, називають *жеодами*, а менші за 2 см – *мигдалінами*.

Дендрити (рис. 1.2, е) – розгалужені зрощення кристалів (піролюзит, самородні золото, срібло, мідь); є результатом вершинного та реберного росту кристалів, який відбувається при нерівномірній дифузії речовини до кристалу.

Крім розглянутих, існують і інші мінеральні агрегати: оолітові, сферолітові, натічні тощо.

Властивості мінералів.

1. Фізичні властивості мінералів.

Забарвлення мінералів є найбільш характерною фізичною властивістю;

на нього впливають: вміст у кристалічних ґратках іонів барвників або хромофорів, валентність іонів, координаційне число, розміри координаційного поліедра, наявність у ґратках молекул H_2O . Розрізняють три типи забарвлень мінералів:

- ідіохроматичне (є власним забарвленням мінералу). Найбільш стійке та обумовлене до складу мінералів елементів-хромофорів (Fe, Cr, Mn, Ni, Co, Ti, V тощо), що надають колір мінералу. Наприклад, присутність Сг обумовлює зелений колір різновиду берилу – ізмуруду, а наявність Мп обумовлює рожевий колір родоніту;

- алохроматичне (є наслідком наявності в мінералах включень сторонніх механічних домішок). Наприклад, тонкі пилоподібні або порошкоподібні механічні домішки або вкраплення вишнево-червоного гематиту іржаво-бурого гетиту надають кварцу бурий та червоний відтінок;

- псевдохроматичне або помилкове. Обумовлене оптичними дефектами, зокрема внаслідок явища дифракції променів світла від яких-небудь внутрішніх тріщин або через наявність кольорової плівки на окисленій поверхні мінералу (чорнильна мінливість у борніта) тощо.

Колір риску визначається відбитком, що залишає мінерал на неглазурованій порцеляновій пластинці. Це колір його подрібненого порошку; він часто не збігається із зовнішнім кольором мінералу. Наприклад, темно-сірий гематит дає характерну вишнево-червону риску; яскраво-жовтий халькопірит – темно-сіру із зеленуватим відтінком тощо.

Блиск мінералу є наслідком відбиття світлових променів від його поверхні. Він залежить насамперед від типу зв'язку: металевий є характерним для мінералів з металевим або ковалентним типом зв'язку, алмазний – для мінералів з ковалентним зв'язком, скляний – з іонним. Крім того, в деяких випадках блиск мінералу обумовлений внутрішньою будовою: в багатьох волокнистих мінералів (селеніту) блиск шовковистий, у лускатих – перламутровий, у склоподібних тіл – смолистий.

Спайність – це здатність мінералів розколюватися в певних напрямках з утворенням рівних, гладких та блискучих паралельних площин (площин спайності). Спайність залежить від внутрішньої будови мінералу і за ступенем досконалості поділяється на чотири види: доволі досконала (слюда, тальк); досконала (галеніт, кальцит); середня (скаполіт); недосконала або відсутня (кварц, апатит).

Окремість проявляється у вигляді більш грубих тріщин, які в основному пов'язані з закономірним розташуванням включень інших мінералів.

При розламуванні мінералу утворюються не тільки площини спайності й окремість, але й поверхні розколу, які називаються *зламом*. Злам може бути рівним (кристали слюди, гіпсу), сходинковим (польовий шпат, кальцит), раковистим (опал, апатит), тощо.

Прозорість – це властивість мінералу пропускати через себе певну кіль-

кість світлових променів у видимому спектрі; визначається коефіцієнтом поглинання світла. Всі мінерали умовно можна розділити на три групи: прозорі (топаз, кварц); напівпрозорі (сфалерит, кіновар); непрозорі (пірит, магнетит).

Густина мінералу (ρ) (або *питома вага*) визначає його масу в одиниці об'єму (г/см^3). Цей показник зазвичай пропорційний хімічному складу мінералів, тому знаючи відповідні хімічні формули, можна його передбачити.

Густина мінералів варіюється від 0,8 у деяких органічних мінералів до $22,7 \text{ г/см}^3$ у осмістого іридію, однак основна маса мінералів має густину, що знаходиться в інтервалі від 2,5 до $5,2 \text{ г/см}^3$. Висока густина є характерною для мінералів з компактною структурою, низька – для мінералів з шаруватою та каркасною структурою.

Усі мінерали поділяють за густиною на три групи:

- легкі, $\rho < 3 \text{ г/см}^3$ (кварц, галіт, гіпс тощо);
- середні $3 < \rho < 5 \text{ г/см}^3$ (сфалерит, халькопірит, корунд та ін.);
- важкі $\rho > 5 \text{ г/см}^3$ (кіновар, галеніт, золото тощо).

2. Механічні властивості мінералів.

Пружність – це властивість мінералів деформуватися під дією зовнішніх механічних сил без утворення тріщин і повертатися в початковий стан після зняття навантаження. Пружними мінералами є слюди, азбест.

Твердість визначає ступінь опору мінералу зовнішньому механічному впливу: дряпанню, вдавлюванню, шліфуванню. Відповідно існують такі методи визначення твердості (табл. 1.1):

- дряпання. Для визначення відносної твердості прийнята шкала Мооса, що представлена 10 еталонними зразками, з яких кожний наступний дряпає усі попередні. Як зразки обрані такі мінерали: тальк – 1, гіпс – 2, кальцит – 3, флюорит – 4, апатит – 5, ортоклаз – 6, кварц – 7, топаз – 8, корунд – 9, алмаз – 10;

- вдавлювання. Цей метод поділяють на три способи: спосіб Бринелля (вдавлювання металевої кульки під навантаженням); спосіб Роквелла (вдавлювання металевої кульки або алмазного конуса під навантаженням); спосіб Віккерса (вдавлювання алмазної пірамідки на приладі ПМТ-3);

- шліфування за методом Разівалія. Зважують зразок до шліфування та після шліфування з використанням 100 г абразивного порошку до його повного спрацювання. Міра твердості – втрата маси, у відсотках. За 100% втрати маси прийнятий кварц.

Крихкість – властивість мінералів подрібнюватися при механічному впливі з утворенням тріщин або уламків різної величини й форми.

Пластичність – здатність мінералу деформуватися під зовнішнім механічним впливом без утворення тріщин або уламків.

При визначенні мікротвердості на приладі ПМТ-3 оцінюють крихкість та пластичність мінералів. При виявленні першої тріщини при певному навантаженні встановлюють бал крихкості та пластичності за таблицею Дмитрієва

(табл.1.2).

Таблиця 1.1 – Визначення твердості мінералів

<i>Мінерал, його формула</i>	<i>Вигляд мінералу</i>	<i>За Моосом</i>	<i>За Віккерсом, кг/мм²</i>	<i>За Разівалем, %</i>
Тальк, $Mg_3[Si_4O_{10}](OH)_2$		1	2,4	0,03
Гіпс, $CaSO_4 \cdot 2H_2O$		2	36,0	1,04
Кальцит, $CaCO_3$		3	109,0	3,75
Флюорит, CaF_2		4	189,0	4,17
Апатит, $Ca_5(PO_4)_3(F,OH,Cl)$		5	536,0	5,42
Ортоклаз, $K[AlSi_3O_8]$		6	795,0	31,0
Кварц, SiO_2		7	1120,0	100,0
Топаз, $Al_2[SiO_4](F,OH)_2$		8	1427,0	146,0
Корунд, Al_2O_3		9	2060,0	833,0
Алмаз, C		10	10060,0	117000,0

Таблиця 1.2 – Шкала крихкості та пластичності мінералів

№ n/n	Категорія крихкості	Мінімальне навантаження, при якому виникає перша тріщина, г	Типові матеріали
1	Дуже крихкі	При усіх навантаженнях	Пірит, гіпс
2	Крихкі	20 та вище	Тетраедрит, пентландит
3	Слабко пластичні	50 та вище	Кварц, піротин
4	Пластичні	100 та вище	Магнетит
5	Дуже пластичні	При навантаженні 200 тріщини не утворюються	Мідь, галеніт, галіт

3. Теплові властивості мінералів. *Теплопровідність* – це швидкість поширення теплоти в мінералі; значною мірою залежить і від однорідності кристалічної структури, наявності різних домішок, дефектів і ін.

Швидкість і ступінь впливу теплової енергії на різні мінерали неоднакова й визначається *коефіцієнтами лінійного та об'ємного теплового розширення*. Коефіцієнт лінійного розширення – це величина зміни (подовження) кристала в певному напрямку при його нагріванні на 1°C; коефіцієнт об'ємного розширення – це величина зміни об'єму кристала при нагріванні на 1°C.

Коефіцієнт лінійного теплового розширення мінералів значною мірою залежить від типу структури, а коефіцієнт об'ємного теплового розширення – від відстаней між просторовими вузлами в просторових ґратках, від валентності іонів та від координаційних чисел.

Теплові перетворення мінералів. При зміні температури в мінералах можуть відбуватися перетворення, які супроводжуються переходом однієї фази в іншу без зміни їхнього хімічного складу. Досить часто аморфні мінерали переходять у кристалічні не змінюючи свого хімічного складу.

Фазові перетворення зі зміною хімічного складу супроводжуються реакціями хімічного розпаду з утворенням нових фаз, реакціями окиснення, зневоднення та ін. При такому типі перетворення один мінерал переходить в інший, змінюючи хімічний склад, структуру, кристаломорфологічні та фізичні властивості та інше.

4. Електричні властивості мінералів. *Електричні властивості* – це властивості мінералів переносити (пропускати) електричний струм або піддією певних зовнішніх факторів регенерувати його; визначаються головним чином типами зв'язку між окремими атомами, іонами або молекулами в кристалічній структурі.

Електропровідність – це властивість мінералів піддією електричного поля пропускати через свої кристалічні структури електричний струм. В залежності від ступеня електропровідності всі мінерали умовно поділяють на три групи (табл. 1.3) з відповідним питомим опором.

Таблиця 1.3 – Розподіл мінералів за питомою електропровідністю

№ n/n	Тип зв'язку в кристалічній структурі	Назва групи	Питомий електричний опір, Ом/м	Характерні мінерали
1	Металевий	Електропровідні з малим питомим опором	$\rho > 10^{-6}$	Самородні золото, срібло, платина, мідь
2	Ковалентний	Електропровідні з великим питомим опором (напівпровідники)	$10^{-8} < \rho < 10^{-6}$	Куприт, пірит, галеніт
3	Іонний	Неелектропровідні (діелектрики)	$\rho < 10^{-8}$	Кварц, польові шпати, гіпс

Піроелектрика – це властивість мінералів змінювати електричну поляризацію при зміні їхньої температури. Піроелектриком є турмалін.

П'єзоелектрика – це властивість виникнення електричної поляризації в кристалах мінералу-діелектрика під дією електричної напруги (прямий п'єзоелектричний ефект) і поява механічних деформацій у кристалі під дією електричного поля (зворотний п'єзо-електричний ефект). Прикладом п'єзоелектрика є кварц.

5. Магнітні властивості мінералів. *Магнітність* – це властивість мінералів взаємодіяти з магнітним полем. Основною характеристикою магнітних властивостей кристалів мінералів є магнітна сприйнятливість (χ), в залежності від якої всі кристалічні мінерали поділяють на п'ять основних груп:

- діамагнітні (немагнітні). Характеризуються тим, що в їх кристалічних структурах атоми немагнітні; магнітна сприйнятливість відсутня або ж дуже мала (самородна мідь Cu, галіт NaCl, кварц);

- парамагнітні (помірно магнітні). Їхні кристалічні структури повністю складаються з магнітних атомів, у яких електрони не скомпенсовані. Сили магнітної взаємодії між атомами дуже малі. Магнітна сприйнятливість позитивна, але незначна (пірит FeS₂);

- антиферомагнітні (слабкомагнітні). Кристалічна структура складена з магнітних атомів або вони присутні у вигляді домішок. Магнітна сприйнятливість дуже мала, а сумарний магнітний момент наближається до нуля (турмалін, гематит Fe₂O₃);

- феромагнітні (сильномагнітні). Їхні структури складені з магнітних атомів або домішок. Міжатомні магнітні сили досить великі. Магнітна сприйнятливість позитивна і дуже велика (самородне залізо Fe);

- феримагнітні (сильномагнітні). Магнітна сприйнятливість позитивна і досягає значних величин. Такі мінерали створюють навколо себе своє магнітне поле (кубаніт, магнетит Fe₃O₄).

Крім розглянутих, мінерали володіють і іншими властивостями (на-

приклад, радіоактивність, гігроскопічність тощо).

Приклад характеристики мінералу. Розглянемо олівін (рис.1.1).

Олівін має оливково-зелений колір, його назва пішла від лат. *oliva* – за кольором плоду оливкового дерева (взагалі його колір може змінюватися від зеленувато-жовтого до чорного). Має хімічну формулу $(\text{Mg}, \text{Fe})_2[\text{SiO}_4]$. Являє собою ізоморфну суміш форстериту ($\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$) та фаяліту ($\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]$). Олівін відносять до найбільш розповсюдженого класу мінералів – силікатів. Є пороутворюючим мінералом; широко поширений в мантії Землі. Сингонія ромбічна. Правильні кристали дуже рідко зустрічаються, зазвичай розповсюджений у вигляді зернистих агрегатів. Колір риски – безкольоровий, жовтуватий. Блиск скляний. Твердість 6–7. Густина – $3,27 \dots 3,37 \text{ г/см}^3$. Спайність недосконала. Олівін крихкий, має раковистий злам, нерівний. Олівін використовують як вогнетривку сировину, олівінове борошно є добривом. Прозорий жовтувато-зеленого кольору різновид олівіну – хризоліт є коштовним камінням.

