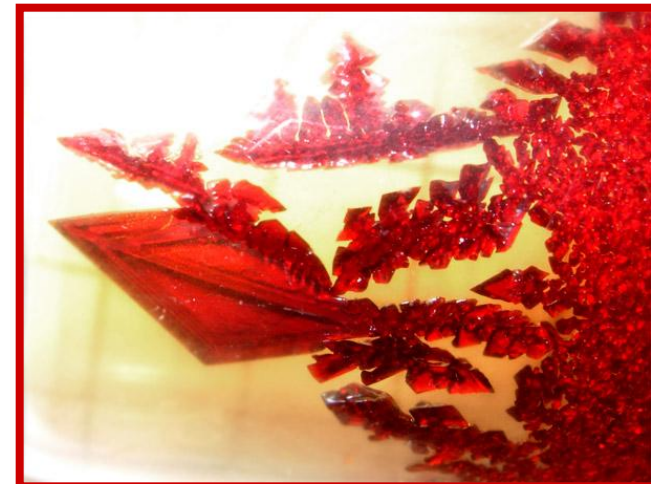
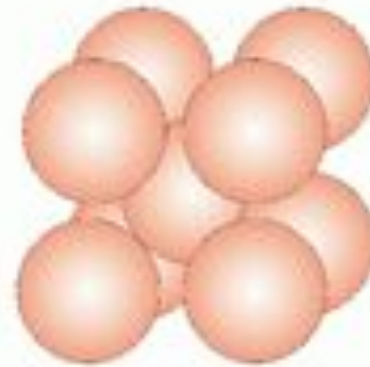
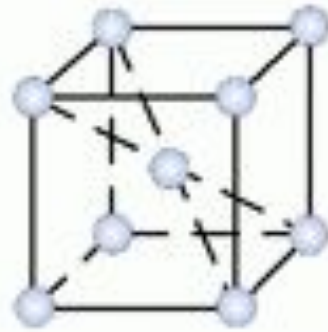
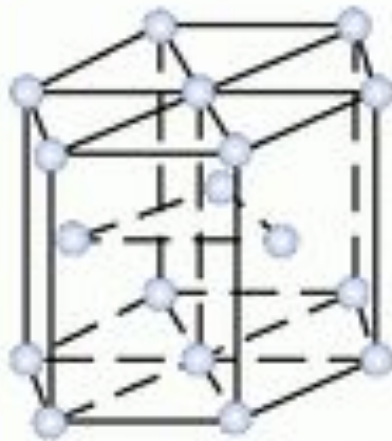


# ОСНОВЫ кристаллографии

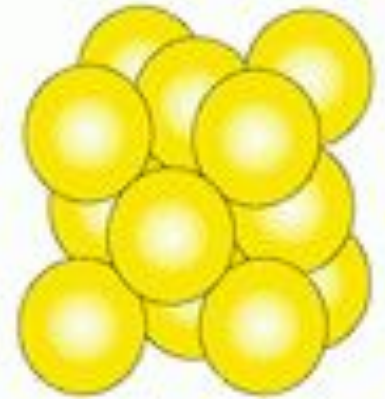
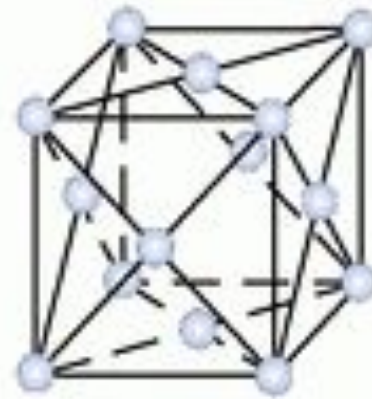




Объемно-центрированного куба (ОЦБ)



Гексагональная плотноупакованная (ГПУ)

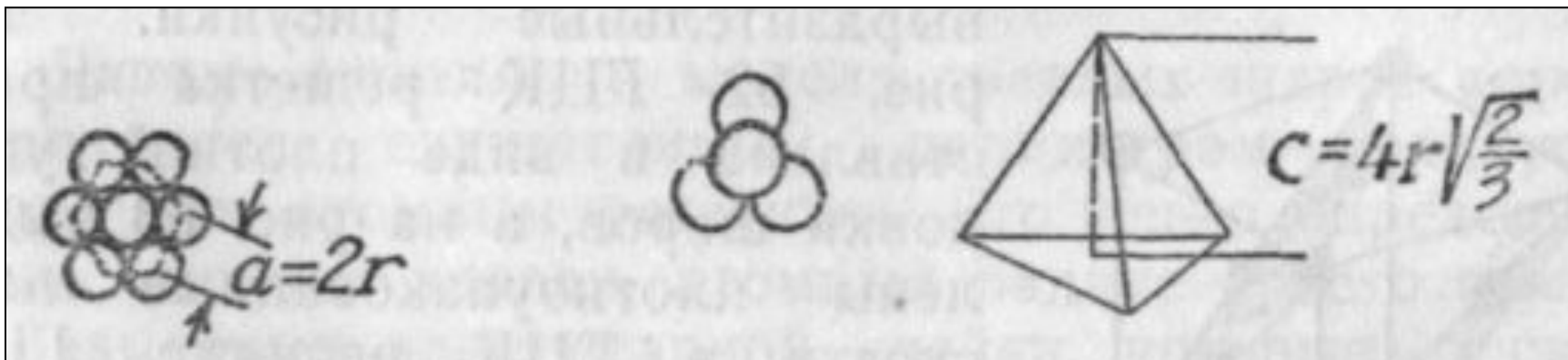


Гранецентрированного куба (ГЦК)

Следует различать понятия **структура кристалла** и **кристаллическая решетка**.

**Периодом решетки** называется расстояние между центрами двух соседних частиц (атомов, ионов) в элементарной ячейке решетки. Периоды решетки выражаются в ангстремах -  $\text{Å}$  ( $1\text{Å} = 10^{-9} \text{ см}$ ).

Под **атомным радиусом** понимают половину межатомного расстояния между центрами ближайших атомов в кристаллической решетке элемента при нормальной температуре и атмосферном давлении.



- **Энергия кристаллической решетки** определяется как энергия, выделяющаяся при образовании кристалла из ионов, атомов или других частиц, образующих кристалл, когда исходное состояние этих частиц газообразное. От величины энергии решетки зависят такие свойства, как температура плавления, модуль упругости, прочность, твердость и др. Увеличение валентности атомов приводит к увеличению энергии решетки.
- **Координационное число  $K$**  показывает количество атомов, находящихся на наиболее близком и равном расстоянии от любого выбранного атома в решетке.
- **Базисом решетки** называется количество атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку решетки.
- **Коэффициент компактности решетки** определяется отношением объема, занимаемого атомами  $V_a$ , ко всему объему решетки  $V_p$ , т. е.  $\eta = V_a / V_p$ .

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

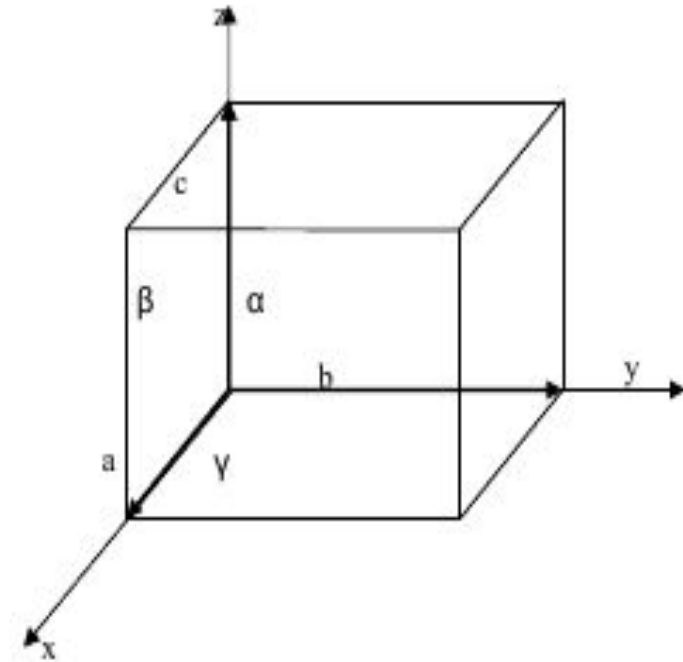
# Индексы Миллера

любую кристаллографическую плоскость и любую грань кристалла можно определить тремя целыми числами - **индексами Миллера**, которые обладают следующими свойствами:

- это целые, не имеющие общего множителя числа;
- они обратно пропорциональны отрезкам, отсекаемым плоскостью от начала координат;
- все параллельные плоскости обозначаются одним набором индексов Миллера;
- если плоскость параллельна какой-либо оси, соответствующий индекс равен нулю;
- в кристаллах кубической системы плоскость и нормаль к ней обозначаются одинаковым набором индексов Миллера.

