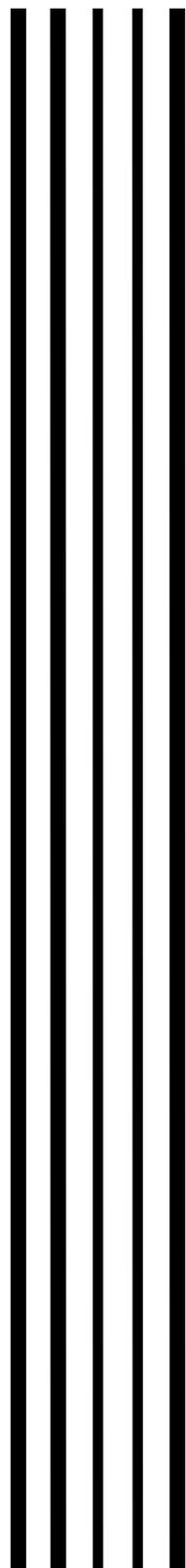


К Г Э У



**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Лабораторный практикум

Казань 2024

УДК 621.002.3

ББК 34.651

П12

П12 **Павлова, Алиса Максимовна.**

Кристаллография: практикум / А. М. Павлова. – Казань : КГЭУ, 2024. – 60 с.

Включает в себя описание лабораторных работ, методические указания по их выполнению и оформлению полученных результатов, а также теоретические вопросы.

Предназначен для обучающихся по образовательной программе направления подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника, направленность (профиль) «Материалы и технологии электроники», изучающих дисциплину «Кристаллография».

УДК 621.002.3

ББК 34.651

© Павлова А.М. 2024

© Казанский государственный энергетический университет, 2024

Лабораторная работа № 1. Стереографические проекции плоскостей направлений в кристаллах

Цель работы: 1) ознакомление с принципами построения сферических, стереографических и гномостереографических проекций кристаллов; 2) решение задач с помощью стандартных стереографических проекций и сетки Вульфа.

Теоретические сведения

В кристаллографии часто необходимо представлять не сам кристалл, нередко имеющий сложную форму, в которой трудно уловить его характерные особенности, а некоторые его параметры, остающиеся неизменными даже в том случае, когда кристалл не имеет формы правильного выпуклого многогранника. Одной из особенностей кристаллов является постоянство углов. Эта особенность сыграла большую роль как в практике идентификации веществ, так и в развитии теории кристаллических форм. В частности, широкое применение получили гониометрия (измерение углов между гранями) и представление углов между гранями вместо самих граней, которые могут иметь и различные размеры, и различную форму. Для получения полной информации об огранке кристалла необходимо не только определить элементы его симметрии, но и, используя основной закон постоянства углов, зафиксировать грани данного кристалла относительно его элементов симметрии.

Весьма удобно для анализа кристаллов графическое представление угловых соотношений на двухмерной схеме (на листе бумаги). Такими двухмерными схемами являются кристаллографические проекции: стереографические, гномостереографические и гномонические. Строятся эти проекции на основе сферической проекции.

Для построения сферической проекции граней (плоскостей) кристаллов прежде всего необходимо их сместить параллельно самим себе в одну точку, например в центр кристалла. Естественно, что параллельный перенос не нарушает угловых соотношений между гранями. Совокупность сведенных в одну точку граней (плоскостей) кристалла называется его *планарным комплексом*.

В любых геометрических многогранниках, в том числе в кристаллах, углы между гранями (плоскостями) удобнее определять через углы между нормальными к этим граням. Совокупность граней, таким образом, можно заменить совокупностью нормалей, смещенных параллельно самим себе в одну точку, например в центр кристалла. Вся совокупность нормалей к граням (плоскостям) кристалла называется его *полярным комплексом*.

Точки пересечения полярного комплекса с поверхностью сферы составляют его *сферическую проекцию* (радиально расходящиеся нормали

проецируются на поверхность сферы в виде точки). Каждая точка (полюс) представляет одну грань (плоскость) кристалла, все точки - весь кристалл. На рис.1.1 и 1.2 приведены сферические проекции полярных комплексов гексаэдра и октаэдра.

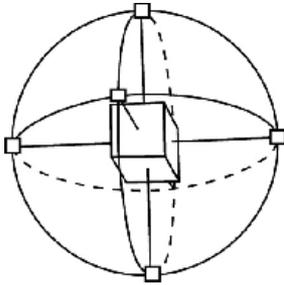


Рис.1.1. Сферическая проекция полярного комплекса гексаэдра

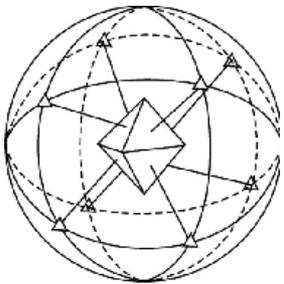


Рис.1.2. Сферическая проекция полярного комплекса октаэдра

Для построения сферической проекции ребер (направлений) их путем параллельного переноса также сводят в одну точку и продолжают до пересечения со сферой, получая систему полюсов ребер (направлений).

Положение полюсов на поверхности сферы можно охарактеризовать сферическими координатами: широтой и долготой. Для представления сферических проекций в числовой форме введем сферическую систему координат или, иначе говоря, систему полярных координат на поверхности сферы (рис.1.3).



Рис. 1.3. Сферическая система координат: P - произвольная точка на поверхности сферы с угловыми координатами φ и ρ ; Q - точка на экваторе с $\varphi=0$

Определим на сфере проекций (по аналогии с глобусом) две диаметрально противоположные точки - северный N и южный S полюсы, а также экватор - линию пересечения экваториальной плоскости, проходящей через центр сферы перпендикулярно линии NS , и нулевой меридиан - дугу, проходящую по поверхности сферы от северного полюса до южного.

Широта, или полярное расстояние ρ - первая сферическая координата точки - отсчитывается по любому меридиану от северного полюса до южного. Возможные значения полярных углов ρ лежат в интервале от 0 до 180° . Полярный угол северного полюса равен нулю, полярный угол южного полюса равен 180° .

Второй сферической координатой точки является долгота, или угловое расстояние φ , отложенное вдоль экватора от нулевого меридиана по часовой стрелке, если смотреть с северного полюса сферы.

Для построения двумерных проекций сферическая проекция планарного или полярного комплекса затем проецируется на специально выбираемую плоскость. При этом сферическая проекция кристаллов может быть спроецирована на эту плоскость, являющуюся плоскостью проекции, разными способами (рис. 1.4).

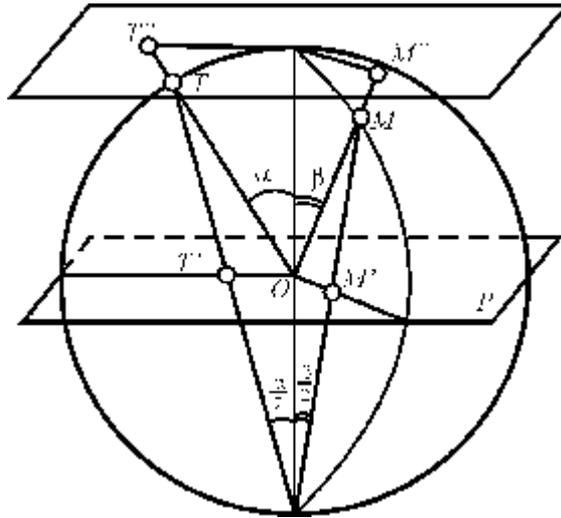


Рис.1.4. Принцип построения гномонической M'' и стереографической M' проекций полюса M

В кристаллографии чаще всего используются стереографические проекции кристаллов. За плоскость стереографической проекции Q принимается экваториальная плоскость, на которую сфера проецируется в виде круга проекций. В результате пересечения сферической поверхности с плоскостью Q имеем большой круг, отвечающий экватору сферы проекций и представляющий круг проекций.

Рассмотрим построение стереографической проекции некоторого направления OA (рис.1.5). Для этого продолжим данное направление до пересечения со сферой проекций (точка a_1). Соединим точку a_1 с «точкой зрения» S «лучом зрения» Sa_1 .

Точка a - точка пересечения Sa_1 с плоскостью Q - является стереографической проекцией направления OA . Если направление пересекает сферу проекций в ее нижней части, то за «точку зрения» принимается N (северный полюс).

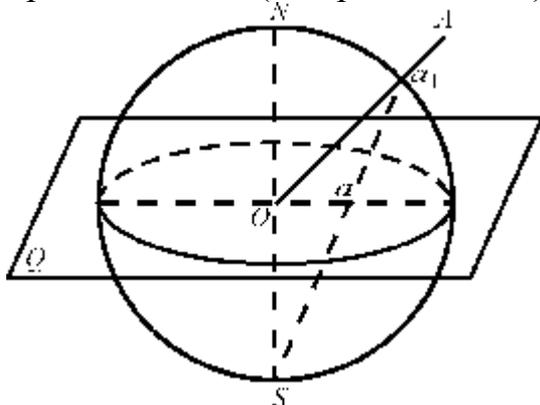


Рис.1.5. Построение стереографической проекции a направления OA

Основным преимуществом стереографических проекций перед другими является то, что на них сохраняются угловые соотношения - углы между дугами на сфере проекций проецируются без искажений (в других проекциях угловые соотношения искажаются). Однако гномоническая проекция, например, обладает тем преимуществом перед стереографической, что координаты точек на ней пропорциональны индексам Миллера соответствующих плоскостей. Гномонические проекции удобны для анализа рентгенограмм монокристаллов, но в кристаллографии применяются редко.

Достоинством стереографической проекции является также то, что проекции всех плоскостей, полюсов их нормалей и направлений не выходят за пределы круга плоскости проекций (в гномонической проекции полюса граней, перпендикулярных плоскости проекций, отодвигаются в бесконечность).

Стереографическая проекция планарного комплекса кристалла представляет собой совокупность проекций окружностей соответствующих больших кругов. Чтобы не усложнять проекцию, на ней представляют только проекции пересечения плоскостей в одной из полусфер.

Стереографические проекции кристаллографических плоскостей и плоскостей симметрии, параллельных плоскости проекций, представляют собой окружности, совпадающие с границами круга проекций. Проекция плоскостей, перпендикулярных плоскости проекций, представляют собой прямые, совпадающие с диаметром круга проекций. Наклонные плоскости проецируются в виде дуг, опирающихся на концы диаметра круга проекций (рис.1.6).

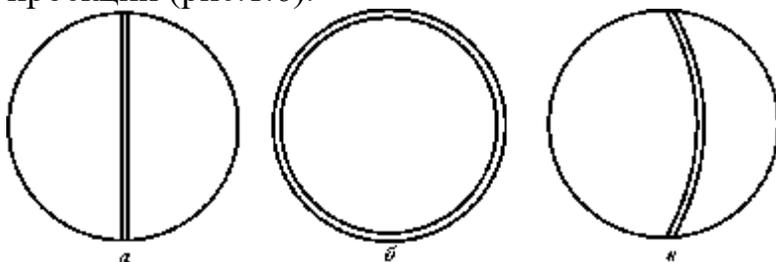


Рис.1.6. Стереографические проекции плоскостей, расположенных относительно плоскости проекции: *a* - перпендикулярно; *б* - в самой плоскости; *в* - под косым углом к ней

Стереографические проекции направлений и осей симметрии изображаются двумя точками, лежащими на окружности круга плоскости проекций, если они параллельны ей; совпадающими с его центром, если они вертикальны; и в поле круга, если они наклонны (рис.1.7).

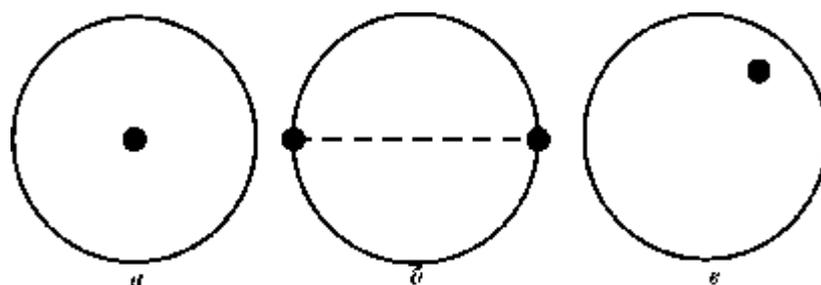


Рис.1.7. Стереографические проекции направлений, расположенных относительно плоскости проекции: *a* - перпендикулярно; *б* - в самой плоскости; *в* - под косым углом к ней

Наличие центра симметрии отображается буквой *C*, охватывающей центр проекции. На рис.1.8 представлена стандартная стереографическая проекция элементов симметрии куба.

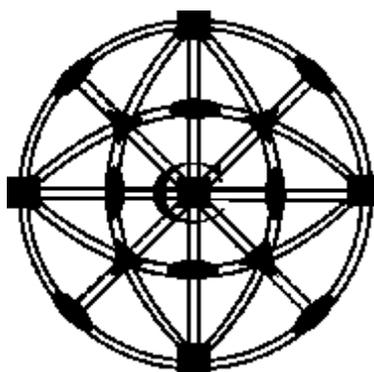


Рис.1.8. Стандартная стереографическая проекция элементов симметрии куба (ось симметрии L_4 перпендикулярна плоскости проекции)

Стереографические проекции граней или плоскостей, если их много, оказываются сильно перегруженными линиями. Поэтому в кристаллографии чаще используются проекции не планарного, а полярного комплекса кристаллов.

