

Компактность кристаллической решетки или степень заполненности ее объема атомами является важной характеристикой. Она определяется такими показателями как **параметр решетки**, **число атомов** в каждой элементарной ячейке, **координационное число** и **плотность упаковки**.

Параметр решетки - это расстояние между атомами по ребру элементарной ячейки. Параметры решетки измеряется в нанометрах ($1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м} = 10 \text{ \AA}$). Параметры кубических решеток характеризуются длиной ребра куба и обозначаются буквой *a*.

Для характеристики **гексагональной решетки** принимают два параметра - **сторону шестигранника a** и **высоту призмы c**. Когда отношение $c/a = 1,633$, то атомы упакованы наиболее плотно, и решетка называется гексагональной плотноупакованной. Некоторые металлы имеют гексагональную решетку с менее плотной упаковкой атомов ($c/a > 1,633$). Например, для цинка $c/a = 1,86$, для кадмия $c/a = 1,88$.

Параметры *a* кубических решеток металлов находятся в пределах от 0,286 до 0,607 нм. Для металлов с гексагональной решеткой *a* лежит в пределах 0,228-0,398 нм, а *c* в пределах 0,357- 0,652 нм.

Параметры кристаллических решеток металлов могут быть измерены с помощью рентгеноструктурного анализа.

При подсчете числа атомов в каждой элементарной ячейке следует иметь в виду, что каждый атом входит одновременно в несколько ячеек. Например, для ГЦК-решетки, каждый атом, находящийся в вершине куба, принадлежит 8 ячейкам, а атом, центрирующий грань, двум. И лишь атом, находящийся в центре куба, полностью принадлежит данной ячейке.

Таким образом, ОЦК- и ГЦК-ячейки содержат соответственно 2 и 4 атома.

Под **координационным числом** понимается количество ближайших соседей данного атома.

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).

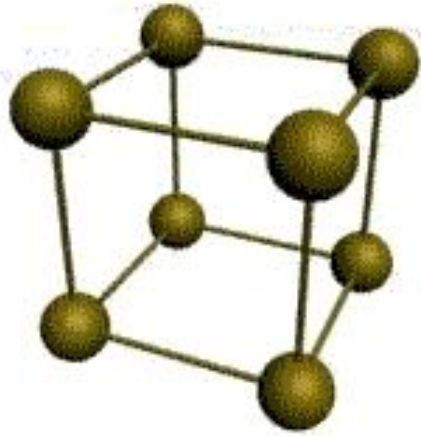
В **ГЦК** решетке (рис. 1.3, б) атом А (на грани куба) находится на наиболее близком равном расстоянии от четырех атомов 1, 2, 3, 4, расположенных в вершинах куба, от четырех атомов 5, 6, 7, 8, расположенных на гранях куба, и, кроме того, от четырех атомов 9, 10, 11, 12, принадлежащих расположенной рядом кристаллической ячейке. Атомы 9, 10, 11, 12 симметричны атомам 5, 6, 7, 8. Таким образом, **ГЦК решетки координационное число равно 12** (К12).

В **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.

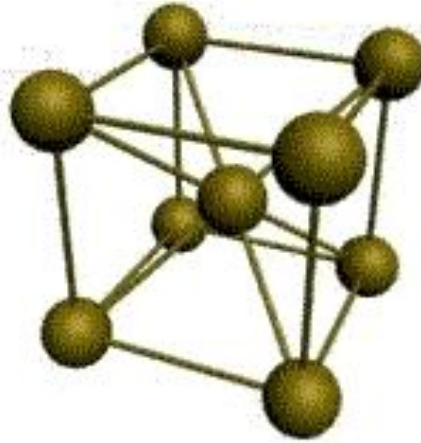
Следовательно, для **ГПУ решетки координационное число равно 12** (Г12).

Плотность упаковки представляет собой отношение суммарного объема, занимаемого собственно атомами в кристаллической решетке, к ее полному объему. Различные типы кристаллических решеток имеют разную плотность упаковки атомов. **В ГЦК решетке атомы занимают 74 %** всего объема кристаллической решетки, а межатомные промежутки («поры») 26 %. **В ОЦК решетке атомы занимают 68 %** всего объема, а «поры» 32 %. Компактность решетки зависит от особенностей электронной структуры металлов и характера связи между их атомами.

