

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«Владимирский государственный университет  
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»  
(ВлГУ)**

Институт машиностроения и автомобильного транспорта

Кафедра технологии функциональных и конструкционных материалов

**МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ**  
к практическим и лабораторным работам по дисциплине  
**«Основы кристаллографии»**  
для направления подготовки  
**22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»**  
(уровень бакалавриата)

Составитель:  
Л.В.Картонова

Владимир – 2018 г.

УДК 548

Рецензент:

Кандидат технических наук,  
доцент кафедры «Технология машиностроения»

*Жданов Алексей Валерьевич*

**Методические указания** к практическим и лабораторным работам по дисциплине «Основы кристаллографии»: для направления подготовки 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов» (уровень бакалавриата)/ Владим. гос. ун-т; Сост.: Л.В. Картонова. Владимир. 2018. – 69 с.

Содержат методические указания к практическим и лабораторным работам по дисциплине «Основы кристаллографии» для направления подготовки 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов» (уровень бакалавриата)

Табл. 23. Ил. 16. Библиогр.: 18 назв.

## ВВЕДЕНИЕ

Целью дисциплины «Основы кристаллографии» является формирование знаний и навыков в области кристаллографии.

В результате освоения данной дисциплины у студентов формируются основные общепрофессиональные и профессиональные компетенции, отвечающие требованиям ФГОС ВО, к результатам освоения ОПОП ВО по направлению 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов».

Таблица 1

### Требования к результатам освоения программы бакалавриата

Код	Требования к результатам освоения программы бакалавриата
ОПК-5	способность применять в практической деятельности принципы рационального использования природных ресурсов и защиты окружающей среды
ПК-6	способность использовать на практике современные представления о влиянии микро- и нано- структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями, частицами и излучениями
ПК-11	способность применять знания об основных типах современных неорганических и органических материалов, принципах выбора материалов для заданных условий эксплуатации с учетом требований технологичности, экономичности, надежности и долговечности, экологических последствий их применения при проектировании высокотехнологичных процессов

В результате освоения дисциплины «Основы кристаллографии» обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

Знать: основные принципы описания и изучения кристалла и кристаллического состояния вещества (ОПК-5; ПК-6, 11).

Уметь: самостоятельно изучать и рассматривать кристаллофизические особенности твердых тел с целью их применения и для получения различных свойств металлов и сплавов (ОПК-5; ПК-6, 11).

Владеть: способностью использовать на практике современные представления о влиянии микро- и нано- структуры на свойства материалов (ОПК-5; ПК-6, 11).

Практические и лабораторные работы являются формой групповой аудиторной работы в небольших группах для освоения практических навыков с целью формирования требуемых компетенций. В табл. 2 и 3 представлен возможный перечень практических и лабораторных работ.

Таблица 2

#### Перечень практических работ

№ п/п	Наименование практических занятий
1.	Изучение простых форм кристаллических многогранников
2.	Анализ пространственных решеток. Определение кристаллографических индексов плоскостей.
3.	Изучение симметрии кристаллических многогранников (симметрии континуума)
4.	Изучение типов изоморфных замещений

Таблица 3

#### Перечень лабораторных работ

№ п/п	Наименование лабораторных работ
1.	Изучение процесса роста кристаллов. Кристаллизация азотнокислого свинца.
2.	Изучение методов рентгеноструктурного анализа. Расчет межплоскостных расстояний и рентгеновской плотности вещества.
3.	Рентгенофазовый анализ поликристаллического вещества
4.	Изучение строения и свойств минералов

Приступая к выполнению практической или лабораторной работы, студент должен заранее, при подготовке к работе, ознакомиться с методическими материалами и рекомендованной литературой, изложенными в практикуме по заданной тематике.

В течение очередного занятия студенты защищают оформленный отчет по предыдущей работе и выполняют следующую работу.

## РАБОТА N 1

### Изучение процесса роста кристаллов. Кристаллизация азотнокислого свинца

Цель работы: изучить процесс образования кристаллов из жидкого состояния.

#### Задания

1. Используя учебники и пособия, изучить пути образования кристаллов.
2. Изучить процесс образования кристаллов соли из жидкого состояния.
3. Проследить за процессом кристаллизации капли азотнокислого свинца  $Pb(NO_3)_2$ .
4. Изучить строение металлических образцов и установить взаимосвязь между структурой слитка и условиями кристаллизации.
5. Ответить на контрольные вопросы.
6. Составить отчет.

#### Общие положения

Как известно, кристаллы могут образовываться как из жидких, так и газообразных и твердых фаз:

- ✓ кристаллизация из жидкого состояния:
  - кристаллизация из растворов,
  - кристаллизация из расплавов;
- ✓ кристаллизация из газообразного состояния (возгонка);
- ✓ кристаллизация из твердого состояния.

Кристаллизация из растворов характеризуется тем, что растворитель отдает избыток растворенного в нем вещества. Выпадение кристаллов возможно только из пересыщенных растворов, этого можно добиться следующим образом:

- испарением или выпариванием растворителя;
- введением в растворы веществ, которые понижают растворимость получаемых кристаллов;
- изменением температуры;
- изменением давления.

В большинстве случаев растворимость веществ падает с понижением температуры. Растворимость таких веществ характеризуется положительным температурным коэффициентом растворимости. Необходимо учесть, что при определенных температуре и давлении какое-либо твердое вещество в определенном объеме растворителя может растворяться лишь до известного предела. Раствор, в котором при данных условиях происходит растворение новых добавочных порций этого твердого вещества, называется *ненасыщенным*.

Раствор, в котором при данных условиях прибавление новых порций того же твердого вещества не сопровождается их дальнейшим растворением и который вместе с тем не содержит избытка растворенного вещества, называется *насыщенным*.

В связи с тем, что с изменением температуры растворимость вещества изменяется (при повышении температуры – обычно растет), можно, изменив температуру (снизив ее), получить из насыщенного раствора неустойчивый, так называемый *пересыщенный раствор*. Его можно также получить путем испарения растворителя. Такой раствор по сравнению с насыщенным раствором содержит избыток растворенного вещества. С течением времени этот избыток обычно выделяется в виде кристаллического осадка. Если ввести в пересыщенный раствор мелкие кристаллики или даже пылинки растворенного вещества, то сразу же начинается кристаллизация. Твердые частицы, способные вызвать кристаллизацию, называются *«затравками»*.

Для получения кристаллов необходим пересыщенный раствор. Однако если вещество выпадает слишком быстро, то крупных, хорошо ограненных кристаллов не получается. Последние чаще всего развиваются лишь при достаточно медленно протекающей кристаллизации. Поэтому рекомендуется по возможности осторожно переводить насыщенный раствор в пересыщенное состояние. Такой переход проще

всего осуществляется изменением температуры или увеличением концентрации путем удаления части растворителя.

С увеличением количества частиц растворенного вещества в растворе или с уменьшением скорости их движения (например, при понижении температуры) частицы начинают закономерно группироваться, образуя вначале мельчайшие кристаллики (зародыши), вырастающие затем в более крупные кристаллы.

Краткое описание метода получения кристаллов из водных растворов в условиях простейшего лабораторного оборудования:

Необходимо предварительно приготовить навеску (измельченное в порошок вещество) той или иной соли, взятой в качестве материала для кристаллизации. Приготовленная навеска ссыпается в стеклянную или фарфоровую емкость, и заливается требуемое количество воды с помощью градуированной мензурки. Емкость необходимо покрыть стеклом, чтобы ускорить растворение соли в воде при нагреве. Полученный таким образом раствор рекомендуется отфильтровать. Отфильтрованная жидкость помещается в специальный стакан с широким дном и низкими стенками, так называемый кристаллизатор. В кристаллизаторе раствор остывает и достаточно интенсивно испаряется. Последнему способствует характерная форма кристаллизатора, создающая большую поверхность испарения.

В результате охлаждения и испарения получаем сначала насыщенный, а затем пересыщенный раствор. При этом в кристаллизаторе начинают выпадать кристаллики, вырастающие с течением времени. На следующий день после приготовления раствора полезно выбрать несколько наилучших из выпавших кристалликов, слить осторожно раствор в чистый кристаллизатор и поместить туда отобранные кристаллы. От времени до времени следует готовить свежий раствор и переносить в него выращиваемые кристаллы. Для получения более или менее равномерно огранных кристаллических многогранников требуется или ежедневно перекладывать растущие кристаллы с грани на грань, или же подвешивать их на волоске или нити.

Процессы кристаллизации из расплавов происходят при охлаждении вещества до точки его затвердевания. Кристаллы, образующиеся в

процессе затвердевания металла, могут иметь различную форму в зависимости от скорости охлаждения, характера и количества примесей. Нередко в процессе кристаллизации образуются разветвленные (древовидные) кристаллы – дендриты.

### **Порядок выполнения работы**

Первое задание выполняется при подготовке к лабораторной работе. Необходимо обратить внимание на кристаллизацию из жидкого состояния: из растворов и расплавов.

Второе задание выполняется в лаборатории под руководством преподавателя. Подготовить пересыщенный соляной раствор, выбрать кристаллик поваренной соли и сделать «затравку». На следующем лабораторном занятии оценить рост кристалла.

В процессе выполнения третьего задания студенты прослеживают процесс кристаллизации капли азотнокислого свинца  $Pb(NO_3)_2$ .

Четвертое задание выполняется либо всей группой, либо группа делится на 2-3 бригады. По готовым макрошлифам или изломам требуется изучить строение металлических образцов и установить взаимосвязь между структурой слитка и условиями кристаллизации.

### **Содержание отчета**

1. Название, цель работы и задание.
2. Описание процесса образования кристаллов поваренной соли из водного раствора  $NaCl$ .
3. Схема строения закристаллизовавшейся капли азотнокислого свинца и необходимыми объяснениями и выводами.
4. Изображение исследуемых металлических образцов с описанием условий кристаллизации.
5. Список используемой литературы.

## **Контрольные вопросы**

1. Каковы пути образования кристаллов?
2. Опишите процесс образования кристаллов из поваренной соли.
3. Каково строение слитка при нормальных условиях охлаждения?
4. Как влияет направленный отвод тепла на строение слитка?
5. Как получить мелкозернистую структуру металла?

## **РАБОТА N 2**

### **Изучение простых форм кристаллических многогранников**

Цель работы: изучение простых форм кристаллических многогранников.

#### **Задания**

1. Используя литературные источники, изучить простые формы кристаллических многогранников и их производные.
2. Определить название форм кристаллических многогранников, предложенных преподавателем (приложение 1).
3. Указать соотношение элементов огранки некоторых кристаллических многогранников, результаты внести в таблицу.
4. Изобразить многогранник по названию, предложенному преподавателем; описать указанную форму.
5. Ответить на контрольные вопросы.
6. Составить отчет.

## Общие положения

Под формой кристаллов подразумевается совокупность всех его граней. По характеру своего внешнего ограничения кристаллы разделяются на две группы:

- ✓ простые формы;
- ✓ сложные (комбинационные) формы.

*Простыми формами* называются такие многогранники, которые состоят из одинаковых граней, имеющих симметричное расположение. Примерами простых форм служат гексаэдр (куб), тетраэдр, октаэдр.

*Сложные (комбинационные) формы* или *комбинации простых форм* представляют собой комбинацию в одном кристалле нескольких простых форм. В природе подавляющее большинство кристаллов представляет комбинацию простых форм.

*Простые формы* могут быть как закрытыми, т. е. замыкающими со всех сторон пространство, так и открытыми, не замыкающими целиком пространство.

В кристаллографии при обозначении различных кристаллографических форм применяется терминология, в основу которой положены следующие слова:

моно – один	окта – восемь, восемью,
ди – два, дважды,	дека – десять,
три – три, трёх, трижды,	додека – двенадцать,
тетра – четыре, четырех, четырежды,	эдра – грань,
пента – пять, пятью,	гония – угол,
гекса – шесть, шестью,	пинакс – доска,
гепта – семь, семью,	клино – наклоняю.

*К открытым простым формам* относятся: моноэдр; диэдр; пинакоид; пирамиды; призмы; дипирамиды.

*К закрытым простым формам* относятся: скаленоэдры; трапециоэдры; ромбоэдр; тетраэдры.

Кроме того, к кубической сингонии относятся следующие простые формы: куб; октаэдр; кубический тетраэдр; тригонритетраэдр;

тетрагонтритетраэдр; пентагонтритетраэдр; ромбододекаэдр; пентагондододекаэдр; тетрагексаэдр; гексатетраэдр; дидододекаэдр; тетрагонтриоктаэдр; тригонтриоктаэдр; пентагонтриоктаэдр; гексаоктаэдр.

Изображения и описания наиболее распространенных простых форм представлены в табл. 1 приложения 1.

Названия простых форм кубической сингонии даны по следующему принципу:

- ✓ первая часть слова (тригон, тетрагон, пентагон) характеризует очертания данной формы (тетрагон = тетра + гон = четырехугольник, пентагон = пента + гон = пятиугольник, и т. д.);
- ✓ вторая часть слова (тритетраэдр, триоктаэдр) указывает:
  - от какой простой (материнской) формы данная форма является произвольной;
  - сколько граней данной формы расположено на каждой материнской форме;
  - чему равно число граней данной формы.

*Пример.* Пентагонтритетраэдр: первая часть слова – это пента + гон = пятиугольник. Вторая часть слова – три + тетраэдр, т.е. материнской формой является тетраэдр, на каждой грани которой три грани вышеуказанной формы. Таким образом, пентагонтритетраэдр – форма, производная из тетраэдра, на каждой грани которого по три неправильных пятиугольника.

На рис. 2.1 изображены простые формы, выводящиеся из кубического тетраэдра.

На рис. 2.2 представлен гексаэдр (куб) и производная от него форма – тетрагексаэдр.

На рис. 2.3 изображены простые формы, выводящиеся из октаэдра.