В додатку Б наведені деякі мінерали, їхні хімічні формули та види симетрії, до яких вони відносяться.

Зміст звіту

Записати визначення кристалу та мінералу. Охарактеризувати принцип запису хімічних форму; морфологічні особливості мінералів. Стисло записати основні властивості мінералів. За планом роботи виконати і оформити індивідуальне завдання.

Контрольні питання

1. Що таке кристалічний стан речовини, кристал?
2. Поняття мінералу.
3. Що вивчають науки кристалографія та мінералогія?
4. Особливості запису хімічних формул мінералів.
5. Три основні групи форм мінералів в залежності від співвідношення їхніх довжини, ширини та товщини.
6. Чим відрізняються мінеральні агрегати від мінеральних індивідів?
7. Які Ви знаєте форми мінеральних агрегатів?
8. Фізичні властивості мінералів.
9. Які Ви знаєте механічні властивості мінералів?
10. Що Вам відомо про теплові, електричні та магнітні властивості мінералів?

Лабораторна робота №2

КРИСТАЛОГРАФІЧНІ ПРОЕКЦІЇ

Мета роботи: ознайомитися з видами кристалографічних проекцій та способами їх зображення. Визначити сферичні координати полюсів граней та побудувати гномостереографічну проекцію кристала.

План заняття

1. Ознайомитися із видами кристалографічних проекцій та способами їх зображення.
2. Побудувати гномостереографічну проекцію кристала:
 - кристал розташувати таким чином, щоб число вертикальних граней було б найбільшим;
 - грані позначити цифрами;
 - уявно утворити кристалічний комплекс і сумістити його центр з центром проекції;
 - для кожного полюса грані визначити сферичні координати φ та ρ .
3. На круг проекцій нанести стереографічну проекцію нормалей до граней кристала, враховуючи їх розташування відносно осі проекції.

Загальні положення

Кристалографічні проекції використовують для графічного зображення форми кристала та його симетрії у двовимірному просторі, тобто в площині рисунка. Спосіб проектування ґрунтується на одній із характерних особливостей кристалів, яка базується на законі постійності кутів між відповідними гранями та ребрами в кристалі. Кристалографічні проекції передають кутові співвідношення між площинами та напрямками в кристалі, а також дають змогу проводити певні кількісні розрахунки при вирішенні цілого ряду задач.

Оскільки розмір кристала при проектуванні не вважається істотним, то це дає змогу замінити кристал *кристалографічним комплексом*. Розрізняють *прямий* та *полярний комплекси*. Прямий кристалографічний комплекс – сукупність площинта прямих, що одержані при паралельному переносі граней або площиніребер в просторі до перетину в одній точці, яку називають центром комплексу (рис. 2.1).

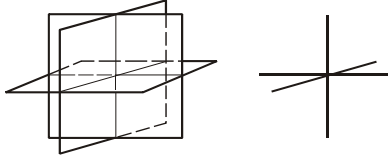


Рисунок 2.1 – Прямий комплекс граней (а) та ребер куба (б)

Якщо в прямому комплексі площини замінити нормальними до них, а прямі лінії перпендикулярними до них площинами, то отримують полярний комплекс. Найчастіше використовують полярний комплекс граней, коли замість грані проектується нормаль до неї. Елемент, який проектують – площина чи напрямок, завжди проходить через центр проєкції, тобто центр комплексу кристала розміщують в центрі проєкції.

В кристалографії застосовують *сферичну, стереографічну та зномостереографічну проєкції*.

Для одержання *сферичної проєкції* напрямком OA продовжують до перетину в точці a' зі сферою довільного радіуса. Ця точка на сфері і є *сферичною проєкцією напрямку OA або полюса грані, до якої проведено нормаль OA* (рис. 2.2). Положення полюса грані на сфері визначають сферичні координати: *полярна відстань ρ* та *довгота φ* . Полярна відстань (ρ) – це кут між віссю проєкції NS і напрямком OA , може змінюватися від 0° (полюс N) до 180° (полюс S) ($0^\circ \leq \rho \leq 180^\circ$). Довгота (φ) – кут між нульовим меридіаном та меридіаном, який проходить через точку a' ($0^\circ \leq \varphi \leq 360^\circ$). Сферична проєкція є просторовою, і в цьому її недолік.

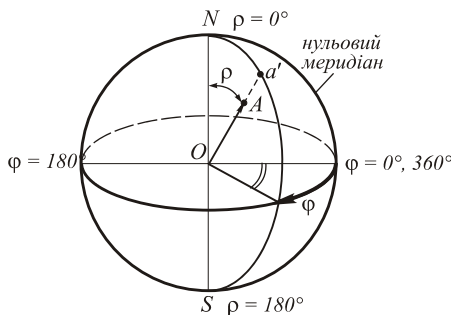


Рисунок 2.2 – Сферична проєкція та сферичні координати

Для побудови *стереографічної проєкції* точки сферичної проєкції проектують на екваторіальну площину (рис.2.3). Площину проєкції,

обмежену екватором, називають основним кругом проекції. При проектуванні точки сферичної проекції верхньої напівсфери з'єднують з південним полюсом S , для точок нижньої напівсфери використовують північний полюс N . Так, a – точка перетину прямої $a'S$ з основним кругом проекції вона є стереографічною проекцією напрямку OA . Аналогічно b , m та n – стереографічні проекції відповідних напрямків OB , OM та ON . Для горизонтальних напрямків OM та ON ($\rho = 90^\circ$) сферична та стереографічна проекції збігаються (точки m і n). Проекції напрямків, для яких $\rho \leq 90^\circ$, позначають кружком, якщо $\rho > 90^\circ$ – хрестиком (рис.2.3).

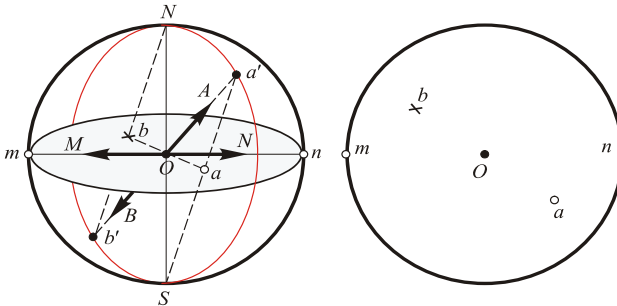


Рисунок 2.3 – Побудова стереографічної проекції напрямків

Сtereoграфічна проекція площини будується аналогічним чином (рис.2.4). Площина, яка розташована під деяким кутом відносно осі проекції, перетинає верхню напівсферу по дузі великого кола $Ma_1a_2a_3a_4K$. Якщо через кожну точку цієї сферичної проекції провести проектуючі лінії з полюса S , то на площини проекції вони залишать слід у вигляді дуги $Ma_1a_2a_3a_4K$, яка зображує стереографічну проекцію площини. Дуга завжди опирається на діаметр кола проекції. Сtereoграфічні проекції вертикально розташованих площин, що знаходяться в площинах $NcOa$ та $dNbOd$, уявляють собою діаметри ac та db кола проекції, їх на проекції показують подвійними лініями (рис. 2.5 і 2.6, а). Сtereoграфічна проекція горизонтальної площини збігається із сферичною проекцією і суміщується з колом основного круга проекції (рис.2.6, б).

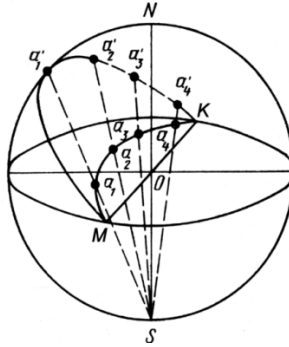


Рисунок 2.4 – Побудова стереографічної проєкції похилої площини

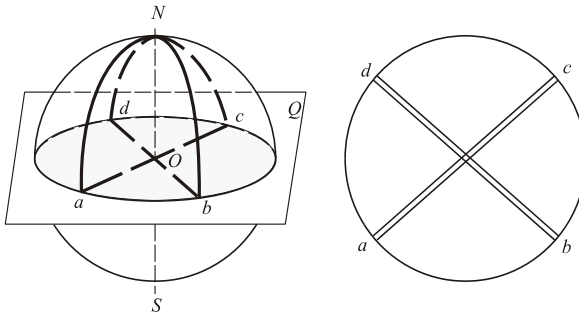


Рисунок 2.5 – Побудова стереографічної проєкції вертикальних площин

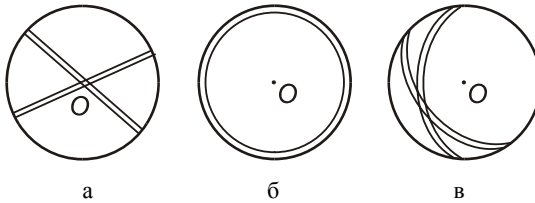


Рисунок 2.6 – Стереографічні проєкції площин, розташованих вертикально (а), горизонтально (б) та під деяким кутом до осі проєкції (в)

Для зручнішого розв'язання практичних задач використовують стереографічну проєкцію полярного комплексу, так звану гномостереографічну проєкцію. В такій проєкції замість площини проєктують нормаль до неї і, навпаки, для прямої лінії проєктують перпендикулярну до неї площину. Отже, гномостереографічна проєкція граней кри-

стала – це стереографічна проекція нормалей до цих граней (рис. 2.7).

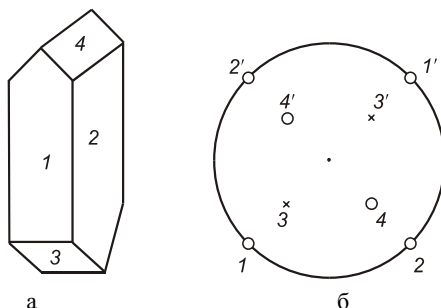


Рисунок 2.7 – Кристал (а) та його гномостереографічна проекція (б).
Проекції симетричних граней позначені цифрами зі штрихом

В кристалографії грані кристала проектують за допомогою гномостереографічної проекції, а при проектуванні елементів симетрії використовують стереографічну проекцію.

Зміст звіту

Описати одержання прямого та полярного комплексів кристала, принцип побудови сферичної, стереографічної та гномостереографічної проекцій кристала. Згідно плану роботи виконати і оформити індивідуальне завдання.

Контрольні питання

1. Як побудувати прямий та полярний комплекс кристала? Вкажіть різницю між ними.
2. Принцип побудови сферичної проекції та її недоліки.
3. Що уявляє собою полюс грані? Яким чином визначають сферичні координати полюса грані?
4. Чим відрізняється стереографічна проекція від сферичної?
5. Принцип побудови гномостереографічної проекції.
6. Як відрізнити стереографічні проекції напрямків, розташованих у верхній та нижній напівсферах?
7. Яке співвідношення між сферичними координатами полюсів двох граней кристала, гномостереографічні проекції яких збігаються і позначені хрестиком та кружком?

Лабораторна робота №3

СИМЕТРИЯ КРИСТАЛІВ

Мета роботи: навчитися визначати елементи симетрії на моделях кристалів, із застосуванням теорем складання записувати формулу симетрії в певній послідовності, будувати стереографічну проекцію елементів симетрії з нанесенням на неї гномостереографічної проекції граней кристалу.

План заняття

1. Ознайомитися з елементами симетрії для визначення симетрії багатогранників.
2. З'ясувати особливості зображення елементів симетрії на стереографічній проекції.
3. Засвоїти теореми складання і навчитися користуватися ними при визначенні елементів симетрії багатогранників.
4. Навчитися виводити повну формулу симетрії кристалу.
5. Одержати у викладача індивідуальні завдання та виконати їх.

Загальні положення

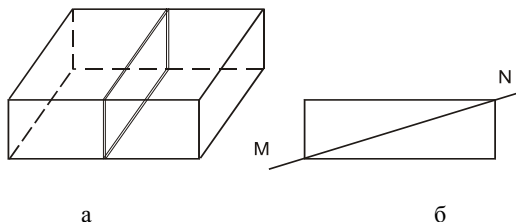
Елементи симетрії кристалів та їх стереографічні проекції

Симетричним називається кристал або геометрична фігура, окремі частини або точки яких можуть бути суміщені одна з одною при здійсненні симетричних операцій (відображення, поворот або їх сумісна дія). Уявні площини, лінії та точки, відносно яких відображаються однакові частини кристала і виявляють симетрію, називають *елементами симетрії*. В теорії симетрії зовнішньої форми кристала (континууму) розрізняють: центр симетрії, площина симетрії, прості поворотні та інверсійні осі симетрії.

Центр симетрії (або *центрінверсії*) – це особлива точка усередині кристала, яка характеризується тим, що на будь-якій довільній лінії, проведеній через неї, на рівних відстанях і по обидва боки, зустрічаються симетричні точки. При наявності центра симетрії кожній грані відповідає рівна їй та паралельна (або зворотнопаралельна) грань. У кристалах може існувати лише один центр симетрії. Позначається він буквою *S*.