# Индексы Миллера

- Для описания кристаллических многогранников и структур применяется **метод кристаллографического индицирования**, удобный для всех кристаллографических систем координат.
- Кристаллическая решетка характеризуется шестью параметрами элементарной ячейки: **длинами ребер (трансляциями) и углами.**
- Набор элементарных углов  $\alpha, \beta, \gamma$  и элементарных трансляций  $a, b, c$ , называется **метрикой**



# Индексы узлов

- Положение любого узла в решетке, относительно выбранного начала координат определяется заданием трех его координат -  $x$ ,  $y$ ,  $z$ .
- Эти координаты можно выразить следующим образом:

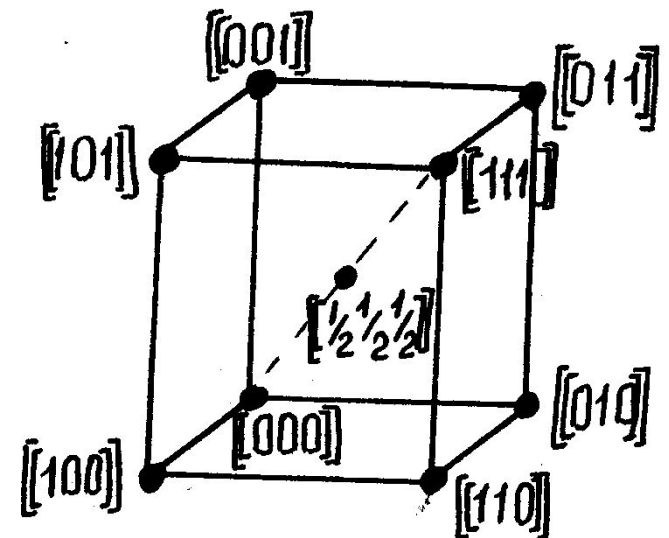
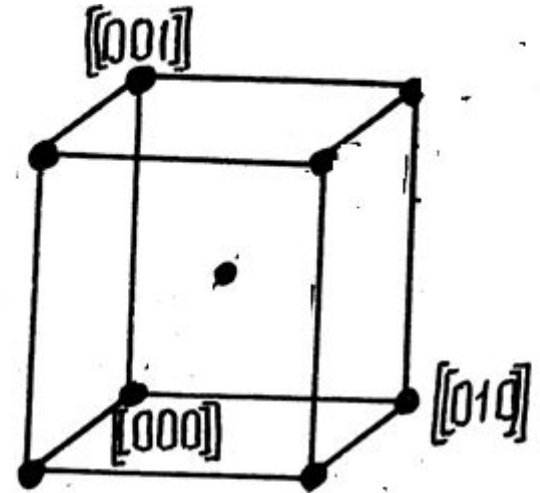
$$x = ua, \quad y = vb, \quad z = wc,$$

где  $a$ ,  $b$ ,  $c$  - параметры решетки;  
 $u$ ,  $v$ ,  $w$  - целые числа.

- Если за единицу измерения длин вдоль осей решетки принять параметры самой решетки  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , то координатами узла будут просто числа  $u$ ,  $v$ ,  $w$ , которые называются **индексами узла** и записываются так:  $[[uvw]]$ .
- Для отрицательного индекса знак минуса ставится над индексом  $[[uvw]]$ .

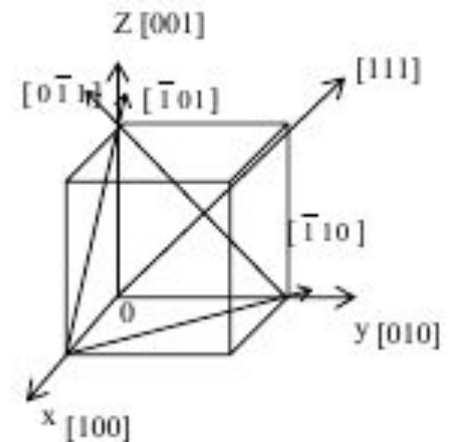
## Задание

- Определить индексы узлов с координатами узлы
- $[[011]]$ .
- $[[111]]$ .
- $[[100]]$ .
- $[[110]]$ .
- $[[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]]$ .



# Индексы направления

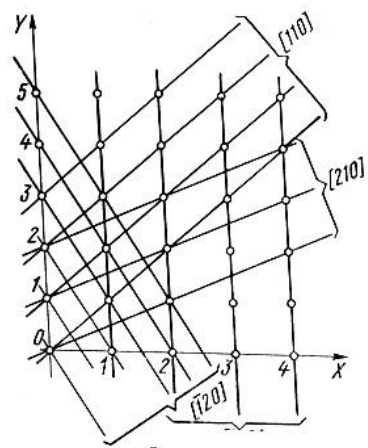
- Для описания направления в кристалле выбирается прямая, проходящая через начало координат.
- Ее положение однозначно определяется индексами  $u$ ,  $v$ ,  $w$  первого узла, через который она проходит. Поэтому индексы узла  $[[uvw]]$  являются одновременно и индексами направления.
- За индексы направления, проходящего через начало координат, принимают координаты первого узла, лежащего на этом направлении  $\langle uvw \rangle$ .



Индексы направления всегда представляют собой три взаимно простых целых числа: пишут не  $[01\frac{1}{2}]$ , а  $[021]$ , не  $[\bar{2}2\bar{4}]$ , а  $[\bar{1}1\bar{2}]$ .



# Найти индексы узлового ряда, проходящего через два узла кристаллической решетки с символами $[[101]]$ и $[[111]]$



## Решение.

Семейство параллельных узловых рядов характеризуют вектором, проходящим через начало координат и ближайший узел решетки, индексы которого являются индексами узлового ряда.

- Любой узел решетки определяется радиус-вектором
 
$$R = ma + nb + pc,$$
- где  $a$ ,  $b$  и  $c$  - базисные векторы,
- $m$ ,  $n$ ,  $p$  - индексы узла.

Для двух узлов  $m_1n_1p_1$  и  $m_2n_2p_2$  радиусы-векторы будут

$$R_1 = m_1a + n_1b + p_1c$$

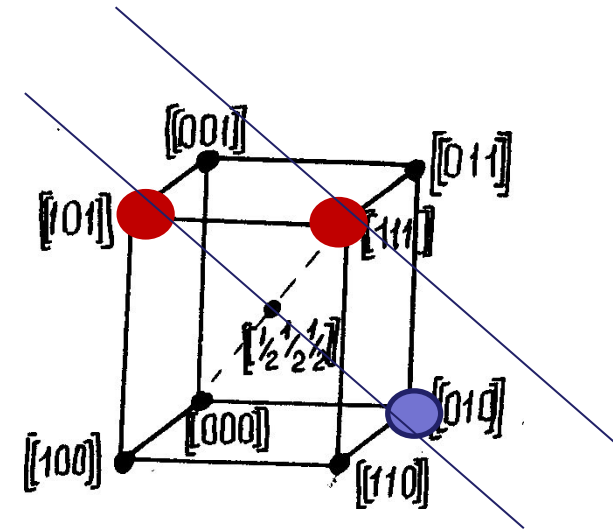
$$R_2 = m_2a + n_2b + p_2c.$$

Если поместить узел  $m_1n_1p_1$  в начало координат, радиус-вектор узла  $m_2n_2p_2$  в новой системе координат приобретет вид

$$R_2 - R_1 = (m_2 - m_1)a + (n_2 - n_1)b + (p_2 - p_1)c.$$

$$R_2 - R_1 = (1-1)a + (1-0)b + (1-1)c = 0a + 1b + 0c$$

Следовательно, при выборе начала координат в узле 101 символ второго узла станет 010, а символ проходящего через оба узла узлового ряда будет  $[010]$ .