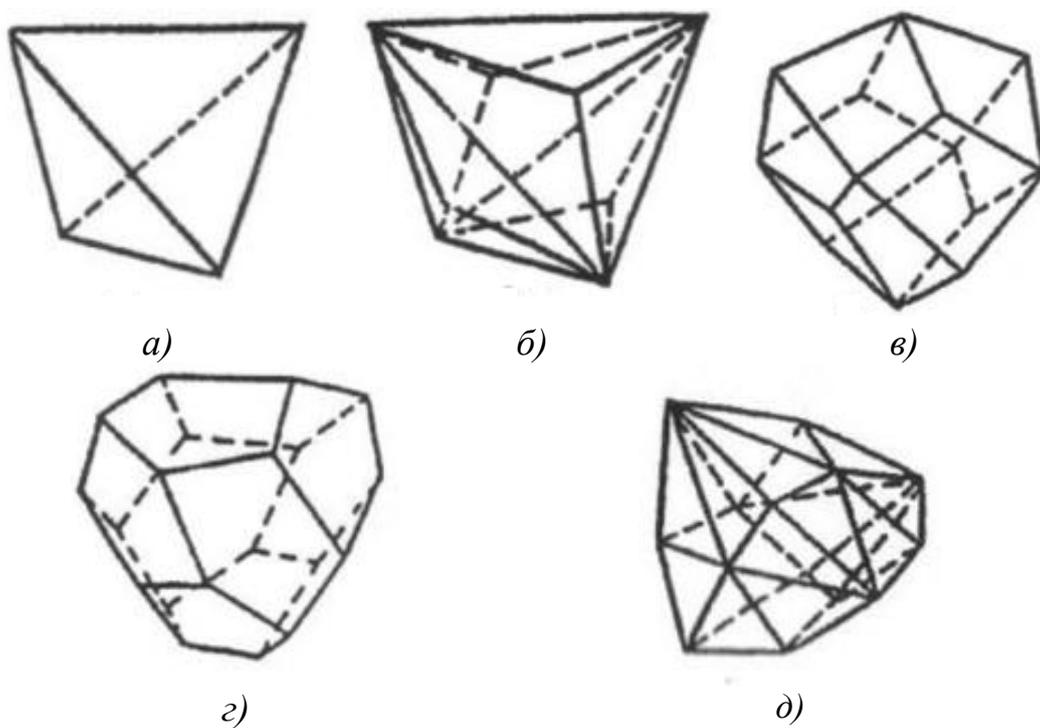


Рис. 2.1. Простые формы, выводящиеся из кубического тетраэдра:  
 а) тетраэдр, б) тригонтритетраэдр, в) тетрагонтритетраэдр,  
 г) пентагонтритетраэдр, д) гексатетраэдр

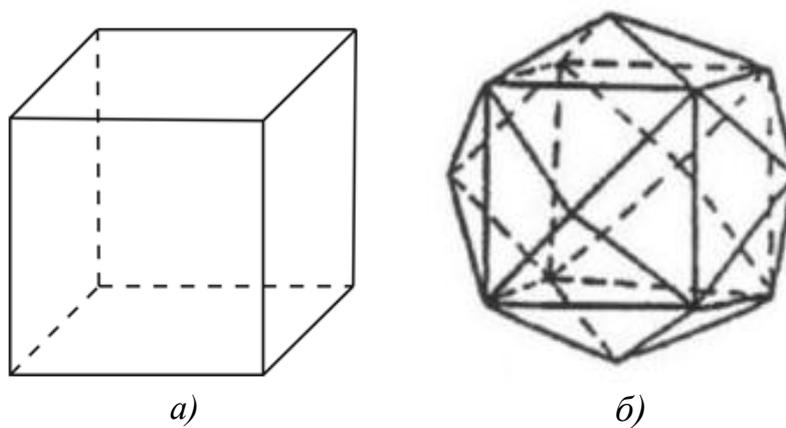
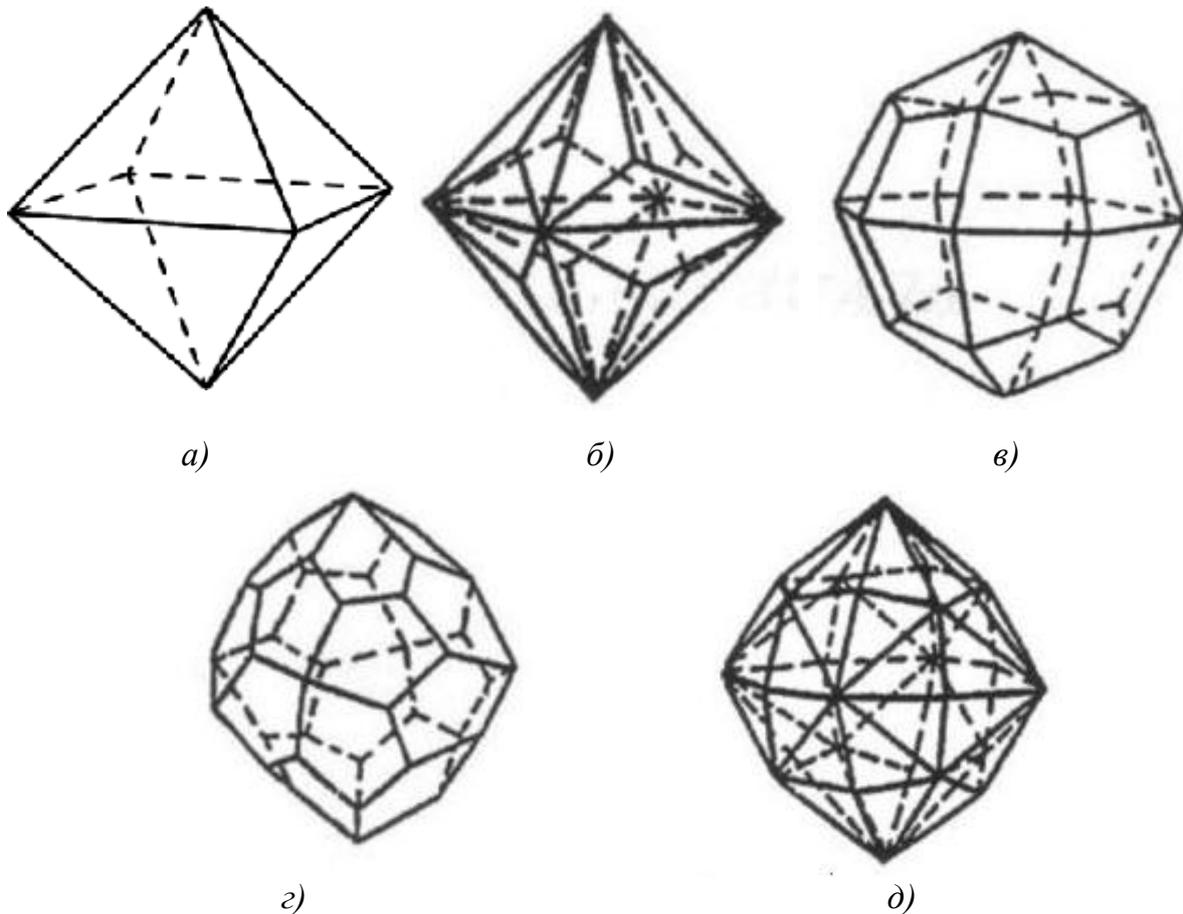


Рис. 2.2. Гексаэдр (а) и тетрагексаэдр (б)



*Рис. 2.3. Простые формы, выводящиеся из октаэдра:  
 а) октаэдр, б) тригонтриоктаэдр, в) тетрагонтриоктаэдр,  
 г) пентагонтриоктаэдр, д) гексаоктаэдр*

### **Порядок выполнения работы**

Первое задание выполняется при подготовке к практической работе.

По варианту, указанному преподавателем (табл. 1 приложения 1), определить название форм кристаллических многогранников, предложенных преподавателем (задание 2).

Указать соотношение элементов огранки некоторых кристаллических многогранников, результаты внести в таблицу (задание 3).

Изобразить многогранник по названию (задание 4), предложенному преподавателем; описать указанную форму.

## Соотношение элементов огранки кристаллических многогранников

Многогранник	Число граней	Число вершин	Число ребер	
Тетраэдр				
Гексаэдр				
Октаэдр				

**Содержание отчета**

1. Цель работы, задание.
2. Рисунок и название форм кристаллических многогранников, предложенных преподавателем.
3. Соотношение элементов огранки некоторых кристаллических многогранников, оформленные в виде таблицы.
4. Рисунок предложенного преподавателем многогранника.
5. Список используемой литературы.

**Контрольные вопросы**

1. Что понимают под формой кристалла? Что такое простая форма кристаллов?
2. Что обозначают слова «гония», «тетра», «окта», «гепта», «пинакс», «клино»?
3. Что такое тетраэдр? Отличительные особенности кубического тетраэдра.
4. Нарисуйте октаэдр. Определите в нем количество вершин, ребер, граней.
5. Какие формы кристаллов относятся к открытым простым формам?
6. Какие формы кристаллов относятся к закрытым простым формам?
7. Что означает тетрагонтриоктаэдр?
8. Что такое сложная форма кристаллов?

## РАБОТА N 3

### Изучение симметрии кристаллических многогранников (симметрии континуума)

Цель работы: изучение симметрии кристаллических многогранников.

#### Задания

1. Используя литературные источники, изучить элементы симметрии.
2. Определить количество плоскостей симметрии в равностороннем и равнобедренном треугольниках, квадрате, прямоугольнике, ромбе.
3. Описать элементы симметрии гексаэдра (куба) и тетраэдра, записать формулы симметрии.
4. Указать все элементы симметрии для многогранника, заданного преподавателем.
5. Ответить на контрольные вопросы.
6. Составить отчет.

#### Общие положения

Симметричной фигурой является фигура, которая может совмещаться сама с собой в результате операций симметрии. В идеально развитом кристалле путем симметричных преобразований – поворотов, отражений – совмещаются равные элементы (границы, ребра, вершины).

Геометрические образы (точки, прямые, плоскости), с помощью которых выявляется симметричность фигуры, называют элементами симметрии.

В кристаллических многогранниках встречаются

- ✓ простые элементы симметрии:
- центр инверсии (центр симметрии),

- плоскость симметрии,
- поворотная ось;
- ✓ сложный элемент симметрии:
- инверсионная ось.

Для обозначения элементов симметрии используются две системы обозначений: *международная символика*, принятая Интернациональным союзом кристаллографов, и *старая символика*, основанная на формулах симметрии».

*Центром инверсии* называется точка, находящаяся внутри фигуры (многогранника) и характеризующаяся тем, что любая прямая, проведенная через эту точку на равных расстояниях в обе стороны от нее, встретит одинаковые точки фигуры. Обозначается центр симметрии буквой *C* (старое обозначение) и  $\bar{I}$  (международное обозначение). Графически отмечается буквой *C*.

*Плоскостью симметрии* называется воображаемая плоскость, делящая фигуру на две равные части, которые относятся друг к другу как предмет и его зеркальное изображение. Обозначается плоскость симметрии буквой *P* (старое) и *m* (международное). Графически плоскость симметрии изображается сплошной линией.

*Осью симметрии (поворотная ось)* называется такая прямая линия, при повороте которой на  $360^\circ$  фигура (многогранник) совмещается сама с собой. Обозначения осей симметрии: старые – буквой *L* с цифровым индексом *n* –  $L_n$  ( $L_1, L_2, L_3, L_4, L_6$ ) и международные – арабскими цифрами, соответствующими порядку оси (1, 2, 3, 4, 6).

В кристаллических многогранниках возможны оси симметрии второго –  $L_2$ , третьего –  $L_3$ , четвертого –  $L_4$  и шестого –  $L_6$  порядков, оси симметрии пятого и выше шестого порядков невозможны.

*Инверсионная ось* – сложный элемент симметрии, позволяющий совмещать равные части фигуры путем двойной операции – поворота на определенный угол, задаваемый порядком оси, и отражения в точке на этой оси, как в центре симметрии. Обозначения инверсионной оси: старые  $L_{in}$ , и международные  $\bar{n}$ .

В таблице 3.1. представлены обозначения элементов симметрии.

Таблица 3.1.

### Обозначение элементов симметрии

Название элементов симметрии	Обозначение	
	Международный символ	По формуле симметрии
Центр симметрии	$\bar{1}$	$C$
Плоскость симметрии	$m$	$P$
Поворотная ось:	$n$	$L_n$
второго порядка	2	$L_2$
третьего порядка	3	$L_3$
четвертого порядка	4	$L_4$
шестого порядка	6	$L_6$
Инверсионная ось:	$\bar{n}$	$L_{in}$

Все кристаллы, обладающие одинаковым комплексом элементов симметрии, относятся к одному *классу*. Возможны лишь 32 комбинации элементов симметрии, что дает 32 класса симметрии. Данные комбинации разделяют на более крупные кристаллографические системы – сингонии. К одной и той же системе относятся те классы, которые имеют один или несколько сходных элементов симметрии.

Такое разделение значительно облегчает не только изучение геометрии кристаллов. В ряде случаев кристаллы, относящиеся к одной и той же сингонии, оказываются близкими между собой по физическим свойствам. Сингонии, в свою очередь, делятся на три категории: низшую, среднюю и высшую (табл. 3.2).

### Порядок выполнения работы

Первое задание выполняется при подготовке к практической работе.

Таблица 3.2

## Категории и сингонии

Категория	Сингония
Низшая	Триклинная
	Моноклинная
	Ромбическая
Средняя	Тетрагональная
	Тригональная
	Гексагональная
Высшая	Кубическая

Второе задание выполняется всей группой. Определить количество плоскостей симметрии в равностороннем и равнобедренном треугольниках, квадрате, прямоугольнике, ромбе.

Описать элементы симметрии гексаэдра (куба) и тетраэдра (задание 3), изобразить поворотные оси, записать формулы симметрии.

В процессе выполнения третьего и четвертого заданий заполнить табл. 3.3.

Таблица 3.3

## Элементы симметрии

Название фигуры	Элементы симметрии							Формула симметрии
	Центр симметрии	Оси первого порядка	Оси второго порядка	Оси третьего порядка	Оси четвертого порядка	Оси шестого порядка	Плоскости симметрии	
тетраэдр								
гексаэдр								
октаэдр								

## Содержание отчета

1. Название, цель работы, задание.
2. Рисунки, определяющие плоскости симметрии в равностороннем и равнобедренном треугольниках, квадрате, прямоугольнике, ромбе.
3. Описание элементов симметрии и графическое изображение поворотных осей тетраэдра, гексаэдра. Запись формулы симметрии.
4. Заполненная таблица 3.3.
5. Список используемой литературы.

## Контрольные вопросы

1. Что относится к элементам ограничения кристаллов?
2. Что понимается под симметрией кристаллов?
3. Что такое ось симметрии?
4. Что такое сингония? Что понимают под категорией?
5. Что обозначает кристаллографическая формула  $L_44L_2$ ?

## РАБОТА № 4

### Анализ пространственных решеток.

### Определение кристаллографических индексов плоскостей

Цель работы: изучение кристаллического строения металлов.

### Задания

1. Используя литературные источники, зарисовать элементарную кристаллическую решетку и указать параметры решетки для выданного преподавателем металла.
2. Определить координационное число.

3. Определить базис ячейки.
4. Ознакомиться с системой обозначения граней и направлений.  
Построить плоскости по индексам, указанным преподавателем.
5. Ответить на контрольные вопросы.
6. Составить отчет.

### **Общие положения**

Согласно принципу минимизации потенциальной энергии каждый атом стремится взаимодействовать с максимально большим числом атомов. Это ведет к образованию структур с максимальным координационным числом и высокому коэффициенту компактности по типу плотнейшей кубической и гексагональной упаковки.

Структурами плотнейших упаковок обладают кристаллы многих химических элементов. Металлы образуют в основном три типа пространственных решеток: объемно центрированную кубическую (Na, Li, Ti<sub>β</sub>, Fe<sub>α</sub> и др.), гранецентрированную кубическую (Ag, Au, Cu, Fe<sub>γ</sub>, Ni и др.) и гексагональную плотноупакованную (Mg, Ti<sub>α</sub>, Zn, Ca<sub>β</sub> и др.).

Важными характеристиками кристаллической решетки являются период решетки, координационное число, коэффициент компактности.

