

# РАСЧЁТ ПЛОТНОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

## 1. Введение

Плотность – одно из наиболее важных свойств материалов, характеризующее соотношение между массой и объёмом и в значительной мере определяющее их технологическое применение.

Плотность, определённая для однородных веществ, может рассматриваться как **теоретическая**. Плотностью, близкой к теоретической, обладают, как правило, металлы, жидкости, некоторые полимеры. Для неоднородных веществ применяют понятие **средней плотности**. Теоретическая плотность кристаллических веществ может быть наиболее точно определена с помощью рентгенографического метода. Рассчитанная таким способом плотность называется **рентгенографической**.

**Цель работы** – изучить методику расчёта плотности кристаллических веществ, используя результаты рентгенографического эксперимента, и рассчитать рентгенографическую плотность заданного кристаллического вещества (металла).

## 2. Краткая теория

В природе твёрдые тела могут находиться в двух состояниях: кристаллическом и аморфном. В аморфных твёрдых телах частицы (атомы или молекулы) располагаются беспорядочно, произвольным образом. Для кристаллических твёрдых веществ характерным является упорядоченное периодическое расположение атомов, ионов или молекул в пространстве. Металлы, а также их сплавы, находящиеся в твёрдом состоянии, относятся к кристаллическим веществам.

Строение кристаллического вещества графически изображается в виде кристаллической решетки, состоящей из элементарных ячеек. По признаку симметрии элементарные ячейки подразделяются на семь **сингоний**: кубическую, гексагональную, тетрагональную, тригональную, ромбическую, моноклинную и триклинную. Каждая сингония характеризуется определённым соотношением между длинами  $a$ ,  $b$ ,  $c$  рёбер и углами  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  между ними (см. рисунок 1). Эти величины называются **параметрами элементарной ячейки**.

Для определения рентгенографической плотности кристаллического вещества необходимо знать объём элементарной ячейки кристалла, число атомов в ней, и массу этих атомов.

Объём элементарной ячейки кристаллического вещества определяется исходя из её сингонии и геометрических соображений, и может быть вычислен через параметры элементарной ячейки согласно формуле

$$V_0 = abc\sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}. \quad (1)$$

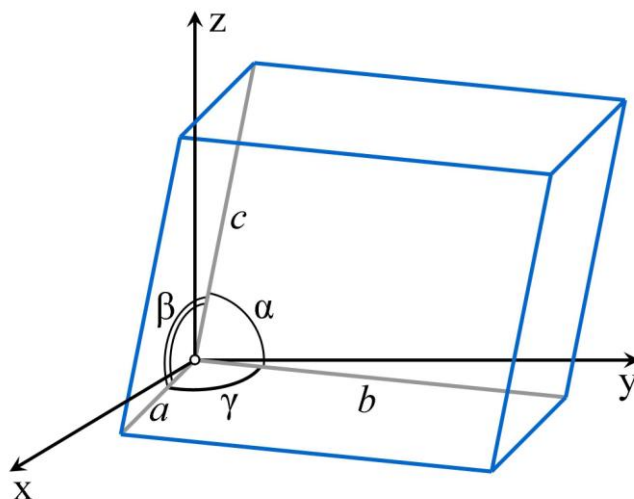


Рисунок 1. Параметры элементарной ячейки

Большинство металлов образуют решётки трёх типов: объёмно-центрированную кубическую (ОЦК), гранецентрированную кубическую (ГЦК) и гексагональную плотно упакованную (ГПУ). Зная вид кристаллической решётки, можно рассчитать число атомов в элементарной ячейке. На одну элементарную ячейку ОЦК-решётки приходится два атома: один в центре куба, а другой – в вершине куба. На элементарную ячейку ГЦК-решётки приходится четыре атома: один из них образуется за счёт атома в вершине куба, а три других – атомы, находящиеся в серединах граней. На элементарную ячейку ГПУ-решётки приходится шесть атомов.