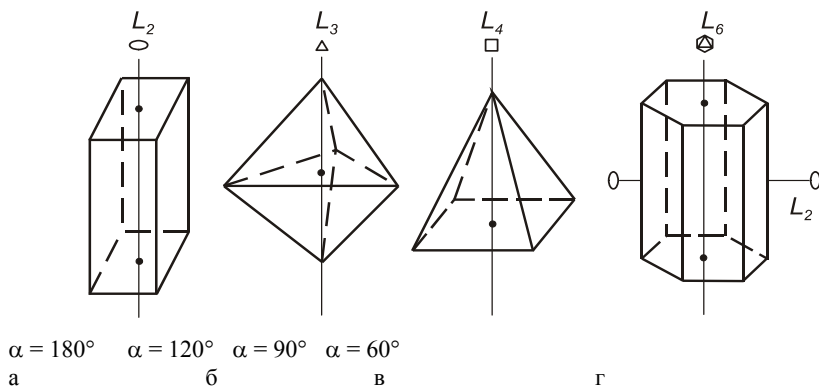
Площина симетрії (*P*) поділяє кристал на дві дзеркально рівні

частини, які розташовані одна відносно іншої як предмет та його дзеркальне відображення (рис.3.1, а). Треба звернути увагу на те, що пряма MN поділяє прямокутник (рис. 3.1, б) на дві рівні, але не дзеркально рівні частини, тому площина, проведена через лінію MN перпендикулярно до площини рисунка, не є площиною симетрії.



а – одна з площин симетрії у кристалі;
б – через пряму MN не проходить площина симетрії
Рисунок 3.1 – Виявлення площин симетрії

Вісь симетрії (L_n) – це пряма лінія, при повороті навколо якої на найменший елементарний кут, спостерігаємо самосуміщення кристала. Порядок осі n показує кількість суміщень кристала при повороті його на 360° і дорівнює $n=360^\circ/\alpha$, де α – найменший кут повороту для суміщення кристала. В кристалах можливими є лише осі 1-го, 2-го, 3-го, 4-го і 6-го порядків: L_1, L_2, L_3, L_4, L_6 (рис. 3.2, табл. 3.1). Неможливість існування у кристалах осей інших порядків обумовлена дискретною внутрішньою структурою кристалів.



$\alpha = 180^\circ$ $\alpha = 120^\circ$ $\alpha = 90^\circ$ $\alpha = 60^\circ$

а

б

в

г

Рисунок 3.2 – Можливі осі симетрії у кристалах та їх позначення при проектуванні

Таблиця 3.1 – Характеристики осей симетрії

Вісь симетрії	Порядок осі, n	α , градуси
L_1	1	360
L_2	2	180
L_3	3	120
L_4	4	90
L_6	6	60

Будь-яка пряма в кристалі буде завжди віссю першого порядку, тобто осей L_1 в кристалах є безліч, з цих причин у формулу симетрії їх не записують.

Інверсійна вісь (L_{in}) – це пряма лінія, при повороті навколо якої на певний найменший кут з подальшим або попереднім відображенням в деякій центральній точці кристал самосуміщується. Інверсійні осі L_{in} n -порядку поєднують у собі дію поворотної осі того ж порядку, що і звичайна ось та, окрім того, ще дію центра симетрії, який при цьому може бути і відсутній. Оскільки L_{i1} , L_{i2} , L_{i3} дорівнюють відомим та більш простим елементам симетрії, окремо їх не виділяють (рис. 3.3).

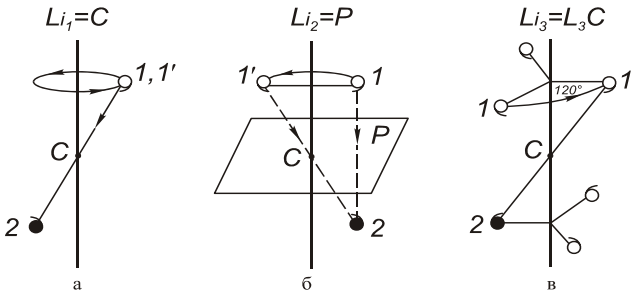


Рисунок 3.3 – Перехід точки, позначеної цифрою 1, у точку (цифра 2) внаслідок дії відповідних елементів симетрії

Самостійними елементами симетрії є тільки інверсійні осі четвертого та шостого порядків ($L_{i4} \Rightarrow L_2$, $L_{i6} = L_3 + P$ ($P \perp L_3$)), оскільки їх порядок вищий, ніж порядок поворотних осей L_2 та L_3 , з якими вони збігаються.

На рис. 3.4 у тетрагональному тетраедрі існує інверсійна вісь четвертого порядку. Для наочності він вписаний в тетрагональну призму, основою якої є квадрат. Ребро AB при повороті на 90° навколо осі

L_{i4} займе положення $A'B'$. При відображенні в уявній точці O точки A та B зустрінуть відповідні симетричні точки C та D , а ребро $A'B'$ буде відображено у нижнє ребро CD . Водночас ця інверсійна вісь є простою віссю другого порядку $L_{i4} \Rightarrow L_2$.

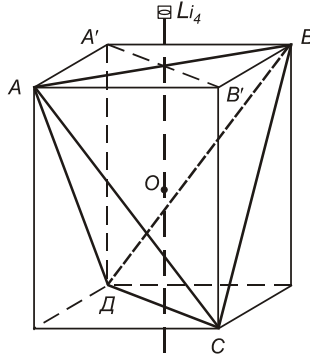


Рисунок 3.4 – Інверсійна вісь четвертого порядку в тетрагональному тетраедрі

Виявлення інверсійних осей проводиться за таким порядком. Кристал необхідно розташувати так, щоб досліджувана вісь була б вертикальною. Замітити у верхній половині кристала характерну грань або ребро. Уявно зробити розріз по горизонтальній площині і повернути тільки верхню половину кристала. Якщо після такого повороту на 60° або 90° верхня частина кристала при відображенні в уявній точці збігається з нижньою, то вісь є дійсно інверсійною. На рис. 3.5 показаний аналіз симетрії кристала у вигляді тригональної призми.

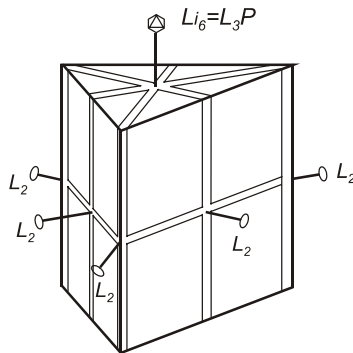


Рисунок 3.5 – Тригональна призма із симетрією $L_{i6}3L_23P$

В цьому багатограннику центра симетрії не існує, тому що бокові грані у формі прямокутників не мають відповідних паралельних граней. Через центри горизонтальних граней у вигляді рівнобічних трикутників проходить вісь L_3 (поворот навколо неї на 120° суміщає кристал). Перпендикулярно до осі L_3 розташована площина симетрії, сумісна дія якої із віссю третього порядку L_3 дорівнює дії інверсійної осі $L_{i6}=L_3+P$ ($P \perp L_3$). Легко виявити ще три вертикальні площини симетрії, що проходять через кожне вертикальне ребро на середину протилежної йому грані та перетинаються вздовж осі L_{i6} . Знаходимо осі симетрії другого порядку L_2 , що перпендикулярні осі L_{i6} вертикальним площинам симетрії та проходять через середину кожного вертикального ребрата центр протилежної йому грані призми. При аналізі цього кристала слід використати такі теореми складання (дивись розділ «Взаємодія елементів симетрії. Теореми складання»):

$$L_3+P=L_{i6} (P \perp L_3); \quad L_3+P (P // L_3)=L_3^3P \text{ (теорема 3)};$$

$$P_{II}+P_{\perp}=L_2 \text{ (теорема 1)}; \quad L_3+L_2 (L_2 \perp L_3)=L_3^3L_2 \text{ (теорема 4)}.$$

Знайдена сукупність елементів симетрії $L_{i6}^3L_2^3P=L_3^3L_2^4P$ називається *повною формулою симетрії*. Повна формула симетрії кристала записується у такій послідовності: спочатку кількість осей найвищого порядку, потім – кількість осей меншого порядку, після цього – кількість площин і в кінці – центр симетрії.

Гадолін О.В. довів, що кількість комбінацій між усіма елементами симетрії дорівнює 32. Відповідно до цього в кристалографії розрізняють 32 види симетрії, або 32 так звані точкові групи (табл. 3.2). В сингонію об'єднані кристали, у яких однакова кристалографічна система координатних осей та схожі елементи симетрії.

Таблиця 3.2 – 32 види симетрії кристалів

Категорія	Сингонія	Вид симетрії						
		Примітивний	Центральний	Планальний	Аксіальний	Планаксіальний	Інверсійно примітивний	Інверсійно планальний
Нижча	Триклінна	–	C					
	Моноклінна			P	L ₂	L ₂ PC		
	Ромбічна			L ₂ 2P	3L ₂	3L ₂ 3PC		
Середня	Тригональна	L ₃	L ₃ C	L ₃ 3P	L ₃ 3L ₂	L ₃ 3L ₂ 3PC		
	Тетрагональна	L ₄	L ₄ PC	L ₄ 4P	L ₄ 4L ₂	L ₄ 4L ₂ 5PC	L _{i4} ⇒L ₂	L _{i4} 2L ₂ 2P
	Гексагональна	L ₆	L ₆ PC	L ₆ 6P	L ₆ 6L ₂	L ₆ 6L ₂ 7PC	L _{i6} =L ₃ P	L _{i6} 3L ₂ 3P
Вища	Кубічна	3L ₂ 4L ₃	3L ₂ 4L ₃ 3PC	3L _{i4} 4L ₃ 6P	3L ₄ 4L ₃ 6L ₂	3L ₄ 4L ₃ 6L ₂ 9PC		

При розподілі кристалів на категорії та сингонії важливими є правила їх кристалографічної установки (табл. 3.3).

Таблиця 3.3 – Правила кристалографічної установки кристалів при проектуванні

<i>Категорія</i>	<i>Сингонія</i>	<i>Характерний елемент симетрії</i>	<i>Розташування координатних осей</i>
Нижча	триклинна	вісь L_1	максимальна кількість вертикальних граней паралельна осі Z
	моноклінна	вісь L_2 або площина P	вісь Z перпендикулярна осі L_2 , вісь Y паралельна L_2 або перпендикулярна до площини P
	ромбічна	$3L_2$ або $3P$	осі X, Y, Z паралельні осі L_2 або перпендикулярні площині P
Середня	тригональна	вісь L_3	головна вісь вздовж осі Z , інші в площині XOY
	тетрагональна	вісь L_4, L_{i4}	
	гексагональна	вісь L_6, L_{i6}	
Вища	кубічна	$4L_3$	осі X, Y, Z паралельні трьом взаємно перпендикулярним осям L_4 , або L_{i4} , або L_2

В додатку Б наведені мінерали для кожного кристалографічного виду симетрії.

Симетрично-рівні та одиничні напрямки

Симетрично-рівні напрямки – це напрямки в кристалі, що пов'язані між собою елементами симетрії; вони повторюються у кристалі кілька разів. На рис.3.5 три осі симетрії L_2 співпадають з симетрично-рівними напрямками наведеного кристала.

Одиничний напрямок – єдиний, що не повторюється в кристалі. Для тригональної призми на рис.3.5 одиничний напрямок співпадає з головною віссю L_{i6} .

Проектування елементів симетрії

При проектуванні елементів симетрії використовують стереографічну проекцію. Проекції осей (рис.3.6) замість точок позначають значками, що характеризують відповідні осі:

$$L_2 - \circ; L_3 - \triangle; L_4 - \square; L_6 - \hexagon; Li_4 - \boxplus; Li_6 - \boxtimes.$$

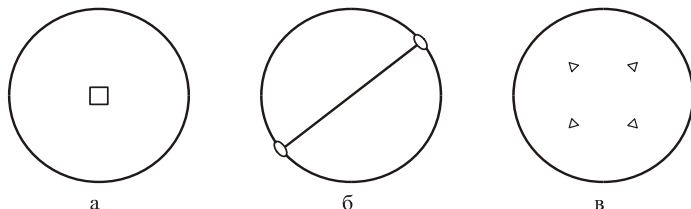


Рисунок 3.6 – Стереографічні проекції вертикальної осі L_4 (а) горизонтальної осі L_2 і чотирьох похилих осей Li_4

Стереографічні проекції площин симетрії зображують подвійними лініями, які в залежності від розташування площини симетрії у кристалі, мають вигляд дуги, діаметра або збігаються із основним колом проекції для горизонтальної площини симетрії (рис. 3.7).

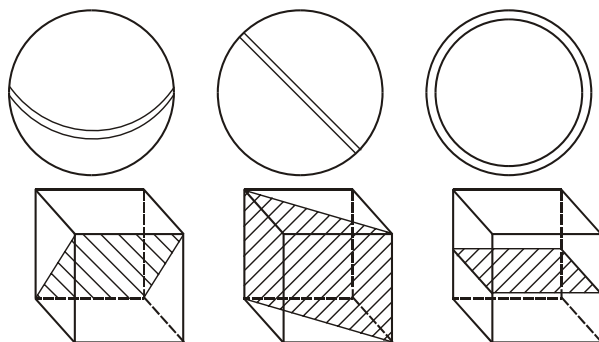


Рисунок 3.7 – Стереографічні проекції площин симетрії в залежності від їх розташування у кубі

Літерою C або невеликим колом в центрі проекції позначають наявність центра симетрії (рис.3.8).

На рис. 3.8 зображені стереографічні проекції елементів симетрії куба (формула симетрії $3L_44L_36L_29PC$) та тригональної призми, зображеної на рис. 3.5 (L_63L_23P). При проектуванні, згідно з установкою кристалів відповідно до сингонії, із віссю проекції суміщають одинич-

ний або один із симетрично-рівних напрямків (для кристалів кубічної сингонії).