*Период решетки* – это расстояние между двумя ближайшими соседними атомами. Кристаллическая решетка характеризуется параметрами  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и углами между координатными осями –  $\alpha$  (угол между осями  $x$  и  $z$ ),  $\beta$  (угол между  $y$  и  $z$ ),  $\gamma$  (угол между  $x$  и  $y$ ).

*Координационное число* – число атомов, находящихся на наиболее близком равном расстоянии от избранного атома.

Чем выше координационное число, тем выше плотность упаковки кристаллической решетки, т. е. объем, занятый атомами.

*Коэффициент компактности  $Q$*  равен отношению суммарного объема атомов, входящего в решетку, к объему решетки:

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

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

Объемно центрированная кубическая (ОЦК) решетка изображена на рис. 4.1, а.

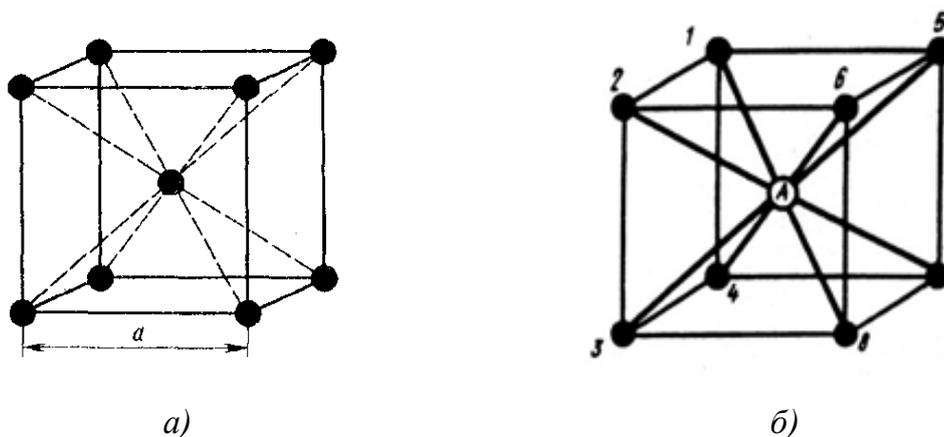


Рис. 4.1. Объемно центрированная кубическая кристаллическая решетка: а – внешний вид; б – координационное число для атома А (К8)

В элементарной ячейке такой решетки (рис. 4.1, б) атом А находится на наиболее близком равном расстоянии от восьми атомов, расположенных в вершинах куба, то есть координационное число этой решетки равно 8 (К8).

В данной решетке девять атомов (восемь – в вершинах куба и один – в центре). Каждый угловой атом входит в восемь соседних ячеек, следовательно, на одну ячейку приходится  $n = 8 \cdot 1/8 + 1 = 2$  атома, а коэффициент компактности – 68 %.

Гранецентрированная кубическая решетка (ГЦК), рис. 4.2, а.

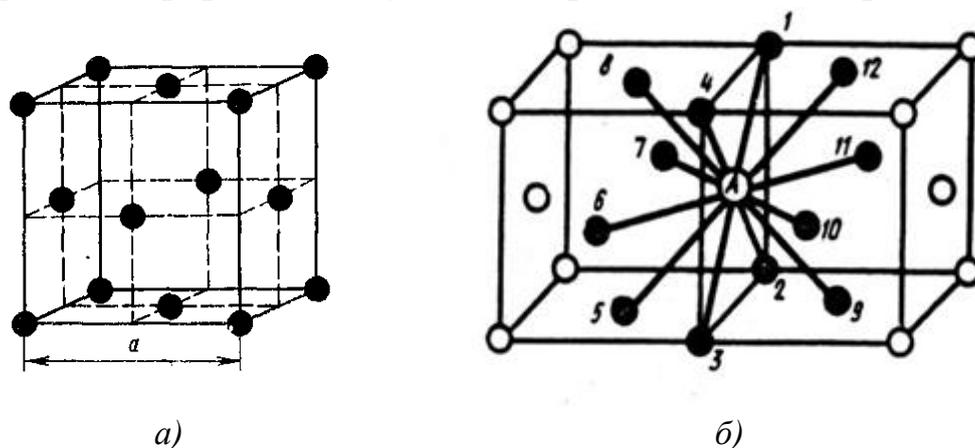


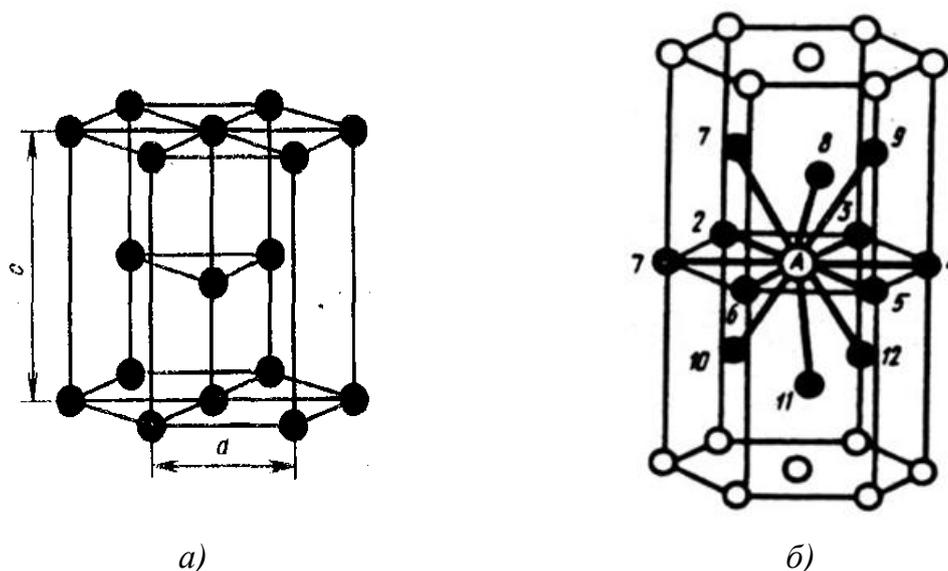
Рис. 4.2. Гранецентрированная кубическая кристаллическая решетка:

*a* – внешний вид; *б* – координационное число для атома *A* (К12)

В гранецентрированной кубической решетке (рис. 4.2, б) атом *A* находится на наиболее близком расстоянии от четырех атомов 1, 2, 3, 4, расположенных в вершинах куба, от четырех атомов 5, 6, 7, 8, расположенных на гранях куба, и от четырех атомов 9, 10, 11, 12, принадлежащих расположенной рядом кристаллической ячейке. Атомы 9, 10, 11, 12 симметричны атомам 5, 6, 7, 8. Следовательно, для гранецентрированной кубической решетки координационное число равно 12 (К12).

В элементарной ячейке такой решетки 14 атомов (8 – в вершинах и 6 – на гранях куба). Каждый угловой атом входит в восемь ячеек; каждый атом, находящийся в центре грани, входит в две соседние ячейки, в центре ячейки атома нет. Таким образом, на одну ячейку приходится  $n = 8 \times 1/8 + 6 \cdot 1/2 = 4$  атома, а коэффициент компактности – 74 %.

*Гексагональная плотноупакованная решетка (ГПУ), рис. 4.3, а.*



*Рис. 4.3. Гексагональная плотноупакованная кристаллическая решетка: а – внешний вид; б – координационное число для атома *A* (Г12)*

В гексагональной плотноупакованной решетке (рис. 4.2, б) атом *A* находится на наиболее близком расстоянии от шести атомов 1, 2, 3, 4, 5, 6, расположенных в вершинах шестигранника, и от трех атомов 7, 8, 9, расположенных в средней плоскости призмы. Кроме того, атом

А находится 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 гексагональной плотноупакованной решетки координационное число равно 12 (Г12).

В элементарной ячейке такой решетки 16 атомов. Верхние центральные атомы входят в две соседние ячейки; атомы, образующие вершины призмы, входят в шесть соседних ячеек; атомы, лежащие внутри призмы, целиком принадлежат данной ячейке. Следовательно, на одну ячейку приходится  $n = 2 \cdot 1/2 + 12 \cdot 1/6 + 3 = 6$  атомов, а коэффициент компактности – 74 %.

При определении положения атомных плоскостей в кристаллических пространственных решетках удобно использовать индексы Миллера. Для того чтобы установить индексы Миллера, элементарную решетку необходимо вписать в пространственную систему координат и положение любого узла кристаллической решетки относительно произвольно выбранного начала координат будет определяться заданием координат  $x, y, z$ .

За единицу измерения вдоль каждой оси принимается период решетки, т. е. для одной элементарной ячейки эти координаты равны параметрам  $a, b, c$  соответственно. Для удаленной от начала координат ячейки координаты узла определяются  $x = ma, y = nb, z = pc$ , где  $m, n, p$  – целые числа. Если за единицу измерения длин вдоль осей решетки выбрать величины  $a, b, c$ , то координатами узла будут просто числа  $m, n, p$  (индексы узла). Положение плоскости определяется отрезками, которые она отсекает на осях решетки. За индексы плоскостей принято брать обратные отрезки:  $h = 1/m, k = 1/n, l = 1/p$ . Эти числа заключают в круглые скобки. На рис. 4.4 показано графическое изображение наиболее важных плоскостей в кубической решетке. Если плоскость не пересекает какую-нибудь ось, например  $x$ , то соответствующий индекс Миллера равен нулю, например (011).

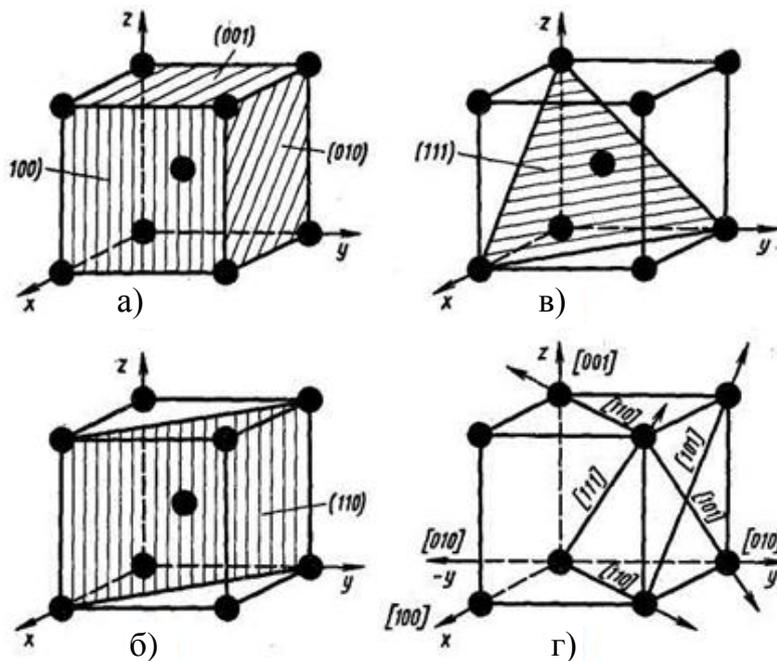


Рис. 4.4. Кристаллографические индексы плоскостей (а – в) и направлений (г) в ОЦК решетке [7, с. 10]

Для рассмотрения явлений, происходящих в решетке, также применяются индексы направлений. Кристаллографические индексы направлений заключают в квадратные скобки (рис. 4.4 , г).

### Порядок выполнения работы

Для металла, указанного преподавателем (первое задание) зарисовать элементарную кристаллическую решетку и указать параметры его решетки.

Второе и третье задание состоит в определении координационного числа и базиса для изображенной решетки.

При подготовке к лабораторной работе (четвертое задание) ознакомиться с системой обозначения граней и направлений. На занятии вписать решетку в пространственную систему координат и построить плоскости по индексам, указанным преподавателем.

## Содержание отчета

1. Название, цель работы, задание.
2. Изображение кристаллической решетки для металла, указанного преподавателем, с указанием параметров решетки.
3. Запись координационного числа, определение базиса.
4. Изображение кристаллической решетки, вписанной в пространственную систему координат, с указанными на ней кристаллографическими плоскостями в соответствии с выданными преподавателем индексами плоскостей.
5. Список используемой литературы.

## Контрольные вопросы

1. Что такое пространственная решетка, элементарная ячейка?
2. Какие пространственные решетки встречаются среди металлов?
3. Координационное число и методика его вычисления.
4. Определение базиса решетки.
5. Кристаллографические индексы плоскости и направления.
6. Порядок нахождения кристаллографических индексов.

## **РАБОТА № 5**

### **Изучение методов рентгеноструктурного анализа. Расчет межплоскостных расстояний и рентгеновской плотности вещества**

Цель работы: изучить рентгеновский метод исследования структуры металлов.

#### **Задания**

1. Используя литературные источники, изучить методы рентгеноструктурного анализа: метод порошка (метод Дебая-Шерера), метод Лауэ и метод вращения.
2. Ознакомиться с выводом уравнения Вульфа-Брегга.
3. Используя уравнение Вульфа-Брегга, лежащего в основе изучаемого метода порошка, освоить методику установления вещества по межплоскостным расстояниям.
4. Определить рентгеновскую плотность исследуемого вещества.
5. Ответить на контрольные вопросы.
6. Составить отчет.

#### **Общие положения**

Одним из наиболее эффективных методов изучения строения кристаллических веществ является рентгенография. Рентгенография делится на два типа: рентгеноструктурный анализ и рентгенофазовый анализ.

Рентгеноструктурный анализ является наиболее общим и информативным методом исследования атомно-кристаллической структуры материалов рентгеновскими лучами, он позволяет однозначно определить все детали кристаллической структуры. Рентгеноструктурный анализ основан на отражении рентгеновских лучей от атомов кристаллической решетки и интерференции этих лучей, т.е. на их способности

усиливать, ослаблять или гасить друг друга. Так как в кристалле расстояние между атомами того же порядка, что и длина волны рентгеновских лучей, то его можно рассматривать, как естественную дифракционную решетку для рентгеновского излучения.

Рентгеновские лучи возникают в рентгеновской трубке при резком торможении быстродвижущихся электронов о поверхность анода, т.е. рентгеновская трубка является источником волн, различных по длине и интенсивности. Следует отметить, что характер рентгеновского излучения может существенно изменяться в зависимости от режима работы и устройства трубки.

При сравнительно низких напряжениях электроны, не проникая вглубь отдельных атомов вещества анода, в основном тратят свою энергию на нагрев анода и лишь около одного процента – на излучение.

Принято считать, что такое излучение состоит из множества следующих друг за другом различных по длине и интенсивности волн и называется белым излучением. Состав белого излучения зависит от скорости свободных электронов (беспрепятственно перемещающихся в безвоздушном пространстве) и не зависит от вещества анода.

С повышением напряжения скорость электронов возрастает, достигая значений, при которых движущиеся электроны в состоянии проходить электронные уровни атомов анода. При этом атомам сообщается некоторая дополнительная энергия, которая в той или иной степени возвращается окружающему пространству в виде ряда волн, характерных по своим длинам только для данного типа атомов. Возникающие при этом волны определенных длин составляют характеристическое излучение рентгеновской трубки.