Проекция полярного комплекса кристалла называется *гномостереографической* проекцией («гномос» - перпендикуляр). В этом случае можно без значительного усложнения внести в чертеж проекции нормалей, пересекающих нижнюю часть сферы проекций, спроецировав их на плоскость проекций из северного полюса и придав им другое обозначение (например, проекции нормалей с верхней полусферы обычно обозначаются кружками, с нижней - крестиками).

Горизонтальные грани (плоскости) на гномостереографических проекциях кристаллов отображаются точками, совпадающими с центром круга проекций, вертикальные - расположенными на окружности круга проекций, наклонные - внутри круга проекций. Чем больше наклон грани (плоскости), тем дальше от центра круга проекций расположена отображающая ее точка. Принципиально возможны гномостереографические проекции направлений, но они нецелесообразны, так как нормали к направлению составляют перпендикулярную ему плоскость, которая проецируется в линию. В результате их гномостереографическая проекция будет не точечной, а линейной.

Для того чтобы на одной схеме дать одновременно проекцию и граней и ребер (плоскостей и направлений) кристалла, строят гномостереографическую проекцию граней (плоскостей) и стереографическую проекцию ребер (направлений). Окружность большого круга гномостереографической проекции является геометрическим местом проекций полюсов всех вертикальных граней, т.е. входящих в зону вертикальной оси, полюс которой проецируется в центр круга проекций.

Все точки стереографической проекции связаны взаимно-однозначным соответствием с точками поверхности сферы. Поэтому каждая точка стереографической проекции может быть охарактеризована сферическими координатами ρ и φ . Для быстрого и удобного определения сферических координат точек стереографической проекции используются специальные шаблоны, называемые *градусными сетками*.

Для построения градусных сеток сначала проведем на сфере определенное количество параллелей и меридианов, подобно геодезическим линиям на глобусе. Угловым интервалом между соседними геодезическими линиями обычно выбирается равным 2, 5 или 10° (в зависимости от допустимой погрешности результатов). Заметим, что все меридианы являются полуокружностями больших кругов, а параллели - окружностями малых кругов. Полученная градусная сетка может быть спроецирована на плоскость по правилам построения стереографической проекции.

В рентгенографии используется сетка Болдырева - стереографическая проекция параллелей и меридианов сферической проекции на экваториальную плоскость одного из ее полюсов (рис.1.9). Меридианы на ней изображаются прямыми, радиально расходящимися из центра проекций. Параллели представляются концентрическими окружностями. Проекция экватора совпадает с окружностью, ограничивающей круг проекций, проекция северного полюса N - с центром. Полярный угол ρ отсчитывается вдоль радиуса (проекции меридиана) от центра сетки. Долгота φ отсчитывается от проекции нулевого меридиана вдоль концентрических окружностей (проекций параллелей) по часовой стрелке.

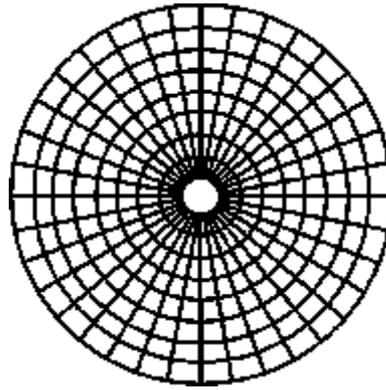


Рис.1.9. Сетка Болдырева

С помощью сетки Болдырева легко откладывать и считывать сферические координаты точек, однако сложно графически измерить угловые расстояния. Поэтому в практике чаще используется другой шаблон, называемый *сеткой Вульфа*, - стереографическая проекция широтно-меридиональной системы сферической проекции из точки на экваториальной плоскости на плоскость, проходящую через нулевой меридиан (рис.1.10).

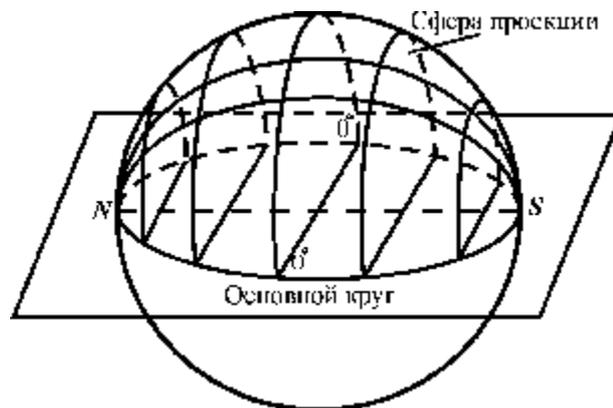
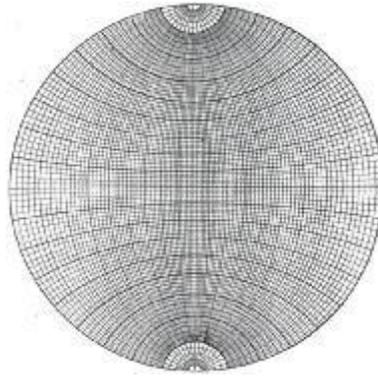


Рис.1.10. Построение сетки Вульфа путем проецирования линий широты и долготы

Стандартная сетка Вульфа, обычно используемая для решения кристаллографических задач, изображается на дуге диаметром 200 мм с угловым расстоянием между линиями параллелей и меридианов в 2° (рис.1.11).



S

Рис.1.11. Сетка Вульфа с линиями, проведенными через 2°

Обычно никаких отметок на самих стандартных сетках не делают. Для этого служит лист кальки, наложенный на сетку. Все построения и преобразования производят на кальке; определения угловых соотношений выполняют путем концентрического вращения сетки или кальки относительно друг друга.

Для того чтобы определить сферические координаты точки на стереографической проекции, сначала вращают кальку так, чтобы точка легла на диаметр сетки Вульфа, и отсчитывают ее полярное расстояние по диаметру от центра сетки (рис.1.12). Затем делают отметку конца диаметра сетки, по которому производили отсчет полярного расстояния, и возвращают кальку в прежнее положение. Долготу точки по окружности основного круга отсчитывают от $\varphi = 0$ до этой отметки.

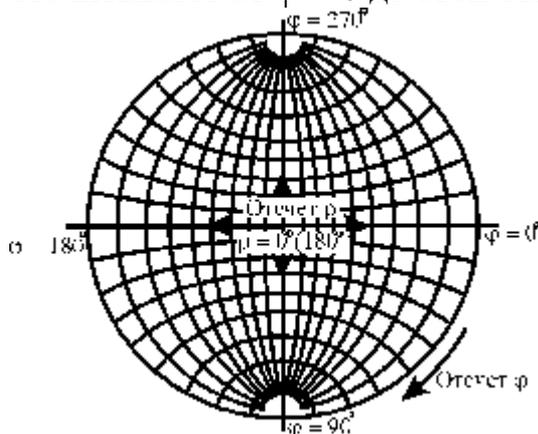


Рис.1.12. Сетка Вульфа и направления отсчета сферических координат

Угол между двумя точками отсчитывают, переводя их путем вращения кальки на один меридиан (или экватор, если это возможно), отсчитывая по нему угловое расстояние. Этот угол будет равен углу между направлениями, если точки являются стереографическими проекциями направлений, и углу, дополняющему угол между гранями (плоскостями) до 180° , если точки являются их гномографическими проекциями.

Для определения оси зоны, к которой принадлежат две плоскости, заданные их гномо- стереографическими проекциями, вращают кальку так, чтобы точки попали на один меридиан. Затем отсчитывают по экватору от точки пересечения этого меридиана с экватором 90° по направлению к центру проекции. Полученная точка и будет проекцией оси зоны. И наоборот, чтобы найти зону данной оси, необходимо перевести ее проекцию на экватор и далее найти точку, отсчитав по нему по направлению к центру 90° . Меридиан, проходящий через эту точку, является геометрическим местом, на котором лежат гномо- стереографические проекции искомой зоны плоскостей.

Метод стереографических проекций широко используется при определении ориентации кристаллов.

При решении задач рекомендуется стереографическую проекцию перенести на кальку. Затем кальку наложить на сетку Вульфа так, чтобы проекции и сетки совместились. Для удобства вращения кальки совмещенные центры можно проколоть булавкой.

Практическая часть

Задача 1. Построить стереографическую проекцию направления, заданного сферическими координатами φ и ρ .

Порядок выполнения:

1) наложить кальку на сетку Вульфа, отметить крестиком центр проекции и черточкой - нулевую точку ($\varphi = 0^\circ$);

2) отсчитать заданный угол φ от $\varphi = 0^\circ$ по основному кругу проекций по часовой стрелке и отметить результат на внешнем круге вспомогательной точкой;

3) вращением кальки (центр кальки при этом всегда должен совпадать с центром сетки) совместить найденную вспомогательную точку с концом ближайшего диаметра сетки;

4) по данному диаметру от центра сетки в сторону вспомогательной точки отсчитать сферическую координату ρ . Если $0 < \rho < 90^\circ$, отметить найденную точку небольшим кружком. Если $90^\circ < \rho < 180^\circ$, отсчет продолжить за плоскость чертежа. Такую точку, как бы невидимую для наблюдателя, обозначить крестиком.

Задача 2 (обратная). Определить сферические координаты направления, заданного стереографической проекцией.

Порядок выполнения:

1) наложить кальку на сетку Вульфа так, чтобы заданная точка (стереографическая проекция направления) попала на один из диаметров сетки, и по диаметру от центра отсчитать ρ ;

- 2) сделать отметку на конце диаметра сетки, по которому отсчитали ρ ;
- 3) вернуть кальку в прежнее положение;

4) от этой отметки отсчитать заданный угол по основному кругу проекций против часовой стрелки до $\varphi = 0^\circ$.

Задача 3. Измерить угловое расстояние между двумя направлениями, заданными их стереографическими проекциями.

Порядок выполнения:

1) перенести стереографические проекции направлений на кальку и вращением кальки совместить заданные точки с одной из меридиональных дуг;

2) отсчитать по этой меридиональной дуге количество градусов, заключенных между заданными точками.

Задача 4. Построить стереографические проекции элементов симметрии кристаллического многогранника в соответствии с индивидуальным заданием.

Примечание. Индивидуальное задание состоит из четырех задач (см. Приложение). В задаче 1 угловые характеристики φ и ρ указаны в градусах. В задачах 2 - 4 в квадратных скобках указаны направления [001], [111], [110], совпадающие с центром стандартной стереографической проекции для кубического кристалла.

Требования к отчету

Отчет должен содержать:

- 1) краткий конспект теоретической части с выполненными построениями;
- 2) кальку с решением индивидуального задания;
- 3) стереографическую проекцию элементов симметрии заданного кристаллического многогранника.

Вопросы для самопроверки

1. Каков принцип построения сферической проекции?
2. Что представляют собой проекции граней и нормалей к граням?
3. Что представляет собой стереографическая проекция кристалла? Как обозначаются проекции плоскости и направления?
4. В чем преимущества стереографических проекций перед другими видами проекций?
5. Постройте стереографическую проекцию элементов симметрии куба, если ось симметрии L_3 перпендикулярна плоскости проекции.
6. Что собой представляют сетка Вульфа и стандартные стереографические проекции?
7. Как найти точку по заданным сферическим координатам?
8. Как измерить угловое расстояние между двумя точками?
9. Как найти стереографическую проекцию оси зоны?

Варианты индивидуального задания

| Номер варианта | Задачи | | | |
|-------------------|--------------------------------|-----------------------------------|---|--|
| | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | $\varphi = 17$ $\rho = 45$ | [001] 212 | [001] $\bar{1} 02 \bar{1} 33$ | Грани куба |
| 2 | $\varphi = 40$ $\rho = 28$ | [001] 113 | [001] 011 031 | оскости симметрии куба |
| 3 | $\varphi = 37$ $\rho = 80$ | [001] $\bar{3} 1 1$ | [001] 101 021 | Оси симметрии куба |
| 4 | $\varphi = 10$ $\rho = 70$ | [001] 102 | [001] 353 111 | Вид симметрии куба |
| 5 | $\varphi = 45$ $\rho = 45$ | [001] $\bar{1} \bar{1} 31$ | [001] $\bar{3} 11 135$ | оскости симметрии октаэдра |
| 6 | $\varphi = 30$ $\rho = 108$ | [001] 353 | [001] $\bar{1} \bar{1} 23 \bar{3} 13$ | симметрии ок-таэдра |
| 7 | $\varphi = 10$ $\rho = 120$ | [001] $\bar{2} 1 1$ | [001] $\bar{1} \bar{1} 51 0 \bar{1} 3$ | симметрии ок-таэдра |
| 8 | $\varphi = 18$ $\rho = 136$ | [001] $\bar{3} 2 1$ | [001] 301 153 | Вид симметрии тригональной пирамиды |