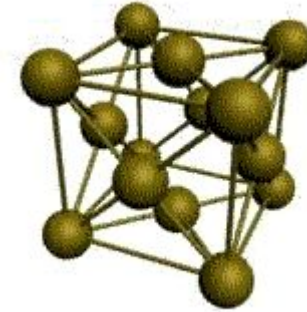
От типа кристаллической решетки сильно зависят свойства металла.



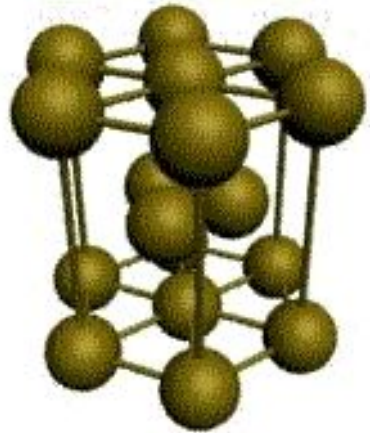
кубическая
(1 атом на ячейку)



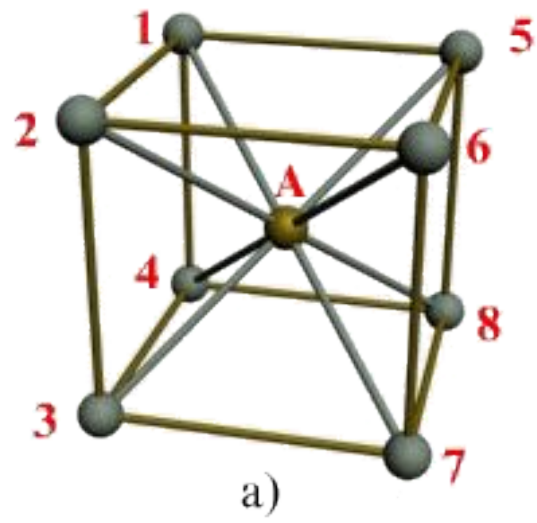
объемно-центрированная кубическая (ОЦК)
(2 атома на ячейку)
железо, хром, ванадий, вольфрам, молибден



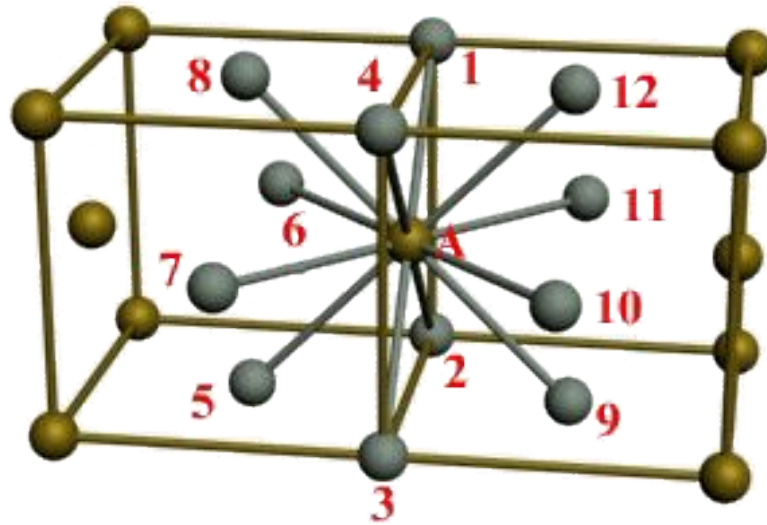
гранецентрированная кубическая
(ГЦК) (4 атома на ячейку)
железо, алюминий, медь, никель,
свинец