Таким образом, рентгеновская трубка может рассматриваться как источник двух излучений, независимых друг от друга, – белого (сплошного) и характеристического. В практике структурного анализа чаще всего используют характеристические лучи. Это связано с тем, что при использовании данного излучения известна длина волн таких лучей.

При прохождении рентгеновских лучей через кристалл происходит рассеивание данного излучения на свободных зарядах – электронах, и возникает вторичное характеристическое излучение, которое

фиксируется на рентгенограммах или специальными счетчиками электронных импульсов. Так как электроны в кристалле располагаются непосредственно вокруг атомных ядер, то по отражению вторичных рентгеновских лучей можно определить расположение атомов в структуре кристалла.

Основными методами рентгеновской съемки являются:

- ✓ метод порошка (метод Дебая-Шерера),
- ✓ метод Лауэ,
- ✓ метод вращения и его разновидности.

Один из наиболее распространенных методов рентгеноструктурного анализа – метод порошка (метод Дебая – Шерера). Для исследования применяют образец в виде цилиндрика диаметром 0,3 – 0,5 мм, спрессованного из поликристаллического порошка или выполненного из поликристаллической проволоки диаметром 0,2 – 0,6 мм, т. е. в методе порошков в качестве объекта исследования применяют поликристаллическое вещество, состоящее из частиц с линейными размерами не больше нескольких микрон. Образец помещают в центр цилиндрической камеры и направляют на него монохроматический рентгеновский луч. В таком образце всегда присутствуют кристаллики любой ориентации, поэтому найдутся такие, в которых группы параллельных между собой плоских сеток будут располагаться по отношению к первичному рентгеновскому лучу под углами  $\theta$ , удовлетворяющими условиям отражения по уравнению Вульфа – Брегга, которое приведено ниже.

Каждое вещество (фаза) обладает своей кристаллической решеткой. Семейства атомных плоскостей, образующих эту решетку, обладают характерным только для данной решетки набором значений межплоскостных расстояний  $d$ . Знание межплоскостных расстояний  $d$  исследуемого металла позволяет установить, с каким веществом (фазой) мы имеем дело.

Пусть узкий пучок монохроматических рентгеновских лучей с известной длиной волны  $\lambda$  падает на совокупность большого числа кристаллов (кристаллическую решетку), которая может быть охаракте-

ризована семейством параллельных плоскостей с определенными межплоскостными расстояниями. При взаимодействии рентгеновских лучей с кристаллическим веществом (рис. 5.1) возникает дифракционная картина, максимумы интенсивности которой удовлетворяют уравнению Вульфа – Брегга:

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

где  $n$  – порядок дифракции (целое число 1, 2, 3 и т. д.);  $\lambda$  – длина волны рентгеновских лучей;  $d$  – межплоскостное расстояние;  $\theta$  – угол скольжения лучей (угол рассеяния).

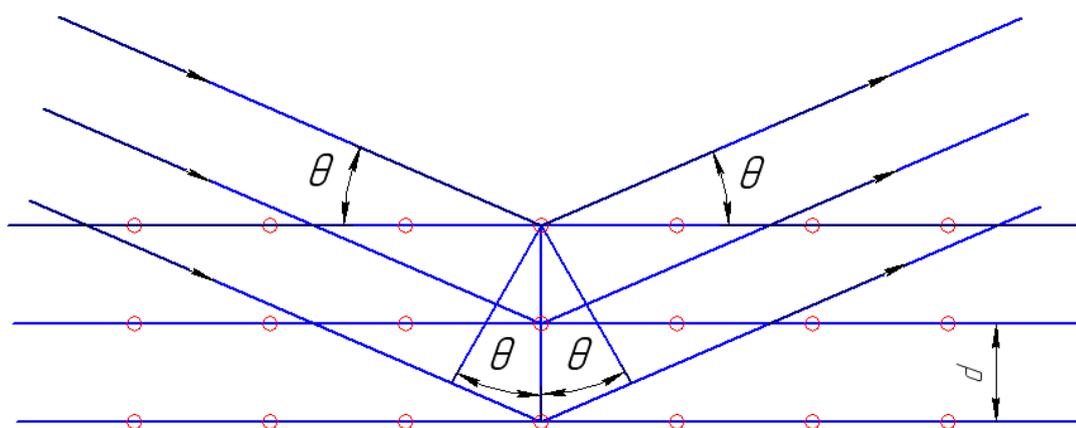


Рис. 5.1. Отражение рентгеновских лучей от атомных плоскостей кристалла

Из уравнения Вульфа – Брегга следует, что

$$\frac{d}{n} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}.$$

Лучи, отраженные от всех кристалликов, у которых плоскости с заданным межплоскостным расстоянием  $d_{hkl}$  находятся в отражающем положении, т.е. удовлетворяют условию Вульфа-Брегга, и образуют вокруг первичного луча дифракционный конус. Каждому  $d_{hkl}$  соответствует свой дифракционный конус (рис.4.2, а). Пересечение каждого конуса дифрагирующих лучей с полоской фотопленки свернутой в виде цилиндра, ось которого проходит через образец, приводит к появлению на ней интерференционных линий, имеющих вид дужек, расположенных симметрично относительно первичного пучка (рис.4.2, б).

Так как длина волны характеристического излучения, в котором получена рентгенограмма, известна, то задача определения межплоскостных расстояний  $d/n$  ( $d_i$ ) сводится к нахождению углов  $\theta$  для всех линии.

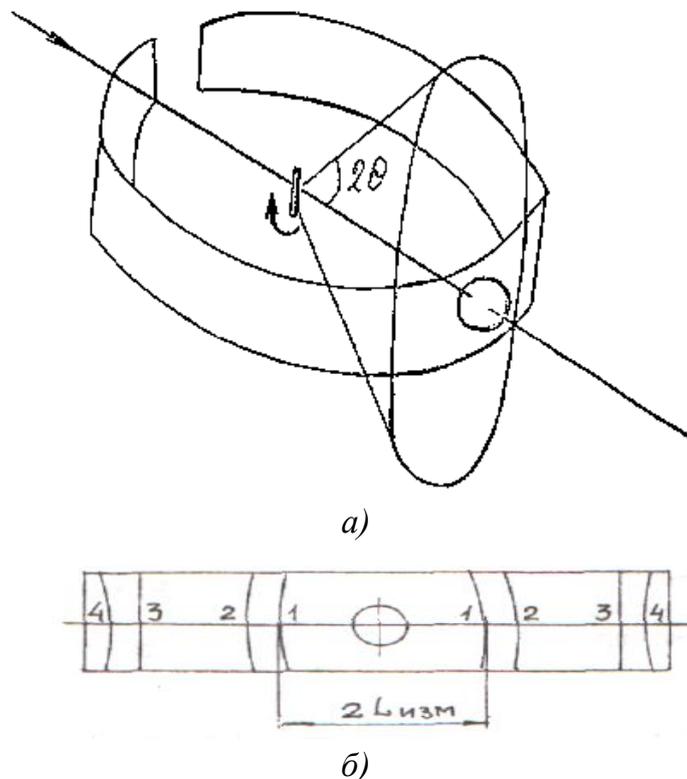


Рис. 4.2. Схема образования дифракционного конуса (а) и схематичное изображение рентгенограммы (б)

### Порядок выполнения работы

Первое и второе задание выполняется при подготовке к лабораторной (практической) работе.

Третье задание выполняется индивидуально. По рентгенограмме поликристаллического вещества, снятой в камере Дебая, установить, с какого вещества была снята рентгенограмма (произвести идентификацию вещества).

Четвертое задание, как и третье, выполняется индивидуально. Для исследуемого вещества определяется его рентгеновская плот-

ность, которая совпадает с плотностью вещества для веществ с неискаженной структурой.

Для облегчения расчетов рентгенограммы по определению межплоскостных расстояний рекомендуется заносить исходные данные, результаты замеров и расчеты в табл. 54.1 и заполнять ее последовательно по столбцам.

*Расчет рентгенограммы для определения межплоскостных расстояний и идентификации веществ (к заданию 3).*

Длина волны излучения  $\lambda =$  , Å

Диаметр камеры 57,3 мм.

Радиус исследуемого образца  $\rho =$

Таблица 5.1

№ п/п	$2L_{изм}$ , мм	$\theta_{приб}$ , град	Поправка на поглощение $\Delta\rho$ , мм	$2L_{исп}$ , мм	$\theta_{точн}$ , град	$\sin\theta$	$d_i$ расч. Å	Табл. знач. $d_i$ Å
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1								
2								
3								
4								

Столбец 1. Для расчета выбирают четыре линии, которые цифрами отмечены на рентгенограмме.

Столбец 2. С помощью линейки измеряют расстояние  $2L$  между парой указанных линий, симметрично расположенных относительно входного отверстия (с точностью до 0,2 мм).

Столбец 3. Приближенные значения угла  $\theta_{прибл}$  определяют по формуле, град.:

$$\theta_{прибл} = 2L_{изм} / 2.$$

Столбец 4. Более точное значение угла находят с учетом поправки на поглощение. Чтобы упростить расчеты, в специальной таб-

лице для каждого значения  $\theta$  дано значение  $\Delta\rho$  в зависимости от известного радиуса  $\rho$  исследуемого образца.

Столбец 5. Величину  $2L_{испр}$  получают из формулы

$$2L_{испр} = 2L_{изм} - \Delta\rho,$$

где  $\Delta\rho$  - поправка на поглощение, выбранная из табл.1 приложения 2.

Столбец 6. Угол  $\theta_{точн}$  в градусах рассчитывают по формуле, град.

$$\theta_{точн} = 2L_{испр} / 2 ,$$

(например,  $\theta_{точн} = 42,6^\circ / 2 = 21,3^\circ$ ).

Столбец 7. Определяется  $\sin\theta$  с точностью до четвертого знака после запятой.

*Примечание.* При отсутствии калькулятора с функцией определения синуса значения угла  $\theta_{точн}$  записывают в градусах и минутах (например,  $21,3^\circ = 21^\circ 18'$ , т.к.  $0,3 \times 60' = 18'$ ). Значения  $\sin\theta$  с точностью до четвертого знака после запятой выбирают из тригонометрических таблиц.

Столбец 8. Используя значение  $\sin\theta$  и известную длину волны рентгеновского излучения, с помощью уравнения Вульфа-Брегга рассчитывают межплоскостные расстояния  $d_i$  расч.

$$d_{i \text{ расч}} = \lambda_\alpha / 2 \sin\theta.$$

Столбец 9. Табличные значения  $d_{табл}$ .

С помощью справочной табл. 4.2 следует определить вещество, для которого табличные значения  $d_{табл}$  совпадают с расчетными значениями межплоскостных расстояний  $d_{расч}$ . Записать название исследуемого вещества.

*Определение рентгеновской плотности вещества* (к заданию 4). После выполнения расчета рентгенограммы и идентификации исследуемого вещества необходимо, пользуясь справочной табл. 5.2, найти тип кристаллической решетки вещества, координационное число и параметр решетки найденного вещества.

Таблица 5.2.

Таблица постоянных величин

№ п/п	Элемент	Межплоскост. расстояние $d$ , Å	Параметр ячейки $a$ , Å	Атомный радиус $r$ , Å	Координационное число	Температура плавления $t_{пл}$ , °С	Плотность $\rho$ , г/см <sup>3</sup>	Атомный вес $A$ , а.е.м.
1	Be	1,97	$a=2,28$ $c=3,60$	1,13	Г12	1350	1,85	9
2	Fe	2,01	2,86	1,26	К8	1535	7,87	56
			3,65		К12			
3	Ni	2,038	3,52	1,24	К12	1455	8,9	58,7
4	Cu	2,08	3,61	1,28	К12	1083	8,96	63,5
5	V	2,14	3,04	1,31	К8	1900	6,11	51
6	Mo	2,22	3,14	1,4	К8	2620	10,2	96
7	W	2,23	3,16	1,41	К8	3410	19,3	184
8	Pt	2,25	3,92	1,38	К12	1773	21,4	195
9	Al	2,33	4,05	1,43	К12	659	2,7	27
10	Au	2,35	4,08	1,44	К12	1163	19,3	197
11	Ag	2,36	4,08	1,44	К12	960	10,5	108
12	Zn	2,46	$a=2,66$ $c=4,94$	1,39	Г6	419	7,31	65,4
13	Ti	2,54	$a=2,95$ $c=4,68$	1,46	Г12	1668	4,51	47,9
14	Mg	2,77	$a=3,21$ $c=5,21$	1,6	Г12	651	1,74	24,3
15	Pb	2,85	4,95	1,75	К12	327	11,34	207
16	Sn	2,91	6,49	1,58		232	7,29	118,7

Рентгеновская плотность вещества  $\rho$  рассчитывается по формуле, г/см<sup>3</sup>:

$$\rho = nA / a^3,$$

где  $n$  - число атомов в элементарной ячейке;  $A$  - вес одного атома в а.е.м. ( $1 \text{ а.е.м.} = 1,66 \times 10^{-24} \text{ г}$ );  $a$  - параметр ячейки .

### Содержание отчета

1. Название, цель работы, задание.
2. Расчет рентгенограммы, выполненный в виде табл. 5.1.

3. Расчет рентгеновской плотности исследуемого вещества.
4. Список используемой литературы.

### **Контрольные вопросы**

1. Что лежит в основе рентгеноструктурного анализа?
2. Как возникают рентгеновские лучи?
3. Что понимают под тормозным и характеристическим излучением?
4. Вывод и смысл уравнения Вульфа-Брегга.
5. Что такое межплоскостные расстояния?
6. Почему линии на рентгенограмме имеют форму дуг?
7. Дайте краткую характеристику наиболее распространенным методам рентгеноструктурного анализа?
8. Какого практического применения имеет метод порошка (метод Дебая-Шерера)?

### **РАБОТА № 6**

#### **Рентгенофазовый анализ поликристаллического вещества**

Цель работы: приобретение навыков определения фазового состава материалов с помощью рентгенофазового анализа.

#### **Задания**

1. Получить представление об основах рентгенофазового анализа.
2. Ознакомиться с принципом работы и устройством рентгеновского дифрактометра.
3. Подготовить поликристаллическое вещество неизвестного состава для рентгенофазового анализа, провести съемку рентгенограммы предложенных преподавателем образцов.

4. Расшифровать рентгенограммы образцов методом сравнения с базой данных компьютера дифрактометра, определить фазовый состав анализируемого образца.
5. Ответить на контрольные вопросы.
6. Составить отчет.