| | | | | |
|----|--------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------|---|
| 9 | $\varphi = 28$ $\rho = 144$ | $[110]$ $\bar{3}55$ | $[110]$ $\bar{3}01\ 130$ | Вид симметрии тригональной призмы |
| 10 | $\varphi = 72$ $\rho = 156$ | $[110]$ $\bar{5}1\bar{3}$ | $[110]$ $011\ 171$ | Вид симметрии тригональной дипира-МИДы |
| 11 | $\varphi = 80$ $\rho = 18$ | $[110]$ $\bar{3}1\bar{1}$ | $[110]$ $201\ 100$ | Вид симметрии ромбической пирамиды |
| 12 | $\varphi = 82$ $\rho = 28$ | $[110]$ 102 | $[110]$ $301\ 315$ | Вид симметрии ромбической призмы |
| 13 | $\varphi = 76$ $\rho = 30$ | $[110]$ 302 | $[110]$ $\bar{3}1\bar{3}\ 023$ | Вид симметрии ромбической дипирамиды |
| 14 | $\varphi = 68$ $\rho = 35$ | $[110]$ $\bar{2}1\bar{3}$ | $[110]$ $711\ 115$ | Вид симметрии тетрагональной пира-МИДы |
| 15 | $\varphi = 60$ $\rho = 40$ | $[110]$ 153 | $[110]$ $\bar{1}\bar{7}1\ 123$ | Вид симметрии тетрагональной призмы |
| 16 | $\varphi = 63$ $\rho = 47$ | $[110]$ $\bar{5}1\bar{5}$ | $[110]$ $\bar{2}31\ 12\bar{2}$ | Вид симметрии тетрагональной дипирамиды |
| 17 | $\varphi = 65$ $\rho = 50$ | $[111]$ $\bar{1}\bar{7}\bar{1}$ | $[111]$ $\bar{3}51\ 12\bar{2}$ | Оси симметрии тетрагональной дипирамиды |
| 18 | $\varphi = 71$ $\rho = 53$ | $[111]$ $\bar{1}53$ | $[111]$ $511\ 021$ | Вид симметрии гексагональной пира-МИДы |
| 19 | $\varphi = 48$ $\rho = 14$ | $[111]$ 513 | $[111]$ $\bar{3}10\ 135$ | Вид симметрии гексагональной призмы |

| | | | | |
|----|-------------------------------|--------------------------|-------------------------------------|---|
| 20 | $\varphi = 22$ $\rho = 48$ | [111] $\bar{3}13$ | [111] 115 021 | Оси симметрии гексагональной призмы |
| 21 | $\varphi = 35$ $\rho = 60$ | [111] $\bar{1}03$ | [111] 110 203 | Вид симметрии гексагональной дипирамиды |
| 22 | $\varphi = 25$ $\rho = 90$ | [111] 201 | [111] $\bar{0}12\ \bar{1}33$ | Вид симметрии кубического тетраэдра |
| 23 | $\varphi = 50$ $\rho = 50$ | [111] 131 | [111] $\bar{3}20\ 113$ | Оси симметрии кубического тетраэдра |
| 24 | $\varphi = 56$ $\rho = 36$ | [111] $\bar{2}12$ | [111] 320 231 | д симметрии ромбододекаэдра |
| 25 | $\varphi = 90$ $\rho = 70$ | [111] $\bar{3}11$ | [111] $\bar{1}33\ \bar{7}11$ | и симметрии ромбододекаэдра |

Лабораторная работа № 2. Простые формы кристаллов

Цель работы: 1) изучение форм кристаллических многогранников; 2) практическое определение названий простых форм.

Теоретические сведения

Огранка кристалла является важной характеристикой кристаллического вещества, отличающей кристаллы одного минерала от кристаллов другого. Свободно развивающиеся кристаллы обычно образуют многогранники с различным количеством граней. Процесс огранения - результат правильного внутреннего строения. Внешняя форма кристаллов до сих пор остается важнейшим диагностическим признаком. Главным методом, с помощью которого изучается расположение граней, является *гониометрия* - метод, основанный на измерении углов между гранями кристалла.

В природе кристаллы одного и того же вещества могут иметь самую разную форму, при этом одни грани встречаются часто, другие - реже.

Присутствие одних и тех же граней в разных кристаллах одного и того же вещества послужило основанием для установления основного закона кристаллографии - *закона постоянства углов* между соответственными гранями (рис.2.1). *Соответственные грани* - это те грани кристаллов одного и того же вещества, которые при одинаковой ориентировке кристаллов оказываются параллельными.

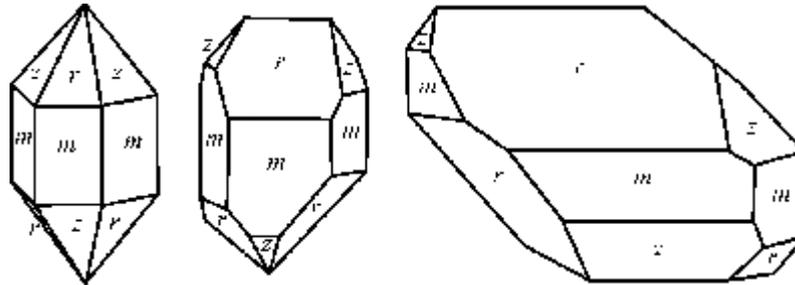


Рис.2.1. Кристаллы кварца с различным развитием соответственных граней, обозначенных одинаковыми буквами

Внешняя огранка, которую стремится принять кристалл в идеальных условиях роста, отвечает точечной группе кристалла. Грани у идеальных кристаллов различны по форме и величине, причем каждый тип граней может быть представлен у кристаллических многогранников лишь вполне определенным их числом. Геометрический анализ показывает, что число совместимых с существованием решетки одинаковых по форме и величине граней у кристаллов приобретает только значения 1, 2, 3, 4, 8, 12, 16, 24 и 48. Эти грани имеют кристаллографические индексы одной формы $\{hkl\}$ и являются одинаковыми по своим физическим и химическим свойствам, а в плоскостях, параллельных указанным граням, расположение атомов также одинаковое. Описываемые грани совмещаются друг с другом с помощью операций симметрии точечной группы данного кристалла.

Поскольку в природе идеальных условий роста не существует, то форма реального кристалла искажается. Однако тот факт, что при росте кристаллов все грани кристалла (и его ребра) перемещаются параллельно самим себе, позволяет фиксировать грани их нормальными, с помощью которых любой кристалл, независимо от индивидуальных особенностей, получает единое описание. Использование стереографических проекций позволяет определять углы между гранями и выявлять симметрические закономерности расположения граней.

Практическое определение симметрии того или иного многогранника осуществляется по взаимному расположению его равных граней, ребер и вершин, т.е. по взаимному расположению равных элементов его формы.

Формой многогранника называется совокупность всех его граней. Очевидно, что форма многогранника определяется не только количеством

всех его граней, но и их взаимным расположением, количеством типов граней (отличающихся друг от друга по величине и очертаниям) и соотношением размеров граней разных типов. Для описания формы кристаллических многогранников, кроме представления об их симметрии, необходима классификация граней.

Простой формой называется такой многогранник, все грани которого можно вывести из одной заданной грани с помощью элементов симметрии точечной группы.

Легко видеть, что число граней одной простой формы и ее облик определяются положением исходной грани относительно элементов симметрии класса.

Термин «*габитус*» (от лат. *habitus*) используется при более детальной характеристике внешней формы кристаллов, отражая степень развития тех или иных простых форм (например, призматический, бипирамидальный, кубический и т.д.).

Простые формы разделяются на *частные* и *общие*. Простая форма называется *частной*, если ее грань:

- 1) параллельна какому-нибудь элементу симметрии;
- 2) перпендикулярна какому-нибудь элементу симметрии;
- 3) образует одинаковые углы с двумя равными элементами симметрии.

Общая простая форма получается, если исходная грань задана в общем положении, т.е. не на элементах симметрии.

Число граней общей простой формы в данной группе максимально и равно числу операций симметрии, составляющих эту группу, т.е. равно ее порядку. Число граней частной простой формы может быть либо равно, либо меньше числа граней общей простой формы, так как элементы симметрии, перпендикулярные к грани, ее не размножают.

Многие простые формы имеют две разновидности: правую и левую, например ромбические тетраэдры (рис.2.2), все трапецоэдры (рис.2.3), пентагон-тритетраэдры и др. Комбинационные многогранники также бывают правые и левые (рис.2.4).

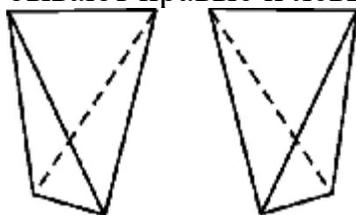


Рис.2.2. Правый и левый ромбические тетраэдры

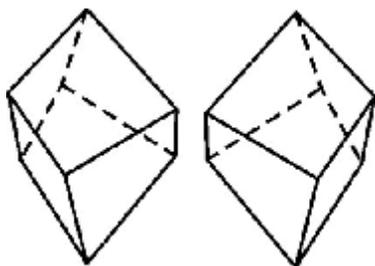


Рис.2.3. Правый и левый тригональные трапецоэдры

Две зеркально-равные фигуры, несовместимые друг с другом путем переносов и поворотов, называются *энантиоморфными* (противоположно-равными). Энантиоморфные формы возможны только в тех видах симметрии, в которых отсутствуют инверсионные оси, плоскости симметрии и центр инверсии. Такими видами симметрии являются все примитивные и аксиальные виды.

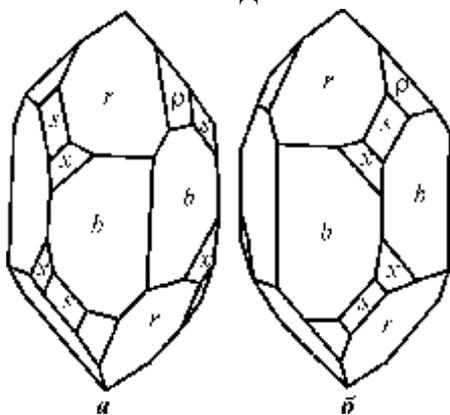


Рис.2.4. Правый и левый кристаллы кварца

В характеристику каждой простой формы, кроме положения грани относительно элементов симметрии (т.е. определения, частная это простая форма или общая), входит понятие *открытая* или *закрытая*. Если совокупность граней одной простой формы полностью замыкает заключенное между ними пространство (например куб), то она считается *закрытой*; если не замыкает, то *открытой* (призмы, пирамиды). Открытые формы характерны для кристаллов сингоний низшей категории и возможны в кристаллах всех сингоний, кроме кубической.

Простые формы кристаллов отражают особенности не только отдельных классов симметрии, но и целых семейств родственных классов. Так, появление только открытых простых форм предопределяет классы с единичным *полярным направлением*, «концы» которого кристаллографически неэквивалентны, т.е. не могут быть совмещены друг с другом симметрическими операциями данного класса. Возникновение лишь закрытых форм говорит о классах без единичных направлений, а существование в кристаллах открытых и закрытых форм характеризует

классы с биполярными особыми направлениями, «концы» которых эквивалентны.

В любом выпуклом многограннике число вершин N_V , граней N_G и ребер N_P подчиняется формуле Эйлера:

$$N_V + N_G = N_P + 2.$$

В огранке кристалла могут участвовать грани либо одной простой формы, либо нескольких, образуя в этом случае комбинационные многогранники. Они уже не могут быть выведены из одной исходной грани, поэтому характерным признаком комбинации является то, что ее грани различны.

Несмотря на бесконечное разнообразие типов комбинационных огранений, число простых форм кристаллов конечно и равно 47, поскольку конечно как число кристалло-графических групп симметрии (32), так и число различных положений граней в каждой из этих групп. Из этого числа 6 форм энантиоморфны, т.е. для них существуют зеркально-равные им формы, и всего насчитывается 53 простые формы.

Очевидно, что в одном классе (группе) может быть несколько принципиально разных частных положений и только одно общее. Именно поэтому общая простая форма служит характеристикой данного класса симметрии, в частности, передает ему свое название.

В основу названий многих простых форм положены греческие слова, обозначающие число граней, или термины, описывающие геометрические объекты:

μονο (моно) - один; δι (два) - дважды;

τρι (три) - три, трижды;

тетра (тетра) - четыре, четырежды; πεντα (пента) - пять, пятью;

εξά (гекса) - шесть, шестью; οκτα (окта) - восемь, восемью; δεκα (дека) - десять;

δωδεκα (додека) - двенадцать; εδρα (эдра) - грань;

γωνια (гония) - угол; πιναξ (пинакс) - дощечка;

κλινω (клино) - наклоняю;

δηαληνοξ (скаленос) - разносторонний треугольник; трапеζα (трапеца) - неправильный четырехугольник.

Описание и классификация простых форм

Для систематики кристаллов 32 класса симметрии делят на семь сингоний. Каждая сингония определяется специфическими константами основного образующего параллелепипеда. Сингонии группируются в три категории:

1) сингониями, относящимися к *низшей категории*, являются триклинная, моноклинная и ромбическая. Общим характерным признаком для них является отсутствие осей симметрии высшего порядка;

2) сингониями, относящимися к *средней категории*, являются

тригональная, тетрагональная и гексагональная. Они характеризуются присутствием одной оси симметрии высшего порядка (L_3, L_4, L_6);

3) наконец, к *высшей категории* относится кубическая. Она характеризуется присутствием нескольких осей высшего порядка.

Чем проще симметрия, чем меньше элементов входит в формулу симметрии вида, тем «проще» будет простая форма, и наоборот. Самая простая форма, какую только можно себе представить, это форма, состоящая из одной единственной грани. Такая простая форма называется моноэдром, что в переводе с греческого означает «одногранник».

Простые формы описываются в определенном порядке, способствующем лучшему запоминанию.

Простые формы низшей и средней категорий

Для кристаллов низшей и средней категории возможны 32 простые формы (табл.2.1). В первом столбце табл.2.1 помещены ромбические простые формы, во втором - тетрагональные, в третьем - тригональные, в четвертом - гексагональные. В каждой горизонтальной строке помещены аналогичные формы разных сингоний.