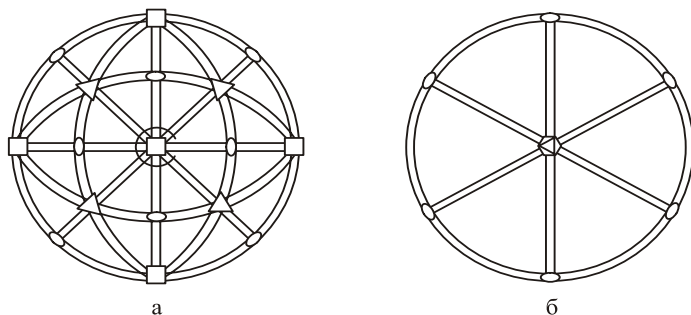


Рисунок 3.8 – Стереографічні проекції елементів в симетрії куба (а) і тригональної призми (б)

Взаємодія елементів симетрії. Теорема складання

Доведено, що при наявності двох елементів симетрії обов'язково присутній третій елемент, дія якого дорівнює сумарній дії двох перших елементів. Існують теореми складання, що базуються на цьому положенні; їх використання дозволяє математично вивести усі сукупності елементів симетрії, тобто одержати повну формулу симетрії кристала.

Теорема 1. Лінія перетину двох площин симетрії є віссю симетрії, мінімальний кут повороту навколо якої вдвічі більший за кут між площинами. Наприклад, лінія перетину двох взаємно перпендикулярних площин завжди є віссю симетрії другого порядку.

Теорема 2. При наявності площини симетрії та перпендикулярній їй осі парного порядку (L_2 або L_4 , L_6) завжди є центр симетрії: а) $P+L_{2n} (L_{2n} \perp P) = L_{2n} \underline{PC}$. Аналогічно існують такі взаємопов'язані теореми: б) $P+C = \underline{L_{2n} PC}$; та в) $L_{2n}+C = L_{2n} \underline{PC}$. З цієї теореми слідує, що сума парних осей дорівнює сумі площин при наявності центру симетрії, наприклад, $\underline{3L_4 4L_3 6L_2 2PC}$.

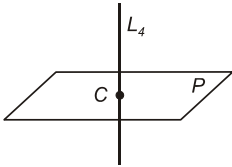
Теорема 3. Якщо через вісь n -го порядку проходить площина симетрії, то таких площин буде n . Кут між площинами вдвічі менший ніж мінімальний кут повороту осі: $L_n+P (P // L_n) = L_n \underline{nP}$.

4. При наявності осі симетрії n -го порядку та осі другого порядку, що перпендикулярна до неї, завжди буде n осей другого порядку: $L_n+L_2 (L_2 \perp L_n) = L_n \underline{nL_2}$.

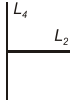
5. Площина симетрії, що розташована вздовж інверсійної осі L_{i4} обумовлює наявність поворотної осі другого порядку L_2 , яка перпендикулярна інверсійній осі та збігається із бісектрисою кута між площинами: $L_{i4}+P (P//L_{i4}) = L_{i4}2L_22P$.

Приклад. Використовуючи теореми складання, вивести повну формулу симетрії при взаємодії таких елементів симетрії:

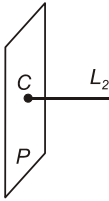
$$L_4+C+L_2 \quad (L_2 \perp L_4)$$



Згідно теореми 2в: $L_4+C = L_4PC$.
Площина P перпендикулярна осі L_4 .



Згідно теореми 4: $L_4+L_2 (L_2 \perp L_4) = L_44L_2$.
Знайшли L_2 , які перпендикулярні осі L_4 .



Згідно теореми 2в: $L_2+C = L_2PC$.
Площина P перпендикулярна осі L_2
та проходить через вісь L_4



Згідно теореми 3: $L_4+P (P//L_4) = L_44P$.
Знайшли 4 площини P , які проходять через
вісь L_4

Підсумовуємо всі елементи симетрії та одержуємо повну формулу симетрії:

$$L_4+C+L_2=L_44L_25PC. \text{ Згідно табл. 3.2 (32 види симетрії) кристал з}$$

такою формулою симетрії відноситься до середньої категорії, тетрагональної сингонії, планаксіального виду симетрії.

Завдання

1. Визначити формулу симетрії заданого багатогранника (моделі кристала), привести використані теореми складання.
2. Записати категорію, сингонію, вид симетрії.
3. Побудувати стереографічну проекцію елементів симетрії. Кристал розташувати згідно з правилами установки кристалів для відповідної сингонії.
4. Нанести на стереографічну проекцію елементів симетрії гномостереографічну проекцію граней заданого багатогранника.
5. Доповнити відсутні елементи симетрії на приведених стереографічних проекціях згідно з заданим варіантом (додаток Д). Записати використані теореми складання та отриману повну формулу симетрії.

Зміст звіту

Описати елементи симетрії, спосіб їх проектування з використанням стереографічної проекції. Привести основні теореми складання. За планом роботи виконати та оформити індивідуальні завдання.

Контрольні питання

1. Що називають центром симетрії, площиною симетрії ?
2. За якою ознакою у багатогранників виявляють наявність центра симетрії, площини симетрії ?
3. Що таке вісь симетрії ? Як визначають елементарний кут повороту та порядок осі симетрії?
4. Інверсійна вісь та порядок її виявлення.
5. Теореми складання елементів симетрії.
6. Поняття симетрично-рівних та одиничних напрямків.
7. Як позначаються елементи симетрії при проектуванні ?

Лабораторна робота № 4

ВИЗНАЧЕННЯ КРИСТАЛОГРАФІЧНИХ СИМВОЛІВ ВУЗЛІВ, НАПРЯМКІВ ТА ПЛОЩИН В КРИСТАЛІЧНИХ ҐРАТКАХ

Мета роботи: ознайомитися з методами визначення кристалографічних символів вузлів, напрямків та площин; навчитися знаходити відповідні символи в кристалічних ґратках.

План заняття

1. Опанувати принцип визначення кристалографічних символів вузлів, напрямків та площин в кристалічних ґратках кубічної та гексагональної сингоній.

2. Навчитися будувати напрямки та площини по заданим кристалографічним символам в кристалічних ґратках кубічної та гексагональної сингоній.

3. Відповідно до індивідуального завдання показати напрямки та площини за заданими символами, а також визначити кристалографічні індекси для певних вузлів, напрямків та площин в кристалічних ґратках кубічної та гексагональної сингоній.

Загальні положення

Основні елементи кристалічних ґраток – це вузли, напрямки вузлових атомних рядів, а також атомно-кристалічні площини. Для їх позначення в кристалографії використовують спеціальні кристалографічні символи. Символ складається з трьох або чотирьох цифр (індексів), записаних у спеціальних дужках для кожного структурного елемента дужках. Наприклад: $(\bar{2}10)$ – кристалографічний символ площини, індекси у круглих дужках вимовляються як «два з мінусом, один, нуль».

Початок координат вибирають в будь-якому вузлі ґратки, а координатні осі в кожній сингонії проводять вздовж базисних векторів елементарної комірки.

Кристалографічні символи вузлів. Положення довільного вузла в ґратках характеризується радіусом-вектором $\bar{R} = m\bar{a} + n\bar{b} + p\bar{c}$, який проводять з початку координат до вузла комірки з координатами m, n, p . Цифри m, n, p записують у подвійні квадратні дужки. Так $[[mnp]]$ –

рівних напрямків в кубічній сингонії, що співпадають з ребрами куба $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$, мають символ $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ або $\langle 001 \rangle$. В тетрагональній сингонії ($a = b \neq c$) до сукупності $\langle 001 \rangle$ входить тільки два напрямки: $[001]$ і $[00\bar{1}]$, інші чотири напрямки відносяться до сукупності $\langle 100 \rangle$ або $\langle 010 \rangle$.

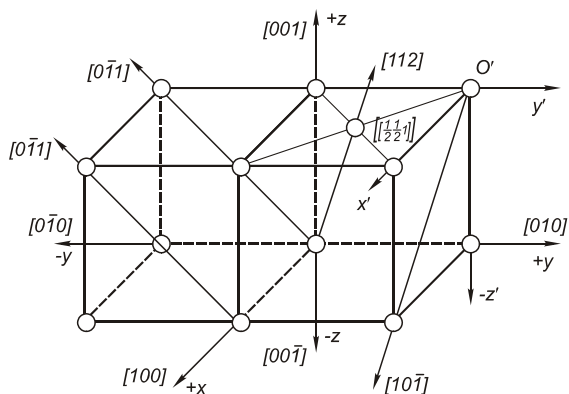


Рисунок 4.2 – Кристалографічні символи напрямків

Кристалографічні символи площин. Для визначення символу площини необхідно виконати певні операції у такій послідовності:

1. Визначити відрізки OA_x , OB_y , OC_z , які площина відсікає на координатних осях. Одиницею виміру треба брати параметри комірки (відповідно для кожної осі береться свій параметр).

2. Записати величини, обернені до знайдених відрізків:

$$\frac{1}{OA_x} \quad \frac{1}{OB_y} \quad \frac{1}{OC_z}.$$

3. Знайти відношення обернених величин і привести їх до найменших взаємнопростих чисел h , k , l :

$$\frac{1}{OA_x} : \frac{1}{OB_y} : \frac{1}{OC_z} = h : k : l.$$

4. Індеси h , k , l взяти у круглі дужки, (hkl) – кристалографічний символ площини у загальному вигляді.

Так, на рис. 4.3 заштриховані площини відсікають на осях OX , OY , OZ відповідні відрізки величиною $1, 1, \frac{1}{2}$ (рис.4.3, а); $\infty, 1, \frac{1}{2}$ (рис.4.3, б); $1, 3, 2$ (рис.4.3, в); $\frac{1}{3}, -1, \frac{1}{2}$ (рис.4.3, г); $-1, \infty, \infty$ (рис.4.3, д).

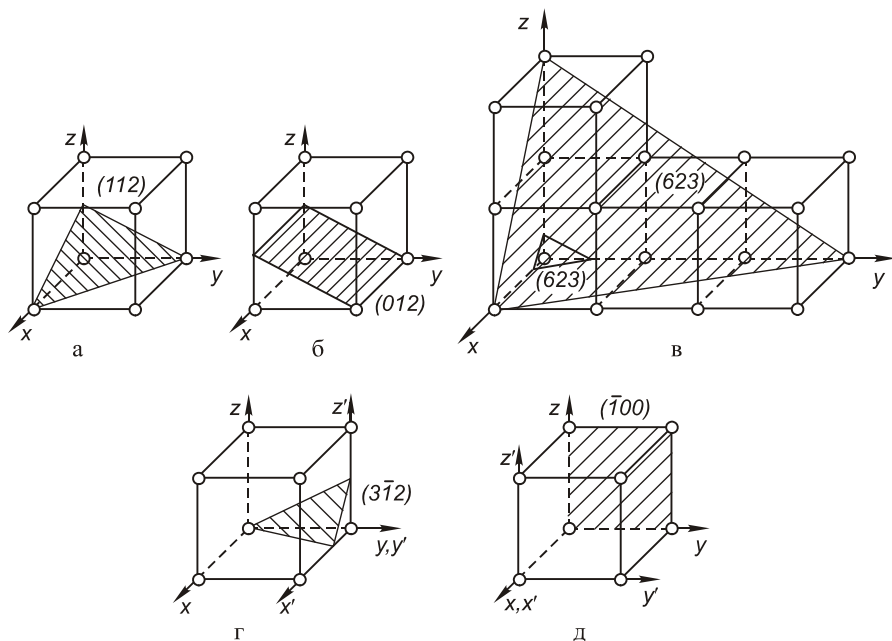


Рисунок 4.3 – Кристалографічні символи площин в кубічних ґратках

У випадку, коли площина паралельна координатним осям, вона перетинається з віссю в нескінченності (рис. 4.3, б і 4.3, д). Треба також зважити на те, що не можна знайти відрізки, якщо площина проходить через початок координат і тому його треба перенести у сусідній вузол (координатні осі OX' , OY' , OZ' позначені на рис.4.3, г і 4.3, д).

Тепер для означених на рис. 4.3 площин можна легко знайти індекси:

$$\begin{aligned} \frac{1}{1} : \frac{1}{1} : \frac{1}{1/2} &= 1:1:2; & \frac{1}{\infty} : \frac{1}{1} : \frac{1}{1/2} &= 0:1:2; \\ \frac{1}{1} : \frac{1}{3} : \frac{1}{2} &= 6:2:3; & \frac{1}{1/3} : \frac{1}{-1} : \frac{1}{1/2} &= 3:\bar{1}:2; \\ \frac{1}{-1} : \frac{1}{\infty} : \frac{1}{\infty} &= \bar{1}:0:0 \end{aligned}$$

На рис.4.3, в показано найближчу до початку координат площину (623) із серії паралельних. Відрізки, що вона відтинає по відповідним координатам осей, дорівнюють 1/6, 1/2, 1/3.

Слід зауважити, що взаємно перпендикулярні площина і напрямок мають однакові індекси для ґраток кубічної сингонії.

Симетрично-рівні площини згідно з симетрією ґраток мають однакову щільність пакування атомів та пов'язані елементами симетрії. Сукупність таких площин у відповідній сингонії позначається фігурними дужками: $\{hk\ell\}$.

Кристалографічні символи в ґратках гексагональної сингонії. При визначенні символів в ґратках гексагональної сингонії використовують чотири координатні осі згідно з геометрією ґратки (OX , OY , OU і OZ). Четверту допоміжну координатну вісь розташовують у горизонтальній площині і вона складає із осями OX та OY кут 120° (рис. 4.4).