### **Общие положения**

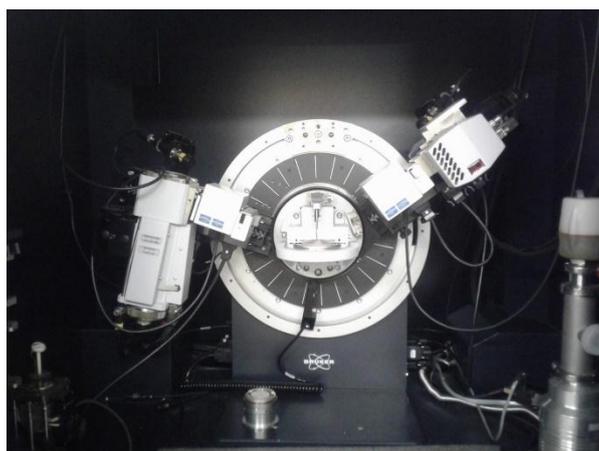
Одним из современных методов определения фазового состава кристаллических тел является метод рентгенофазового анализа (РФА). Объектами исследования РФА являются поликристаллические образцы. Рентгенофазовый анализ основан на явлении дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решетке.

Для выполнения РФА используются рентгеновские дифрактометры, главные компоненты которого – рентгеновская трубка и детектор размещаются на подвижном устройстве (гониометр). Это система точной установки и отслеживания угла излучения по отношению к поверхности образца. При этом одно плечо гониометра задает угол облучения образца рентгеновской трубкой, а другое определяет угол отражения излучения от образца (детектируемый сигнал).

На рис. 6.1 изображен гониометр и принципиальная схема дифрактометра D8 ADADVANCE.

При изменении угла детектор непрерывно во время движения регистрирует интенсивность рентгеновского излучения. Остальные части оптической схемы дифрактометра придают излучению определенные свойства, которые позволяют его оптимизировать для решения тех или иных задач дифрактометрических исследований.

В случае взаимодействия порошка или мелкокристаллического материала с монохроматическими рентгеновскими лучами всегда найдется для каждого сорта плоскостей определенное число кристалликов, попавших в «отражающее» положение.



а)



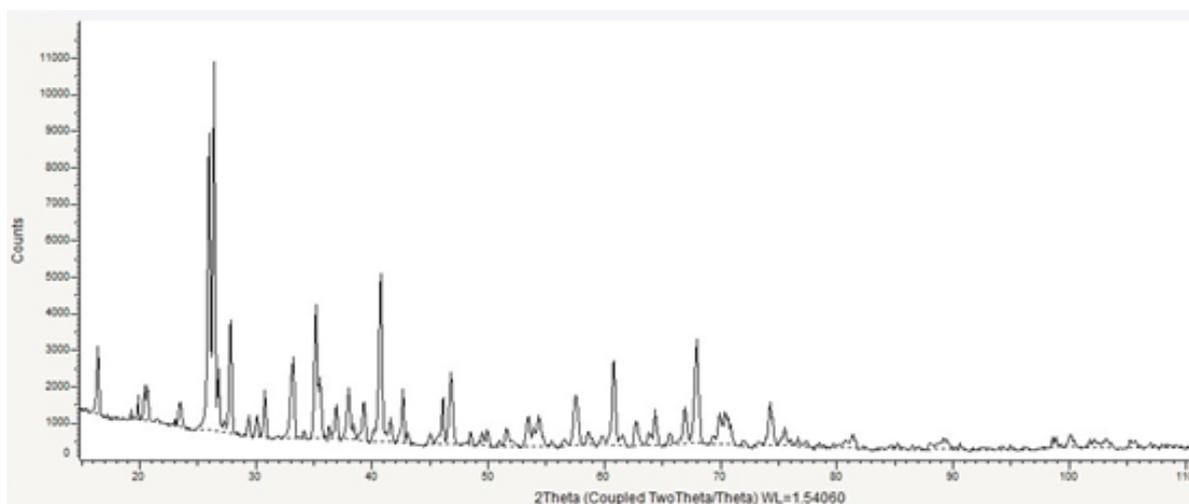
б)

Рис. 6.1. Гониометр (а) и принципиальная схема (б) дифрактометра D8 ADADVANCE

Угловое положение дифракционного максимума (рефлекса) для данного сорта плоскостей, характеризующееся разной интенсивностью, будет определяться значением  $d$ , а последнее – геометрией кристаллической решетки.

Поэтому, типичная дифрактограмма поликристаллического вещества представляет собой серию пиков на плавной линии фона (рис.6.2). Каждый пик является отражением  $n$  - го порядка от серии плоскостей  $(hkl)$  с межплоскостным расстоянием  $d_{hkl}$ . Геометрия кристаллической решетки определяется набором брэгговских углов  $\theta$  при

дифракции на заданном излучении. Индивидуальность и распределение атомов определяет интенсивность дифрагированных лучей.



*Рис.6.2. Дифрактограмма поликристаллического вещества.*

Интегральная интенсивность рефлекса при рентгеновской дифракции на практике определяется с достаточной степенью точности количественно. На интенсивность рефлексов влияет ряд факторов: длина волны излучения; структурный фактор; фактор повторяемости, учитывающий число эквивалентных плоскостей, дающих одну и ту же дифракционную линию – он зависит от типа кристаллической решетки и сорта плоскостей; температурный фактор; фактор поглощения, зависящий от исследуемого вещества, длины волны излучения и метода съемки; от режима работы рентгеновского аппарата – тока и напряжения на трубке, размера щелей, режима работы счетчика квантов рентгеновского излучения, скорости вращения образца и счетчика, скорости протяжки диаграммной ленты, а также от количества данной фазы.

На рис. 6.3. показана информация, необходимая для расшифровки дифрактограммы.

Если исследуемый объект состоит из нескольких фаз, то каждой фазе будет соответствовать своя собственная дифракционная картина. В этом случае на рентгенограмме присутствуют пики всех фаз образца. Интенсивность рефлексов каждой фазы будет зависеть от ее количества в исследуемой смеси.

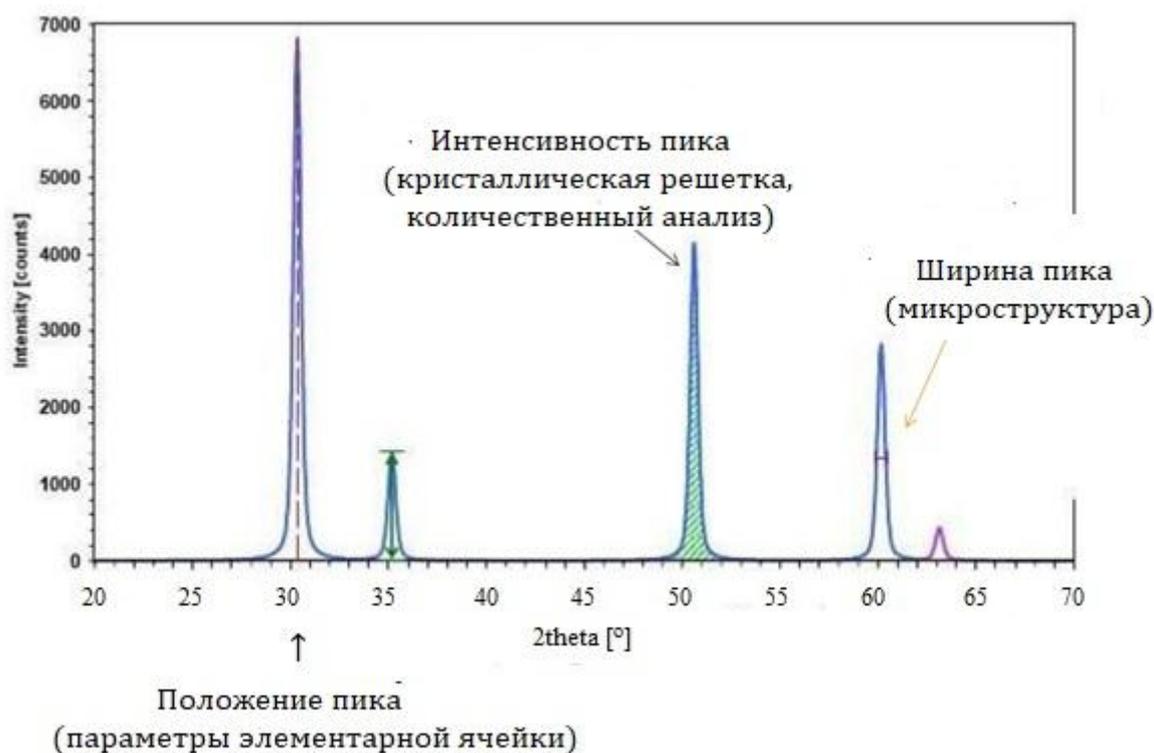


Рис.6.3. Информация, необходимая для расшифровки дифрактограммы.

При расшифровке рентгенограмм определение фазового состава изучаемого вещества производят путем сравнения экспериментального набора значений: углового положения рентгеновского максимума  $2\theta$ , набора межплоскостных расстояний  $d_{hkl}$  и соотношений интенсивностей  $I/I_0$ , найденных из рентгеновских спектров, с табличными значениями  $d_{hkl}$  и  $I/I_0$ , с использованием БД PDF (powder diffraction patterns) (A comprehensive database of powder diffraction patterns – ICDD PDF (International Centre for Diffraction Data – [www.icdd.com](http://www.icdd.com))).

Указанная база данных содержит рентгенограммы чистых фаз; постоянно редактируется, дополняется и обновляется; ежегодно пополняется экспериментальными и расчетными рентгенограммами; компьютерный поиск начиная с 1985 года; выпуск 2010 года содержит более 300 000 рентгенограмм.

## Порядок выполнения работы

Первое и второе задание выполняется при подготовке к лабораторной работе.

С помощью преподавателя подготовить образец для съемки и поместить его на предметном столике в держатель проб (третье задание). При необходимости можно скорректировать положение высоты плоскости образца. После этого устанавливают в DIFFRAC.Suite рекомендованные режимы и запускают программу съемки. По окончании съемки сохранить результаты.

Расчет результатов измерений рентгеновской дифракции проводить в универсальном программном модуле DIFFRAC.EVA. Для проведения анализа (четвертое задание) использовать библиотеки International Centre for Diffraction Data (ICDD) PDF-2 (Powder Diffraction File).

Полученные результаты должны быть представлены в виде таблицы описания исследуемых фаз (рис. 6.4, а) и в виде круговой диаграммы – секторальное представление результатов полуколичественного фазового анализа (рис. 6.4, б).

## Содержание отчета

1. Название, цель работы, задание.
2. Краткое содержание работы.
3. Таблица описания исследуемых фаз и секторальное представление результатов полуколичественного фазового анализа.
4. Список использованной литературы.

Show	Icon	Color	Index	Name	Parent	Scan	Pattern #	Compound Name
Yes			1	COD 9000710	Pattern List#7	Il.bml (X-Offset) #1	COD 9000710	Sillimanite
Yes			2	COD 7220854	Pattern List#7	Il.bml (X-Offset) #1	COD 7220854	

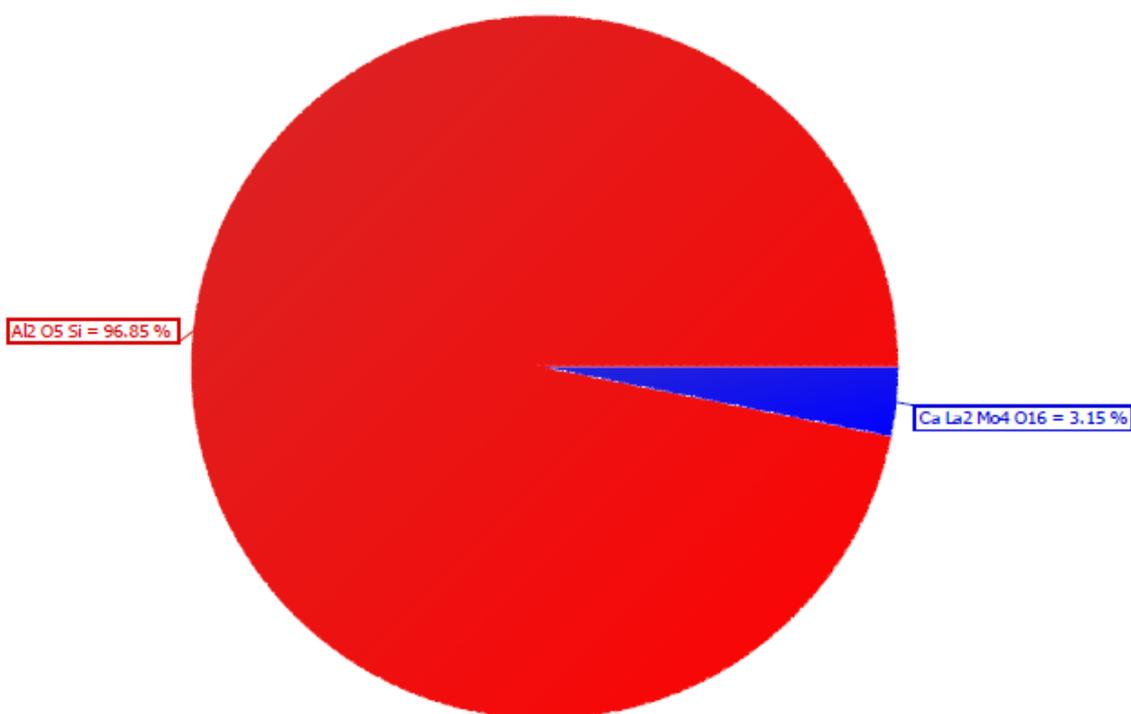
Formula	Y-Scale	I/c DB	I/c User	S-Q	Added Reference	d x by	Scan WL
Al2 O5 Si	80.0111 %	1.180		96.85 %		1.0000	Yes
Ca La2 Mo4 O16	23.9513 %	10.850		3.15 %		1.0000	Yes

Wavelength	System	Space Group	a	b	c	alpha	beta	gamma	Z	Volume
1.54060	Orthorhombic	P b n m (62)	7.48830	7.68080	5.77740					332.29
1.54060	Tetragonal	I 41/a (88)	5.33700		11.82900				1	336.93

Density	Cell Tuned	F (N)
	No	
	No	

a)

S-Q



б)

Рис.6.4. Таблицы описания исследуемых фаз (а) и секторальное представление результатов полуколичественного фазового анализа (б)

## Контрольные вопросы

1. Опишите принципиальную схему дифрактометра.
2. Что понимают под дифракционным максимумом?
3. Что представляет собой дифрактограмма?
4. Какая информация необходима для расшифровки дифрактограммы?
5. Каким образом определяют фазовый состав изучаемого вещества?

## РАБОТА № 7

### Изучение типов изоморфных замещений

Цель работы: изучить типы изоморфных замещений.

### Задания

1. Используя учебники и пособия, изучить типы изоморфных замещений.
2. Изучить условия, необходимые для проявления изоморфизма.
3. По заданию преподавателя, используя таблицы приложения 3 подобрать возможные замещения для указанных веществ.
4. Используя схемы Гинзбурга (приложение 3) определить возможные изовалентные и гетеровалентные замещения для указанных преподавателем веществ.
5. Подобрать два минерала, на которых можно продемонстрировать изоморфные замещения.
6. Ответить на контрольные вопросы.
7. Составить отчет.

## Общие положения

**Изоморфизм** – способность элементов (атомов, ионов) замещать друг друга в кристаллических решетках, не нарушая их строения.

- В твердых растворах первого рода (изоморфные смеси) атомы (ионы) одного кристаллического вещества могут замещаться атомами (ионами) другого вещества, которые располагаются в узлах кристаллической решетки.