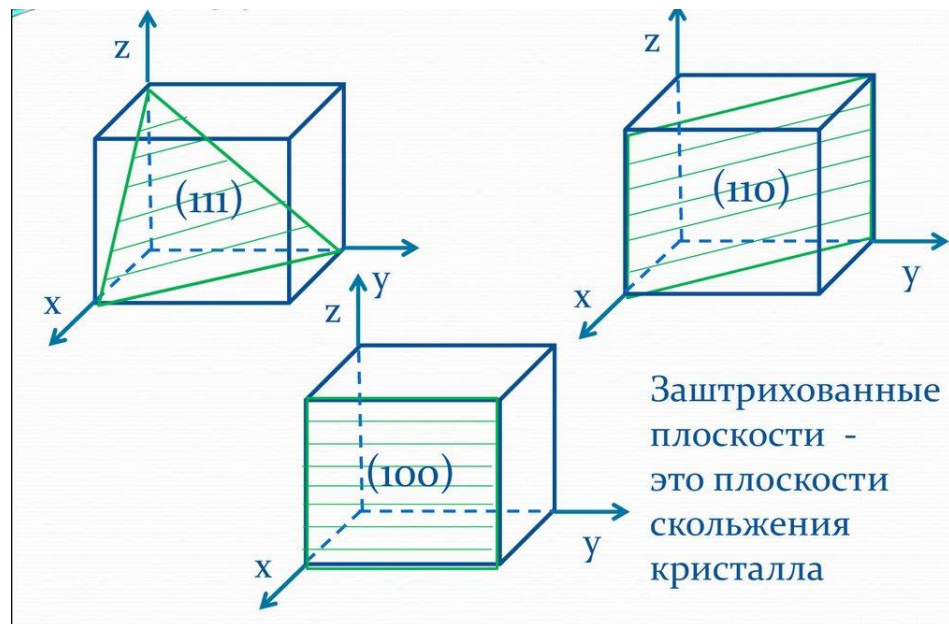


# Индексы плоскости

- Плоскость, проходящая через узлы кристаллографической решетки называется **кристаллографической плоскостью**.
- Индексы плоскости заключают в круглые скобки. Если плоскость параллельна одной из осей («пересекается в бесконечности»), то соответствующий индекс равен нулю.

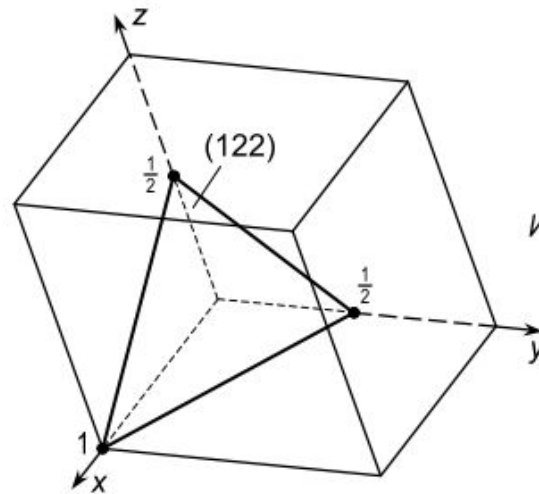
$$(1/\infty = 0).$$

- *Если начало координат лежит в плоскости, то либо саму плоскость, либо нулевой узел необходимо перенести так, чтобы она не проходила через него.*
- Как и для направлений, индексы плоскостей всегда приводят к трём наименьшим (взаимно простым) целым числам.



## Индексирование плоскостей проводится в следующей последовательности:

- а) искомую плоскость необходимо вынести из начала координат (если, конечно, она проходит через нулевой узел) и определить величины отрезков (в масштабных единицах), которые отсекаются ею на координатных осях;
- б) взять обратные значения этих отрезков, привести их к общему знаменателю и его отбросить, оставшиеся в числителе величины и будут определять индексы данной плоскости.



Отрезки на осях:

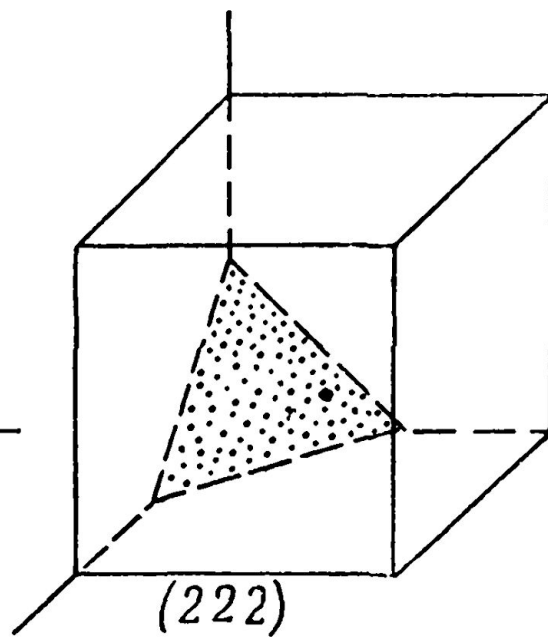
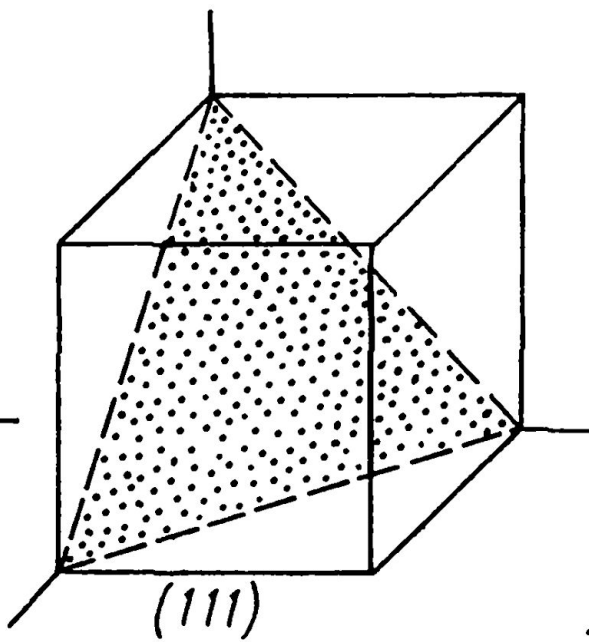
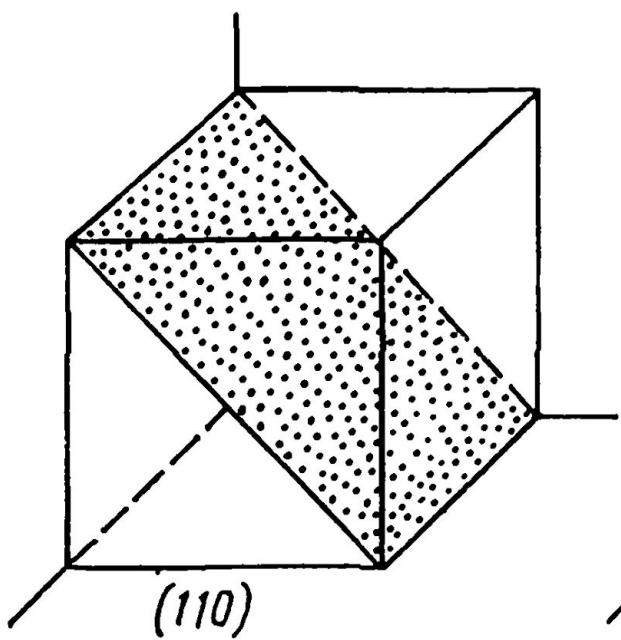
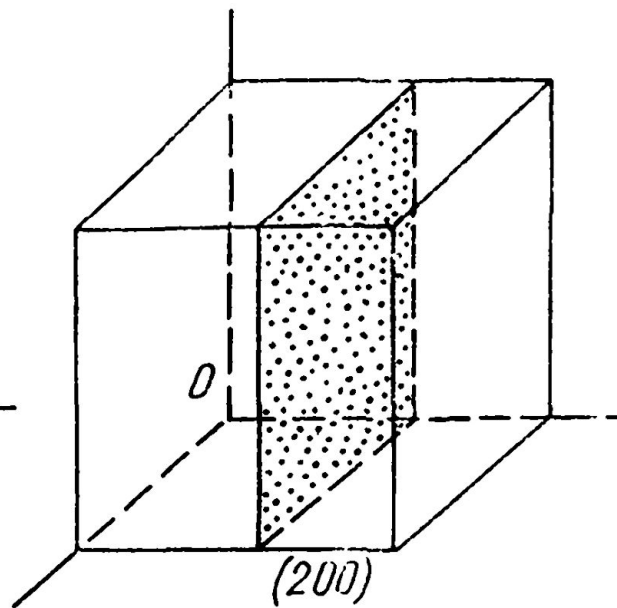
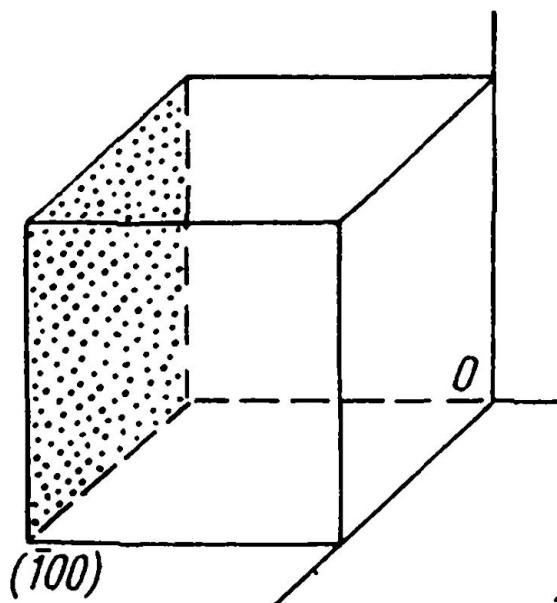
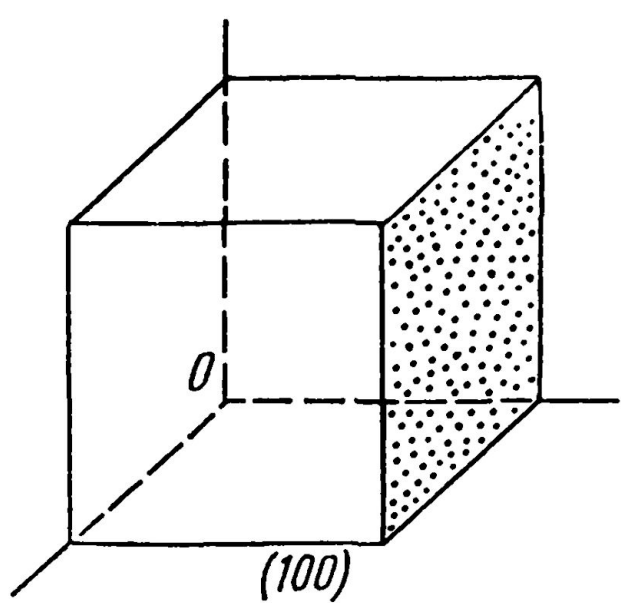
$$1; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}$$