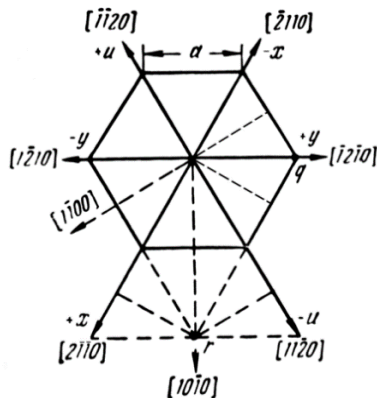


Рисунок 4.4 – Кристалографічні символи напрямків в гексагональній сингонії

Відповідний індекс i щодо цієї осі посідає третє місце у символі: для площин $-(hki\ell)$ або індекс t для напрямку $-[uvw]$. Індекс i -

та залежать від значення перших двох індексів пов'язані з ними такими рівняннями $h + k + i = 0$ або $u + v + t = 0$. Тоді $i = -(h + k)$ або $t = -(u + v)$. Так, якщо вузол q має символ $\left[\begin{matrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 2 & 2 & 0 \end{matrix} \right]$ то відповідний на-

прямок координатної осі OY , на якій лежить цей вузол, має символ $[\bar{1} 2 \bar{1} 0]$, протилежний напрямок позначається символом $[1 \bar{2} 1 0]$. Знаки змінюються на протилежні (рис.4.4).

Аналогічно символ напрямку, який проходить через початок координат і вузол r з координатами $\left[\begin{matrix} 3 & 0 & \bar{3} \\ 2 & 2 & 0 \end{matrix} \right]$, позначається як $[1 0 \bar{1} 0]$.

На рис. 4.5 показано деякі площини в гексагональній ґратці. Площини $(\bar{1} \bar{1} 0)$ і $(0 \bar{1} 0)$, в символах яких застосовано тільки три індекси, структурно еквівалентні, що не очевидно. Використання четвертого індексу ліквідує цей недолік. Вище наведені площини мають символи $(\bar{1} \bar{1} 0 0)$ і $(0 \bar{1} 1 0)$ та відрізняються тільки перестановкою індексів і знаками. Символ похилої площини, що має форму трикутника, $(1 0 \bar{1} 1)$: $\frac{1}{1} : \frac{1}{\infty} : \frac{1}{-1} : \frac{1}{1} = 1 : 0 : \bar{1} : 1$.

Перевірка дає: $h + k + i = 1 + 0 - 1 = 0$.

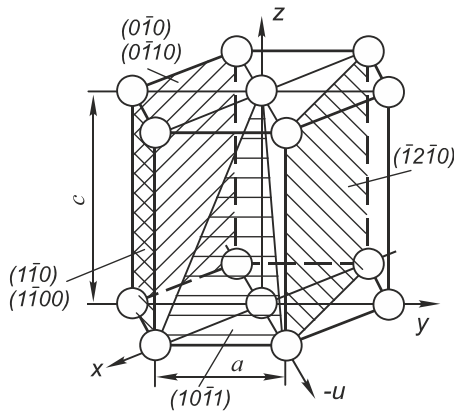


Рисунок 4.5 – Найважливіші площини в ґратці гексагональної сингонії

Зміст звіту

Описати принцип визначення кристалографічних символів вузлів, напрямків та площин в кристалічних ґратках кубічної та гексагональної сингоній. За планом роботи виконати і оформити індивідуальні завдання.

Контрольні питання

1. Розташування координатних осей в ґратках різних сингоній?
2. Як визначити індекси вузлів, напрямків і площин та записати їх кристалографічний символ?
3. Як визначити кристалографічний символ напрямку, що не проходить через початок координат?
4. Як знайти символ площини, що проходить через початок координат?
5. Особливості у визначенні індексів гексагональних ґраток.
5. Чому в гексагональній сингонії додано ще одну координатну вісь?
6. Як визначити та якими дужками позначити симетрично-рівні напрямки та площини в ґратках різних сингоній ?

Лабораторна робота №5

ТИПИ ЕЛЕМЕНТАРНИХ КОМІРОК БРАВЕ ТА ЇХ КІЛЬКІСНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Метароботи: ознайомитися із типами елементарних комірок Браве та навчитися визначати їх кількісні характеристики.

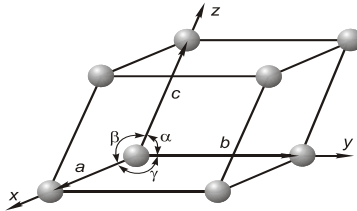
План заняття

1. Ознайомитися із різними типами елементарних комірок Браве в кристалах.
2. Навчитися визначати базис та базисну матрицю основних ґраток металів.
3. Знайти координаційне число для кожної ґратки та показати атоми, що його визначають.
4. Ознайомитися з поняттям коефіцієнту компактності.
5. Для заданої елементарної комірки вміти знаходити базис, базисну матрицю, координаційне число.

Загальні положення

Типи елементарних комірок Браве. Проаналізувавши симетрію кристалів Браве встановив, що всі існуючі кристалічні структури в тривимірному просторі можуть бути описані чотирнадцятьма комірками, котрі є трансляційними, тобто при переміщенні їх вздовж певних векторних напрямків або координатних осей відтворюється вся структура.

Кожну елементарну комірку характеризують шість параметрів: трансляційні одиничні вектори a , b , c і кути між ними α , β , γ (рис.5.1). Куткові параметри визначають форму комірки, а лінійні – розмір.

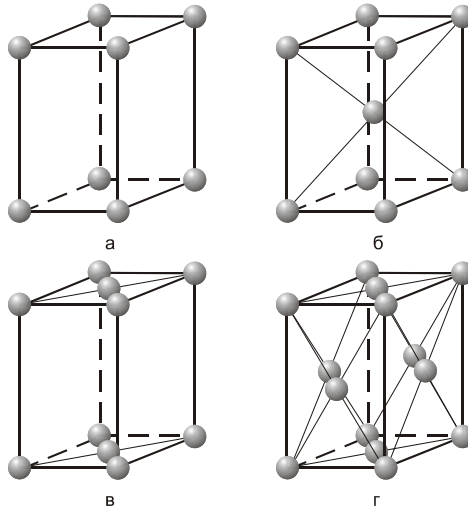


a , b , c – лінійні параметри; α , β , γ – куткові параметри

Рисунок 5.1 – Елементарна комірка кристалічної структури

За характером розташування атомів у комірці запропоновано одну примітивну (позначається буквою P) і три складні комірки з додатковими вузлами

в центрі об'єму або в центрі граней комірки. Це об'ємноцентрована (тип I), базоцентрована (тип C) та гранецентрована (тип F). Названі комірки для ромбічної сингонії наведено на рис.5.2.



а – примітивна комірка (тип P); б – об'ємноцентрована (тип I);
в – базоцентрована (тип C); г – гранецентрована (тип F)

Рисунок 5.2 – Елементарні комірки Браве ромбічної сингонії

Тільки в ромбічній сингонії присутні усі чотири типи комірок, в кубічній сингонії немає базоцентрованої, як неможливої для даної кристалічної структури, бо порушується симетрія комірки. Всі існуючі типи комірок для різних сингоній позначені в табл. 5.1 хрестиками. Всього існує 14 елементарних комірок Браве.

Відсутність того чи іншого типу елементарної комірки Браве пояснюється тим, що в більш складній ґратці можна виділити простішу комірку меншого об'єму. Саме тому існує тільки чотирнадцять комірок Браве. Враховуючи співвідношення між лінійними та кутковими параметрами можна побудувати комірку будь-якої сингонії.

Кількісні характеристики комірок. Типи комірок відрізняються базисом. Базис – це кількість атомів, котрі належать власне тільки одній комірці. При визначенні базису треба враховувати не тільки кількість атомів, а також частку їх належності до комірки за допомогою коефіцієнтів: $1/8$ – для атомів, що знаходяться у вершинах; $1/2$ – для атомів на гранях комірки; 1 – для атома, розташованого в середині ко-

мірки. Так в примітивній ґратці кожен атом належить восьми коміркам, тому на одну комірку припадає тільки один атом: $N = 1/8 \cdot 8 = 1$.

Таблиця 5.1 – 14 елементарних комірок Браве

Сингонія ґратки	Параметри ґратки	Тип просторової ґратки Браве			
		Примітивна (P)	Базоцентрована (C)	Об'ємноцентрована (I)	Гранецентрована (F)
Триклінна	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	+			
Моноклінна	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	+	+		
Ромбічна	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	+	+	+	+
Тригональна	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	+			
Тетрагональна	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	+		+	
Гексагональна	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	+			
Кубічна	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	+		+	+

Базисна матриця – це сукупність координат базисних атомів, визначених в осьових відрізках. Для розглянутої примітивної комірки базисна матриця позначається символом $|000|$, бо початок координат можна вибрати в будь-якому вузлі. За аналогією знаходимо базисні атоми та їх координати і в складних ґратках (табл. 5.2). Маючи координати базисних атомів, що показують розташування атомів у просторі, можна нарисувати всю просторову структуру в цілому.

Координаційне число – кількість найближчих атомів в ґратці, розташованих на однаковій відстані відносно будь-якого довільного атома. Цей параметр характеризує щільність пакування атомів у ґратці.

Так, в об'ємноцентрованій кубічній (ОЦК) ґратці кожен атом має вісім найближчих сусідів, розміщених на відстанях $\frac{a\sqrt{3}}{2} = 0,866a$, де a – параметр ґратки. Позначається координаційне число символом $K8$ (рис. 5.3).

Більш пакованою є гранецентрована кубічна (ГЦК) комірка, атоми якої розташовані у вершинах та в центрах граней і кожен атом оточений

дванадцятьма найближчими атомами, що знаходяться від нього на однаковій відстані $\frac{a\sqrt{2}}{2} = 0,707a$. Інші атоми розміщуються на відстанях, що дорівнюють a і більше. Таким чином, координаційне число ГЦК ґратки визначається символом $K12$. Неважко переконатись, що для примітивної ґратки маємо координаційне число $K6$, і при цьому відстань між атомами дорівнює a .

Таблиця 5.2 – Значення базису та базисної матриці для різних типів ґраток

Тип ґратки	Базис	Базисна матриця
Примітивна (P)	$\frac{1}{8} \cdot 8 = 1$	$ 000 $
Об'ємноцентрована (J)	$\frac{1}{8} \cdot 8 + 1 = 2$	$\begin{array}{c c} 000 & \\ \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline 2 & 2 & 2 \end{array}$
Базоцентрована (C)	$\frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 2 = 2$	$\begin{array}{c c} 000 & \\ \hline 1 & 1 & 0 \\ \hline 2 & 2 & 0 \end{array}, \text{ або } \begin{array}{c c} 000 & \\ \hline 1 & 0 & 1 \\ \hline 2 & 0 & 2 \end{array}, \text{ або } \begin{array}{c c} 000 & \\ \hline 0 & 1 & 1 \\ \hline 0 & 2 & 2 \end{array}$
Гранецентрована (F)	$\frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 4$	$\begin{array}{c c} 000 & \\ \hline 1 & 1 & 0 \\ \hline 2 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 1 \\ \hline 2 & 0 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 1 \\ \hline 0 & 2 & 2 \end{array}$
Гексагональна цільнопакована (ГЦП)	$\frac{1}{8} \cdot 8 + 1 = 2$	$\begin{array}{c c} 000 & \\ \hline 1 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 3 & 2 \end{array}$

Якщо центри атомів, що визначають координаційне число, з'єднати лініями, то в просторі одержимо координаційний багатогранник. В його вершинах знаходяться однакові атоми, а їх кількість дорівнює координаційному числу. Для примітивної кубічної комірки – це октаedr, для ОЦК – гексаedr,

ГЦК та ГЦП – кубооктаєдр (рис. 5.4). Слід підкреслити, що координаційний багатогранник зовсім не відповідає зовнішній формі кристала чи елементарної комірки.

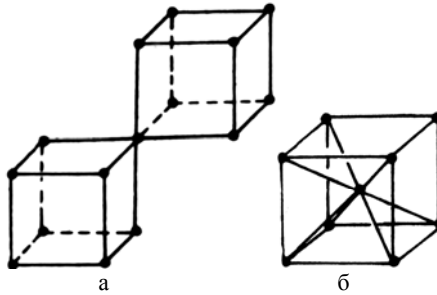


Рисунок 5.3 – Знаходження координаційного числа для примітивної кубічної ґратки (а) та для ОЦК ґратки (б)

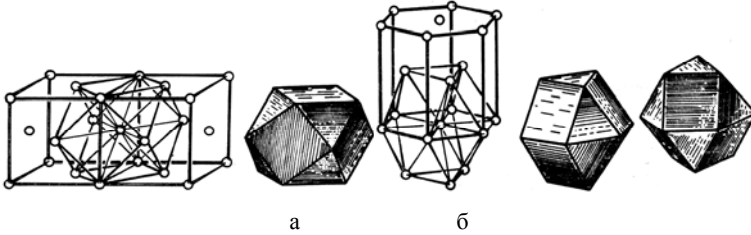


Рисунок 5.4 – Координаційне число для ГЦК ґратки (а), ГЦП (б) та поліедр у вигляді кубооктаєдра

Коефіцієнт компактності – це частка об'єму комірки, котрий займають атоми (в %):

$$\eta = \frac{V_a}{V_k} \cdot 100\% = \frac{N \cdot V_0}{V_k} \cdot 100\%,$$

де V_a – об'єм базисних атомів;

V_k – об'єм комірки (для кубічної сингонії $V_k = a^3$);

N – кількість базисних атомів;

$V_0 = \frac{4}{3} \pi r^3$ – об'єм одного атома (r – радіус атома).

Для примітивної кубічної комірки коефіцієнт компактності дорівнює 52%, для ОЦК – 68%, для ГЦК і ГЦП – 74%. Надлишок об'єму комірки припадає на порожнини або так звані пори.

Внаслідок існування між атомами переважно металевого зв'язку метали мають щільнопаковані ґратки і кристалізуються в одну з таких структур

(табл.5.3).