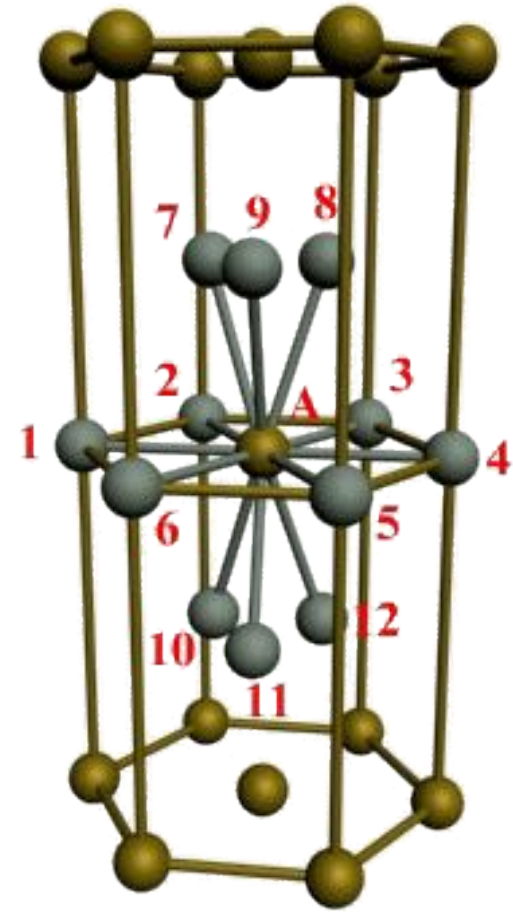
гексагональная
плотноупакованная (ГП) магний,
цинк, кадмий, бериллий, титан



а)

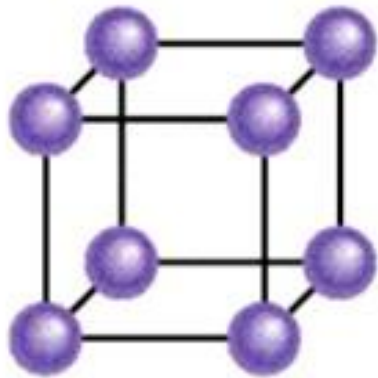


б)

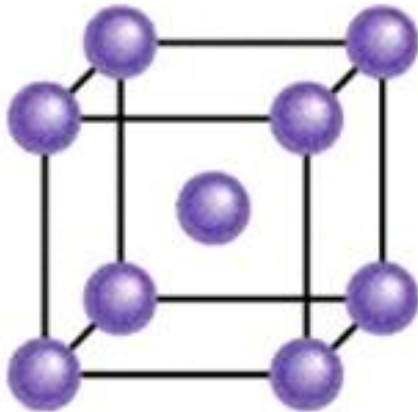
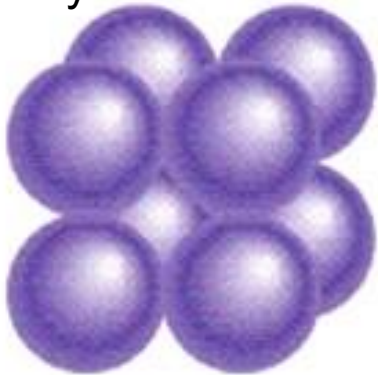


в)

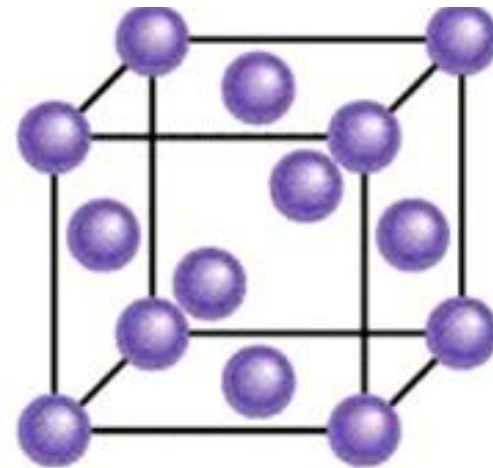
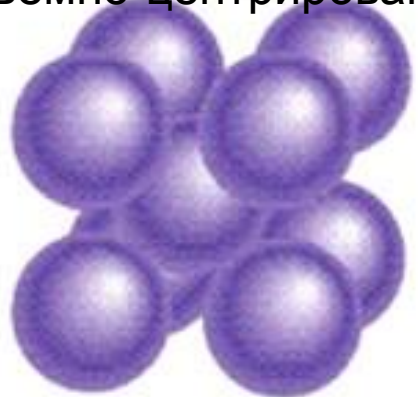
а) - объемноцентрированная кубическая (К8); б) - гранецентрированная кубическая (К12); в) - гексагональная плотноупакованная (Г12)



