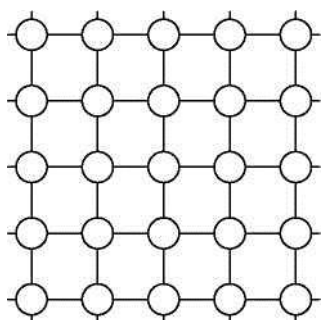


## Пр\_1. Базис и координационное число

В металлах, находящихся в твердом состоянии, порядок расположения атомов строго определен и закономерен, силы взаимодействия уравновешены, тело сохраняет свою форму. Металлы имеют кристаллическое строение с правильным закономерным расположением атомов в пространстве.

Закономерное расположение атомов (точнее, положительно заряженных ионов) приведено на рис. 1. Воображаемые линии, проведенные через центры атомов, расположенных в одной плоскости, образуют решетку, в узлах которой располагаются атомы. Такая конфигурация называется *кристаллографической плоскостью*.



Многочисленное повторение кристаллографических плоскостей в пространстве позволяет получить *пространственную кристаллическую решетку* (рис. 2.2). Пространственная кристаллическая решетка сложна в изображении, поэтому представление об атомном строении кристаллов дается в виде элементарных кристаллических ячеек. Под *элементарной кристаллической ячейкой* понимают минимальный объем, дающий представление об атомной структуре металла в целом, его повторение в пространстве образует кристаллическую решетку.

Элементарные кристаллические ячейки характеризуются следующими основными параметрами: периодом решетки, координационным числом, атомным радиусом, базисом (атомной плотностью).

*Периодом решетки* называется расстояние между центрами двух соседних частиц (атомов, ионов) в элементарной ячейке решетки.

*Координационное число  $K$*  показывает количество атомов, находящихся на самом близком расстоянии от любого выбранного атома в решетке.

Под атомным радиусом понимают половину межатомного расстояния между центрами ближайших атомов в кристаллической решетке элемента при равновесных условиях.

Базисом решетки называется количество атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку решетки.

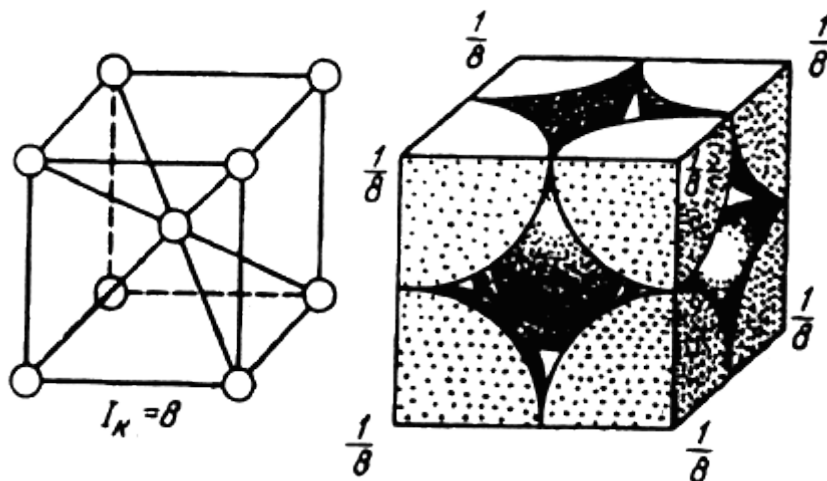


Рис. 2. Схема определения базиса ОЦК решетки

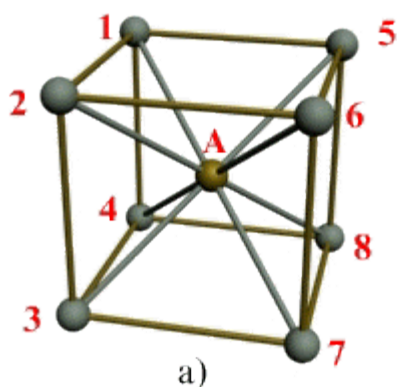
Коэффициент компактности Q равен отношению суммарного объема атомов, входящих в решетку, к объему решетки:

$$Q = \frac{V_{ат} \times n}{V_{реш}}$$

где  $V_{ат}$  — объем атома (иона);  $n$  — базис, или число атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку;  $V_{реш}$  — объем элементарной ячейки.