Индексы плоскости:

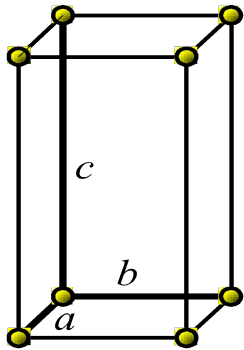
$$\frac{1}{1} = 1$$

$$\frac{1}{1/2} = 2$$

$$\frac{1}{1/2} = 2$$



# Индексы Миллера (Кристаллографические индексы)

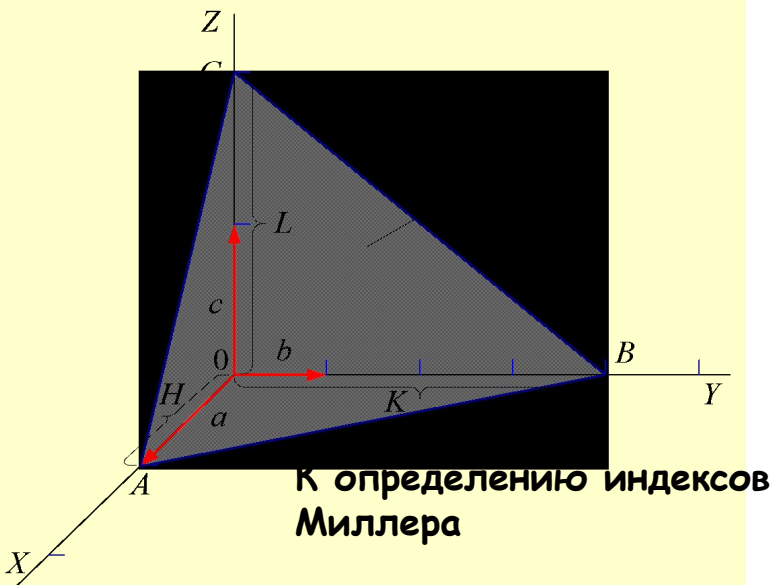


В кристаллографии принято характеризовать плоскости (или направления к ним) не параметрами решетки (параметрами Вейса), а индексами Миллера.

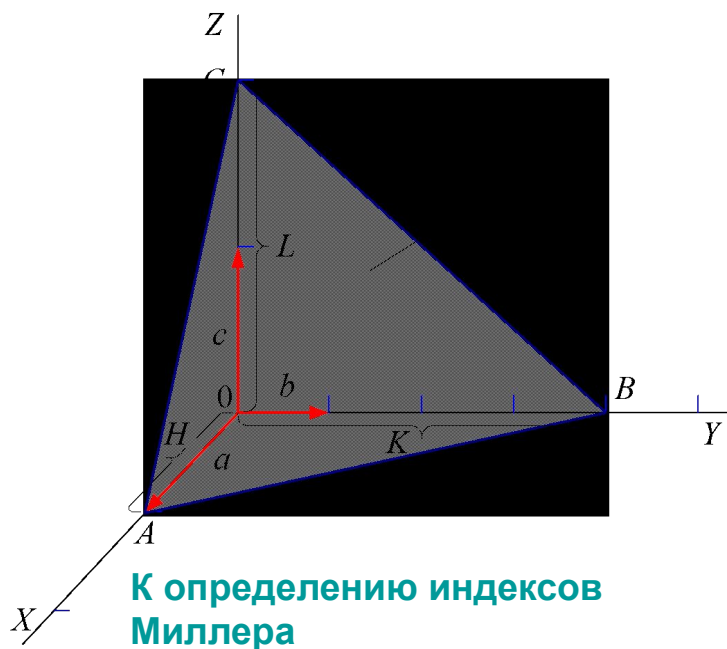
$$\frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{r} = h:k:l$$

Индексы Миллера - три целых взаимно простых числа  $(hkl)$  обратно пропорциональных измеренным в осевых единицах отрезкам, отсекаемым плоскостью по координатным осям

$$OA=1a; OB=4b; OC=2c$$



# Индексы Миллера



Чтобы определить индексы Миллера какой либо кристаллографической плоскости необходимо:

- взять обратные значения координат точек пересечения плоскости ( $A$ ,  $B$  и  $C$ ) с осями координат ( $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ ) отрезков  $OA$ ,  $OB$  и  $OC$ , выраженные в единицах периодов трансляции

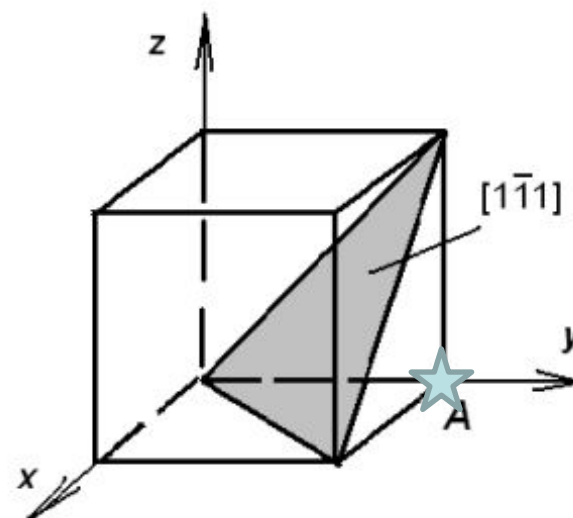
$$\frac{1}{1}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2};$$

- привести к общему знаменателю (в нашем случае это «4»);
- дополнительные множители и будут индексами Миллера

$$\frac{4}{1}, \frac{1}{4}, \frac{2}{2};$$

- **Изобразите плоскость с индексами**  $(1 \bar{1} 1)$ .