1. *Моноэдр* - одногранник. 2. *Диэдр* - простая форма, состоящая из двух пересекающихся граней. Различают диэдр осевой (сфеноид), в котором две грани пересекаются друг с другом по оси симметрии 2-го порядка, и диэдр плоскостной (дома), в котором две грани связаны между собой плоскостью симметрии. 3. *Пинакоид* - простая форма, состоящая из двух параллельных граней.

Призмы. 4. *Ромбическая*. 5. *Тетрагональная*. 6. *Тригональная*. 7. *Гексагональная*. Перечисленные призмы состоят из четырех, трех и шести граней, пересекающихся в параллельных ребрах. В сечениях, перпендикулярных к граням этих призм, получаются соответственно ромб, квадрат, равносторонний треугольник и правильный шестиугольник. У тетрагональной, тригональной и гексагональной призм грани параллельны главной оси.

8. *Дитетрагональная*. 9. *Дитригональная*. 10. *Дигексагональная*. Эти призмы удобно рассматривать как тетрагональную, тригональную или гексагональную призму, у которой удвоены грани таким образом, что все ее ребра параллельны главной оси. В сечениях, перпендикулярных к граням этих призм, получаются соответственно дитетрагон, дитригон и дигексагон путем построения на каждой стороне тетрагона, тригона и гексагона равнобедренного треугольника с малой высотой.

Пирамиды. 11. *Ромбическая*. 12. *Тетрагональная*. 13. *Тригональная*. 14. *Гексагональная*. Все грани пирамиды пересекаются в одной точке, лежащей на оси симметрии, причем грани равнонаклонены к этой оси.

15. *Дитетрагональная*. 16. *Дитригональная*. 17. *Дигексагональная*. Эти пирамиды удобно рассматривать как тетрагональную, тригональную и гексагональную пирамиды, у которых удвоены грани. Грани их также пересекаются в одной точке на оси симметрии и равнонаклонены к оси.

Дипирамиды. 18. *Ромбическая*. 19. *Тетрагональная*. 20. *Тригональная*. 21. *Гексагональная*. Дипирамиду можно рассматривать как две пирамиды, сложенные основаниями так, что точно под гранью верхней пирамиды находится грань нижней пирамиды, если основания сложенных пирамид расположены горизонтально.

22. *Дитетрагональная*. 23. *Дитригональная*. 24. *Дигексагональная*. Эти формы можно рассматривать как дипирамиды с удвоенными гранями.

Трапецоэдры. 25. *Тетрагональный*. 26. *Тригональный*. 27. *Гексагональный*. Трапецоэдр можно представить как две пирамиды, сложенные основаниями так, что верхняя пирамида повернута относительно нижней на произвольный угол, при этом нижние грани располагаются несимметрично относительно двух верхних. Трапецоэдрические грани представляют собой четырехугольники с одной парой равных смежных сторон. В трапецоэдрах присутствуют лишь простые оси (L_4 , P и C не встречаются). В связи с этим различают правые и левые трапецоэдры, отвечающие энантиоморфным формам.

Тетраэдры. 28. *Ромбический*. 29. *Тетрагональный*. Из геометрии известен кубический (правильный) тетраэдр, грани которого представляют собой правильные треугольники.

Тетрагональный тетраэдр можно рассматривать как кубический, сжатый или вытянутый по L_4 . Ромбический тетраэдр удобно представлять себе как тетрагональный, скрученный вокруг L_4 .

30. *Ромбоэдр*. Его можно рассматривать как куб, сжатый или вытянутый по L_3 , или как две тригональные пирамиды, сложенные основаниями так, что точно посередине между двумя гранями верхней пирамиды находится грань нижней. Ромбоэдр, получающийся за счет сжатия куба, называется тупым, а за счет растяжения - острым.

Скаленоэдры. 31. *Тетрагональный*. 32. *Тригональный* (или дитригональный). Грани их пересекают главную ось (L_4 и L_3) в двух точках. Пара нижних граней располагается симметрично между двумя парами верхних. Очертания граней отвечают разносторонним треугольникам. Тетрагональный скаленоэдр удобно рассматривать как тетрагональный тетраэдр с удвоенными гранями, а тригональный скаленоэдр - как ромбоэдр с удвоенными гранями.

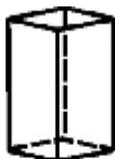
Простые формы низшей и средней категории



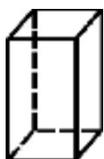
Диэдр



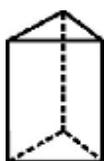
- Пинакоид



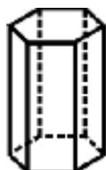
- Ромбическая призма



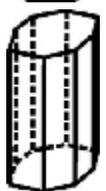
- Тетрагональная призма



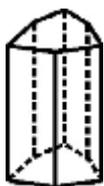
- Тригональная призма



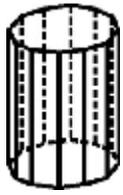
- Гексагональная призма



- Дитетра-гональная
Призма



- Дитриго-нальная призма



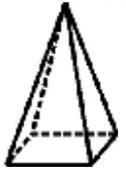
- Дигекса-гональная

Призма



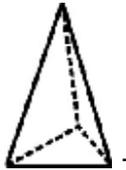
- . Ромбиче-ская пира-

мида



- . Тетраго-нальная пи-

рамида



- Триго-нальная пи-

рамида



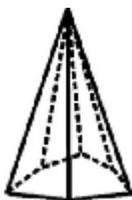
- . Гексаго-нальная пи-

рамида



- Дитетра-гональная пи-

рамида



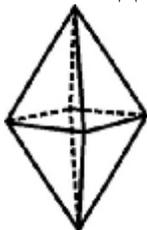
- Дитриго-нальная пи-

рамида



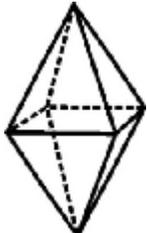
- Дигексаго-нальная пира-

Мида

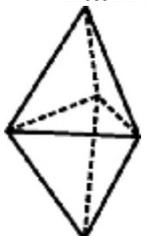


- Ромбиче-ская дипи-

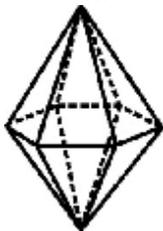
Рамида



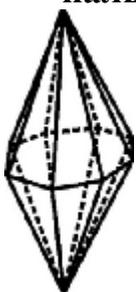
- . Тетраго-
нальная ди-пирамида



- Триго-
нальная ди-пирамида

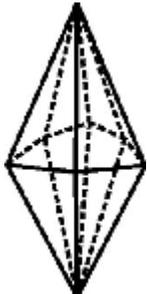


- Гексаго-
нальная ди-пирамида

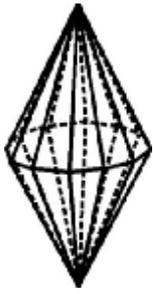


- Дитетраго-нальная дипи-

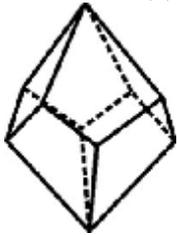
Рамида



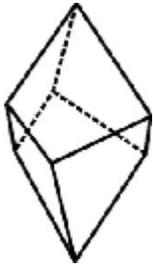
- Дитриго-нальная ди-
Пирамида



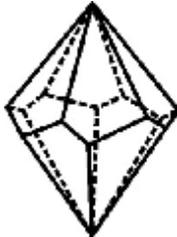
- Дигексаго-нальная дипи-
Рамида



- . Тетраго-
нальный трапецоэдр



- Триго- нальный тра-
Пецоэдр



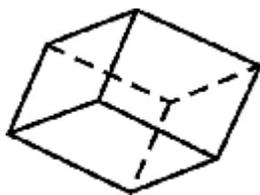
- Гексаго- нальный тра-
Пецоэдр



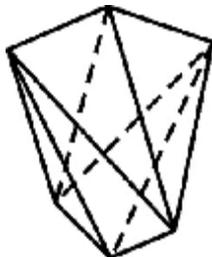
- Ромбиче-ский тетра-
Эдр



- Тетраго-нальный тет-
Раэдр



- Ромбоэдр



- Тетрагональный скале-ноэдр



- Тригональный скалено-эдр

Простые формы высшей категории

В высшей категории насчитывается 15 простых форм, причем ни одна из форм низшей или средней категории сюда не входит (перешло лишь одно название - тетраэдр). Названия простых форм кубической сингонии базируются на названиях пяти простейших исходных форм: кубический тетраэдр, гексаэдр (куб), октаэдр, пентагон-додекаэдр (две-надцать граней в форме неправильных пятиугольников) и ромбододекаэдр. Грани этих простых форм занимают строго фиксированное положение, как бы подчеркивая основные особые направления классов кубической сингонии - три координатные оси симметрии, четыре равнонаклонные к ним оси 3-го порядка и шесть диагональных особых направлений. Из пяти названных выше простейших форм четыре имеют производные формы.

Грани, перпендикулярные координатным направлениям, образуют *куб* (*гексаэдр*) с символами граней $\{100\}$. Задание граней, перпендикулярных осям 3-го порядка, приводит к возникновению *октаэдра* - простой формы из восьми треугольных граней с символами $\{111\}$. Грани, перпендикулярные теперь уже полярным тройным осям, образуют *тетраэдр* с четырьмя также треугольными гранями с символами $\{111\}$. Четвертой постоянной формой можно считать 12-гранную простую форму - *ромбододекаэдр*, грани которого с символами $\{110\}$ равнонаклонны к двум координатным осям и параллельны третьей, т.е. занимают (как и грани трех основных форм) также строго фиксированное положение.

Остальные простые формы кубических кристаллов выводятся из перечисленных основных форм путем наращивания на их гранях «пирамидок» - двух-, трех-, четырех- или шестигранных «крыш», допускаемых плоскостной симметрией граней.

При этом названия большинства производных простых форм кристаллов кубической сингонии строятся по следующей схеме:

- характеризуется *форма грани*: *тригон* - треугольная, *тетрагон* - четырехугольная, *пентагон* - пятиугольная;
 - фиксируется *количество граней*, заменивших исходную грань основной простой формы;
 - указывается название простой формы, на основе которой выводится полученная производная форма. Например, *тригон-тетрагексаэдр* - простая форма с гранями треугольной формы, грань исходной формы - гексаэдра - учетверилась и т.д.

При образовании названий простых форм кристаллов кубической сингонии, в которых используются характеристики форм граней - приставки «тригон-», «тетрагон-», «пентагон-», а также кристаллов низшей и средней категорий, в которых используются приставки «ромбо-», «трапеца-», «скалена-» и т.д., надо иметь в виду, что такое название составить легко, если в огранке кристалла участвуют грани лишь одной простой формы. Если же кристалл комбинационный, т.е. является комбинацией нескольких простых форм, то истинные очертания граней каждой простой формы могут быть сильно искажены. В этом случае их «ложная» форма не может входить в название той или иной простой формы (рис.2.5). В таких случаях надежнее обратиться к стереографической проекции комбинационного кристалла и с ее помощью получить сведения и о симметрии кристалла, и о взаимном расположении граней каждой простой формы, участвующей в огранке кристалла, что позволит правильно составить название той или иной простой формы.

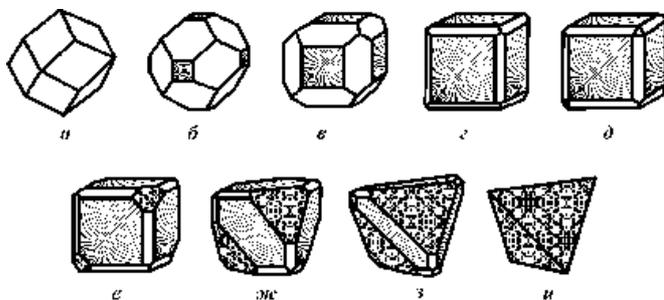


Рис.2.5. Переход от простой формы ромбододекаэдра через его комбинации с гексаэдром и тетраэдром к простой форме тетраэдра, иллюстрирующий искаженные очертания граней простой формы в комбинационном кристалле

Приведем названия простых форм кристаллов кубической сингонии (табл.2.2).

1. *Тетраэдр* - в кубической сингонии единственный четырехгранник. 2. *Октаэдр* - в кубической сингонии единственный восьмигранник. 3. *Тригон-тритетраэдр*. 4. *Тригон-триоктаэдр*. 5. *Тетрагон-тритетраэдр*. 6. *Тетрагон-триоктаэдр*. 7. *Пентагон-тритетраэдр*. 8. *Пентагон-триоктаэдр*.

Первое слово названия каждой из этих простых форм отражает контур грани, а второе показывает, что грань тетраэдра или октаэдра заменена тремя гранями.

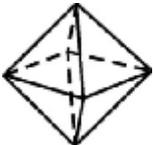
9. *Гексатетраэдр*. 10. *Гексоктаэдр*.

По аналогии предыдущими эти простые формы должны бы называться: тригон-гексатетраэдр и тригон-гексоктаэдр, но их названия сокращены. Гексоктаэдр - 48-гранник. Это самая богатая гранями простая форма.