- В твердых растворах второго рода атомы одного элемента располагаются в промежутках кристаллической решетки другого.

Так, например, в бедных железом породах образуется тремолит –  $\text{Ca}_2\text{Mg}_5\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$ , но содержание железа в тремолите может увеличиваться в процессе изоморфного замещения атомов магния на атомы железа, и образуется актинолит –  $\text{Ca}_2(\text{Mg},\text{Fe}^{2+})_5[\text{Si}_8\text{O}_{22}](\text{OH})_2$  (рис.).



а)



б)

Рис. Тремолит (а) и актинолит (б)

Условия, необходимые для проявления изоморфизма:

- ✓ замещаться могут ионы одного знака, т. е. катион на катион, анион на анион;

- ✓ замещаться могут только атомы или ионы близкого размера, т.е. разница величины ионных радиусов иона замещаемого и замещающего не должна превышать, по В. М. Гольдшмидту, при совершенном изоморфизме 15 и несовершенном 25 %. Если же величина более 40 %, изоморфизм невозможен.

- ✓ замещаться могут только ионы, близкие по степени поляризации, т. е. по степени ионно-ковалентной связи;

✓ замещаться могут только элементы, имеющие одинаковое координационное число в данной кристаллической структуре;

✓ изоморфные замещения должны происходить таким образом, чтобы не нарушался электростатический баланс кристаллической решетки;

✓ изоморфные замещения протекают в сторону приращения энергии решетки, т. е. количества энергии, которое выделяется при соединении катионов и анионов, находящихся в изолированном состоянии, в твердую кристаллическую решетку.

Разница величины ионных радиусов иона определяется следующим образом:

$$\frac{R_2 - R_1}{R_1} 100,$$

где  $R_1$  – меньший ионный радиус,  $R_2$  – наибольший ионный радиус;

Различают следующие типы изоморфизма:

- ✓ изовалентный;
- ✓ гетеровалентный;
- ✓ изоструктурный;
- ✓ изоморфизм особого рода.

*Изовалентный изоморфизм* характеризуется тем, что в этом случае происходит замещение ионов одинаковой валентности (разница в размерах ионных радиусов не должна быть более 15 %). В табл. 1 и 2 приложения 3 приведены размеры ионных радиусов.

*Гетеровалентный изоморфизм* – происходит замещение ионов различной валентности. В этом случае один ион не может замещаться другим без того, чтобы не нарушился электростатический баланс кристаллической решетки. Поэтому происходит замещение не иона на ион, как при изовалентном изоморфизме, а наблюдается замещение группы ионов определенной валентности на другую группу ионов при сохранении той же суммарной валентности (табл. 3 приложение 3).

При этом типе изоморфизма следует иметь в виду, что замещение иона одной валентности на ион другой всегда связано с компенсацией валентности, которая может происходить как в катионной, так и анионной части соединения.

Поэтому необходимо соблюдать следующие условия:

а) сумма валентности замещаемых ионов должна быть равна сумме валентностей замещающихся ионов;

б) сумма ионных радиусов замещаемых ионов должна быть близка к сумме ионных радиусов и может отличаться от нее не более чем на 15 % (для совершенного изоморфизма).

*Изоструктурный изоморфизм* характеризуется тем, что при этом виде изоморфизма происходит замещение не одного или группы ионов на другой ион или на другую группу, а замещение целого «блока» одной кристаллической решетки на другой такой же «блок». Необходимым условием является однотипность структуры минерала или близкие размеры элементарных частиц.

*Изоморфизм особого рода* характерен для минералов, в которых компенсация валентностей происходит за счет высвобождения из кристаллической решетки отдельных ионов и образования в узлах её вакантных мест – дефектов.

В приложении 3 представлены схемы, составленные А. И. Гинзбургом.

В табл. 7. 1 приведены свойства микроклина, в котором в процессе кристаллизации часть ионов  $K^+$  может замещаться ионами  $Na^+$ . При полном замещении полученная разновидность шпата называется альбитом.

### **Порядок выполнения работы**

Первое и второе задание выполняется при подготовке к практической работе.

Третье и четвертое задание выполняется индивидуально в соответствии с указанным преподавателем заданием.

Пятое задание выполняется после занятия самостоятельно. При этом необходимо подобрать два минерала, на которых можно продемонстрировать изоморфные замещения, а также дать описание свойств этих минералов.

Таблица 7.1.

## Изоморфизм в полевом шпате

Свойства минералов	Микроклин	Альбит
Класс	Силикаты, полевой шпат	
Химическая формула	$K[AlSi_3O_8]$	$Na[AlSi_3O_8]$
Фото минерала		
Форма выделения	короткопризматические или таблитчатые кристаллы	столбчатые, игольчатые, таблитчатые, сдвойникованные кристаллы, полисинтетические двойники
Сингония	триклинная	
Блеск	стеклянный	
Цвет	бесцветный, белый, серый, серовато-желтый, желтоватый, цвета загара, лососево-розовый, коричневатокрасный, голубовато-зеленый, зеленый	бесцветный, белый, серый, светло-желтый, реже светло-красный, зеленый, бурый
Цвет черты	белый	бесцветный или белый
Прозрачность	прозрачный, полупрозрачный, просвечивает	прозрачен, полупрозрачен просвечивает, мутный, непрозрачный
Спайность	Совершенная в двух направлениях	
Излом	неровный	неровный или раковистый
Твердость	6-6,5	
Хрупкость	хрупок	

## Содержание отчета

1. Название, цель работы, задание.
2. Описание условий, необходимых для проявления изоморфизма.
3. Заполненная таблица 7.2.

Таблица 7.2.

Наименование замещаемого элемента	Наименование замещающего элемента	Разница величины ионных радиусов, %	Возможность изоморфизма

4. Заполненная таблица 7.3.

Таблица 7.3.

Наименование замещаемого элемента	Наименование замещающего элемента	
	Изовалентные замещения	Гетеровалентные замещения

5. Список использованной литературы.

## Контрольные вопросы

1. Назовите типы изоморфных замещений?
2. Чем характеризуется ковалентный изоморфизм?
3. Являются ли натрий и медь изоморфными веществами?
4. Какие условия необходимы для гетеровалентного изоморфизма?
5. Что такое изоструктурный изоморфизм?
6. Опишите изоморфизм особого рода.

## РАБОТА № 8

### Изучение строения и свойств минералов

Цель работы: изучить строение и основные свойства минералов.

#### Задания

1. Используя учебники и пособия, изучить строение и основные свойства минералов.
2. По заданию преподавателя описать строение и основные свойства указанных минералов.
3. Определить фазовый состав минерала с помощью рентгенофазового анализа.
4. Ответить на контрольные вопросы.
5. Составить отчет.

#### Общие положения

Химический состав минералов в общем укладывается в химическую формулу, но, в зависимости от присутствующих в них примесей, может несколько изменяться.

К основным *физическим свойствам* минералов относятся такие, как цвет, побежалость, цвет черты, блеск, степень прозрачности, твердость, спайность, отдельность, излом, удельный вес, магнитность, хрупкость, ковкость, гибкость, упругость.

✓ Цвет (окраска) минералов зависит от химического состава, структуры и примесей. Например, кварц может иметь белую, серую, дымчатую, розовую, буроватую, почти черную окраску.

По окраске минералов принято судить об условиях их образования и принадлежности к определенному месторождению.

✓ Побежалость – это явление, когда минерал помимо основной окраски в тонком поверхностном слое имеет дополнительную окраску. Эта окраска возникает в результате интерференции света в

тонких пленках вследствие различных реакций (рис.). Цвета побежалости можно сравнить с радужными пленками на поверхности воды, загрязненной нефтяными продуктами.



*Рис. Побежалость в халькопирите*

✓ Цвет черты – это цвет тонкого порошка минерала, образующийся при трении образца о шероховатую поверхность неглазурированной фарфоровой пластинки. Очень часто он не совпадает с внешним цветом минерала. Особенно характерным цвет черты является для малопрозрачных и непрозрачных минералов.

Цвет черты минералов – более постоянный признак в сравнении с окраской.

✓ Блеск является следствием отражения световых лучей от поверхности минерала. Блеск зависит прежде всего от типа связи кристаллической решетки.

По характеру блеска минералы делят:

- на минералы с металлическим блеском, напоминающим блеск отполированной поверхности металла,
- минералы с неметаллическим блеском (алмазным, стеклянным, перламутровым, шелковым, жирным, смолистым, восковым и матовым).

✓ По степени прозрачности минералы делятся:

- на прозрачные минералы, сквозь которые ясно видно изображение, горный хрусталь;

- *полупрозрачные минералы*, сквозь которые предметы видно с трудом, гипс ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ );

- *просвечивающиеся минералы* – минералы прозрачные в тонких слоях, опал ( $\text{SiO}_2 \cdot n2\text{H}_2\text{O}$ );

- *непрозрачные минералы*, не пропускающие свет даже в тонких обломках, пирит ( $\text{FeS}_2$ ).

✓ Спайность, как уже отмечалось ранее, – это способность минералов раскалываться по определенным плоскостям с образованием параллельных плоскостей.

По степени совершенства минералов различают следующие виды:

- *весьма совершенная спайность*, характеризующаяся очень легким расщеплением кристалла, в частности пальцами (слюды, молибденит);

- *совершенная спайность* – при слабом ударе образуются обломки кристалла с ровными плоскостями спайности (кальцит, флюорит);

- *средняя спайность* – при ударе наблюдается образование обломков не только по плоскостям спайности, но и образование неровных поверхностей излома по случайным направлениям (полевые шпаты);

- *несовершенная спайность* обнаруживается с трудом и проявляется только на небольших участках (апатит);

- *весьма несовершенная спайность* – отсутствие спайности (магнетит).

✓ Отдельность, по Н. В. Белову, – отделение по плоскостям мельчайших включений других минералов, расположенных вдоль плоскостей с плотнейшей упаковкой в структуре другого минерала в виде тонких прокладок.

✓ Излом – это поверхность раскола минералов при разламывании минералов не по плоскости спайности и отдельности.

Различают следующие виды изломов:

- *ровный излом*, типичный для материалов с повышенной спайностью – халькопирит ( $\text{CuFeS}_2$ );

- *неровный излом*, характеризующийся неровной поверхностью раскола, – апатит [ $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ , F, OH];
- *ступенчатый излом*, типичный для минералов со спайностью в нескольких направлениях, – полевой шпат;
- *занозистый излом*, характерный для минералов цепочной структуры и волокнистого сложения. Напоминает поверхность неоструганных досок – асбест, селенит ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ );
- *раковинный излом*, характерный для минералов, у которых отсутствует спайность. Напоминает внутреннюю поверхность раковины – кварц ( $\text{SiO}_2$ );
- *землистый излом*, поверхность которого шероховатая, матовая, как бы покрыта пылью, – калионит ( $\text{Al}_4(\text{OH})_8[\text{Si}_4\text{O}_{10}]$ );
- *крючковатый излом*, характерный для ковких минералов (Cu, Ag, Au). Поверхность раскола, как бы покрыта острыми крючочками;
- *зернистый излом*, на поверхности которого отчетливо видны отдельные зерна, слагающие агрегат, – хромит ( $\text{FeCr}_2\text{O}_4$ ).

✓ Удельный вес зависит от химического состава минерала, плотности упаковки и мотива структуры. Большим удельным весом обладают минералы, имеющие в своем составе элементы с большим порядковым номером.

По удельному весу минералы делят на три группы:

- *легкие минералы*, имеющие удельный вес до 2,5, – сера, гипс;
- *средние минералы*, удельный вес которых от 2,5 до 4,0, – силикаты, кварц;
- *тяжелые минералы* с удельным весом более 4,0 – гематит, самородные металлы (Cu, Au, Pt).

✓ Магнитность минералов определяется с помощью магнита или способностью минерала отклонять магнитную стрелку на компасе.

Магнитностью обладает сравнительно небольшое количество минералов, в состав которых входят железо, кобальт, никель, марганец. Магнитные свойства хорошо выражены у магнетита ( $\text{FeFe}_2\text{O}_4$ ).

✓ Хрупкость, вязкость, ковкость. Хрупкость – это свойство минерала легко распадаться при ударе на мелкие обломки. Вязкие минералы раскалываются с трудом. Ковкие минералы сплющиваются при ударе и закругляются по краям.

✓ Гибкость, упругость. Минерал считается гибким, если его тонкие пластинки и волокна могут изгибаться, не ломаясь. Упругим является минерал, у которого после изгибания пластинки или волокна выпрямляются сами собой.

Важный диагностический признак при определении минералов является твердость. Под твердостью понимается степень сопротивления вещества какому-либо внешнему механическому воздействию.

Для приближенной оценки твердости минералов применяют обычно метод царапания – метод Мооса. При этом сравнение ведут с помощью эталонов шкалы Мооса (табл. 8.1 и 8.2).

Твердость относится к тем свойствам, в отношении которых кристаллы обнаруживают анизотропию, за исключением кристаллов кубической сингонии.

*Таблица 8.1*

Эталонны шкалы Мооса

№ п/п	Минерал	Твердость по шкале Мооса
1	Тальк $Mg_3(OH)_2[Si_4O_{10}]$	1
2	Гипс $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ (каменная соль NaCl)	2
3	Кальцит $Ca[CO_3]$	3
4	Флюорит (плавиковый шпат) $CaF_2$	4
5	Апатит $Ca_5F[PO_4]_3$	5
6	Полевой шпат (ортоклаз) $K[AlSi_3O_8]$	6
7	Кварц $SiO_2$	7
8	Топаз $Al_2(F, OH)_2[SiO_4]$	8
9	Корунд $Al_2O_3$	9
10	Алмаз C	10

Таблица 8.2

## Бытовая шкала Мооса

№ п/п	Предмет	Твердость по шкале Мооса
1	Карандаш мягкий	1
2	Ноготь	2
3	Медная монета	3
4	Простое (оконное) стекло	5
5	Лезвие стального ножа	6
6	Напильник	7

**Порядок выполнения работы**

Первое задание выполняется при подготовке к лабораторной работе. При этом следует обратить внимание на то, что для любого минерала характерна его физическая и химическая гомогенность (однородность), т.е. равенство физических и химических свойств во всех или параллельных направлениях.

Второе задание выполняется в лаборатории под руководством преподавателя путем изучения коллекций минералов. Результаты заносятся в таблицу 8.3.

Таблица 8.3

## Свойства минералов

Минерал	Форма выделения	Сингония	Блеск	Цвет	Цвет черты	Степень прозрачности	Наличие побежалости	Твердость

Провести съемку рентгенограммы минерала, выданного преподавателем (третье задание). Полученные результаты представить в виде таблицы описания исследуемых фаз и в виде круговой диаграммы – секторальное представление результатов полуколичественного фазового анализа.

## **Содержание отчета**

1. Название, цель работы, задание.
2. Заполненная таблица 8.3.
3. Таблица описания исследуемых фаз и секторальное представление результатов полуколичественного фазового анализа.
4. Список использованной литературы.