- В этом случае сначала придется выполнить задачу, обратную предыдущей, поскольку предварительно надобно определить те отрезки, которые сама плоскость отсекает на осях координат.
- Здесь также нужно взять обратные величины, которые составят соответственно
  - 1 по оси  $x$ ,
  - -1 по оси  $y$
  - 1 по оси  $z$ .
- При построении плоскости в качестве нулевого узла удобно выбрать точку  $A$ , тогда искомая плоскость примет вид



- Найдите индексы плоскости, отсекающей на координатных осях отрезки: 2; -1; - 1/2.

1. Искомая плоскость отсекает

- на оси  $x$  отрезок, равный 2 масштабным единицам;
- на оси  $y$  - соответственно -1,
- на оси  $z$  уже отрезок, составляющий -1/2.

2. Определим величины, обратные названным отрезкам 1/2; -1 и -2.

- Указанные значения приведем к общему знаменателю, т.е. получим следующий ряд:

- $1/2; -2/2$  и  $-4/2$ .

- отбросим знаменатель и оставшиеся числа заключим в круглые скобки.

- Получим следующий результат:

$$(1 \ \bar{2} \ \bar{4} ).$$



# Кристаллографические зоны

- В кристалле всегда можно выделить плоскости, которые параллельны одному направлению в пространстве.
- При параллельном переносе все эти плоскости пересекаются по данному направлению, которое называется **осью зоны**, а совокупность таких плоскостей – **кристаллографической зоной**.
- Группа плоскостей  $(h_1 k_1 l_1)$ ,  $(h_2 k_2 l_2)$  и  $(h_3 k_3 l_3)$ , формирующих кристаллографическую зону с осью  $[uvw]$ .

Если известны индексы каких-либо двух плоскостей, допустим  $(h_1 k_1 l_1)$  и  $(h_2 k_2 l_2)$ , то индексы зоны  $[uvw]$ , в которой они лежат, определяются выражениями:

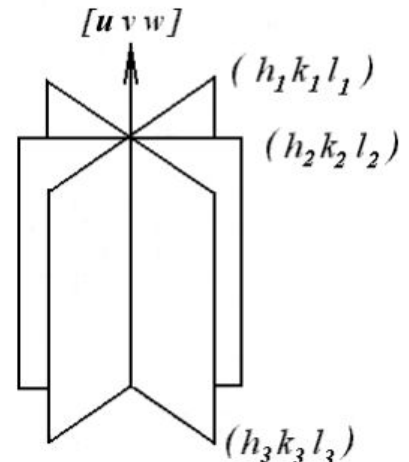
$$u = k_1 l_2 - k_2 l_1,$$

$$v = l_1 h_2 - l_2 h_1,$$

$$w = h_1 k_2 - h_2 k_1.$$

Условие того, что плоскость с индексами  $(hkl)$  лежит в зоне  $[uvw]$ , записывается следующим образом:

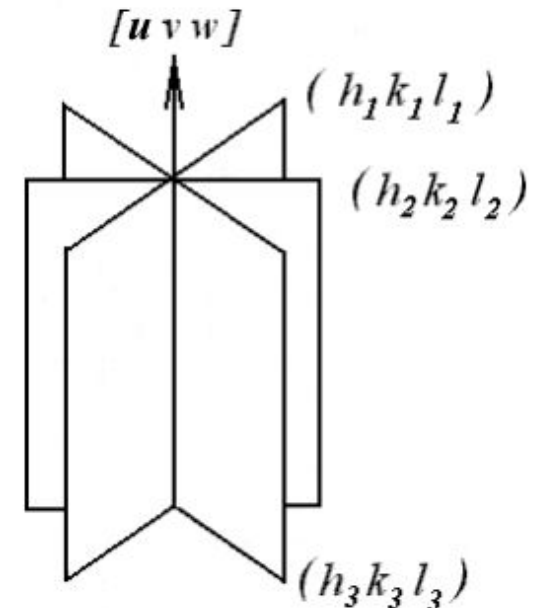
$$hu + kv + lw = 0 . \quad (2)$$



- **Правило зон Вейсса** гласит, что сумма попарных произведений индексов плоскости и принадлежащего ей направления равняется нулю.

Условие того, что плоскость с индексами  $(hkl)$  лежит в зоне  $[uvw]$ , записывается следующим образом:

$$hu + kv + lw = 0 .$$



- Определите ось зоны для следующих пересекающихся плоскостей: (102) и (201).  
Дайте изображение этих плоскостей и оси зоны.

$$hu + kv + lw = 0.$$

$$u = k_1 l_2 - l_1 k_2$$

$$v = l_1 h_2 - h_1 l_2$$

$$w = h_1 k_2 - k_1 h_2$$

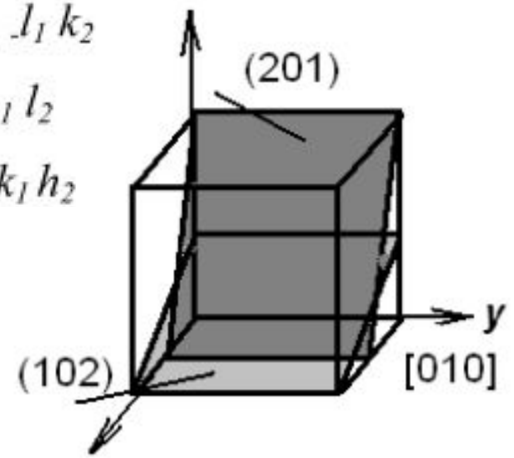
(1 0 2) и (2 0 1).

(h<sub>1</sub> k<sub>1</sub> l<sub>1</sub>) и (h<sub>2</sub> k<sub>2</sub> l<sub>2</sub>)

$$u = k_1 l_2 - l_1 k_2$$

$$v = l_1 h_2 - h_1 l_2$$

$$w = h_1 k_2 - k_1 h_2$$



- Выполним необходимые расчеты:
- $u = 0 \cdot 1 - 2 \cdot 0 = 0;$
- $v = 2 \cdot 2 - 1 \cdot 1 = 3$
- $w = 1 \cdot 0 - 0 \cdot 2 = 0.$
- Таким образом, получаем [030] или же в окончательном виде [010] (индексы должны иметь такую запись, чтобы общий знаменатель для них мог делиться только на 1).
- Легко проверить правильность записанных символов данного направления, используя правило зон :
- $1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + 2 \cdot 0 = 0$  и соответственно  $2 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 = 0.$

• Какие из перечисленных ниже плоскостей могут входить в кристаллографическую зону  $[-1\ 1\ 1]$ : (100); (110); (101); (211); (321); (011)?

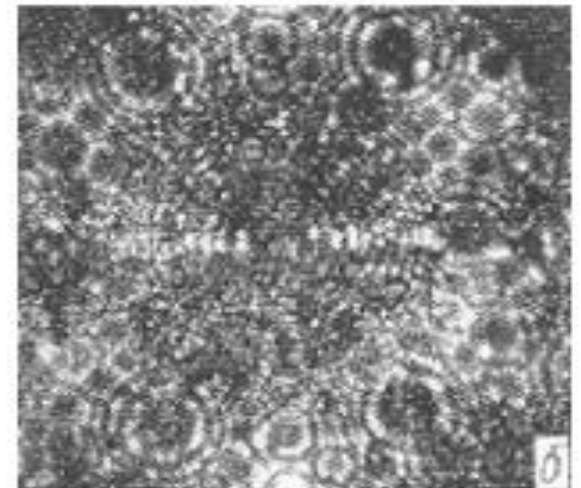
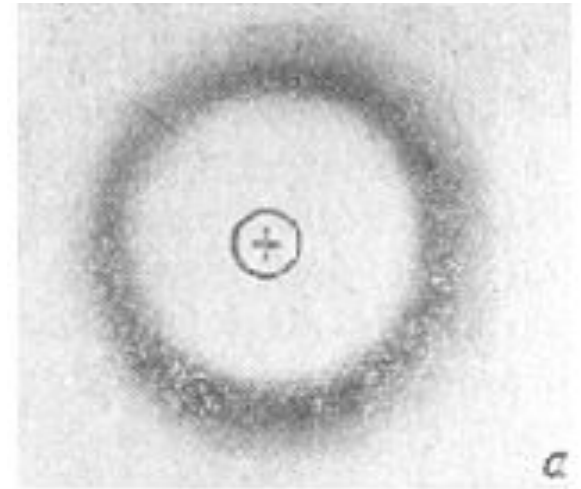
- В данном случае используем уравнение, описывающее правило зон.
- Основная идея – если плоскость принадлежит заданной зоне, то должно выполняться искомое условие, т.е. сумма попарных произведений символов равняется нулю.
- Проверим на принадлежность данной зоне первой плоскости (100):
- $1 \cdot (-1) + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 1 = 1$  и  $1 \neq 0$ , следовательно, эта плоскость не относится к указанной зоне.
- Проверим следующую плоскость (110):  $1 \cdot (-1) + 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 = 0$  и, стало быть, данная плоскость принадлежит рассматриваемой зоне.
- Если действовать и далее подобным образом, то итоговый результат будет следующим: в указанную зону  $[-1\ 1\ 1]$  входят плоскости (110), (101), (211) и (321).
- Если действовать и далее подобным образом, то итоговый результат будет следующим: в указанную зону входят плоскости (110), (101), (211) и (321).