Таблиця 5.3 – Кристалічні структури металів

Тип ґратки	Метали
ОЦК	α -Fe, V, W, Mo, Nb, β -Ti, β -Zr, Ba, Cr, β -Hf
ГЦК	γ -Fe, Ni, Al, Ag, Au, Cu, Pb, Pt
ГЦП	Cd, α -Co, Mg, α -Hf, Re, Ru, α -Ti, Zn, α -Zr

Складна гексагональна щільнопакована(ГЦП) ґратка та її характеристики. Чимало металів (Be, Mg, Zn, Cd, α -Ti, α -Co, α -Zr, α -Hf та інші) мають гексагональну щільнопаковану структуру. Щоб підкреслити належність такої структури до гексагональної сингонії із віссю симетрії шостого порядку, її зображають у вигляді гексагональної призми, що складається із трьох комірок, розташованих під кутом 120°C (рис.5.5). Одна із комірок на рисунку виділена і має такі характеристики: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, в основі такої комірки – ромб. ГЦП структура є двошаровою АВАВАВ..., при цьому у кожному шарі щільність пакування атомів максимальна (лаб.роб. №6, рис.6.2, г) відстань між шарами становить $c/2$. Координаційне число дорівнює 12, базисна матриця – $|000; 1/3 \ 2/3 \ 1/2|$, коефіцієнт компактності $\eta = 74\%$.

Важливим для характеристики ГЦП ґратки є співвідношення c/a , яке з геометричних міркувань для ідеальної ГЦП структури дорівнює $c/a = 1,633$ (атоми 1, 2, 3 та 4 знаходяться у вершинах тетраедра). Відхилення від цього значення із врахуванням сил міжатомного зв'язку в реальних структурах приводить до більшої дефектності ґратки і змін систем ковзання для металів із ГЦП ґраткою.

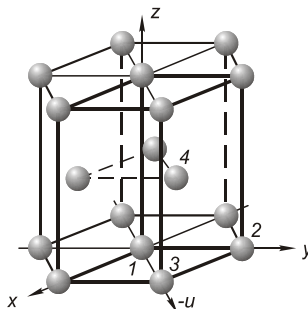


Рисунок 5.5 – Гексагональна щільнопакована ґратка

Зміст звіту

Нарисувати основні типи комірок (рис. 5.2). Охарактеризувати кількісні характеристики комірок: базис, координаційне число і коефіцієнт компактності. Показати ГЩП ґратку (рис. 5.5) та вказати її кількісні характеристики. За планом роботи виконати і оформити індивідуальне завдання.

Контрольні питання

1. Елементарна комірка та її параметри.
2. Типи елементарних комірок, їх позначення.
3. Скільки існує елементарних комірок Браве? Причини відсутності того чи іншого типу елементарної комірки Браве.
4. Що таке базис і як записати базисну матрицю?
5. Що таке координаційне число і що саме воно визначає?
6. Дати характеристику коефіцієнту компактності.
7. Які метали мають ОЦК, ГЦК чи ГЩП ґратки ?

Лабораторна робота № 6
ВИЗНАЧЕННЯ НАЙБІЛЬШ ЩІЛЬНОПАКОВАНИХ
НАПРЯМКІВ І ПЛОЩИН В ОСНОВНИХ
ГРАТКАХ МЕТАЛІВ.
ВИДИ ЩІЛЬНОПАКОВАНИХ СТРУКТУР

Мета роботи: ознайомитися з щільнопакованими структурами. Навчитися визначати найбільш щільнопаковані напрямки і площини в ґратках та коефіцієнти компактності.

План заняття

1. Зарисувати розташування атомів в площинах (100), (110) та (111) в ґратках кубічної сингонії (примітивній, ОЦК, ГЦК).
2. Розрахувати ретикулярну густину для кожної площини і визначити найбільш щільнопакований напрямок і площину в кожній ґратці.
3. Визначити співвідношення між параметром ґратки і радіусом атома і розрахувати коефіцієнт компактності для комірок кубічної сингонії.
4. Визначити місця розташування пор в ґратках ОЦК, ГЦК та ГЦП.

Загальні положення

Основна закономірність будови кристалічних ґраток металів полягає в тому, що атоми заповнюють простір найбільш щільно, тобто торкаються один одного в якнайбільшій кількості точок. Розглянемо модель структури, яка складається із атомів одного сорту, що мають форму кулі, яка не може бути zdeформована при стисненні. Всі існуючі структури можна уявити як упаковку куль.

В будь-якій ґратці існують площини з різною щільністю в розташуванні атомів. Для точного визначення площини найщільнішого пакування треба знайти ретикулярну густину n_s , що визначає кількість атомів на одиницю площі:

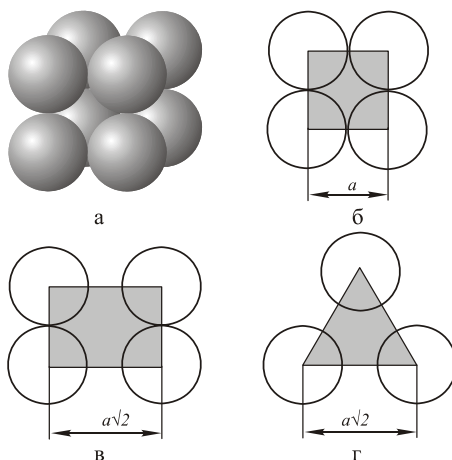
$$n_s = \frac{N}{S},$$

де N – кількість атомів на вибраній ділянці;

S – площа цієї ділянки.

Щільнопакованими площинами в ґратках є кристалографічні площини з малими значеннями індексів h, k, l . Розглянемо розташуван-

ня атомів саме на таких площинах (100), (110) та (111) в примітивній кубічній ґратці (рис. 6.1).



а – примітивна кубічна комірка; б – площина (100); в – (110); г – (111)

Рисунок 6.1 – Розташування атомів на площинах з малими (hkl) в примітивній кубічній ґратці

Ретикулярна густина для цих площин складе:

$$n_{(100)} = \frac{\frac{1}{4} \cdot 4}{a^2} = \frac{1}{a^2};$$

$$n_{(110)} = \frac{\frac{1}{4} \cdot 4}{a \cdot a \cdot \sqrt{2}} = \frac{1}{a^2 \cdot \sqrt{2}} = 0,707 \cdot \frac{1}{a^2};$$

$$n_{(111)} = \frac{\frac{1}{6} \cdot 3}{\frac{(a\sqrt{2})^2 \cdot \sqrt{3}}{4}} = \frac{1}{a^2 \cdot \sqrt{3}} = 0,577 \cdot \frac{1}{a^2}$$

В розрахункових формулах у знаменнику наведено значення площі вибраної ділянки (квадрат, прямокутник, трикутник на рис. 6.1). Площина трикутника в останньому рівнянні дорівнює

$$S_{\Delta} = \frac{x^2 \cdot \sqrt{3}}{4};$$

де $x = a\sqrt{2}$ – сторона трикутника.

Таким чином, площа типу $\{100\}$ в примітивній кубічній гратці є найбільш пакованою порівняно з іншими площинами:

$$n_{(100)} > n_{(110)} > n_{(111)}.$$

Отже площини типу $\{110\}$ та $\{111\}$ мають меншу ретикулярну густину.

Найбільш щільнопакований напрямок у розглянутій гратці має символ $\langle 100 \rangle$ з періодом трансляції $= a$ (відстань між центрами куль, що торкаються одна одної, рис. 6.1, б).

Інші напрямки будуть менш паковані, бо відстань між атомами порівняно з напрямком $\langle 100 \rangle$ збільшується:

$$t_{(100)} < t_{(110)} < t_{(111)}.$$

Для визначення коефіцієнта компактності треба знайти залежність між параметром комірки a та радіусом атома r . Це співвідношення легко визначається з рис. 6.1, б і має вигляд $a = 2r$. Тоді коефіцієнт компактності для примітивної кубічної комірки складе:

$$\eta = \frac{N \cdot V_0}{V_k} \cdot 100\% = \frac{1 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} \cdot 100\% = \frac{\pi}{6} \cdot 100\% = 52\%,$$

де N – кількість базисних атомів;

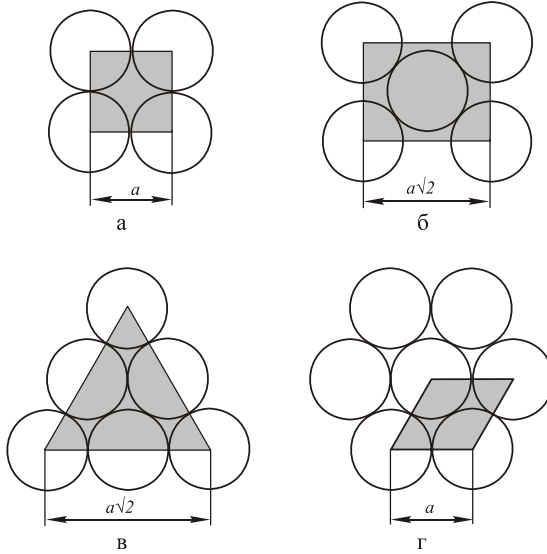
$$V_0 - \text{об'єм атома, що дорівнює } \frac{4}{3} \pi r^3;$$

$$V_k - \text{об'єм комірки.}$$

Аналогічно можна розрахувати коефіцієнт компактності для ОЦК, ГЦК та ГЦП граток, використовуючи рис. 6.2, де показано розташування атомів на найбільш щільнопакованих площинах в відповідних гратках.

Очевидно, існує лише один спосіб щільного розміщення куль однакового розміру: навколо центральної кулі треба розташувати шість куль в вершинах шестикутника (рис. 6.2, в, г), усі інші варіанти будуть менш паковані (рис. 6.2).

В залежності від розміщення атомів у другому та третьому шарі, існує два типа пакувань. Перший реалізується в ГЦП гратці і складається з двох шарів. Атоми другого шару розміщуються в певних лунках між кулями попереднього шару. Атоми третього шару розташовуються в лунках другого шару, які розташовані саме над атомами першого шару, атоми четвертого шару розташовуються над атомами другого шару і т. д. Такий вид пакування записується символом АВАВАВ..., де літерою А позначено перший шар, а літерою В – другий. Третій шар повторює перший і т. ін.

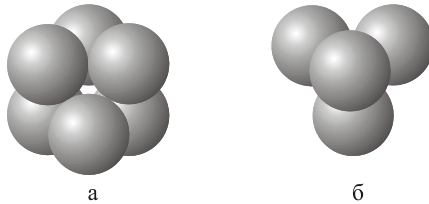


а – примітивна кубічна; б – ОЦК; в – ГЦК; г – ГЦП
Рисунок 6.2 – Найбільш щільнопаковані площини
в ґратках кубічної і гексагональної сингонії

В ГЦП ґратці ці шари розташовані в площинах (0001), перпендикулярно до осі симетрії шостого порядку.

Другий тип пакування реалізується в ГЦК ґратці і складається з трьох шарів: АВСАВСАВС... . Кулі другого шару розміщуються в певних лунках попереднього шару. Кулі третього шару розміщуються в лунках, утвореними атомами другого шару, які не знаходяться над атомами першого шару. Четвертий шар повторює перший і т. ін. На рис. 6.2, в показано один з таких шарів площини (111), котра в ґратці є перпендикулярною до об'ємної діагоналі, що збігається із віссю L_3 .

Пусті місця між атомами в ґратках називають *порожнинами* або *порами*. Існує два виду пор: октаедрична і тетраедрична (рис.6.3).



а – октаедрична пора; б – тетраедрична пора

Рисунок 6.3 – Типи порожнин (пор) в кристалічних ґратках

Октаедричну пору оточують шість атомів і усі вони знаходяться в вершинах октаедра. Тетраедрична пора – це пора між чотирма атомами (рис. 6.3, б), що в просторі утворюють тетраедр. Так, наприклад, октаедричну пору легко виявити у середині ГЦК ґратки, а в ОЦК ґратці вона розташована в центрі граней. Тетраедричну пору в ГЦК ґратці знаходимо на кожній з об'ємних діагоналей, а в ОЦК – на гранях.

Розмір пори – це сфера, що може бути розміщена між атомами. Радіус пор та їх кількість залежать від виду пори та типу ґратки, а також визначається радіусом атома r (табл. 6.1).

Таблиця 6.1 – Розмір порожнин в ґратках

Тип ґратки	Радіус пори	
	октаедричної	тетраедричної
ГЦК, ГЦП	$0,41r$	$0,22r$
ОЦК	$0,154r$	$0,29r$

Зміст звіту

Описати визначення ретикулярної густини площин. Накреслити щільнопаковані площини в ґратках примітивної кубічної, ОЦК, ГЦК і ГЦП (рис.6.2), показати розташування щільнопакованих шарів в цих ґратках. Навести поняття октаедричних та тетраедричних пор. За планом роботи виконати і оформити індивідуальне завдання.

Питання для самоперевірки

1. Що таке ретикулярна густина площини ?
2. Як знайти найбільш щільнопаковану площину в ґратці ?
3. Як визначити коефіцієнт компактності комірки ?
4. Назвіть два типи щільних пакувань атомів в структурах металів, їх розташування в ґратках.
5. Знайти розташування октаедричних та тетраедричних пор в ОЦК, ГЦК та ГЦП ґратках.
6. Від чого залежить розмір пор ?

ЛІТЕРАТУРА

1. Бірюкович, Л.О. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія: підручник для студ. спеціальності 132 Матеріалознавство / Л.О. Бірюкович / КПІ ім. Ігоря Сікорського. – К.: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 234 с.