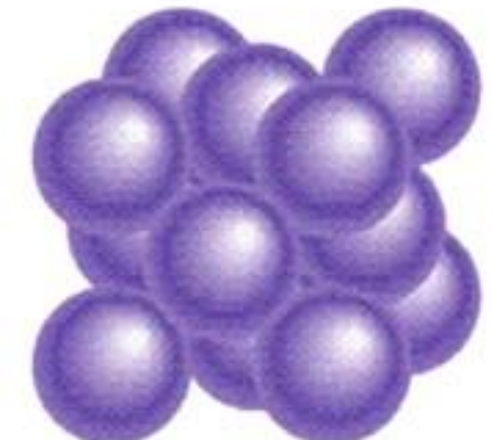
Простая
кубическая

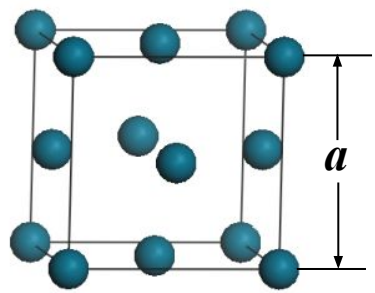


кубическая
объемно-центрированная

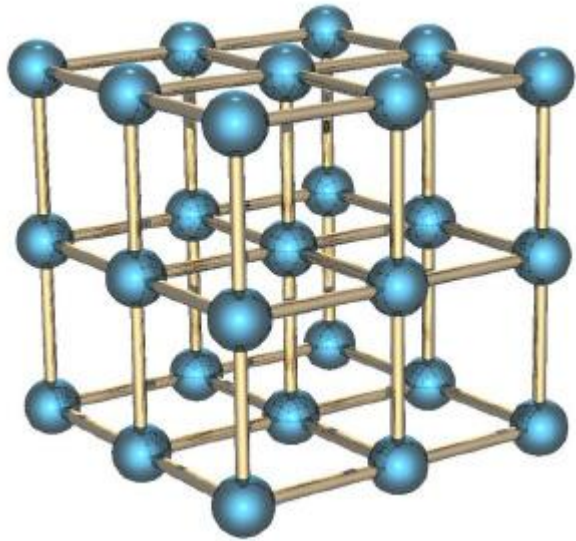


кубическая
гранецентрированная



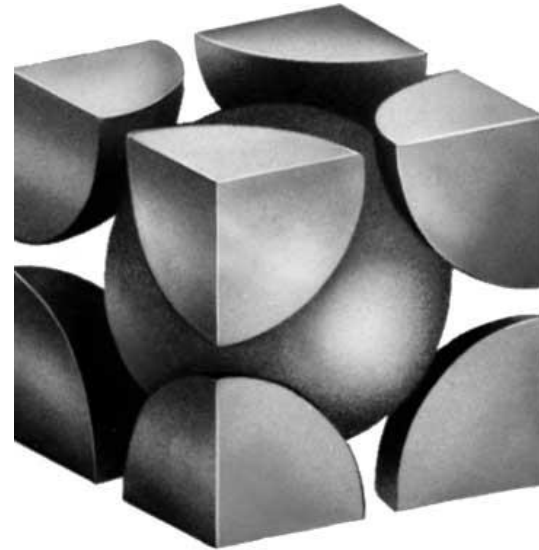
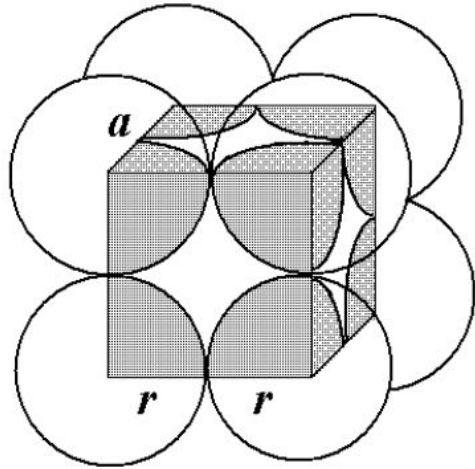


ЗАДАЧА. Назовите кристаллические решетки, показанные на рисунке. Сколько атомов приходится на одну ячейку каждой решетки?