# Использование индексов Миллера в рентгеноструктурном анализе

- Зная индексы  $(hkl)$  плоскости, можно подсчитать межплоскостное расстояние  $d$  между плоскостями  $(hkl)$  данного семейства для кубических кристаллов с периодом решетки  $a$  по формуле

$$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

- Эта зависимость широко используется при рентгеноструктурном анализе кристаллических тел, имеющих кубическую решетку.



- Основной рентгеноструктурного анализа является формула Вульфа — Брэггов, показывающая условия интерференции отраженных рентгеновских лучей от атомов в параллельных кристаллографических плоскостях кристалла.
- Лучи, отраженные от этих плоскостей, будут усиливать друг друга при условии, когда разность пути  $\Delta$  для лучей равна целому числу длин волн  $\lambda$ :

$$\Delta = n\lambda = 2d \sin \theta$$

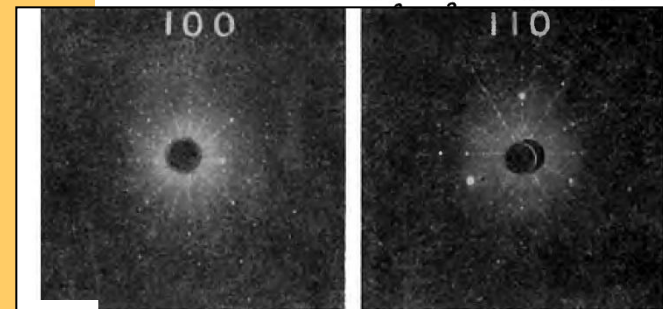
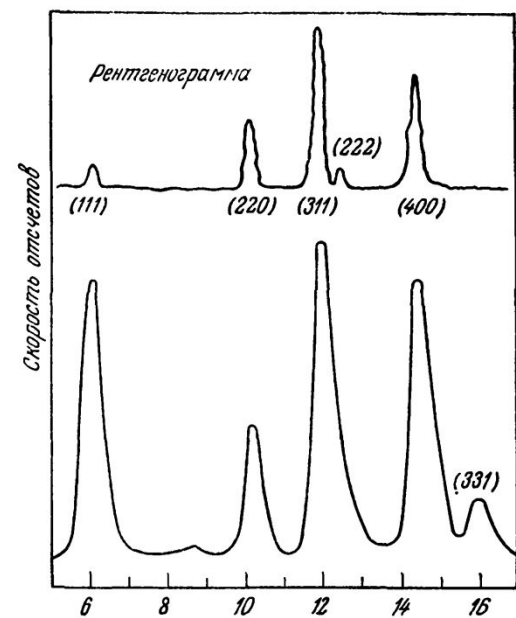
где  $n$  — целое число;  $\lambda$  — длина волны рентгеновских лучей;

$d$  — межплоскостное расстояние;  $\theta$  — угол падения и отражения лучей.

- Формула для расшифровки линий рентгенограмм, снятых с материалов с кубической решеткой,
- получится из предыдущих формул :

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (1.2)$$

- По промерам рентгенограммы устанавливают  $\sin \theta$ .
- Зная длину волны  $\lambda$  и параметр решетки  $a$ , устанавливают индексы плоскости  $(hkl)$  от которой получены соответствующие линии на рентгенограмме.

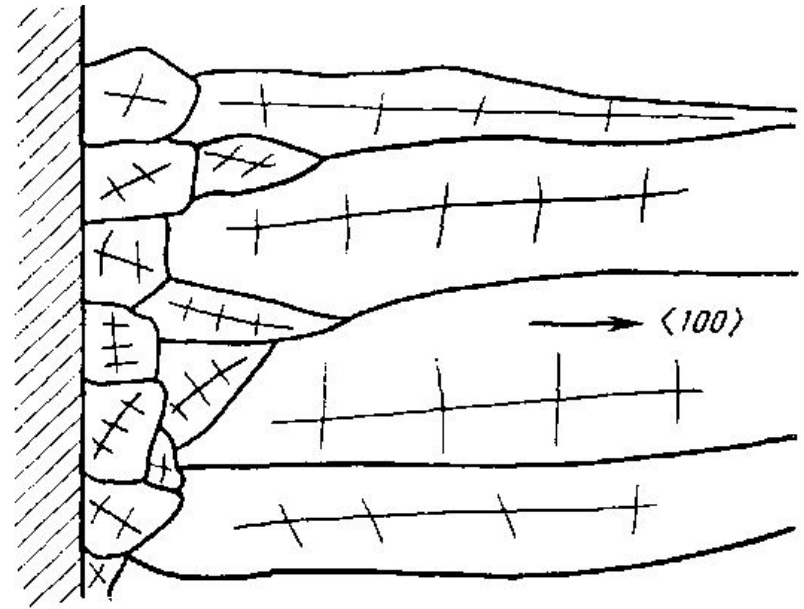


..... Дифракционные пятна на лауэграммах монокристаллов пирита FeS<sub>2</sub> с ориентацией (100) и (110).

# ОСЕВАЯ ПОРИСТОСТЬ

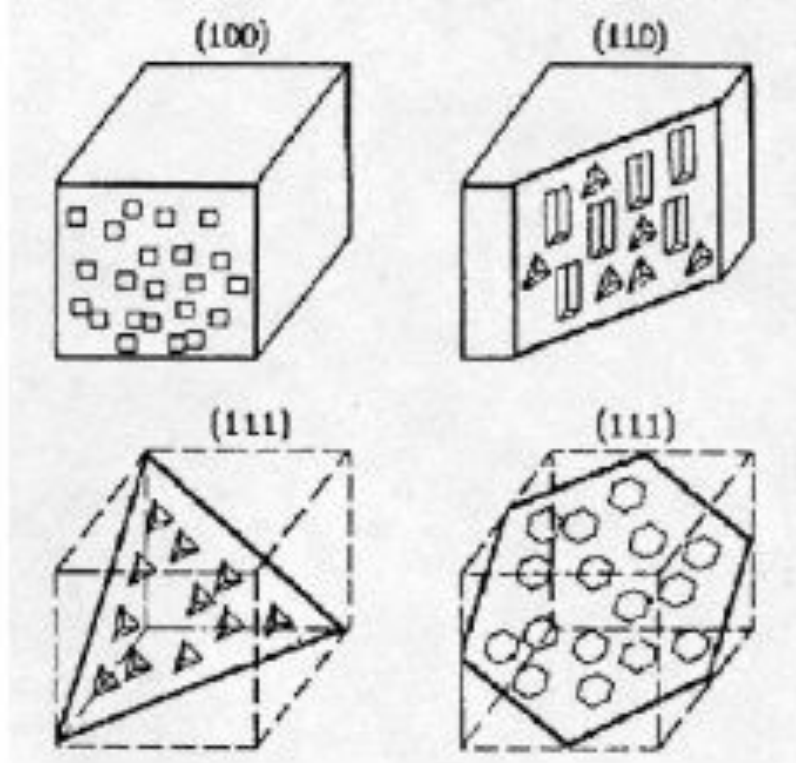
При кристаллизации слитка осевая зона незатвердевшего металла все время сужается и в отдельных местах происходит срастание кристаллов, растущих с противоположных боков этой зоны.