2. Пчелінцев, В.О. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія: Навчальний посібник / В.О. Пчелінцев. – Суми: Вид-во СумДУ, 2007. – 226 с.

3. Словотенко, Н.О. Геометрична кристалографія. Ч.1: навч. посібник для студентів ОКР «Бакалавр» напрямку 6.040103 – геологія / Н.О. Словотенко, І.Т. Бакуменко. – Львівський національний університет імені Івана Франка, 2015. – 96 с.

4. Словотенко, Н.О. Геометрична кристалографія. Ч.2: навч. посібник для студентів ОКР «Бакалавр» напрямку 6.040103 – геологія / Н.О. Словотенко, І.Т. Бакуменко. – Львівський національний університет імені Івана Франка, 2015. – 88 с.

5. Ворошилов, Ю.В. Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов: Учебник. / Ю.В. Ворошилов, В.И. Павлишин. – К.: КНТ, 2011. – 568 с.

6. Методичні вказівки та завдання до виконання лабораторних і контрольних робіт із дисципліни «Кристалографія та дефекти кристалічної будови» для студентів спеціальності 132 «Матеріалознавство» денної та заочної форми навчання / Укл.: Л.П. Степанова, В.Я. Грабовський, О.В. Лисиця. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 82 с.

Додаток А

Основні формули кристалографії

Визначення міжплощинної відстані d_{hkl} :

- кубічна сингонія $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + \ell^2}{a^2}$;
- тетрагональна сингонія $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{\ell^2}{c^2}$;
- ромбічна сингонія $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{\ell^2}{c^2}$;
- гексагональна сингонія $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \cdot \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{\ell^2}{c^2}$.

Кут між площинами $(h_1k_1\ell_1)$ та $(h_2k_2\ell_2)$:

- кубічна сингонія

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + \ell_1\ell_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + \ell_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + \ell_2^2)}};$$


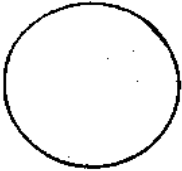

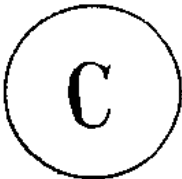

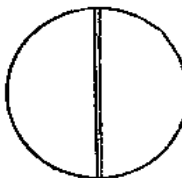

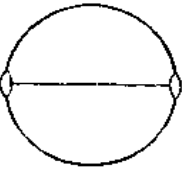
- гексагональна сингонія


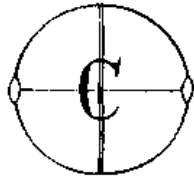

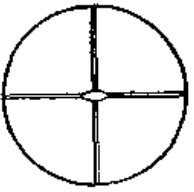

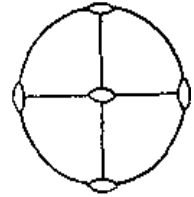

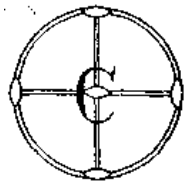

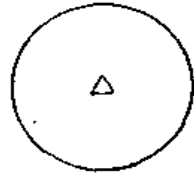
$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + \frac{1}{2}(h_1k_2 + h_2k_1) + \frac{3}{4} \cdot \frac{a^2}{c^2} \cdot \ell_1\ell_2}{\sqrt{\left(h_1^2 + k_1^2 + h_1k_1 + \frac{3}{4} \frac{a^2}{c^2} \ell_1^2\right) \left(h_2^2 + k_2^2 + h_2k_2 + \frac{3}{4} \frac{a^2}{c^2} \ell_2^2\right)}}.$$


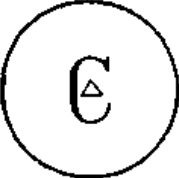

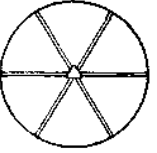

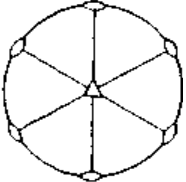

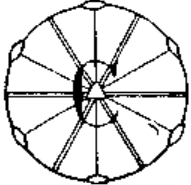

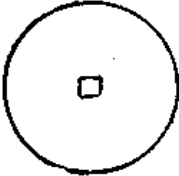
Формули для розрахунку кутів між напрямками $[uvw]$ аналогічні вище зазначеним формулам, тільки замість індексів площин (hkl) треба записати індексів напрямків $[uvw]$.




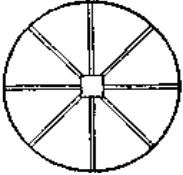

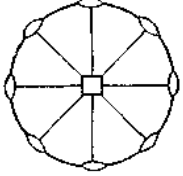

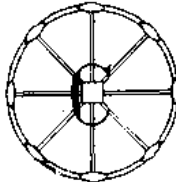

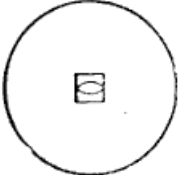
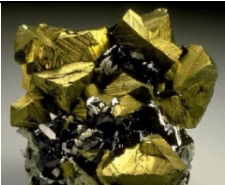
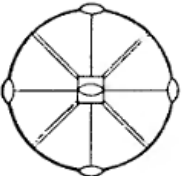
Додаток Б


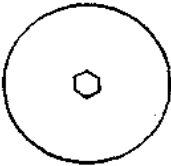

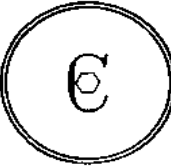
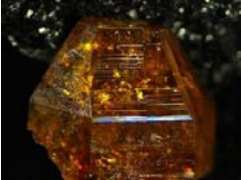
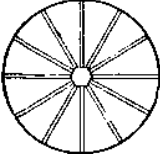

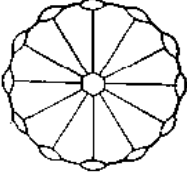

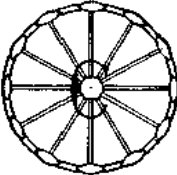

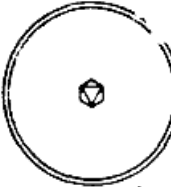
Приклади мінералів


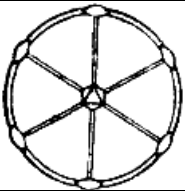

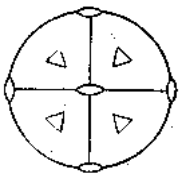

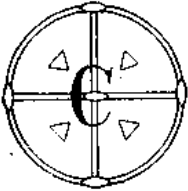

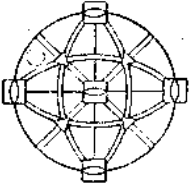

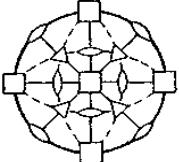

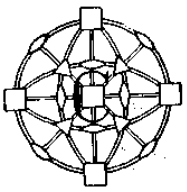
Мінерал	Назва та хімічна формула	Вид симетрії, формула симетрії	Проекція елементів симетрії
<i>Триклінна сингонія</i>			
	Волластоніт $\text{Ca}_3(\text{Si}_3\text{O}_9)$.	Примітивний -	
	Бірюза $\text{CuAl}_6[\text{PO}_4]_4(\text{OH})_8 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	Центральний С	
<i>Моноклінна сингонія</i>			
	Сахароза $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$	Планальний Р	
	Галотрихіт $\text{FeAl}_2[\text{SO}_4]_4 \cdot 22\text{H}_2\text{O}$	Аксіальний L_2	

	Реальгар AsS	Планаксіальний L_2PC	
<i>Ромбічна сингонія</i>			
	Геміморфіт $Zn_4[Si_2O_7](OH)_2 \cdot H_2O$	Планальний L_22P	
	Епсоміт $MgSO_4 \cdot 7H_2O$	Аксіальний $3L_2$	
	Топаз $Al_2[SiO_4](F,OH)_2$	Планаксіальний $3L_23PC$	
<i>Тригональна сингонія</i>			
	Сульфіт магнію $MgSO_3$	Примітивний L_3	

	<p>Діоптаз $\text{Cu}_6(\text{Si}_6\text{O}_{18}) \cdot 6\text{H}_2\text{O}$</p>	<p>Центральний L_3C</p>	
	<p>Турмалін $\text{Na}(\text{Li,Al})_3\text{Al}_6[(\text{OH})_4(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}]$</p>	<p>Планальний L_33P</p>	
	<p>Киновар HgS</p>	<p>Аксіальний L_33L_2</p>	
	<p>Кальцит CaCO_3</p>	<p>Планаксіальний L_33L_23PC</p>	
<i>Тетрагональна сингонія</i>			
	<p>Вульфеніт $\text{Pb}(\text{MoO}_4)$</p>	<p>Примітивний L_4</p>	

	Шеліт [Ca(WO ₄)]	Центральний L ₄ PC	
	Титанат свинцю PbTiO ₃	<u>Планальний</u> L ₄ 4P	
	α-квистобаліт SiO ₂	Аксіальний L ₄ 4L ₂	
	Циркон Zr(SiO ₄)	Планаксіальний L ₄ 4L ₂ 5PC	
	Тугтупіт Na ₄ [BeAlSi ₄ O ₁₂]Cl	Інверсійно примітивний L _{i4}	
	Халькопірит CuFeS ₂	Інверсійно планальний L _{i4} 2L ₂ 2P	

<i>Гексагональна сингонія</i>			
	Нефелін $(\text{Na}, \text{K})\text{AlSiO}_4$	Примітивний L_6	
	Апатит $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{OH}, \text{Cl})$.	Центральний L_6PC	
	Гринокіт CdS	Планальний L_66P	
	Кварц (β -кварц) SiO_2	Аксіальний L_66L_2	
	Берил $\text{Al}_2[\text{Be}_3(\text{Si}_6\text{O}_{18})]$	Планаксіальний L_66L_27PC	
	Германат свинцю $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$ або $(5\text{PbO} \cdot 3\text{GeO}_2)$	Інверсійно примітивний L_{i6}	

	Бенітоїт $\text{BaTi}[\text{Si}_3\text{O}_9]$	Інверсійно планальний $L_{16}3L_23P$	
Кубічна сингонія			
	Гранат Загальна формула $A_3^{2+}B_2^{3+}(\text{SiO}_4)_3$, де A_3^{2+} — Mg, Fe, Ca, Mn; B_2^{3+} — Al, Fe, Cr, V, Mn, Ti^{4+} , Zr^{4+} тощо	Примітивний $4L_33L_2$	
	Пірит FeS_2	Центральний $3L_24L_33PC$	
	Сфалерит ZnS	Планальний $4L_33Li_46P$	
	Куприт Cu_2O	Аксіальний $3L_44L_36L_2$	
	Лазурит $(\text{Na}, \text{Ca})_8(\text{AlSiO}_4)_6$ $(\text{S}, \text{SO}_4, \text{Cl}_2)$	Планаксіальний $3L_44L_36L_29PC$	

Додаток В

Кристалічні структури елементів

Елемент	Символ	Модифікація	Тип ґратки	Періоди комірки, нм	
				а	с
1	2	3	4	5	6
Срібло	Ag	-	ГЦК	0,40853	-
Алюміній	Al	-	ГЦК	0,40488	-
Миш'як	As	-	Ромбоедр.	0,37598	1,05475
Золото	Au	-	ГЦК	0,40789	-
Барій	Ba	-	ОЦК	0,501	-
Берилій	Be	α (<1254 °C)	ГЦП	0,22858	0,35843
		β (>1254 °C)	ОЦК		
Вісмут	Bi	-	Ромбоедр.	0,45460	1,1862
Вуглець	C	Графіт	Гексагон.	0,2464	0,6711
		Алмаз	Кубічна	0,35669	
Кадмій	Cd	-	ГЦП	0,29787	0,56166
Кобальт	Co	α (<400 °C)	ГЦП	0,25071	0,40695
		β (>400 °C)	ГЦК	0,3554	
Хром	Cr	-	ОЦК	0,2884	-
Мідь	Cu	-	ГЦК	0,36148	-
Залізо	Fe	α (<911°C)	ОЦК	0,28665	
		γ (911-1392°C)	ГЦК	0,3656	-
		δ (>1392°C)	ОЦК	0,2930	
Германій	Ge	-	Кубічна	0,5658	
Гафній	Hf	α (<1740 °C)	ГЦП	0,3198	0,5061
		β (>1740 °C)	ОЦК	0,3500	
Індій	In	-	ГЦТ	0,32512	0,49467
Іридій	Ir	-	ГЦК	0,38390	-
Калій	K	-	ОЦК	0,53298	-
Літій	Li	> -195 °C	ОЦК	0,35100	-
		< -195 °C	ГЦП	0,3086	0,6823
Магній	Mg	-	ГЦП	0,32089	
Марганець	Mn	α (< 727 °C)	Кубічна	0,89139	
		β (727–1095°C)	Кубічна	0,6313	
		γ (1095–1133°C)	ГЦК	0,3862	
		δ (>1133 °C)	ОЦК	0,3080	

1	2	3	4	5	6
Молібден	Mo	-	ОЦК	0,31470	-
Натрій	Na	-	ОЦК	0,4291	-
Ніобій	Nb	-	ОЦК	0,33002	-
Нікель	Ni	-	ГЦК	0,35232	-
Осмій	Os	-	ГЦП	0,27353	0,43191
Свинець	Pb	-	ГЦК	0,49507	-
Паладій	Pd	-	ГЦК	0,38874	-
Платина	Pt	-	ГЦК	0,39242	-
Реній	Re	-	ГЦП	0,27609	0,44576
Родій	Rh	-	ГЦК	0,38034	-
Рутеній	Ru	-	ГЦП	0,2700	0,4275
Сурма	Sb	-	Ромбоedr.	0,43084	1,1274
Скандій	Sc	-	ГЦП	0,3308	0,5267
Кремній	Si	-	Кубічна	0,54286	-
Олово	Sn	α (<13 °C)	Кубічна	0,6491	-
		β (>13 °C)	Тетрагон.	0,58315	0,31814
Тантал	Ta	-	ОЦК	0,33025	-
Титан	Ti	α (<882,5 °C)	ГЦП	0,29508	0,46855
		β (>882,5 °C)	ОЦК	0,3606	-
Уран	U	α (<662 °C)	Ромбічна	0,28537	b=0,58695 c=0,49548
		β (>662 –775 °C)	Тетрагон.	0,1075	0,5656
		γ (>775 °C)	ОЦК	-	-
Ванадій	V	-	ОЦК	0,30271	-
Вольфрам	W	-	ОЦК	0,31652	-
Грій	Y	α (<1490 °C)	ГЦП	0,36509	0,57388
		β (>1490 °C)	ОЦК	-	-
Цинк	Zn	-	ГЦП	0,26646	0,49461
Цирконій	Zr	α (<862 °C)	ГЦП	0,3232	0,5147
		β (>862 °C)	ОЦК	0,3620	-
Церій	Ce	α (<800°C)	ОЦК	0,5143	-
		β (>800 °C)	ГЦП	0,3650	0,5960

Додаток Г

Методичні вказівки до виконання контрольної роботи

Кожен студент одержує від викладача індивідуальне завдання (варіант для виконання контрольної роботи, що складається з п'яти питань). Перше питання контрольної роботи відповідає одному із теоретичних положень дисципліни. В другому питанні надається характеристика заданого мінералу. Останні три питання – це задачі із основних розділів курсу. Необхідні довідникові дані наведено у таблиці «Кристалічні структури елементів» (додаток В).