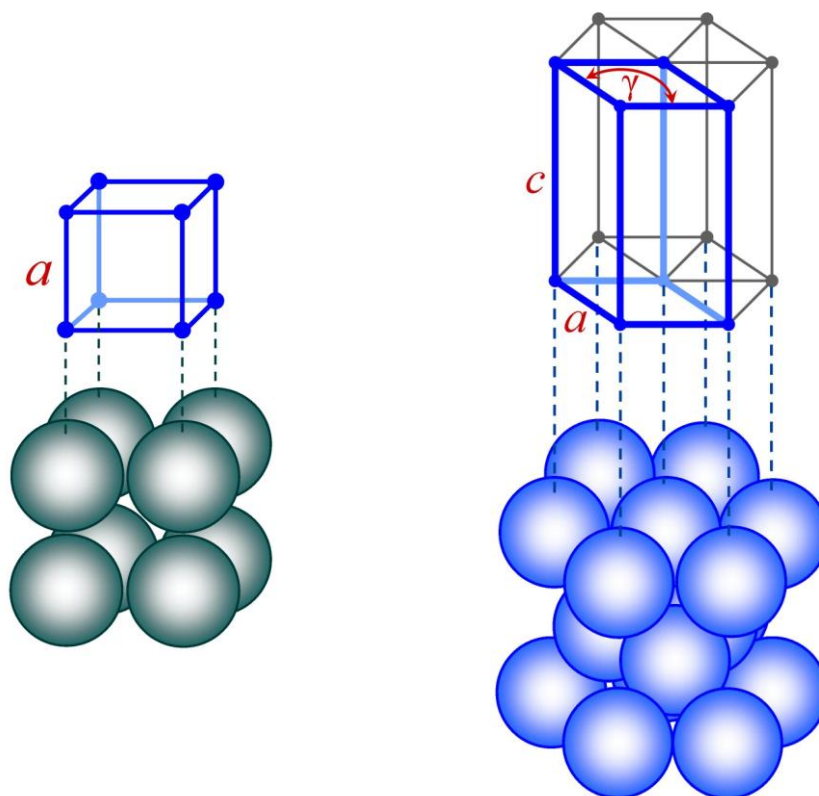


Рисунок 2. Элементарные ячейки кубической (слева) и гексагональной (справа) сингоний

Значение рассчитанной таким образом рентгенографической плотности кристаллического материала характеризует идеализированную кристаллическую решётку с реальными параметрами. Справочные значения плотности веществ, как правило, будут отличаться от рентгенографической в большую или меньшую сторону.

### 3. Практическая часть

#### 3.1 Порядок расчёта.

- 3.1.1 Получить у преподавателя вариант индивидуального задания в соответствии с пунктом 3.2.
- 3.1.2 Рассчитать рентгенографическую плотность вещества. Число атомов в ячейке определить, исходя из сведений о кристаллической структуре предложенного преподавателем вещества. Объём элементарной ячейки вычислить по формуле (1).
- 3.1.3 Сравнить полученные результаты расчёта со справочными данными, приведёнными в таблице 1 пункта 3.2.

### 3.2 Перечень кристаллических материалов (металлов) для выполнения индивидуального задания.

Таблица 1

№ варианта	Название вещества, атомная масса	Сингония	Кристаллическая решётка	Параметры	Плотность, кг/м <sup>3</sup>
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>
1	<b>Ванадий (V),</b> 50,94 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 3,024 \text{ \AA}$	6 110
	<b>Золото (Au),</b> 196,97 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 4,078 \text{ \AA}$	19 300
	<b><math>\alpha</math>-Скандий (Sc<sub><math>\alpha</math></sub>),</b> 44,96 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 3,309 \text{ \AA}$ $c = 5,268 \text{ \AA}$	2 990
2	<b>Хром (Cr),</b> 52,90 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 2,885 \text{ \AA}$	7 190
	<b>Свинец (Pb),</b> 207,20 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 4,950 \text{ \AA}$	11 340
	<b>Рений (Re),</b> 186,21 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,761 \text{ \AA}$ $c = 4,456 \text{ \AA}$	21 020
3	<b><math>\alpha</math>-Железо (Fe<sub><math>\alpha</math></sub>),</b> 55,85 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 2,866 \text{ \AA}$	7 870
	<b>Алюминий (Al),</b> 26,98 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 4,041 \text{ \AA}$	2 700
	<b>Цинк (Zn),</b> 65,39 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,665 \text{ \AA}$ $c = 4,947 \text{ \AA}$	7 130
4	<b>Молибден (Mo),</b> 95,94 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 3,147 \text{ \AA}$	10 220
	<b>Никель (Ni),</b> 58,69 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 3,524 \text{ \AA}$	8 900
	<b><math>\alpha</math>-Титан (Ti<sub><math>\alpha</math></sub>),</b> 47,88 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,951 \text{ \AA}$ $c = 4,697 \text{ \AA}$	4 540
5	<b>Ниобий (Nb),</b> 92,91 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 3,301 \text{ \AA}$	8 570
	<b>Серебро (Ag),</b> 107,87 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 4,086 \text{ \AA}$	10 500
	<b>Магний (Mg),</b> 24,31 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 3,103 \text{ \AA}$ $c = 5,200 \text{ \AA}$	1 740
6	<b>Тантал (Ta),</b> 180,95 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 3,310 \text{ \AA}$	16 650
	<b>Медь (Cu),</b> 63,55 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 3,615 \text{ \AA}$	8 920
	<b>Кобальт (Co),</b> 58,93 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,505 \text{ \AA}$ $c = 4,089 \text{ \AA}$	8 900
7	<b>Вольфрам (W),</b> 183,84 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 3,160 \text{ \AA}$	19 250
	<b>Платина (Pt),</b> 195,08 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 3,924 \text{ \AA}$	21 450
	<b>Иттрий (Y),</b> 88,91 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 3,647 \text{ \AA}$ $c = 5,731 \text{ \AA}$	4 470