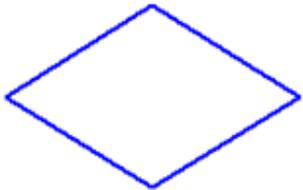
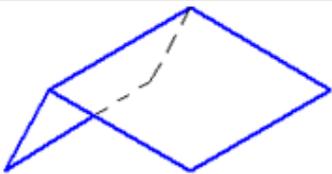
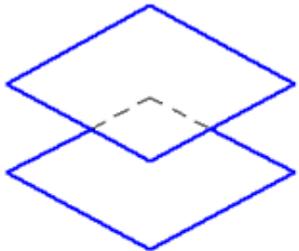
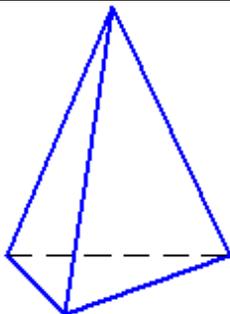
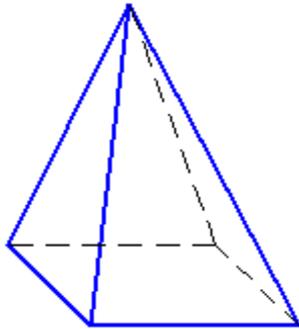
## **Контрольные вопросы**

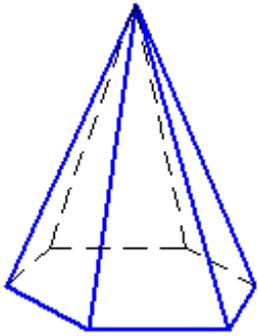
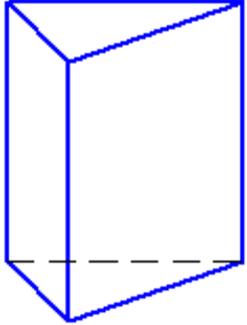
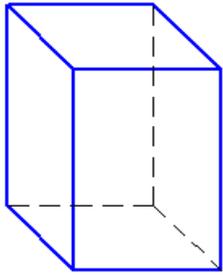
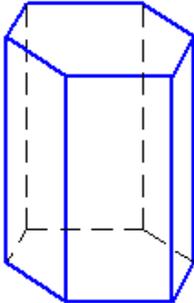
1. Какие свойства относятся к физическим свойствам?
2. Что такое побежалость?
3. Что понимают под цветом черты?
4. Как подразделяются минералы по характеру блеска?
5. Как подразделяются минералы по степени совершенства?
6. Что понимают под отдельностью?
7. Как классифицируют изломы минералов?
8. Какие группы минералов различают по удельному весу?
9. Что понимают под магнитностью минерала?
10. Какие минералы принято считать упругими?

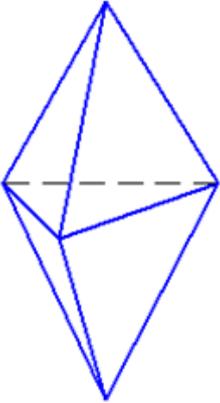
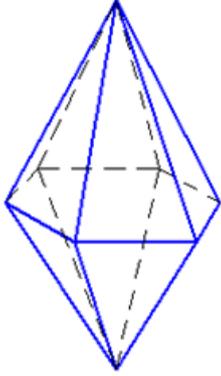
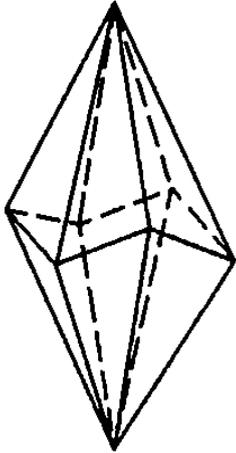
## Приложение 1

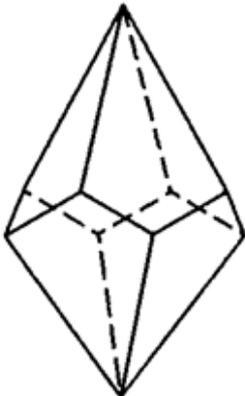
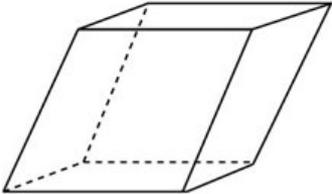
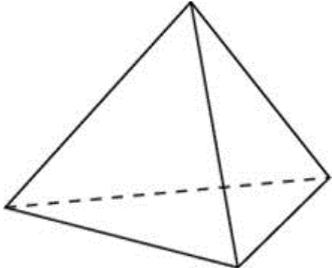
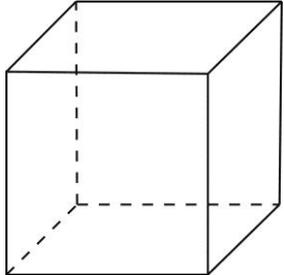
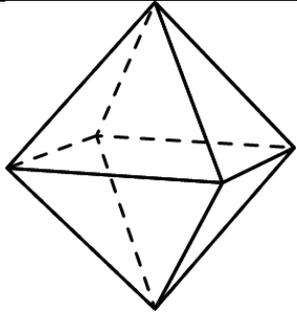
Таблица 1

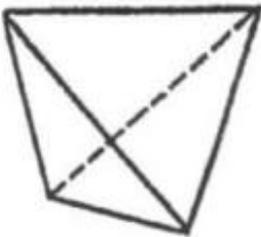
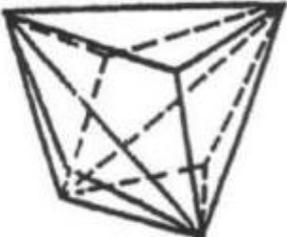
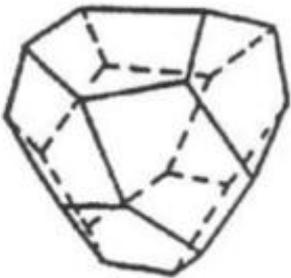
### Простые формы

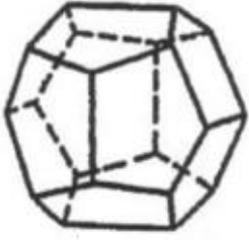
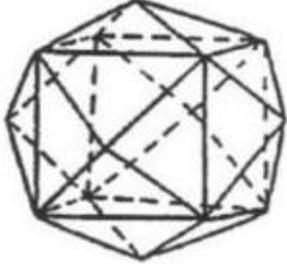
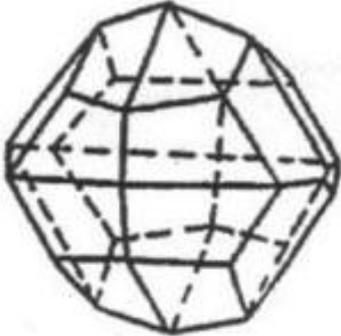
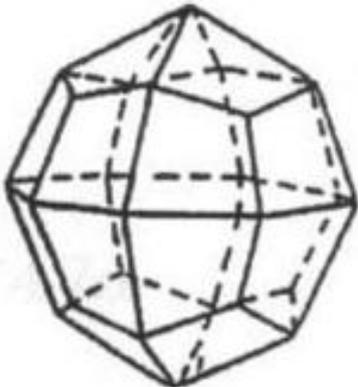
Форма	Название	Описание
	моноэдр	простая форма, состоящая из одной грани
	диэдр	простая форма, состоящая из двух пересекающихся граней
	пинакоид	простая форма, состоящая из двух параллельных граней
	тригональная пирамида	пирамиды – простые формы, состоящие из трех или большего числа граней, пересекающихся в одной точке. По форме поперечного сечения пирамиды называются: тригональная, тетрагональная, гексагональная и т. д.
	тетрагональная пирамида	

Форма	Название	Описание
	<p>гексагональная пирамида</p>	
	<p>тригональная призма</p>	<p>призмы – простые формы, состоящие из трех или большего числа граней, пересекающихся по параллельным ребра. По форме поперечного сечения призмы называются: тригональная, тетрагональная, гексагональная и т. д.</p>
	<p>тетрагональная призма</p>	
	<p>гексагональная призма</p>	

Форма	Название	Описание
	<p>тригональная дипирамида</p>	<p>простые формы, дипирамиды представляющие собой две одинаковые пирамиды, сложенные своими основаниями. Названия дипирамид зависят от формы их сечения: тригональная, тетрагональная, гексагональная и т. д.</p>
	<p>гексагональная дипирамида</p>	
	<p>скаленоэдр</p>	<p>простая форма, сходная с дипирамидами, с боковыми гранями в виде разносторонних треугольников (скалено – разносторонний)</p>

Форма	Название	Описание
	трапециоэдр	простая форма, сходная с дипирамидами, но с боковыми ребрами, не параллельными между собой
	ромбоэдр	простая форма, грани которой имеют форму ромбов
	тетраэдр	простая форма, состоящая из четырех треугольных непараллельных граней
	гексаэдр	форма, состоящая из шести квадратных граней
	октаэдр	форма, состоящая из восьми равносторонних треугольных граней

Форма	Название	Описание
	кубический тетраэдр	форма, состоящая из четырех равносторонних треугольных граней
	тригонритетраэдр	форма, производная из тетраэдра: на каждой грани тетраэдра по три грани в виде равнобедренного треугольника
	тетрагонритетраэдр	форма, производная из тетраэдра: на каждой грани тетраэдра по три неправильных четырехугольника
	пентагонритетраэдр	форма, производная из тетраэдра: на каждой грани тетраэдра по три пятиугольника
	ромбододекаэдр	форма, состоящая из двенадцати граней в виде ромба

Форма	Название	Описание
	пентагондодекаэдр	форма, состоящая из двенадцати пятиугольников
	тетрагексаэдр	форма, производная из куба: на каждой грани куба по четыре равнобедренных треугольника
	гексатетраэдр	форма, производная из тетраэдра: на каждой грани тетраэдра по шесть равнобедренных треугольников
	дидодекаэдр	двадцатичетырехгранник
	тетрагонтриоктаэдр	форма, производная из октаэдра: на каждой грани октаэдра по три неправильных четырехугольника

Форма	Название	Описание
	тригонтриоктаэдр	форма, производная из октаэдра: на каждой грани октаэдра по три грани в виде равнобедренных треугольников
	пентагонтриоктаэдр	форма, производная из октаэдра: на каждой грани октаэдра по три пятиугольника
	гексаоктаэдр	48-гранник

Таблица 2

Варианты для выполнения задания п. 2

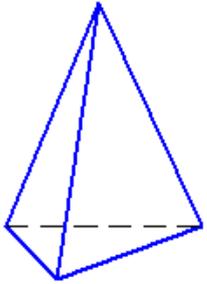
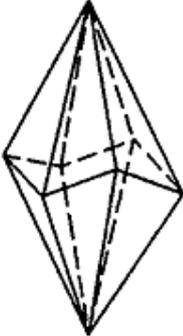
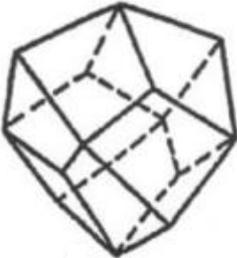
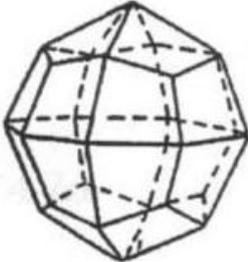
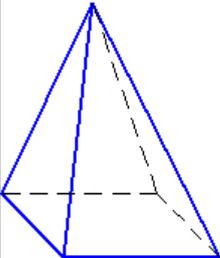
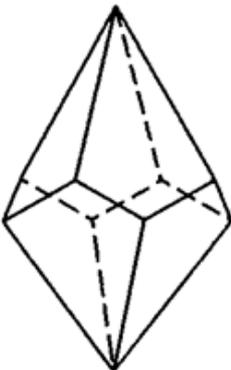
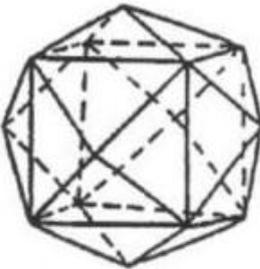
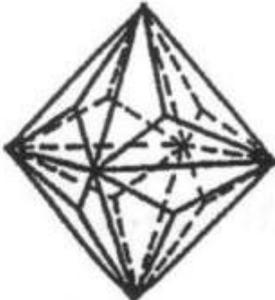
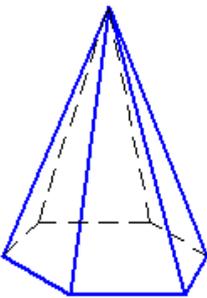
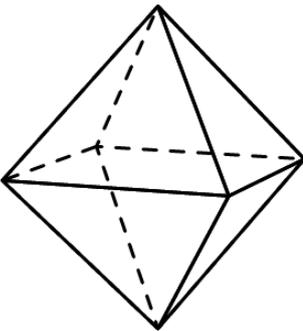
Вариант 1			
			
Вариант 2			
			
Вариант 3			
			

Таблица 3

Варианты для выполнения задания п. 4

1 вариант	пентагонтриоктаэдр
2 вариант	гексаоктаэдр
3 вариант	тригонритетраэдр

## Приложение 2

Таблица 1

### Поправка $\Delta$ на поглощение в образце радиусом $\rho$

$\Theta$	$\rho$									
	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60
10	0,29	0,39	0,49	0,58	0,68	0,78	0,87	0,97	1,07	1,16
12	0,29	0,38	0,48	0,57	0,67	0,76	0,86	0,96	1,05	1,14
14	0,28	0,38	0,47	0,56	0,66	0,75	0,85	0,94	1,03	1,13
16	0,28	0,38	0,46	0,55	0,65	0,74	0,83	0,92	1,02	1,11
18	0,27	0,37	0,45	0,54	0,63	0,72	0,81	0,90	1,00	1,09
20	0,27	0,35	0,44	0,53	0,62	0,71	0,80	0,89	0,97	1,06
22	0,26	0,34	0,43	0,52	0,60	0,69	0,77	0,86	0,95	1,03
24	0,25	0,33	0,42	0,50	0,58	0,67	0,75	0,84	0,92	1,00
26	0,24	0,32	0,41	0,49	0,57	0,65	0,73	0,81	0,88	0,97
28	0,23	0,31	0,39	0,47	0,55	0,62	0,70	0,78	0,86	0,96
30	0,23	0,30	0,38	0,45	0,52	0,60	0,68	0,75	0,83	0,90
32	0,22	0,29	0,36	0,43	0,50	0,58	0,65	0,72	0,79	0,86
34	0,21	0,28	0,35	0,41	0,48	0,55	0,62	0,69	0,76	0,82
36	0,20	0,26	0,33	0,39	0,46	0,52	0,59	0,66	0,72	0,78
38	0,19	0,25	0,31	0,37	0,43	0,50	0,56	0,62	0,68	0,74
40	0,18	0,23	0,29	0,35	0,41	0,47	0,53	0,59	0,64	0,70
42	0,17	0,22	0,27	0,33	0,39	0,44	0,49	0,55	0,61	0,66
44	0,16	0,21	0,26	0,31	0,36	0,42	0,47	0,52	0,57	0,62
46	0,14	0,19	0,24	0,29	0,34	0,38	0,43	0,48	0,53	0,58
48	0,14	0,18	0,22	0,27	0,32	0,36	0,40	0,45	0,49	0,54
50	0,12	0,17	0,21	0,25	0,29	0,33	0,37	0,41	0,46	0,50
52	0,11	0,15	0,19	0,23	0,27	0,30	0,34	0,38	0,42	0,46
54	0,10	0,14	0,17	0,21	0,24	0,28	0,31	0,34	0,38	0,41
56	0,09	0,13	0,16	0,19	0,22	0,25	0,28	0,32	0,35	0,38
58	0,08	0,11	0,14	0,17	0,20	0,22	0,25	0,28	0,32	0,34
60	0,08	0,10	0,13	0,15	0,18	0,20	0,22	0,25	0,27	0,30
65	0,05	0,07	0,09	0,11	0,13	0,14	0,16	0,18	0,20	0,22
70	0,03	0,05	0,06	0,07	0,08	0,09	0,10	0,12	0,13	0,14
75	0,02	0,03	0,03	0,04	0,05	0,05	0,06	0,07	0,07	0,08
80	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02	0,03	0,03	0,03	0,03	0,04