Типове завдання контрольної роботи

1. _____.
2. Описати заданий мінерал _____. Навести його зображення, пояснити походження назви, навести хімічну формулу, вказати морфологічні особливості, навести властивості (забарвлення, колір риски, блиск, спайність, прозорість, густина, твердість за Моосом тощо), походження мінералу, його використання.
3. Використовуючи теореми складання, одержати повний набір елементів симетрії кристала – точкову групу при підсумуванні наступних елементів симетрії:

Привести використані теореми складання. Вказати вид симетрії, сингонію та категорію. Намалювати кристал з такою симетрією та показати елементи симетрії.

4. Проаналізувати ретикулярну щільність різних кристалографічних площин в ґратці хімічного елемента _____. Показати на рисунку елементарної комірки найбільш щільнопаковану площину та розрахувати для неї міжплощинну відстань d_{hkl} . Визначити кристалографічний символ найбільш щільнопакованого атомного ряду. Розрахувати період повторюваності ряду та привести необхідні рисунки.

5. Знайти кут між площинами (або напрямками) _____ та _____ і показати на рисунку в _____ ґратці.

Варіанти питань до контрольної роботи

Варіанти першого питання (цифра за порядком вказує номер варіанта):

1. Поняття кристалу. Моно- та полікристали. Властивості кристалів.
2. Утворення кристалів. Особливості росту кристалів.
3. Поняття прямого та полярного кристалічних комплексів. Види кристалографічних проєкцій та їх стисла характеристика.
4. Симетрія кристалів. Елементи симетрії зовнішньої форми кристалів (центр симетрії, площина, прості осі симетрії).
5. Закон симетрії. Інверсійні осі. Співвідношення між інверсійними осями та іншими елементами симетрії.
6. Теореми складання елементів симетрії.
7. 32 види симетрії. Сингонії, категорії і види симетрії.
8. Елементи симетрії нескінчених кристалічних структур (трансляція, площина ковзаючого відбиття, гвинтові осі).
9. Елементарна комірка, її геометричні параметри. Правило вибору елементарної комірки.
10. Кристалографічні символи вузлів, напрямків, площин.
11. Поняття міжплощинної відстані. Розрахунок кута між площинами та напрямками.
12. Характеристика і типи п'яти плоских сіток Браве. Стисла характеристика 14 типів комірок Браве.
13. Основні 4 типи елементарних комірок (P, C, I, F), характеристика їх базису і базисної матриці.
14. Кількісні характеристики комірок (базис і базисна матриця, координаційне число, коефіцієнт компактності) із прикладами для ґраток металів.
15. Визначення ретикулярної щільності атомної площини. Щільнопаковані площини та напрямки. Навести приклади в ґратках металів.
16. Складна ГЦП ґратка, її характеристики (базис і базисна матриця, координаційне число, коефіцієнт компактності).
17. Складна ґратка типу алмазу, її характеристики (базис і базисна матриця, координаційне число, коефіцієнт компактності).
18. Вказати кристалографічні символи та показати в примітивній кубічній ґратці, в ГЦК, ОЦК та ГЦП ґратках найбільш щільнопаковані площини і напрямки.
19. Види пор в щільнопакованих структурах, їх розмір та розташування в ґратках (ОЦК, ГЦК і ГЦП).

20. Поліморфізм. Поліморфні модифікації. Приклади металів з поліморфними перетвореннями.

Варіанти другого питання(цифра за порядком вказує номер варіанта).

<i>Варіант</i>	<i>Мінерал</i>	<i>Варіант</i>	<i>Мінерал</i>
1	Ортоклаз	11	Берил
2	Пірит	12	Циркон
3	Кальцит	13	Гематит
4	Топаз	14	Аметист
5	Кварц	15	Гірський кришталь
6	Флюорит	16	Галіт
7	Корунд	17	Малахіт
8	Сфалерит	18	Кіновар
9	Галеніт	19	Куприт
10	Апатит	20	Барит

Варіанти третього питання(цифра за порядком вказує номер варіанта).

<i>Варіант</i>	<i>Взаємодія елементів симетрії</i>	<i>Варіант</i>	<i>Взаємодія елементів симетрії</i>
1	$L_3+C+P (P L_3)$	11	$L_6+P_{\perp}+P_{ }(P\perp L_6; P L_6)$
2	$L_4+C+P (P L_4)$	12	$P+P_{\perp}+P_{ }$ (3 взаємноперпендикулярні площини)
3	$L_6+C+L_2 (L_2\perp L_6)$	13	$P+P$ (кутміжплощинами 30°)
4	$L_3+L_2+P (L_2\perp L_3; P L_3)$	14	$L_4+P_{\perp}+P_{ }(P\perp L_4; P L_4)$
5	$L_6+P_{\perp}+L_2 (P\perp L_6; L_2\perp L_6)$	15	$P+P+C$ (кутміжплощинами 60°)
6	$L_4+L_2+P (L_2\perp L_4; P L_4)$	16	$L_2+P_{\perp}+P_{ } (P\perp L_2; P L_2)$
7	$L_2+C+P (P L_2)$	17	$L_6+C+P (P L_6)$
8	$L_3+L_2+C (L_2\perp L_3)$	18	$P+P+C$

			(кут між площинами 90°)
9	$L_4+L_2+P (L_2 \perp L_4; P \perp L_4)$	19	$P+P+L_2$ (кут між площинами 60° , $L_2 \perp P$)
10	$P+P_1+C (P \perp P)$	20	$P+P+L_2$ (кут між площинами 30° , $L_2 \perp P$)

Варіанти четвертого питання (цифра за порядком вказує номер варіанта). Визначити найбільш щільнопаковану площину та розрахувати для неї міжплосинну відстань d_{hkl} . Визначити кристалографічний символ найбільш щільнопакованого атомного ряду. Розрахувати період повторюваності ряду. Навести необхідні рисунки.

Для виконання завдання треба ретельно ознайомитися із матеріалом, який викладено в лаб.роб. №5, 6 та використати додаток А.

Тип ґратки та розмір елементарної комірки для відповідного елемента наведено у таблиці «Кристалічні структури елементів» (додаток В).

Варі-ант	Еле-мент	Варі-ант	Еле-мент	Варі-ант	Еле-мент	Варі-ант	Еле-мент
1	Ag	6	Nb	11	Cu	16	Pt
2	Al	7	Ni	12	α -Fe	17	Rh
3	Au	8	Pb	13	γ -Fe	18	Ta
4	Va	9	Pd	14	Mo	19	V
5	Cr	10	β -Co	15	Na	20	W

Варіанти п'ятого питання (цифра за порядком вказує номер варіанта). Знайти кут між площинами (або напрямками), показати на рисунку.

Для виконання завдання засвоїти матеріал наведений в лабораторних роботах №4, 5 та використати додаток А.

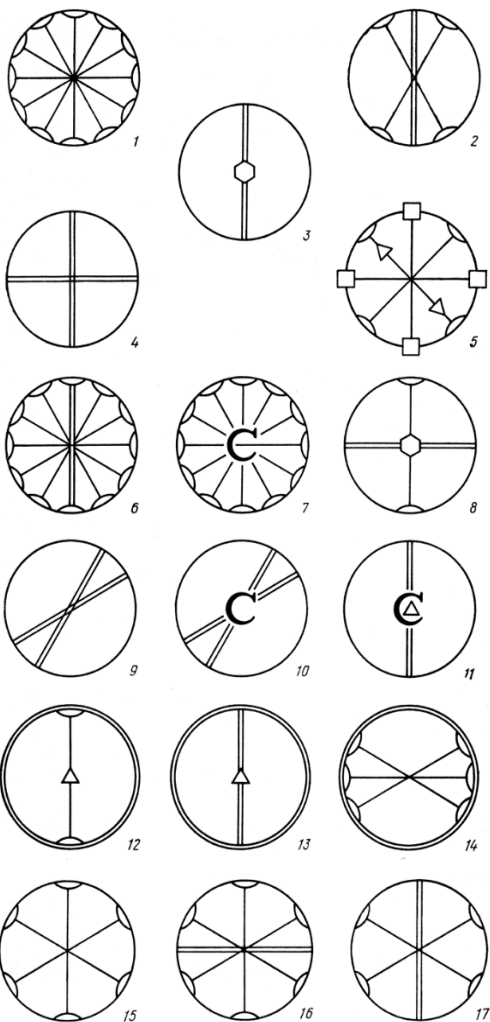
Варіант	Тип ґратки	Індекси площин або напрямків
1	2	3
1	ГЦК	$(\bar{1}\bar{2}1) (011)$

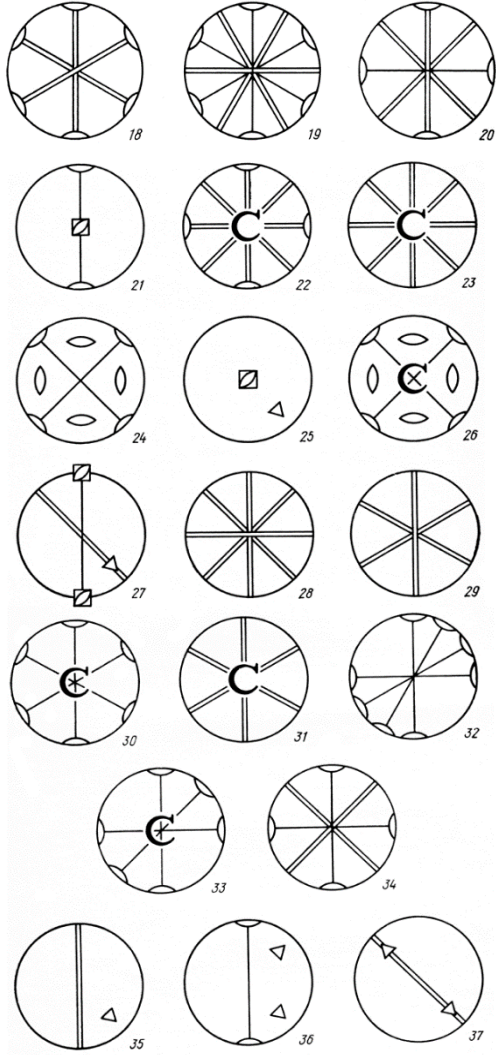
2	ОЦК	$(01\bar{1})$ $(0\bar{1}1)$
3	ГЦК	$[10\bar{1}]$ $[00\bar{1}]$
4	ГЦК	$[110]$ $[011]$
5	ГЦК	$(00\bar{1})$ $(3\bar{1}2)$
6	ГЦК	(112) (110)
7	ОЦК	$[101]$ $[\bar{1}02]$
8	ГЦК	$(\bar{1}12)$ (110)
9	Примітивна кубічна	$[111]$ $[010]$
10	ОЦК	(113) $(\bar{1}10)$
11	ГЦК	(101) (011)
12	ОЦК	$[112]$ $[001]$
13	ГЦК	$(\bar{1}\bar{1}1)$ (100)
14	ОЦК	(012) (010)
15	ОЦК	$[0\bar{1}1]$ $[112]$
16	ГЦК	$[121]$ $[110]$
17	ОЦК	(110) (210)
18	ГЦК	$[11\bar{2}]$ $[0\bar{1}\bar{1}]$
19	ОЦК	(102) (122)
20	Примітивна кубічна	(110) (111)

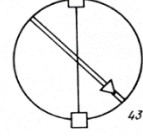
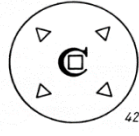
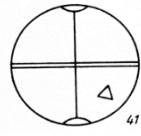
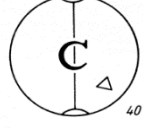
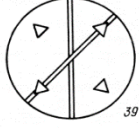
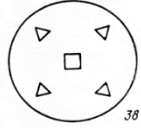
Додаток Д

Варіанти завдання до пункту 5 лабораторної роботи №3

На стереографічній проекції доповнити елементи симетрії, яких не вистачає.







ДЛЯ ПРИМІТОК