Простые формы высшей категории



- Кубический тетраэдр



- Октаэдр

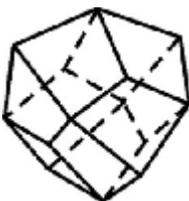


- Тригон-

Тритетраэдр

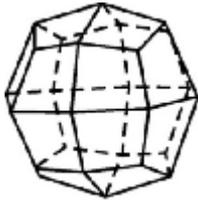


- Тригон-триоктаэдр

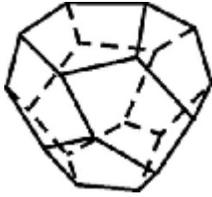


- Тетрагон-

Тритетраэдр

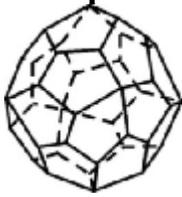


Тетрагон-триоктаэдр



- Пентагон-

Тритетраэдр



- Пентагон-

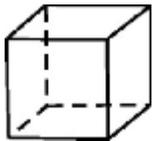
Триоктаэдр



- Гексатетраэдр



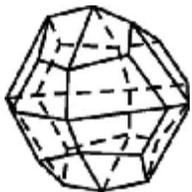
- Гексоктаэдр



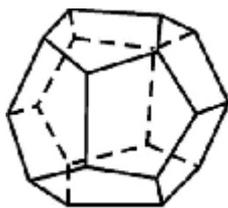
- Гексаэдр



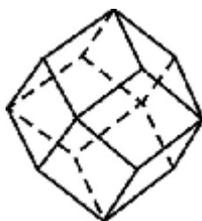
- Тетрагексаэдр



- Дидодекаэдр



- Пентагон-додекаэдр



- Ромбододека-эдр

11. *Гексаэдр* (куб) - в кубической сингонии единственный шестигранник. 12. *Тетра- гексаэдр* - гексаэдр с учетверенными гранями. В его названии форма грани - тригон - для сокращения опущена. 13. *Пентагон-додекаэдр*. Его можно рассматривать как гексаэдр с удвоенными гранями. 14. *Дидодекаэдр* - пентагон-додекаэдр с удвоенными гранями. 15. *Ромбододекаэдр* - двенадцатигранник. Его грани имеют форму ромбов.

Разновидности простых форм

Одна и та же простая форма может встречаться в разных классах симметрии, причем в одном классе форма может быть частной, а в другом - общей. Поэтому, естественно, грани одной (по названию) формы могут отличаться по своей симметрии. Например, диэдр может быть осевым или плоскостным (рис.2.6), а моноэдр может быть реализован в десяти различных классах.

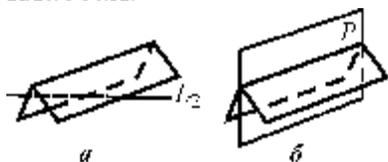


Рис.2.6. Диэдр: *а* - осевой,
б - плоскостной

У реальных кристаллов это различие выступает при изучении физических свойств поверхностей граней и в первую очередь фигур их роста, растворения, травления и других особенностей скульптуры граней. Например, гексаэдры, как отметил А.В. Шубников, могут иметь различную по симметрии штриховку граней в соответствии с пятью видами симметрии кубической сингонии (рис.2.7).

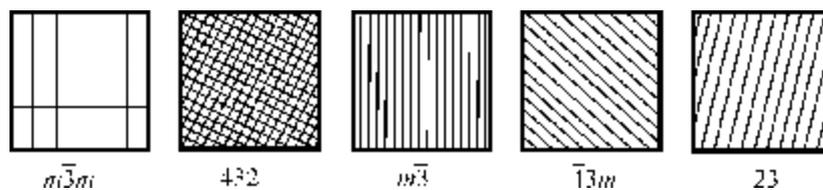


Рис.2.7. Собственная симметрия граней пяти разновидностей куба, принадлежащих пятиклассам кубической сингонии (по А.В. Шубникову)

Учет симметрии простых форм, а следовательно, и их физических свойств увеличивает общее число простых форм с 47 до 146, а учет еще энантиоморфных пар - до 193. Если же учесть тот факт, что в классах с полярными направлениями параллельные друг другу грани с символами (hkl) и $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ могут не выводиться друг из друга операциями симметрии класса и образовывать так называемые *положительные* и *отрицательные* формы, то число простых форм будет 318.

Как правило, при росте кристаллов образуются простые формы с малым числом граней и малыми индексами. Однако различные сочетания простых форм дают причудливое многообразие природных форм кристаллов.

Практическая часть

1. Подготовить конспект теоретической части.
2. На деревянных моделях кристаллов изучить простые формы и их производные.
3. Дать названия предложенным кристаллическим многогранникам.
4. Проверить соотношение элементов огранки некоторых кристаллических многогранников по формуле Эйлера, результаты внести в форму табл.2.3.

Форма табл.2.3

Соотношение элементов огранки некоторых многогранников

| Многогранник | Число граней | Число вершин | Число ребер |
|--------------|--------------|--------------|-------------|
| Тетраэдр | | | |
| Гексаэдр | | | |
| Октаэдр | | | |

| | | | |
|----------------|--|--|--|
| Ромбододекаэдр | | | |
|----------------|--|--|--|

Требования к отчету

Отчет должен содержать:

- 1) краткий конспект теоретической части с рисунками;
- 2) чертежи простых форм, предложенных для рассмотрения;
- 3) заполненную форму табл.2.3.

Вопросы для самопроверки

1. Что первично для кристаллов: внешняя форма или внутреннее строение?
2. Что представляют собой простые формы кристаллов?
3. Какие простые формы возможны: а) в низшей категории; б) в средней категории; в) в высшей категории?
4. Какими бывают пирамиды, призмы и дипирамиды?
5. Чем отличается тетраэдр кубической сингонии от ромбического тетраэдра?
6. Какие кристаллы называются энантиоморфными?
7. Чем отличается тетрагональная дипирамида от октаэдра?
8. Какие есть способы определения названий простых форм?

Лабораторная работа №3 . РЕАЛЬНАЯ ФОРМА КРИСТАЛЛОВ И ПОСТРОЕНИЕ ИДЕАЛЬНОЙ ФОРМЫ

Целью работы является описание реальной формы кристаллов некоторых веществ, выращенных из растворов. Затем проводится измерение кристаллов, построение идеальной формы в виде проекций.

Введение

Весь необходимый для работы теоретический материал содержится в курсе кристаллографии, читаемом на физическом факультете, и в соответствующих пособиях и учебниках. Из растворов и паров кристаллы растут, как правило, в виде многогранников. Форма кристалла в этом случае характеризуется двумя понятиями: огранением и обликом (габитусом). Огранение показывает присутствие тех или иных простых форм, а облик — их относительное развитие. Очевидно, наиболее развитые по площади грани растут с малыми скоростями по сравнению с соседними. Так, огранение кристаллов KN_2PO_4 состоит из тетрагональной призмы $\{100\}$ и тетрагональной бипирамиды $\{101\}$.

Если преобладают грани $\{100\}$, кристалл имеет призматический габитус, если грани $\{101\}$, то облик кристаллов бипирами- дальный (рис. 3.1.1).

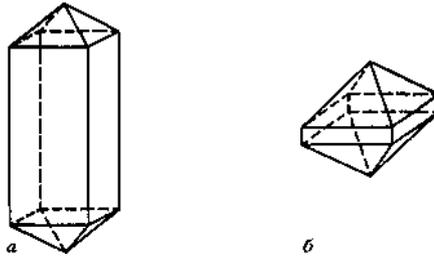


Рис. 3.1.1. Кристаллы KDP, имеющие разный габитус: *a* — призматический; *b* — бипирамидальный

Особенности реальной формы кристаллов определяются условиями их роста. Поэтому кристаллы одного и того же вещества могут иметь сильно отличающиеся формы. Часто на кристалле обнаруживается неодинаковое развитие граней одной и той же простой формы. Например, у кубического кристалла, имеющего простые формы куба, октаэдра и ромбододекаэдра, различные грани куба могут быть неодинаковыми по площади. Более того, вместо шести граней куба могут быть представлены только пять или того меньше. То же самое наблюдается в отношении граней октаэдра и ромбододекаэдра.

При большом числе простых форм на кристалле описание реальной формы сильно усложняется. Затрудняется и правильное использование кристаллического материала, т.е. изготовление из кристалла линз, призм и т. д.

Измерение кристалла

Для точной характеристики формы кристалла проводят его измерение и строят проекцию. Сначала строится гномостереографическая проекция (кратко, стереограмма). Для этого необходимо измерить углы между нормальными к граням, величина которых, в соответствии с законом постоянства углов, не зависит от облика кристалла. В данной работе применяется прикладной гониометр с

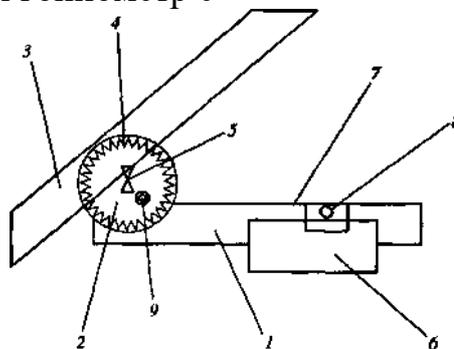


Рис. 3.1.2. Устройство гониометра

оптическим отсчетом (рис. 3.1.2). Угломер состоит из корпуса 2 с отсчетным устройством и двух линеек, сдвоенной 1 и сменной 3, предназначенных для фиксации измеряемого угла.

Для удобства измерения используется подставка 6. Сдвоенная линейка закрепляется в пазу подставки посредством вкладыша 7, прижима 8 и гайки. Сменная линейка вставляется в вырез отсчетного устройства и может быть закреплена в любом положении с помощью рычага 5. Закрепление линеек в положении фиксации измеряемого угла осуществляется поворотом зажимного кольца 4. Отсчет производится при оптическом наблюдении отсчетного лимба с помощью лупы 9. Приборная ошибка угломера составляет $5'$, но реально ошибка много выше, поскольку трудно оптимальным образом плотно приложить линейки к каждой из соседних граней кристалла (рис. 3.1.3).

Для повышения точности измерение необходимо провести несколько раз. Если углы между плоскостями граней меньше 90° ,

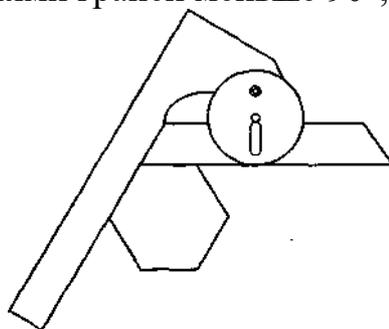


Рис. 3.1.3. Измерение кристалла

то индекс на шкале отсчета непосредственно показывает величину измеряемого угла. В противном случае, он показывает величину дополнительного угла. Напомним, что для построения стереограммы в конечном счете нужны значения углов между нормальными к граням.

Построение стереографической проекции

Для построения стереограммы необходимо самостоятельно усвоить теоретический материал, который излагается в любом учебнике кристаллографии. Основной проблемой здесь является правильный выбор координатных осей и единичной грани, т. е. установки кристалла. Выбору установки помогает отыскание в форме реального кристалла возможных элементов симметрии, ярко выраженных зон граней и т. п., хотя в общем случае выбор установки требует специального исследования. В данной работе выбор установки производится с помощью преподавателя.

После построения стереографической проекции можно определить отношение осевых отрезков (отношение параметров ячейки) $a : b : c$ и осевые углы α, β, γ , а также индексы всех граней. Пусть грань ABC отсекает на осях x, y, z отрезки OA, OB, OC (рис. 3.1.4).

Очевидно, что

$$OA = \frac{OP}{\cos(OP, x)}, \quad OB = \frac{OP}{\cos(OP, y)}, \quad OC = \frac{OP}{\cos(OP, z)},$$

где OP — высота, опущенная на рассматриваемую грань. Тогда

$$OA : OB : OC = \frac{1}{\cos(OP, x)} : \frac{1}{\cos(OP, y)} : \frac{1}{\cos(OP, z)}.$$

Углы видны на рис. 3.1.4: $\alpha = COB$, $\beta = AOC$, $\gamma = AOB$. Для единичной грани высота есть OP_1 и ее связь с углами остается прежней, т. е.

$$a : b : c = \frac{1}{\cos(OP_1, x)} : \frac{1}{\cos(OP_1, y)} : \frac{1}{\cos(OP_1, z)}.$$

Индексы Миллера получаются, если разделить a , b и c почленно на OA , OB и OC :

$$h : k : l = \frac{\cos(OP, x)}{\cos(OP_1, x)} : \frac{\cos(OP, y)}{\cos(OP_1, y)} : \frac{\cos(OP, z)}{\cos(OP_1, z)}.$$

По стереограмме находят осевые углы a , θ , γ измерением дуг zy , xz и xy . По косинусам дуг между проекцией OP_1 к единичной грани и проекциями осей x , y и z получают отношение осевых

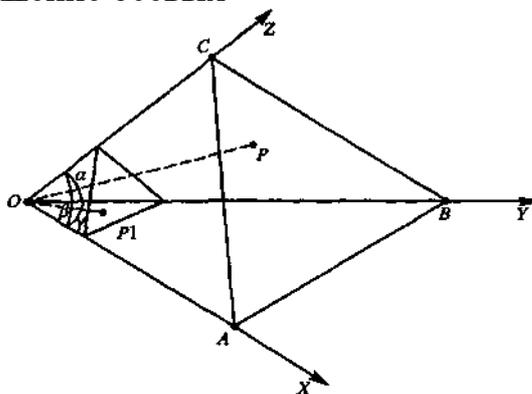


Рис. 3.1.4. К вычислению отношения осевых отрезков и индексов грани кристалла

отрезков a , b и c . Наконец, косинусы углов между полюсом (проекцией) произвольной грани и координатными осями позволяют найти индексы этой грани.

Черчение идеальной формы

Идеальной формой кристалла называется форма, имеющая одинаковые по площади грани для каждой простой формы, присутствующей на кристалле.