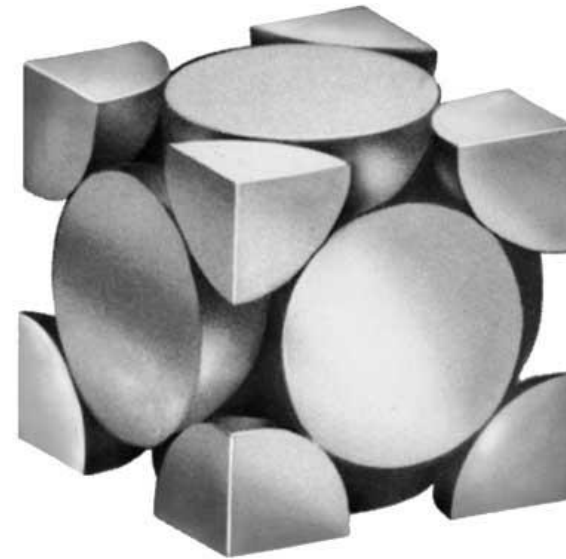
P

0



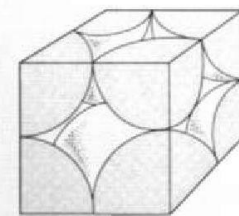
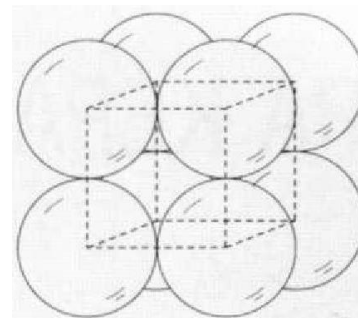
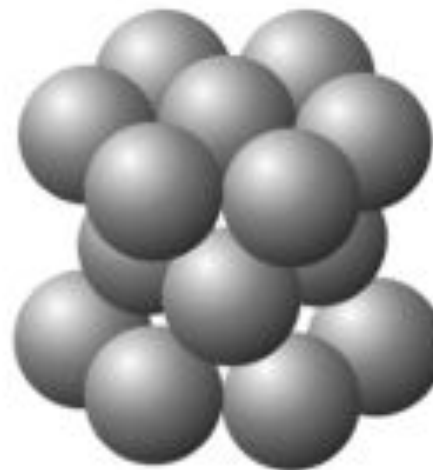
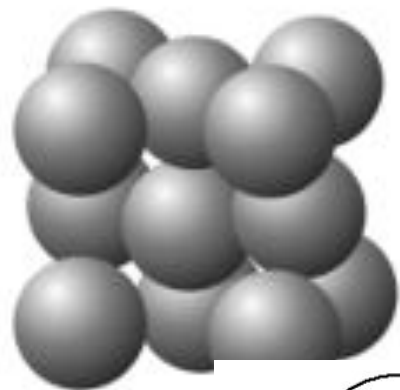
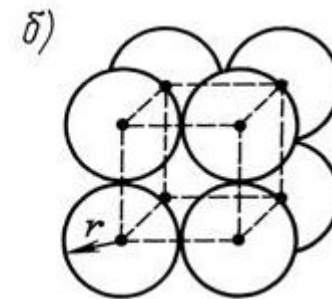
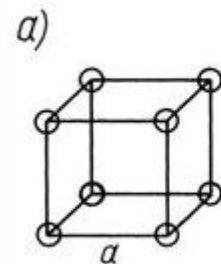
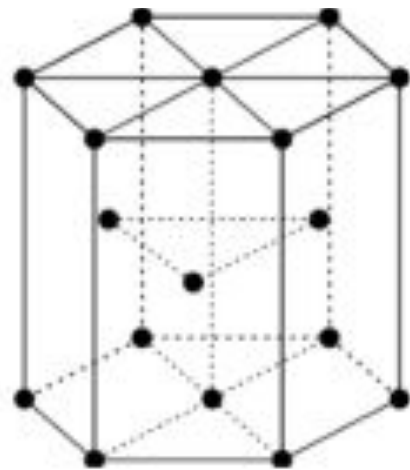
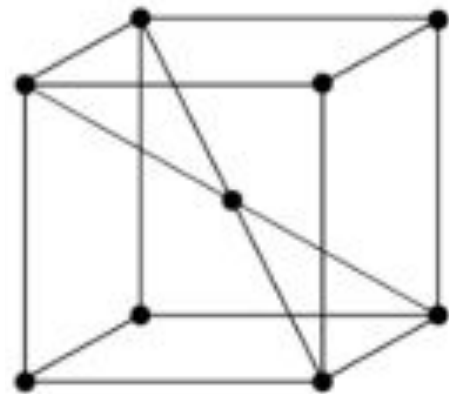
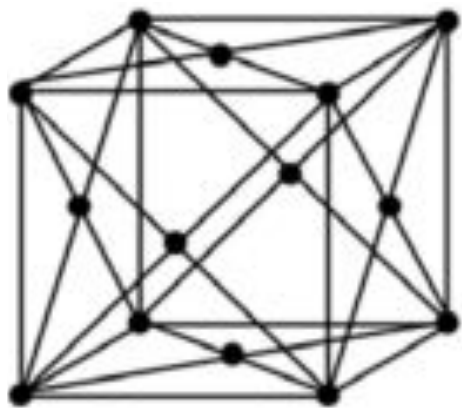
N