<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>
8	<b>Литий</b> (Li), 6,94 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 3,490 \text{ \AA}$	530
	<b>Родий</b> (Rh), 102,91 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 3,803 \text{ \AA}$	12 410
	<b>Цирконий</b> (Zr), 91,22 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 3,231 \text{ \AA}$ $c = 5,148 \text{ \AA}$	6 510
9	<b>Натрий</b> (Na), 22,99 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 4,282 \text{ \AA}$	970
	<b>Палладий</b> (Pd), 106,42 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 3,890 \text{ \AA}$	12 020
	<b>Технеций</b> (Te), 97,91 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,737 \text{ \AA}$ $c = 4,391 \text{ \AA}$	11 500
10	<b>Калий</b> (K), 39,10 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 5,332 \text{ \AA}$	860
	<b>Иридий</b> (Ir), 192,22 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 3,840 \text{ \AA}$	22 650
	<b>Рутений</b> (Ru), 101,07 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,706 \text{ \AA}$ $c = 4,282 \text{ \AA}$	12 410
11	<b>Рубидий</b> (Rb), 85,47 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 5,710 \text{ \AA}$	1 530
	<b>Церий</b> (Ce), 140,12 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 5,160 \text{ \AA}$	6 760
	<b>Кадмий</b> (Cd), 112,41 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,979 \text{ \AA}$ $c = 5,618 \text{ \AA}$	8 650
12	<b>Цезий</b> (Cs), 132,91 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 6,140 \text{ \AA}$	1 870
	<b>Кальций</b> (Ca), 40,08 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 5,580 \text{ \AA}$	1 550
	<b>Осмий</b> (Os), 190,23 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,734 \text{ \AA}$ $c = 4,317 \text{ \AA}$	22 590
13	<b>Барий</b> (Ba), 137,33 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 5,020 \text{ \AA}$	3 500
	<b>Стронций</b> (Sr), 87,62 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 6,080 \text{ \AA}$	2 540
	<b>Гафний</b> (Hf), 178,49 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 3,196 \text{ \AA}$ $c = 5,054 \text{ \AA}$	13 310
14	<b>Радий</b> (Ra), 226,03 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 5,148 \text{ \AA}$	5 500
	<b>Иттербий</b> (Yb), 173,05 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 5,490 \text{ \AA}$	6 970
	<b>Бериллий</b> (Be), 9,01 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 2,286 \text{ \AA}$ $c = 3,584 \text{ \AA}$	1 850
15	<b>Европий</b> (Eu), 151,96 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 4,501 \text{ \AA}$	5 240
	<b>Актиний</b> (Ac), 227,03 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 5,670 \text{ \AA}$	10 070
	<b>Таллий</b> (Tl), 204,38 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 3,456 \text{ \AA}$ $c = 5,525 \text{ \AA}$	11 850
16	<b>β-Титан</b> (Ti <sub>β</sub> ), 47,87 а.е.м.	Кубическая	ОЦК	$a = 3,269 \text{ \AA}$	4 320
	<b>Торий</b> (Th), 232,04 а.е.м.	Кубическая	ГЦК	$a = 5,080 \text{ \AA}$	11 780
	<b>Празеодим</b> (Pr), 140,91 а.е.м.	Гексагональная	ГПУ	$a = 3,673 \text{ \AA}$ $c = 11,840 \text{ \AA}$	6 770

## Требования к оформлению отчёта

Результаты выполнения студентом лабораторной работы представляются преподавателю в виде письменного отчёта, выполненного на листе формата А4 или близкого к нему формата. В отчёте обязательно указываются фамилия и инициалы студента, выполнившего работу, дата выполнения работы, номер лабораторной работы, её название, цель, а также полностью указываются те исходные данные, которые были предоставлены преподавателем для выполнения работы, в том числе зарисовывается вид элементарной ячейки кристалла, для которого будут проводиться расчёты. Далее в произвольной форме записывается весь ход вычислений и расчётов, а также полученный конечный результат. Отчёт о лабораторной работе обязательно завершается выводом, который делается на основании полученных студентом результатов вычислений и сравнения этих результатов с табличными значениями соответствующих характеристик вещества. Отчёт сдаётся преподавателю для проверки, и может быть не принят и отправлен на доработку в случае наличия ошибок, неполноты представленных промежуточных вычислений и т.п. После принятия отчёта преподавателем студент обязан пройти процедуру защиты выполненной им лабораторной работы, для того, чтобы она считалась зачётной. По итогам проверки отчёта и защиты работы преподавателем выставляется оценка по работе, которая будет учитываться при вычислении итоговой оценки по данному спецкурсу.

### Пример оформления отчёта

___. ___. 2016	_____ (Ф.И.О.)
Лабораторная работа № ____	
_____ (название работы)	
<b>Цель:</b> _____	
<b>Вариант №</b> _____	
<b>Исходные данные:</b>	1) _____ 2) _____ 3) _____
<div style="border: 1px dashed black; width: 200px; height: 80px; margin: 0 auto;"></div>	
Рисунок № _____. _____ (название рисунка)	
<b>Вычисления</b>	
<b>Результат</b>	
<b>Вывод</b>	