Простейшим типом кристаллического строения является кубическая решетка, в которой атомы расположены в углах куба (см. рис. 2). На ее примере покажем основные параметры решетки:

- период решетки равен  $a$ ;
- координационное число  $K=6$ ;



- базис решетки равен 1  $((1/8) \cdot 8 = 1)$ , каждый из атомов, расположенных в углах куба, принадлежит одной из восьми элементарных ячеек, т.е. на одну ячейку приходится  $1/8$  атома).

- Коэффициент компактности  $Q$  равен отношению суммарного объема атомов,

входящих в решетку, к объему решетки:

$$Q = \frac{V_{ат} \times n}{V_{реш}}$$

$$Q = \frac{4\pi R^3 n}{3V} \cdot 100,$$

где  $R$  — радиус атома (иона);  $n$  — базис, или число атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку;  $V$  — объем элементарной ячейки.

Для простой кубической решетки  $n = (1/8) \cdot 8 = 1$ ;  $V = a^3 = (2R)^3$ , коэффициент компактности  $Q = 52 \%$ .

В простой кубической решетке атомы уложены (упакованы) недостаточно плотно. Стремление атомов занять места, наиболее близкие друг к другу, приводит к образованию новых типов решеток.

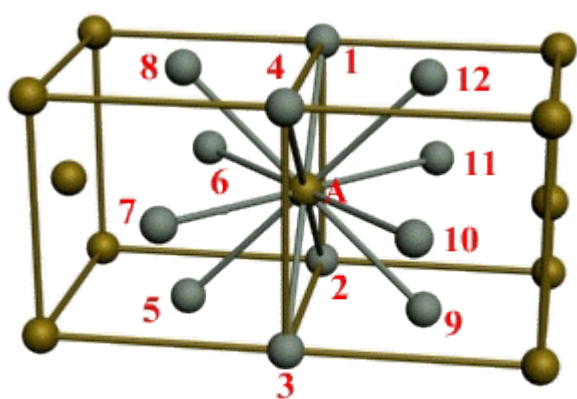
Для большинства металлов характерны следующие типы кристаллических решеток: объемно-центрированная кубическая (ОЦК); гранецентрированная кубическая (ГЦК); гексагональная плотно-упакованная (ГПУ). Основные типы кристаллических решеток представлены на рис. 2.4.

В объемно-центрированной кубической решетке (рис. 2.4, а) атомы расположены в углах и центре куба. Период решетки равен  $a$ , в элементарной ячейке ОЦК наименьшее расстояние между атомами соответствует  $d = 0,5 a$ . координационное число  $K = 8$ , базис решетки равен 2  $((1/8) \cdot 8 + 1 = 2$ ; 8 атомов расположены в углах куба, 1 атом в центре куба принадлежит только одной ячейке). Данный тип решетки имеют металлы К, Na, Li, Та, W, Мо, Fe<sub>a</sub>, Cr, Nb и др. Коэффициент компактности ячейки, определяемый как

отношение объема, занятого атомами, к объему ячейки составляет для ОЦК решетки 68 %

В ОЦК решетке (рис. 1.3, а) атом А (в центре) находится на наиболее близком равном расстоянии от восьми атомов, расположенных в вершинах куба, т. е. координационное число этой решетки равно 8 (К8).

В гранецентрированной кубической решетке (рис. 4, б) атомы расположены в углах куба и центрах его граней. Эта решетка характеризуется периодом  $a$ , координационным числом  $K=12$ , базисом,



б)

равным 4:  $(1/8) \cdot 8 + 1/2 \cdot 6 = 4$ ; 8 атомов в углах куба и 6 атомов в центрах граней, каждый из которых принадлежит двум элементарным ячейкам.

Кубическую гранецентрированную решетку имеют следующие металлы: Ca, Pb, Ni, Ag, Au, Pt, Fe<sub>γ</sub> и др.-