Изображение идеальной формы кристалла также называют его проекцией. Здесь рассматриваются две проекции: ортогональная и аксонометрическая. Первая дает вид кристалла со стороны оси x , y и z , т.е. фасад, профиль и план кристалла подобно чертежу детали. Вторая — общий вид кристалла с изображением граней, которые может видеть наблюдатель, находящийся на некотором удалении от кристалла.

Основное правило для построения ортогональной проекции следующее. Вращением кальки, на которой построена стереограмма кристалла, полюсы рассматриваемых соседних граней

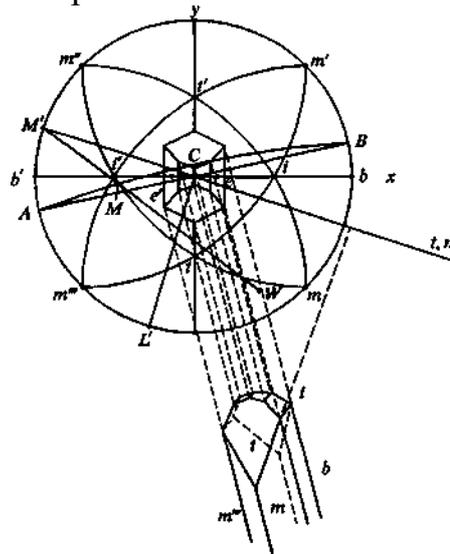


Рис. 3.1.5. Построение ортогональной и аксонометрической проекций кристалла каламина

переводят на один меридиан сетки Вульфа. Тогда экватор сетки дает направление ребра между этими гранями.

Е.Б. Флинт дает этот наиболее простой способ построения ортогональной проекции на примере кристалла каламина. На рис. 3.1.5 показана стереографическая проекция и его ортогональная проекция вдоль оси z . На рис. 3.1.5 представлены полюсы всех граней e и e' , m , m' , m'' , m , i , g' , b , b' , t , t' . Начинают чертеж с грани (001) . Если же ее нет, то с двух ближайших к выходу оси z . Для каламина — это грани e и e' . Ставят полюсы этих граней на один меридиан сетки. При этом на меридиан попадают также полюсы граней g и g' , b и b' . Значит, ребра пересечения этих всех граней будут параллельны. Прикладывая к экватору треугольник с линейкой, чертят соответствующие параллельные прямые. Прямые отстоят от центра проекции на одинаковых расстояниях. Величина этих расстояний может быть произвольной, но надо считаться с обликом изображаемого кристалла. Далее переходят к граням t и t' . Видно, что грань t должна пересекаться с гранями e

и e' , с гранями m и m' , z и z' , т. е. она ограничена 6 ребрами. Можно начать с ребра te , но сначала на ребре ee' берутся точки, ограничивающие размеры граней e и e' по оси y . Этот выбор также сообразуется с обликом кристалла. Стереогрaмму поворачивают на сетке Вульфа так, чтобы полюсы граней t и e оказались на одном меридиане. Затем параллельно экватору чертят ребро et . Аналогично проводят ребра te' , $t'e$, $t'e'$. Тем же приемом проводят от углов граней e и e' ребра ti' , $t'i$, ti , $t'i'$. Размеры этих ребер уже определены точками пересечения с ребрами $b'i'$ и bl . Наконец, проводят 4 ребра набора mt . Получение ортогональной проекции достаточно просто. Для полного представления о форме кристалла можно построить ортогональные проекции также вдоль осей z и y , предварительно перейдя к стереографическим проекциям, где ось z , а затем ось y совпадают с центром проекции.

Правило построения аксонометрической проекции

Сначала выбирается проекционная плоскость, перпендикулярно которой рассматривается кристалл. Как правило, эта плоскость получается поворотом на угол $\angle p = 18^\circ 30'$ основного круга стереогрaммы вправо от южного полюса и наклоном ее на угол $p = 6-10^\circ$.

В этом случае кристалл повернут к наблюдателю своим верхним правым октантом. Выбранная плоскость проекции изображается в виде дуги AB большого круга. Ее полюс — точка W , обычно с координатами $= 71^\circ 30'$, $p = 80$ -г 84° .

Для черчения ребер между двумя выбранными гранями действуют так: находят точку пересечения дуги AB и зонального круга, на котором находятся полюсы двух рассматриваемых граней (точка M), соединяют ее с точкой W и продолжают эту линию до пересечения с основным кругом (точка M'). Эту точку M' соединяют с центром основного круга C . Затем к полученному радиусу проводят перпендикуляр CL' , задающий направление ребра между этими гранями, полюса которых лежат на выбранном зональном круге.

Аналогично действуют для каждой другой выбранной пары граней. Крайняя левая точка аксонометрической проекции находится на перпендикуляре к диаметру AB , проходящем через крайнюю левую точку начерченной ортогональной проекции. Длина ребра определяется параллельными прямыми, проведенными из вершин ортогональной проекции кристалла.

Задание

1. Рассмотреть реальную форму кристалла и качественно описать ее.
2. Измерить кристалл и построить его стереографическую проекцию. Обозначить развитие граней на реальном кристалле размерами крестиков и ноликов на стереографической проекции.
3. Указать положение общей формы на проекции.
4. Построить ортогональные проекции кристалла вдоль осей z , y и x .
5. Построить аксонометрическую проекцию кристалла.

Контрольные вопросы

1. Чем реальная форма кристалла отличается от идеальной?
2. Какие факторы влияют на форму растущего кристалла?
3. Как зависит форма кристалла от относительных скоростей роста граней?
4. Назовите типичные реальные формы кристаллов.

Список литературы

1. Флинт Е.Е. Начала кристаллографии.—М.: Высшая школа, 1961.
2. Шаскольская М.П. Кристаллография.—М.: Высшая школа, 1976.
3. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография.—М.: Высшая школа, 1972.
4. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А. Основы кристаллографии.—М.: Физматлит, 2004, 500 с.
5. КРИСТАЛЛОГРАФИЯ: Лабораторный практикум / Под ред. доф. Е. В. Чупрунова: Учеб, пособие для вузов.—М.: Издательство физико-математической литературы, 2005.—412 с.—ISBN 5-94052-103-7.

Лабораторная работа №4

ИЗУЧЕНИЕ СКОРОСТИ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Цель работы

Исследовать процесс кристаллизации методами моделирования на примере изучения влияния условий кристаллизации на характер и форму роста кристаллов.

Рабочее задание

1. Провести эксперимент по кристаллизации водных растворов солей, зафиксировать движения фронта кристаллизации, графическим дифференцированием по способу нормалей определить скорости кристаллизации для трех моментов времени, объяснить причину изменения скорости кристаллизации;

2. Изучить по излому слитков кристаллизацию металлов в зависимости от скорости ее охлаждения в холодной и горячей формах, зарисовать структуру излома и объяснить причину изменения характера кристаллизации в зависимости от скорости охлаждения.

Оборудование и реактивы

Микроскоп Levenhuk 740, МБС-10, стеклянная палочка, предметное стекло, насыщенный водный раствор соли.

Порядок оформления отчёта

Каждый студент должен оформлять отчёт индивидуально в следующей последовательности:

- 1) номер работы и ее название;
- 2) цель работы и задачи, подлежащие решению;
- 3) краткое описание используемых установок и приборов;
- 4) теоретические основы;
- 5) описание экспериментальной части работы;
- 6) таблицы результатов измерений;
- 7) графики по результатам измерений;
- 8) вычисления и анализ результатов измерений;
- 9) выводы.

Описание метода эксперимента

Процесс кристаллизации изучается методом моделирования на прозрачных водных растворах солей. При этом кристаллизация солей, а также влияние модификаторов на нее исследуются на насыщенных водных растворах: бихромата калия $K_2Cr_2O_7$ – кристаллы, кубической формы, хлористого аммония NH_4Cl – кристаллы дендритной формы.

Проведение эксперимента

Капля раствора наносится на стеклянную пластину, которая помещается на предметный столик микроскопа. Передвигая стеклянную пластину с каплей, следует установить край капли на начало шкалы окуляра, совмещая при этом линию шкалы радиусом капли. После настройки начинаем отсчет времени и снимаем показания шкалы с интервалом времени 1 мин. Данные эксперимента записываем в табл. 1.1. Количество измерений должно быть не менее 10. Опыт считается законченным, если получены три одинаковых значения размера кристалла в течение трех последних измерений.

Таблица 1.1

| № измерения | Измеряемые величины | | Вычисляемая величина |
|-------------|---------------------|--|--|
| | Время, мин. | Положение фронта, кристаллизации, X_{III} в делениях шкалы | Истинное положение фронта кристаллизации, X_0 , мм |

Чтобы определить размер объекта (в мм), достаточно подсчитать число делений шкалы, которое укладывается в измеряемом участке объекта и это число (X_{III}) разделить на 56 (кратность увеличения микроскопа):

$$X_0 = X_{III}/56$$

Обработка результатов измерений

По данным табл. 1.1 строится график зависимости X_0 (положение фронта кристаллизации, мм) – τ (время, мин.).

Графическим дифференцированием и методом нормали определяют первую производную (т.е. скорость кристаллизации) в крутой (точка 1), средней (точка 2) и полой (точка 3) частях кривой на рис. 1.1.

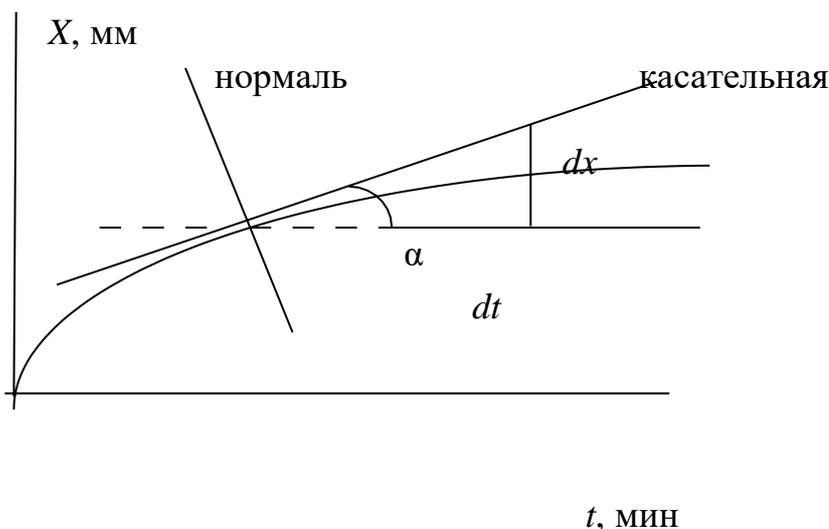


Рис. 1.1. Графическое изображение первой производной

Проведя касательные к трем произвольно выбранным точкам (например, на 2, 5, и 8 минуте) определяем производные в этих точках. По смыслу производная функции $x = f(t)$, т.е. dx/dt является тангенсом угла наклона касательной к кривой в данной точке: $dx/dt = \operatorname{tg} \alpha$, рис. 1.1.

Для перехода к численным значениям производной (скорости кристаллизации $V_{кр}$, мм/мин.) умножаем значения отрезков, найденных

графическим построением (т.е. катетов прямоугольного треугольника) в миллиметрах на масштабы величины по осям.

$$V_{\text{кр}} = \frac{\Delta X \cdot M_x}{\Delta \tau \cdot M}$$

Если по оси Y 20 мм чертежа соответствует 0,1 (X_0), то $M_x = 0,1$ мм/20 мм = 0,005. Если по оси X 10 мм чертежа соответствует 1 мин (τ), то $M_\tau = 1$ мин/10 мм = 0,1 мин/мм. Ошибка применяемого метода уменьшается по мере приближения наклона кривой к 45°.

Три полученные величины скорости кристаллизации сопоставляются между собой, и формулируется вывод о влиянии формы и размеров капли на скорость кристаллизации.

Теоретические основы процесса кристаллизации

Все вещества могут находиться в трех агрегатных состояниях: твердом, жидком и газообразном, переходы между которыми (так называемые фазовые переходы) сопровождаются скачкообразными изменениями свободной энергии энтропии, плотности и других физических свойств.

Жидкости и твердые тела относят к конденсированному состоянию вещества. В отличие от газообразного состояния у вещества в конденсированном состоянии атомные остовы расположены ближе друг к другу, что приводит к их более сильному взаимодействию и, как следствие этого, жидкости и твердые тела имеют постоянный собственный объем. Для теплового движения атомных остовов в жидкости характерны малые колебания атомных остовов вокруг равновесных положений и частые перескоки из одного равновесного положения в другое. Это приводит к наличию в жидкости только так называемого ближнего порядка в расположении атомных остовов, т.е. некоторой закономерности в расположении соседних атомных остовов на расстояниях, сравнимых с межатомными. Для жидкости в отличие от твердого тела характерно такое свойство, как текучесть.

Атомные остовы в твердом теле, для которого в отличие от жидкого тела характерна стабильная, постоянная собственная форма, совершают только малые колебания около своих равновесных положений. Это приводит к правильному чередованию атомных остовов на одинаковых расстояниях для сколь угодно далеко удаленных атомных остовов, т.е. существование так называемого дальнего порядка в расположении атомных остовов. Такое правильное, регулярное расположение атомных остовов в

твердом теле, характеризующееся периодической повторяемостью в трех измерениях, образует кристаллическую решетку, а тела, имеющие кристаллическую решетку, называют твердыми телами. Кроме того, существуют аморфные тела (стекло, воск и т.д.). В аморфных телах атомные остовы совершают малые колебания вокруг хаотически расположенных равновесных положений, т.е. не образуют кристаллическую решетку. Аморфное тело находится с термодинамической точки зрения в неустойчивом (так называемом метастабильном) состоянии и его следует рассматривать как сильно загустевшую жидкость, которая с течением времени должна закристаллизоваться, т.е. атомные остовы в твердом теле должны образовать кристаллическую решетку и превратиться в истинно твердое тело.