Таблица 2

## Межплоскостные расстояния

HKL	d/n	J	HKL	d/n	J	HKL	d/n	J
<b>Al</b>			<b>Cu</b>			<b>Pb</b>		
111	2,330	1,00	111	2,080	1,00	111	2,850	1,00
200	2,020	0,40	200	1,798	0,86	200	2,470	0,50
220	1,430	0,30	220	1,271	0,71	220	1,740	0,50
311	1,219	0,30	311	1,083	0,86	311	1,490	0,50
222	1,168	0,07	222	1,038	0,56	222	1,428	0,17
400	1,011	0,02	400	0,900	0,29	331	1,134	0,17
331	0,928	0,04	331	0,826	0,56	420	1,050	0,17
420	0,826	0,01	420	0,806	0,42	<b><math>\alpha</math> - Fe</b>		
422	0,905	0,04	422	0,735	0,42	110	2,010	1,00
<b>Ag</b>			<b>W</b>			200	1,428	0,15
111	2,360	1,00	110	2,230	1,00	211	1,166	0,38
200	2,040	0,53	200	1,580	0,29	220	1,010	0,10
220	1,445	0,27	211	1,290	0,71	310	0,904	0,08
311	1,232	0,53	220	1,117	0,17	222	0,825	0,03
222	1,179	0,05	310	1,000	0,29	321	0,764	0,10
400	1,022	0,01	222	0,913	0,06	330	0,673	0,03
311	0,938	0,08	321	0,846	0,34	420	0,638	0,09
420	0,915	0,05	330	0,745	0,11	<b>Zn</b>		
422	0,834	0,03	420	0,707	0,06	002	2,460	0,25
511	0,786	0,04	332	0,674	0,06	100	2,300	0,20
440	0,691	0,04	510	0,622	0,06	101	2,080	1,00
<b>Cr</b>			<b>Ni</b>			102	1,680	0,14
110	2,052	1,00	111	2,038	1,00	110	1,330	0,18
200	1,436	0,40	200	1,766	0,50	112	1,169	0,12
211	1,172	0,60	220	1,250	0,40	201	1,120	0,08
220	1,014	0,50	311	1,067	0,60	202	1,040	0,02
310	0,909	0,60	222	1,022	0,10	203	0,941	0,02
222	0,829	0,20	400	0,884	0,02	105,114	0,904	0,02
321	0,768	0,70	331	0,812	0,20	<b>Pt</b>		
400	0,718	0,10	420	0,791	0,16	111	2,250	1,00
330	0,6775	0,40	422	0,723	0,10	200	1,950	0,30
420	0,642	0,30	511	0,681	0,10	220	1,385	0,16
332	0,612	0,30	410	0,625	0,02	311	1,178	0,16
422	0,5865	0,30	531	0,598	0,08	222	1,128	0,03
			422	0,590	0,07	400	0,978	0,01
						331	0,897	0,03

## Приложение 3

Таблица 1

### Размеры ионных радиусов для одновалентных ионов

Размеры ионных радиусов, Å								
Li <sup>1+</sup>	Cu <sup>1+</sup>	Na <sup>1+</sup>	Ag <sup>1+</sup>	K <sup>1+</sup>	Au <sup>1+</sup>	Ti <sup>1+</sup>	Rb <sup>1+</sup>	Cs <sup>1+</sup>
0,78	0,96	0,98	1,33	1,33	1,37	1,49	1,49	1,65

Таблица 2

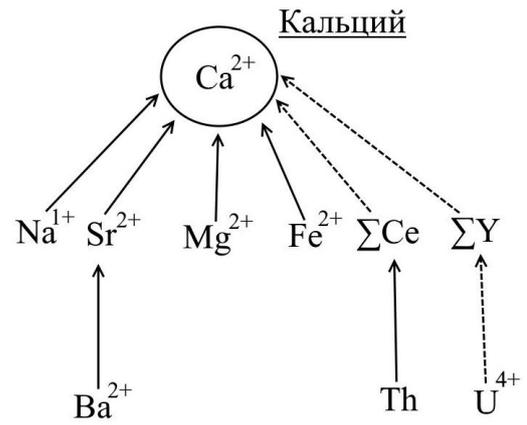
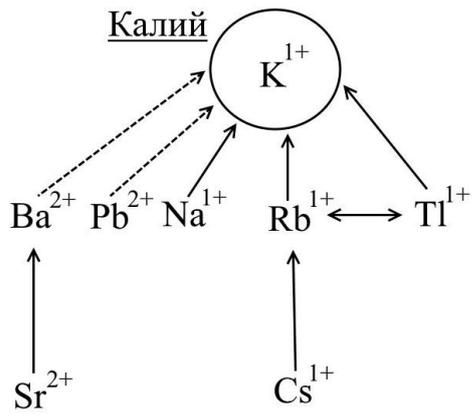
### Размеры ионных радиусов для двухвалентных ионов

Размеры ионных радиусов, Å									
Be <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Fe <sup>2+</sup>	Zn <sup>2+</sup>	Ni <sup>2+</sup>	Co <sup>2+</sup>	Mn <sup>2+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Sr <sup>2+</sup>	Ba <sup>2+</sup>
0,34	0,78	0,83	0,83	0,78	0,82	0,91	1,05	1,27	1,43

Таблица 3

### Гетеровалентные замещения минералов

Замещаемая группа	Замещающая группа	Примеры минералов
Ca <sup>2+</sup> Al <sup>3+</sup>	Na <sup>1+</sup> Si <sup>4+</sup>	Плагиоклазы, скаполиты
Ca <sup>2+</sup> Ca <sup>2+</sup>	Na <sup>1+</sup> TR <sup>3+</sup>	Апатит, перовскит
Ca <sup>2+</sup> Ti <sup>4+</sup>	Na <sup>1+</sup> Nb <sup>5+</sup>	Перовскит, лопарит, сфен
Ca <sup>2+</sup> Mg <sup>2+</sup>	Na <sup>1+</sup> Al <sup>3+</sup>	Актинолит
Mg <sup>2+</sup> Mg <sup>2+</sup>	Li <sup>1+</sup> Al <sup>3+</sup>	Биотит, лепидолит, роговая обманка
Mg <sup>2+</sup> Si <sup>4+</sup>	Al <sup>3+</sup> Al <sup>3+</sup>	Авгит, роговая обманка



————— Изовалентные замещения  
 - - - - - Гетеровалентные замещения

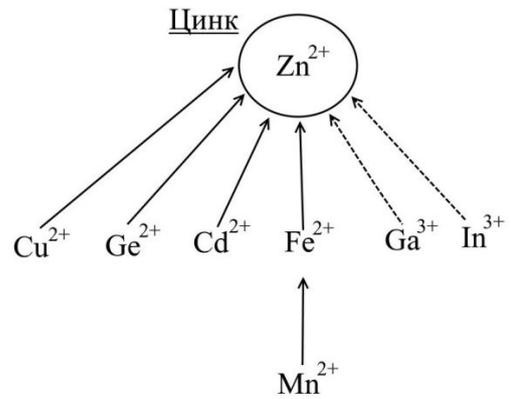
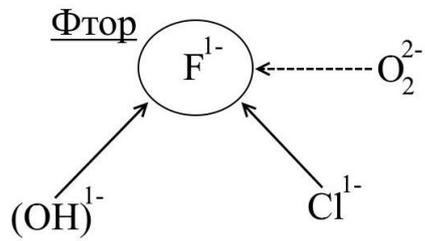


Рис. 1. Схемы А. И. Гинзбурга

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аникина, В. И. Основы кристаллографии и дефекты кристаллического строения [Электронный ресурс]: Практикум / В. И. Аникина, А. С. Сапарова. - Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2011. – 148 с. – ISBN 978-5-7638-2195-6. <http://znanium.com/bookread2.php?book=441367>

(вход для зарегистрированных пользователей)

2. Брагина, В. И. Кристаллография, минералогия и обогащение полезных ископаемых [Электронный ресурс]: учеб. пособие / В. И. Брагина. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2012. – 152 с. – ISBN 978-5-7638-2647-0. <http://znanium.com/bookread2.php?book=492236> (вход для зарегистрированных пользователей)

3. Васильев, Д. М. Физическая кристаллография: учеб. пособие для металлург. специальностей вузов / Д. М. Васильев. – Изд. 2-е, перераб. и доп. – М.: Металлургия, 1981. – 248 с.

4. Вегман, Е. Ф. Кристаллография, минералогия, петрография и рентгенография: учеб. пособие для вузов / Е. Ф. Вегман, Ю. Г. Руфанов, И. Н. Федорченко. – М.: Металлургия, 1990. – 262 с. – ISBN 5-229-00516-5.

5. Гумилевский, С. А. Кристаллография и минералогия: учеб. пособие для вузов / С. А. Гумилевский, В. М. Киршон, Г. П. Луговской; под ред. А. И. Гинзбурга. – М.: Высш. шк., 1972. – 280 с.

6. Егоров-Тисменко, Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия: учеб. для вузов по специальности "Геология" / Ю. К. Егоров-Тисменко. – М.: Книжный дом "Университет" (КДУ), 2005. – 587 с. – ISBN 5-98227-095-4.

7. Картонова, Л. В. Основы материаловедения металлических и неметаллических веществ: учеб. пособие / Л. В. Картонова, В. А. Кечин; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир: Изд-во ВлГУ, 2014. – 176 с. Издание на др. носителе: Основы материаловедения металлических и неметаллических веществ [Электронный ресурс], ISBN 978-5-9984-0503-7.

<http://e.lib.vlsu.ru/bitstream/123456789/4028/1/01404.pdf>

8. Картонова Л. В. Основы кристаллографии: учеб. пособие / Л. В. Картонова; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир: Изд-во ВлГУ, 2016. – 84 с. Издание на др. носителе: Основы кристаллографии [Электронный ресурс], ISBN 978-5-9984-0672-0. <http://e.lib.vlsu.ru/bitstream/123456789/5108/1/01545.pdf>

9. Кристаллография и минералогия. Основные понятия/ Бойко С.В. - Краснояр.: СФУ, 2015. - 212 с.: ISBN 978-5-7638-3223-5 <http://znanium.com/bookread2.php?book=550292> (вход для зарегистрированных пользователей)

10. Лахтин, Ю. М. Материаловедение: учеб. для вузов / Ю. М. Лахтин, В. П. Леонтьева. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Машиностроение, 1990. – 528 с. – ISBN 5-217-00858-X. – (Сер. Для вузов).

11. Материаловедение: учеб. для вузов / Б. Н. Арзамасов [и др.]; под ред. Б. Н. Арзамасова. – Изд. 3-е, перераб. и доп. – М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2001. – 646 с. – ISBN 5-7038-1860-5. – (Сер. Учебник для технических вузов).

12. Попов, Г. М. Кристаллография: учеб. для вузов / Г. М. Попов, И. И. Шафрановский. – Изд. 5-е, испр. и доп. – М.: Высш. шк., 1972. – 352 с.

13. Розин, К. М. Кристаллография и кристаллохимия. Раздел: Индицирование плоскостей и направлений в кристаллах: учеб. пособие для студентов всех специальностей фак. полупроводниковых материалов и приборов / К. М. Розин, В. С. Петраков ; Моск. гос. ин-т стали и сплавов (Технолог. ун-т) (МИСиС), Каф. физики кристаллов. – М.: [Б. и.], 2001. – 87 с.

14. Савельева, А. Д. Кристаллография и минералогия: учеб. пособие: в 3 ч. / А. Д. Савельева, П. В. Нарциссова; Владим. гос. ун-т. – Владимир: Изд-во ВлГУ, 2003. – Ч. 1. – 71 с. – ISBN 5-89368-407-9.

15. Солнцев, Ю. П. Материаловедение: учеб. для вузов по металлург., машиностроит. и общетехн. специальностям / Ю. П. Солнцев, Е. И. Пряхин; под ред. Ю. П. Солнцева. – Изд. 3-е, перераб. и доп. – СПб.: Химиздат, 2004. – 735 с. – ISBN 5-93808-075-4. – (Сер. Учебник для вузов).

16. Торопов, Н. А. Кристаллография и минералогия: учеб. для химико-технолог. специальностей вузов / Н. А. Торопов, Л. Н. Булак. – Изд. 3-е, перераб. и доп. – Л.: [Стройиздат], 1972. – 503 с.

17. Чупрунов, Е. В. Кристаллография: учеб. для вузов по физ. и хим. специальностям / Е. В. Чупрунов, А. Ф. Хохлов, М. А. Фаддеев. – М.: Физматлит, 2000. – 496 с. – ISBN 5-94052-020-0.

18. Шаскольская, М. П. Кристаллография: учеб. для техн. вузов / М. П. Шаскольская. – М.: Высш. шк., 1976. – 392 с.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение .....	3
<b>РАБОТА № 1.</b>	
Изучение процесса роста кристаллов.	
Кристаллизация азотнокислого свинца .....	5
<b>РАБОТА № 2.</b>	
Изучение простых форм кристаллических многогранников .....	9
<b>РАБОТА № 3.</b>	
Изучение симметрии кристаллических многогранников (симметрии континуума) .....	15
<b>РАБОТА № 4.</b>	
Анализ пространственных решеток.	
Определение кристаллографических индексов плоскостей .....	19
<b>РАБОТА № 5.</b>	
Изучение методов рентгеноструктурного анализа.	
Расчет межплоскостных расстояний и рентгеновской плотности вещества .....	26
<b>РАБОТА № 6.</b>	
Рентгенофазовый анализ поликристаллического вещества .....	34
<b>РАБОТА № 7.</b>	
Изучение типов изоморфных замещений .....	41
<b>РАБОТА № 8.</b>	
Изучение строения и свойств минералов .....	47
Приложение 1 .....	54
Приложение 2 .....	62
Приложение 3 .....	64
Библиографический список .....	66