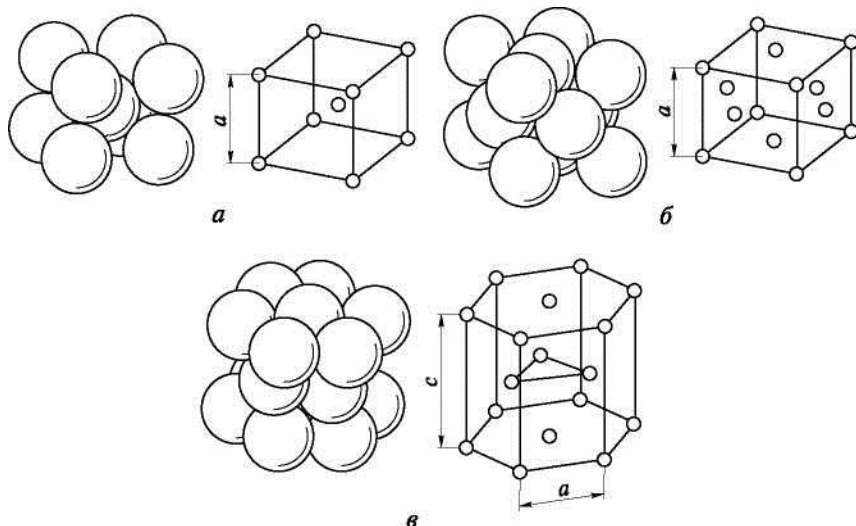
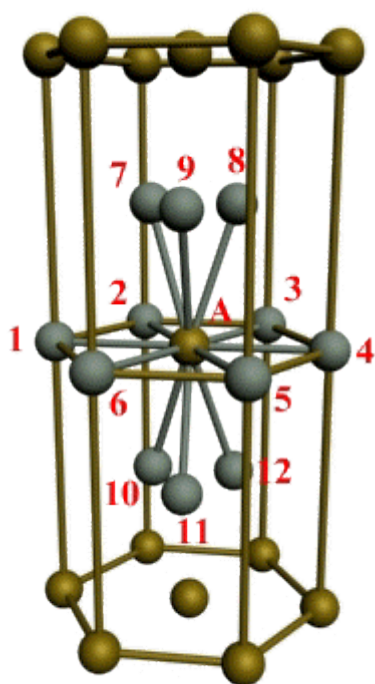


Рис. 4. Типы кристаллических решеток и схемы упаковки в них атомов:

$a$  — объемно-центрированная кубическая;  $b$  — гранецентрированная кубическая;  $в$  — гексагональная плотноупакованная

В ГЦК решетке (рис. 4, б) атом А (на грани куба) находится на наиболее близком равном расстоянии от четырех атомов 1, 2, 3, 4, расположенных в вершинах куба, от четырех атомов 5, 6, 7, 8, расположенных на гранях куба, и, кроме того, от четырех атомов 9, 10, 11, 12, принадлежащих расположенной рядом кристаллической ячейке. Атомы 9, 10, 11, 12 симметричны атомам 5, 6, 7, 8. Таким образом, ГЦК решетки координационное число равно 12 (К12).

В гексагональной плотноупакованной решетке (рис. 5) атомы



в)

расположены в вершинах и центрах шестигранных оснований призмы, кроме того, три атома находятся в средней плоскости призмы. Периоды решетки —  $a$  и  $c$ , причем  $c/a > 1$  (например,  $c/a = 1,633$  для Ru, Cd и  $c/a > 1,633$  для Mg, Zn), координационное число  $K=12$ , базис решетки равен 6.

координационное число равно  $K_{12}$ , где расстояние между атомами  $d = 0,5 a$ . ГПУ решетка, для которой  $c/a = 1,633$ , имеет координационное число 12 (Г12) (рис. 3 в), что также соответствует наиболее плотной упаковке. Если отношение  $c/a$  отличается от 1,633 то координационное число будет равняться 6.

ГЦК ГПУ решетки более компактные; в них коэффициент компактности равен 74 %.

При уменьшении координационного числа в ГПУ решетке с 12 до 6 коэффициент компактности составляет 50 %, а при координационном числе 4 - всего 25 %.

*В ГПУ решетке при  $c/a = 1,633$  (рис. 1.3, в) атом А в центре шестигранного основания призмы находится на наиболее близком равном расстоянии от шести атомов 1, 2, 3, 4, 5, 6, размещенных в вершинах шестигранника, и от трех атомов 7, 8, 9, расположенных в средней плоскости призмы. Кроме того, атом А оказывается на таком же расстоянии еще от трех атомов 10, 11, 12, принадлежащих кристаллической ячейке, лежащей ниже основания. Атомы 10, 11, 12 симметричны атомам 7, 8, 9.*

*Следовательно, для ГПУ решетки координационное число равно 12 (Г12).*

Половину наименьшего расстояния между атомами в их кристаллической решетке называют атомным радиусом. Атомный радиус возрастает при уменьшении координационного числа, так при этом увеличивается пространство между атомами.

Тип решетки	Координационное число, базис	Коэффициент компактности	Металл
ГЦК	12, 4	74	Ag, Au, Pt, Cu, Al, Pb, Ni
ОЦК	8, 2	68	Na, K, V, Nb, Cr, Mo, W
ГПУ	12, 6	74	Be, Mg, Zn, Cd