Под сросшимися кристаллами затвердевание идет без доступа жидкого металла сверху из прибыльной части слитка и поэтому в этих местах образуются мелкие усадочные пустоты.



Формирование столбчатых кристаллов путем преимущественного роста зерен с ориентацией  $\langle 100 \rangle$





7 Фигуры травления на основных кристаллографических плоскостях кубической решетки.

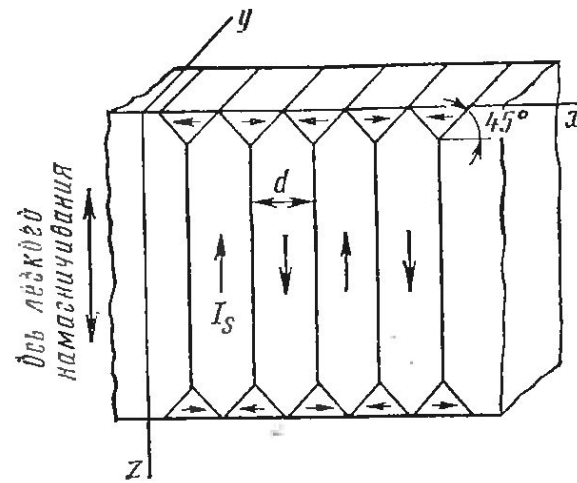
При использовании селективных травителей процесс травления происходит с различными скоростями по разным кристаллографическим плоскостям. Образующиеся при этом фигуры травления позволяют сделать заключение о кристаллографической ориентации плоскостей. В кристаллах с кубической элементарной ячейкой (германий, кремний, флюорит) для основных кристаллографических плоскостей (100), (110), (111) они будут иметь вид, изображенный на рисунке

# Домены

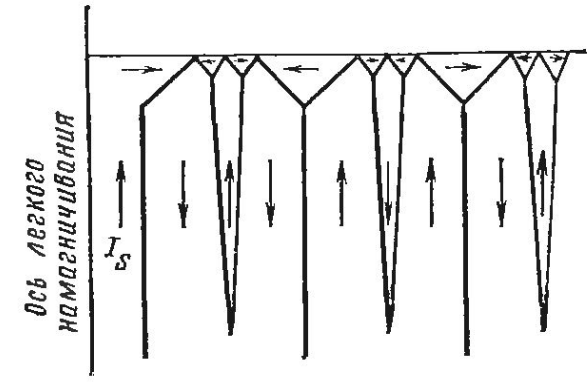
Первым непосредственным подтверждением существования доменов был открытый в 1919 г. эффект Баркгаузена. Эффект состоит в том, что при монотонном увеличении намагничивающего поля намагниченность в ферромагнетике возрастает не плавно, а скачкообразно. Это объясняется увеличением объемов доменов, векторы намагниченности  $I_s$  которых совпадают (или близки по направлению) с направлением поля  $H$  за счет доменов с антипараллельными или расположенными под другими углами по отношению к полю направлениями намагниченности.

Образование доменной структуры объясняется выполнением требования термодинамического условия минимума всех видов энергии:

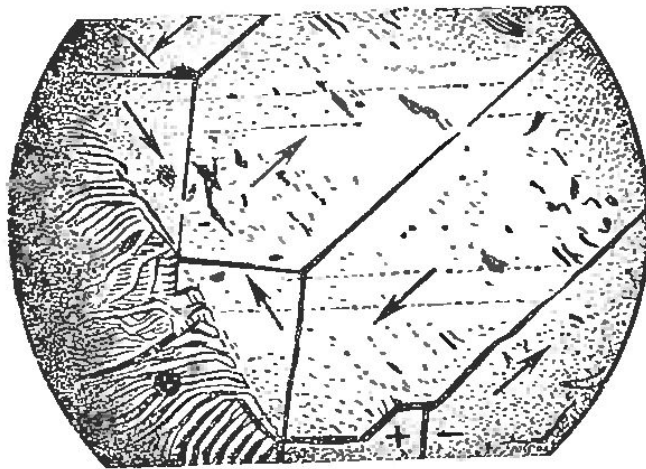
- 1) обменной энергии  $E_{\text{обм}}$ ;
- 2) энергии кристаллографической магнитной анизотропии  $E_{\text{к}}$ ;
- 3) энергии магнитоэластической деформации  $E_{\text{л}}$ ;
- 4) магнитоупругой энергии  $E_{\text{с}}$ ;
- 5) магнитоэлектронной энергии  $E_{\text{о}}$ ;
- 6) магнитной энергии  $E_{\text{м}}$ .



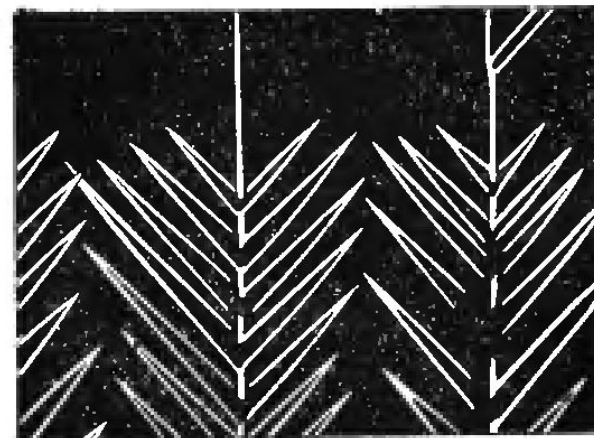
Структура плоскопараллельных доменов в магнитном одноосном кристалле



Образование клинообразных областей в ферромагнетиках с одноосной анизотропией



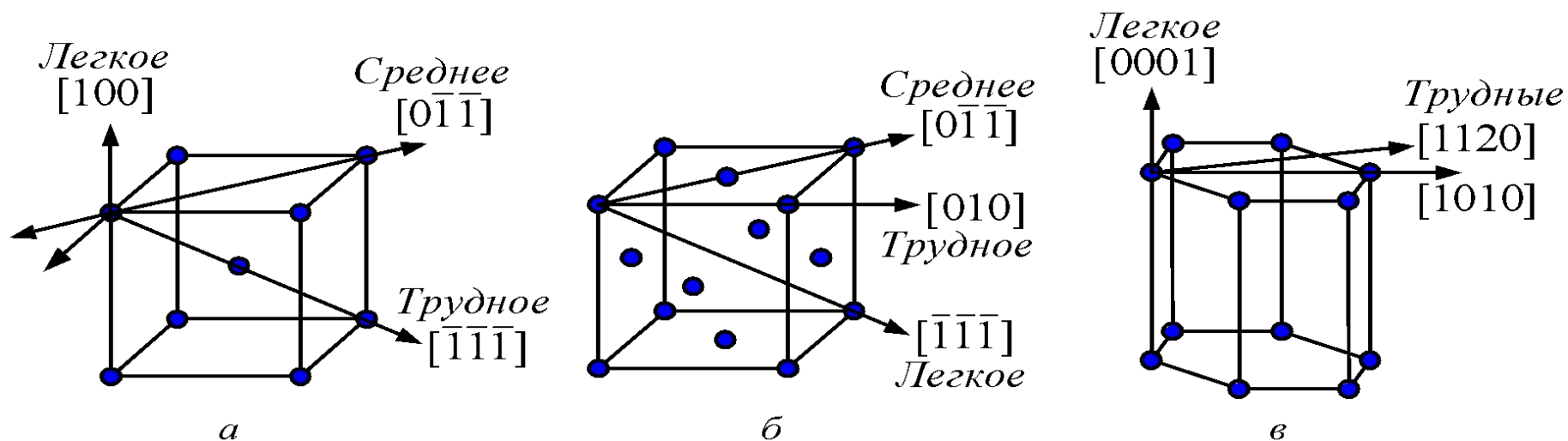
Фигуры Акулова — Биттера для ферромагнетиков с одноосной анизотропией



Фигуры Акулова — Биттера в виде «елочек»

# ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ И ЯВЛЕНИЯ В МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ

*Магнитная анизотропия* представляет собой явление преимущественной ориентации спонтанной намагниченности ферромагнетика вдоль особых, характерных для данного магнетика кристаллических осей. Другими словами, это явление изменения внутренней энергии ферромагнетика в зависимости от ориентации спонтанной намагниченности в кристалле.