Аморфное состояние образуется при быстром – (10^6 °C/с и более) охлаждении расплава. Например, при охлаждении ряда сплавов из жидкого состояния образуются так называемые металлические стекла, обладающие специфическими физико-механическими свойствами.

Атомные остовы в кристаллическом твердом теле располагаются в пространстве закономерно, периодически повторяясь в трех измерениях через строго определенные расстояния, т.е. образуют кристаллическую решетку. Кристаллическую решетку можно «построить», выбрав для этого определенный «строительный блок» (аналогично постройке стены из кирпичей) и многократно смещая этот блок по трем непараллельным направлениям. Такая «строительная» единица кристаллической решетки имеет форму параллелепипеда и называется элементарной ячейкой. Все элементарные ячейки, составляющие кристаллическую решетку, имеют одинаковую форму и объемы. Атомные остовы могут располагаться как в вершинах элементарной ячейки, так и в других ее точках (в узлах кристаллической решетки). В первом случае элементарные ячейки называются простыми (примитивными), во втором – сложными. Если форма элементарной ячейки определена и известно расположение всех атомов внутри нее, то имеется полное геометрическое описание кристалла, т.е. известна его атомно-кристаллическая структура.

При переходе из жидкого состояния в твердое образуется кристаллическая решетка, возникают кристаллы. Такой процесс называется *кристаллизацией*. Переход металла из жидкого или парообразного состояния в твердое с образованием кристаллической структуры называется первичной кристаллизацией. Образование же новых кристаллов в твердом кристаллическом веществе называется вторичной кристаллизацией.

Процесс кристаллизации складывается из двух одновременно идущих процессов: зарождения и роста кристаллов. Кристаллы могут зарождаться самопроизвольно (самопроизвольная кристаллизация) или расти на имеющихся готовых центрах кристаллизации (несамопроизвольная кристаллизация).

В природе все самопроизвольно протекающие превращения, а, следовательно кристаллизация и плавление, обусловлены тем, что новое состояние в новых условиях является энергетически более устойчивым, обладает меньшим запасом энергии.

Поясним примером. Тяжелый шарик из положения 1 (рис. 1.2) стремится попасть в более устойчивое положение 2, так как потенциальная энергия в положении 2 меньше, чем в положении 1.



Рис. 1.2. Пример самопроизвольной кристаллизации

Энергетическое состояние системы, имеющей огромное число охваченных тепловым движением частиц (атомных остовов, молекул), характеризуется термодинамической функцией (потенциалом) $Z(F)$, также называемой свободной энергией. Свободная энергия $F(Z) = H - TS$, где H – внутренняя энергия системы (энтальпия); T – абсолютная температура; S

– энтропия, равная энергии колебания элементарных частиц в узлах решетки (вибрационная составляющая) и энергии поступательного движения валентных электронов при тепловом возбуждении (электронная составляющая). Таким образом, чем больше свободная энергия системы, тем система менее устойчива, и если имеется возможность, то система переходит в состояние, где свободная энергия меньше («подобно» шарик, который скатывается из положения 1 в положение 2, если на пути нет препятствия).

С изменением внешних условий, например температуры, свободная энергия системы изменяется по сложному закону, но различно для жидкого и кристаллического состояний. Схематически характер изменения свободной энергии жидкого и твердого состояний с температурой показан на рис. 1.3.

Выше температуры T_s , меньшей свободной энергией обладает вещество в жидком состоянии, ниже T_s – вещество в твердом состоянии.

Следовательно, выше T_s , вещество должно находиться в жидком состоянии, а ниже T_s – в твердом, кристаллическом.

Очевидно, что при температуре, равной T_s , свободные энергии жидкого и твердого состояний равны, металл в обоих состояниях находится в равновесии. Эта температура T_s и есть равновесная или теоретическая температура кристаллизации. Однако при T_s не может происходить процесс кристаллизации (плавление), так как при данной температуре $F_{ж} = F_{кр}$ и процесс кристаллизации (плавления) не может идти, так как при равенстве обеих фаз это не будет сопровождаться уменьшением свободной энергии.

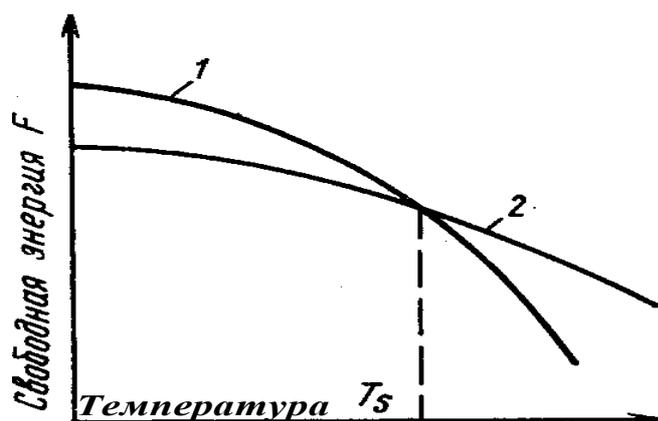


Рис. 1.3. Изменение свободной энергии жидкого (1) и кристаллического (2) состояний в зависимости от температуры

Для начала кристаллизации необходимо, чтобы процесс был термодинамически выгоден системе и сопровождался уменьшением свободной энергии системы. Из кривых, приведенных на рис. 1.4, видно, что это возможно только тогда, когда жидкость будет охлаждена ниже точки T_s . Температура, при которой практически начинается кристаллизация, может быть названа фактической температурой кристаллизации.

Так в металлических кристаллах плотноупакованные структуры ГПУ ($K = 12$) и ГЦК ($K = 12$) имеют большую энергию связи и устойчивы при низких температурах (до T_1). Более «рыхлая» структура ОЦК ($K = 8$) имеет большую энтропию, вследствие большей амплитуды колебаний атомов, а поэтому устойчива при повышенных температурах. Этим объясняется стабильность

ОЦК решетки при повышенных температурах во многих металлах Ti, Zr, Hf, Fe.

Разница между равновесной (T_s) и реальной (T_n) температурой кристаллизации называется *степенью переохлаждения* (ΔT).

Разница между реальными температурами плавления и кристаллизации называется *температурным гистерезисом*.

Степень переохлаждения увеличивается с ростом скорости охлаждения. Обычная степень переохлаждения металлов при кристаллизации в производственных условиях колеблется от 10 до 30 °С; при больших скоростях охлаждения она может достичь сотен градусов. Степень перегрева при плавлении металлов обычно невелика (не превышает нескольких градусов).

При кристаллизации выделяется теплота. Когда кристаллизуется чистый элемент, отвод теплоты, происходящий вследствие охлаждения, компенсируется теплотой кристаллизации. Поэтому на кривой охлаждения, изображаемой в координатах «температура – время» процессу кристаллизации соответствует горизонтальный участок (кривая 1, рис. 1.4).

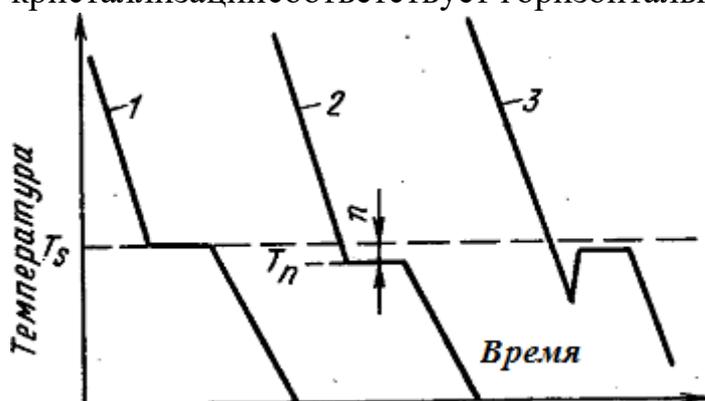


Рис. 1.4. Кривые охлаждения при кристаллизации

По окончании кристаллизации, т.е. после полного перехода в твердое состояние, температура снова начинает снижаться, и твердое кристаллическое вещество охлаждается. Теоретически процесс кристаллизации изображается кривой 1. Кривая 2 показывает реальный процесс кристаллизации. Жидкость непрерывно охлаждается до температуры переохлаждения T_n , лежащей ниже теоретической температуры кристаллизации T_s . При охлаждении ниже температуры T_s создаются энергетические условия, необходимые для протекания процесса кристаллизации.

В жидком состоянии атомные остовы вещества вследствие теплового движения перемещаются беспорядочно. В то же время в жидкости имеются сравнительно устойчивые группировки атомов небольшого объема. Эти группировки неустойчивы, рассасываются и вновь появляются в разных

местах жидкости. В пределах группировки расположение атомных остовов вещества во многом аналогично их расположению в решетке кристалла. При переохлаждении жидкости некоторые из них, наиболее крупные, становятся устойчивыми и способными к росту. Эти устойчивые группировки атомных остовов называются центрами кристаллизации (*зародышами*). Все зародыши большего размера будут центрами кристаллизации, а зародыши – меньшего размера окажутся неустойчивыми и вновь рассасываются в жидкости.

Центр кристаллизации, обрастая новыми слоями атомов, становится крупнее. Кристаллы растут свободно до тех пор, пока со всех сторон их окружает жидкость. Форма таких растущих кристаллов геометрически правильна и соответствует их кристаллическому строению.

При взаимном столкновении граней кристаллов их правильная форма нарушается и становится в момент окончания процесса кристаллизации *неправильной*.

Зародыши, возникающие в жидкой фазе, имеют трехмерные размеры и называются трехмерными.

Критический размер зародыша связан с термодинамическими параметрами:

$$r_{kp} = \frac{2\sigma}{\Delta f},$$

где σ – удельное (на 1 см^2) поверхностное натяжение на границе жидкость – кристалл; Δf – удельное (на 1 см^3) изменение свободной энергии при переходе жидкости в кристаллическое состояние.

С увеличением степени переохлаждения Δf быстро увеличивается. Следовательно, с ростом степени переохлаждения критический размер зародыша убывает, центров появляется больше.

Таким образом, кристаллизация состоит из двух процессов. Первый из них заключается в зарождении мельчайших кристаллических частиц, называемых зародышами или центрами кристаллизации, второй – в росте кристаллов из этих центров.

Скорость зарождения центров кристаллизации выражается числом зародышей, образующихся в единице объема жидкости за единицу времени. Оно обозначается (ч.ц.) – число центров.

Скорость роста кристаллов или скорость кристаллизации выражается линейной скоростью движения кристаллов в направлении перпендикулярном к ней. Эта скорость обозначается (с.к.) – скорость

кристаллизации или (с.р.) – скорость роста кристаллов, она измеряется единицами длины в единицу времени.

На рис. 1.5 приведены кривые зависимости ч.ц. и с.р. от степени переохлаждения. С увеличением ΔT возрастает число центров кристаллизации и увеличивается скорость их роста; при определенной степени переохлаждения наступает максимум. Однако металлы и сплавы отличаются в жидком состоянии сравнительно малой способностью к переохлаждению, т.е. их невозможно переохлаждать до таких температур, при которых ч. ц. достигали бы максимума. Поэтому для металлов кривые обрываются уже прималых степенях переохлаждения (сплошные линии).

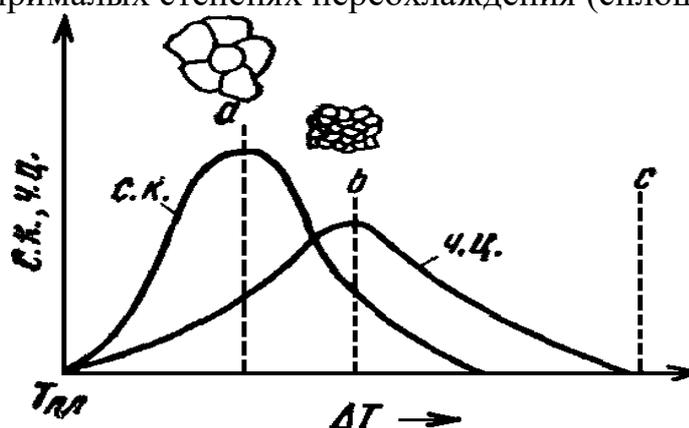


Рис. 1.5. Влияние степени переохлаждения на число центров кристаллизации (ч.ц.) и скорость роста кристаллизации (с.р.)

При малой степени переохлаждения, когда скорость образования центров кристаллизации мала, а скорость их роста велика, размеры кристаллов велики; при больших степенях переохлаждения скорость зарождения новых центров велика, а скорость роста мала: кристаллы получаются более мелкими. Фактический размер кристаллов определяется соотношением скоростей роста кристаллов и образования центров кристаллизации. Оба процесса связаны с перемещениями атомных остовов, т.е. являются диффузионными и зависят от температуры. У некоторых веществ (органические соединения, стекла) при очень больших степенях переохлаждения диффузия замедляет образование центров кристаллизации, и рост кристаллов. Однако скорость образования центров растет более резко и поэтому в металлах при увеличении степени переохлаждения получаются все более мелкие кристаллы. Соответственно при малых степенях переохлаждения велик критический размер зародыша, а скорость зарождения мала и кристаллы получаются крупными.