a



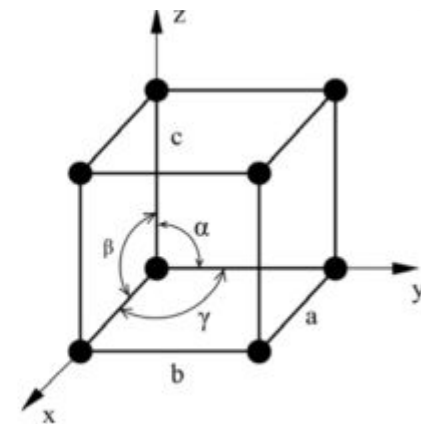
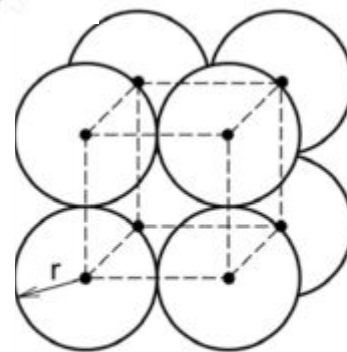
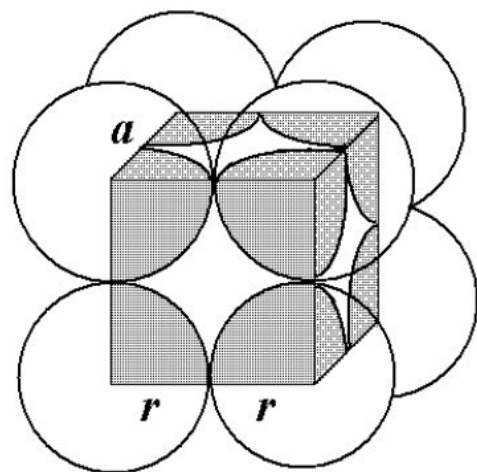
A

u



(а) Простой куб

(б) Элементарная ячейка



РАДИУСЫ АТОМОВ

- Длина периодов в значительной степени определяет сходство элементов в группах. В результате лантаноидного сжатия переходные металлы 5 и 6 периодов проявляют поразительное сходство в химических свойствах, существенно отличаясь от своих аналогов в 4 периоде.
- Например, разделение гафния и циркония доставляет головную боль атомщикам: цирконий практически прозрачен для тепловых нейтронов $\sigma = 0,19$ б, а сечение захвата природного гафния 115 б (в 600 раз больше).

• Технеций и

Характеристика	Zr	Tc
Электроотрицательность	1,33 (шкала Полинга)	1,3 (шкала Полинга)
Электродный потенциал	0	0
Степени окисления	0, +1, +2, +3, +4	0, 2, 3, 4