Направления легкого, среднего и трудного намагничивания в монокристаллах ферромагнитных кристаллов:

*а* — железа; *б* — никеля; *в* — кобальта

# ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ И ЯВЛЕНИЯ В МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ

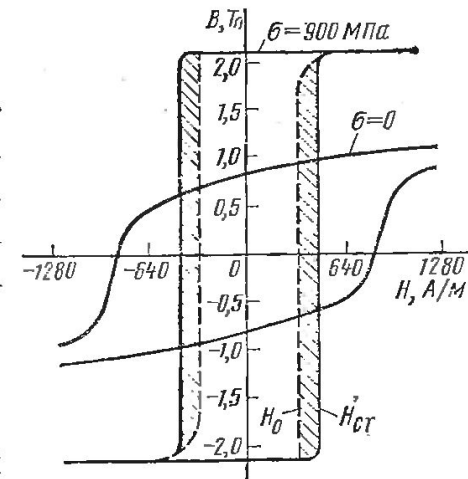
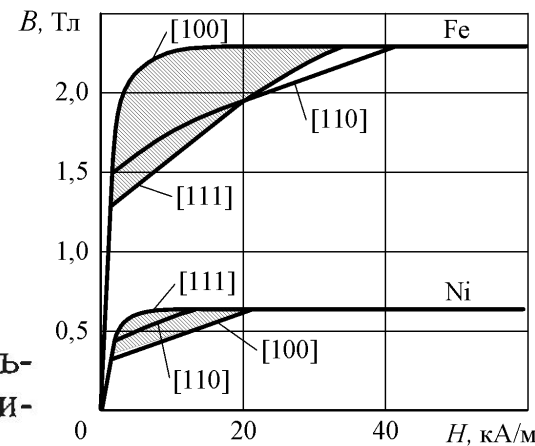
Энергия, которая требуется для намагничивания единицы объема вещества, определяется площадью между кривой намагничивания и осью ординат:

$$E_{\text{н}} = \int_0^I \mu_0 H dI.$$

Поэтому заштрихованные на **рисунке** площади представляют собой энергию, которую надо затратить для изменения направления намагничивания от легкого до трудного. Эту энергию называют энергией естественной кристаллографической магнитной анизотропии. Для кубического кристалла ее можно представить следующим образом:

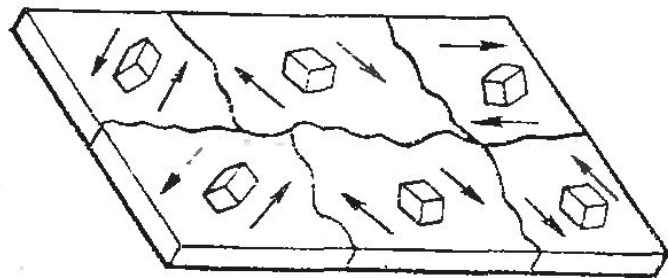
$$E_{\text{к}} = K_0 + K_1 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + K_2 \alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2,$$

где  $K_0$ ,  $K_1$ ,  $K_2$  — константы кристаллографической магнитной анизотропии, определяемые экспериментально;  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\alpha_3$  — направляющие косинусы вектора намагниченности по отношению к осям  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , совпадающим с основными кристаллографическими направлениями кубической решетки.

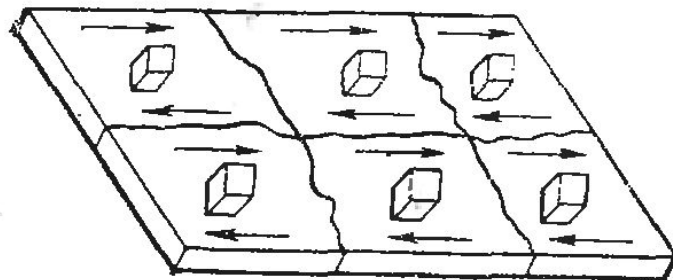


Образование прямоугольной петли гистерезиса при растяжении проволоки из сплава Fe-Ni

Кривые намагничивания кристаллов железа и никеля вдоль различных кристаллографических направлений



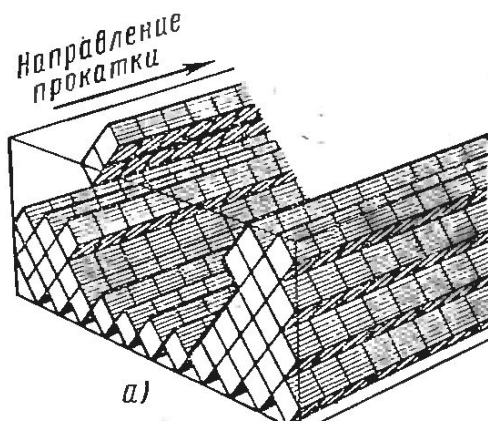
а)



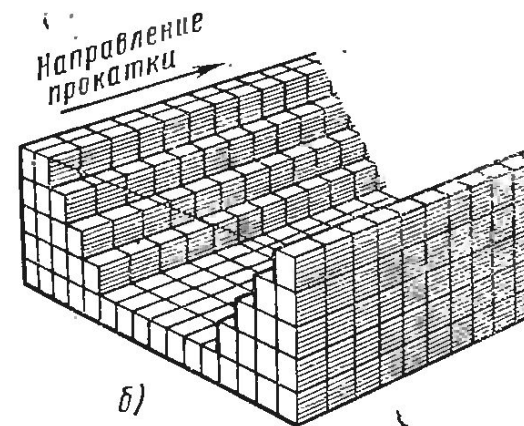
б)

Схематическое изображение расположения кристаллов относительно направления прокатки:

а — горячекатаная сталь; б — холоднокатаная сталь с ребровой текстурой



а)



б)

Схематическое изображение расположения кристаллов относительно направления прокатки:

а — для материала с ребровой текстурой; б — для материала с кубической текстурой

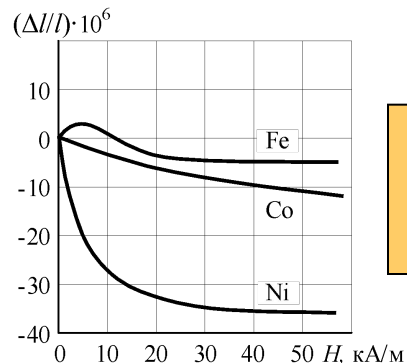
# Магнитострикция

это изменение формы и размеров тела при изменении его магнитного состояния, которое возникает в результате перехода ферромагнитного вещества через точку Кюри при отсутствии внешнего поля (самопроизвольная магнитострикция) и при воздействии внешнего поля на ферромагнетик, температура которого ниже точки Кюри.

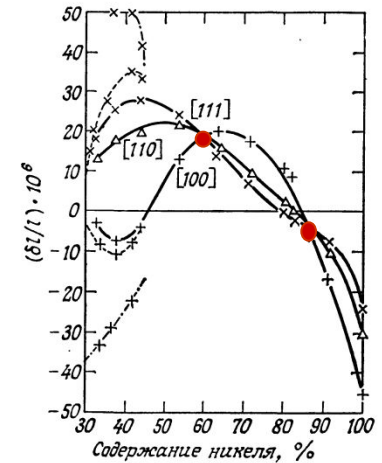
Н. С. Акуловым было получено следующее выражение для константы магнитострикции  $\lambda_s = (\Delta l/l)_s$  намагниченного до насыщения кристалла кубической симметрии:

$$\lambda_s = \frac{3}{2} \lambda_{100} \left( \alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3} \right) + 3 \lambda_{111} (\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3 + \alpha_3 \alpha_1 \beta_3 \beta_1),$$

где  $\lambda_{100}$  и  $\lambda_{111}$  — константы магнитострикции при намагничивании кристалла до насыщения в направлениях осей [100] и [111];  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  — направляющие косинусы вектора самопроизвольной намагниченности по отношению к кристаллографическим осям;  $\beta_1, \beta_2, \beta_3$  — направляющие косинусы направления, в котором измеряется изменение длины.



Зависимость магнитострикционной деформации поликристаллов железа, кобальта и никеля от напряженности внешнего поля



Зависимость констант  $\lambda_{100}$ ,  $\lambda_{110}$  и  $\lambda_{111}$  от состава сплава Fe—Ni (кривые, изображенные сплошными линиями, взяты из работы [7], а кривые для содержания Ni ниже 44 %, изображенные соответственно штриховой линией (комнатная температура) и штрихпунктирной линией (4,2 К), — из работы [8]).