При заливке жидкого металла в форму с низкой теплопроводностью (земляная, шамотная) или в подогретую металлическую форму кристаллизация идет при небольших степенях переохлаждения. Увеличение

переохлаждения получается при заливке жидкого металла в холодные металлические формы.

Число зерен (кристаллов) n в единицу объема металла и их размер при данной степени переохлаждения, может быть определен по формуле:

$$n \propto \sqrt{\text{ч. ц./с. р.}}$$

Таким образом, изменяя степень переохлаждения, можно получить кристаллы (зерна) различной величины. От величины зерен зависят многие свойства металлов. Более желательно мелкозернистое строение. В реальных условиях процессы кристаллизации в значительной мере зависят от имеющихся готовых центров кристаллизации. Такими центрами могут быть твердые частицы разнообразных примесей, стенки формы. Особенно эффективны частицы таких веществ, которые по своему кристаллическому строению похожи на затвердевающий металл. Это сходство проявляется в близком соответствии расположения атомных остовов на определенных плоскостях решеток металла и примеси.

Растворенные примеси в металле способствуют увеличению числа центров, если примеси будут поверхностно-активными веществами, понижающими поверхностное натяжение. В этом случае уменьшается критический размер центра кристаллизации, что эквивалентно увеличению степени переохлаждения.

Для измельчения структуры широко применяют модифицирование – обработку жидких сплавов небольшими количествами добавок (модификаторов). В качестве модификаторов используют поверхностно-активные вещества (бор в стали, натрий в алюминии и его сплавах) и тугоплавкие металлы (титан, цирконий в алюминии и его сплавах).

При повышении температуры жидкого металла примеси, играющие роль дополнительных центров кристаллизации, растворяются, а поверхностно-активные примеси – дезактивируются, поэтому повышение температуры жидкого металла перед разливкой приводит к укрупнению зерна при кристаллизации.

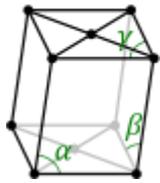
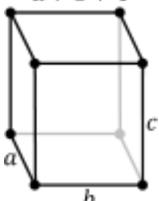
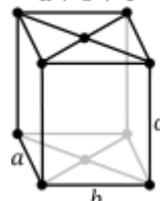
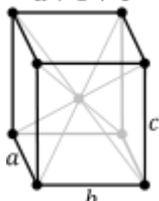
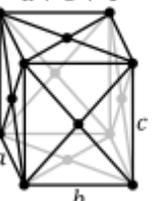
Форма кристаллов и строение слитков

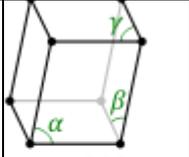
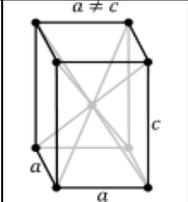
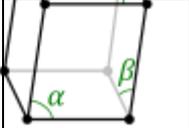
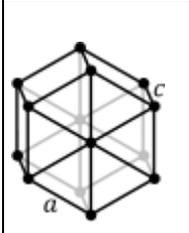
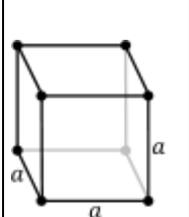
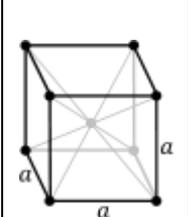
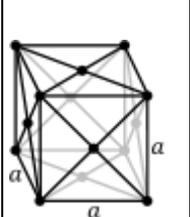
Форма зерен, образующихся при кристаллизации, зависит от условий их роста, главным образом от скорости и направления отвода теплоты и температуры жидкого металла, а также от примесей. Рост зерна происходит по дендритной (древовидной) схеме (рис. 1.6). Наибольшая скорость роста

кристаллов наблюдается по таким плоскостям и направлениям решетки, которые имеют наибольшую плотность упаковки атомных остовов. В результате вырастают длинные ветви, которые называются осями первого порядка. Затем на этих осях появляются и начинают расти ветви второго порядка и т.д. Классификация кристаллических решеток показана в табл. 1.2.

Таблица 1.2

Типы кристаллических решеток

| Кристаллографическая система | Решётки Браве | | | |
|--|---|---|---|---|
| | Простая | Базо-центрир-ая | Объемн о-центр-ая | Гране-центр-ая |
| Триклинная (параллелепипед) $a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$ <chem>K2Cr2O7</chem> | | | | |
| Моноклинная (правильная призма с параллелограммом в основании) $a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ <chem>Sb</chem> | | $\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$  | | |
| Ромбическая (ромбоэдр) $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ <chem>Fe3C, Sa</chem> | $a \neq b \neq c$  | $a \neq b \neq c$  | $a \neq b \neq c$  | $a \neq b \neq c$  |

| | | | | |
|--|--|--|---|---|
| <p>Тетрагональная (прямой параллелепипед) $a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ TiO₂, SnV</p> | <p>$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$</p>  <p>$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$</p> | |  | |
| <p>Тригональная(ромбоэдриче ская)(равносторонний ромбоэдр As, Bi) $a = b = c; \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ,$ $\neq 90^\circ$</p> |  | | | |
| <p>Гексагональная (призма с основанием шестиугольника) $a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma$ $= 120^\circ$ Zn, Cd</p> |  | | | |
| <p>Кубическая (правильный куб) $a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ Cu, Fe, NaCl</p> |  | |  |  |

Если гладкая (первичная) ось дендрита, ориентированная вдоль направления отвода тепла (ось первого порядка), намного длиннее осей, перпендикулярных к ней (оси второго порядка), то дендрит называется *столбчатым*. Если оси первого и второго порядков приблизительно равны по длине и достаточно развиты, дендрит называется *равноосным*. В том случае, когда в жидком металле возникает очень большое число центров кристаллизации (при значительной степени переохлаждения или вследствие присутствия большого числа посторонних центров кристаллизаций), то дендриты не успевают вырасти; такие дендриты называются *мелкоглобулярными*.

Чаще всего при кристаллизации металлов и сплавов, применяемых в промышленности, образуются дендриты всех трех видов.

Дендриты растут до тех пор, пока не соприкоснутся друг с другом. После этого окончательно заполняются межосные пространства, и дендриты превращаются в полновесные кристаллы с неправильной внешней огранкой. Такие кристаллы называются *зернами* или *кристаллитами*. На границах между зернами в участках между осями дендритов накапливаются примеси, появляются поры из-за усадки и трудностей подхода жидкого металла к фронту кристаллизации.

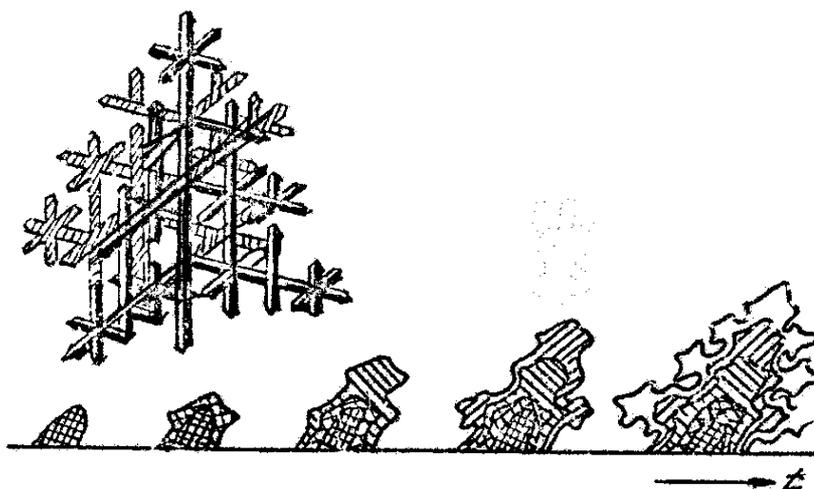


Рис. 1.6. Схема роста дендрита

Условия отвода теплоты при кристаллизации значительно влияют на форму зерен. Это видно на примере кристаллизации стального слитка (рис. 1.7).

Кристаллизация стального слитка идет в три стадии. Сначала на поверхности слитка образуется зона 1 (рис. 1.7) мелких кристаллов – это результат влияния холодной металлической формы, которая обеспечивает в первые моменты затвердевания слитка большую скорость охлаждения металла. Затем растут большие кристаллы (зона 2), вытянутые по направлению отвода теплоты. Их называют столбчатыми кристаллами. Наконец, в середине слитка, где наблюдается наименьшая степень переохлаждения, образуются равноосные кристаллы больших размеров (зона 3)

При известных условиях (перегретый жидкий металл, малое содержание примесей и др.) зона крупных равновесных кристаллов полностью исчезает. Структура слитка состоит практически из одних столбчатых кристаллов и называется транскристаллической. Зона столбчатых кристаллов характеризуется наибольшей плотностью, но в месте стыка столбчатых кристаллов собираются нерастворимые примеси и слитки

с транскристаллической структурой часто растрескиваются при обработке давлением. Транскристаллизация часто наблюдается в сварных швах, уменьшая их прочность.

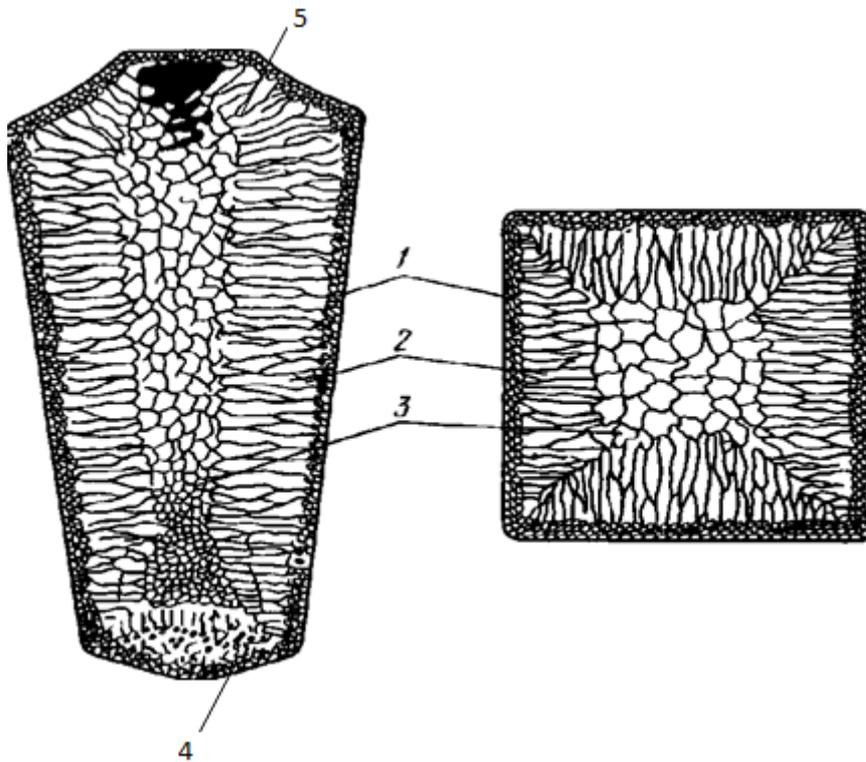


Рис. 1.7. Схема сечения слитка спокойной стали: 1 – слой мелкоглобулярных кристаллов; 2 – область столбчатых кристаллов; 3 – равноосные дендриты; 4 – шлак; 5 – шлак

В верхней части слитка, которая затвердевает в последнюю очередь, концентрируется усадочная раковина. Под усадочной раковиной металл получается рыхлым, в нем содержится много усадочных пор. Часть слитка с усадочной раковиной и рыхлым металлом отрезают. Слиток имеет неоднородный состав. Например, в стали по направлению от поверхности к центру и снизу вверх увеличивается концентрация углерода и вредных примесей – серы и фосфора. Химическая неоднородность по отдельным зонам слитка называется зональной ликвацией. Она отрицательно влияет на механические свойства.

Контрольные вопросы и задачи

1. Существенные характеристики кристаллической структуры.
2. Почему не совпадают теоретическая и фактическая температуры

кристаллизации?

3. Как влияет степень переохлаждения на процесс кристаллизации металла?

4. Как изменяются размеры кристаллов в зависимости от числа центров кристаллизации и скорости линейного роста кристаллов?

5. Как влияют посторонние примеси в расплаве на размеры кристаллов?

6. Какие условия влияют на образование вытянутых древовидных кристаллов (дендритов)?

7. Какими условиями кристаллизации определяется неоднородность дендритного строения металла в сечении слитка или отливки?

8. Каковы причины изменения скорости кристаллизации соли из раствора?

Задача

Две одинаковые детали из алюминиевого сплава (силумина) были отлиты в землю (рис.1.8) и кокиль (рис.1.9).

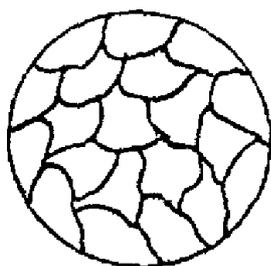


Рис. 1.8

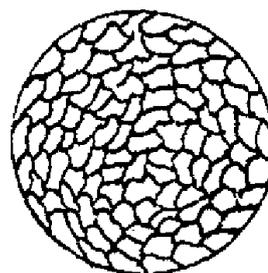


Рис. 1.9

Описать:

1. Влияние на величину зерна скорости кристаллизации;
2. Влияние на величину зерна числа центров кристаллизации, зарождающихся в единице объёма в единицу времени;
3. Модифицирование и его влияние на величину зерна.