МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Л.М. Монастырский

МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА СТРОЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТЕЛ В КУРСЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ

Учебно-методическое пособие

Ростов-на-Дону
2016

Учебно-методическое пособие разработано профессором физического факультета Южного федерального университета Л.М.Монастырским.

Ответственный редактор – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей физики физического факультета Южного федерального университета, профессор А.С. Богатин

Компьютерный набор и верстка Л.М.Монастырского

Печатается в соответствии с решением Учебно-методического совета Физического факультета Южного федерального университета, протокол № 2 от 15 ноября 2016 г.

Методические указания содержат теорию строения кристаллических тел, примеры решения задач в рамках программы курса общей физики и подбор задач для самостоятельного решения.

Сборник задач предназначен для аудиторных и домашних занятий студентов естественнонаучных специальностей всех факультетов университетов. Сборник составлен на основе задачников по физике, используемых в средних общеобразовательных и высших учебных заведениях. Задачи снабжены ответами.

Подавляющее большинство твердых тел в природе имеет кристаллическое строение. Так, например, почти все минералы и все металлы в твердом состоянии являются кристаллами.

Характерная черта кристаллического строения, отличающая его от жидкого и газообразного состояния, заключается в наличии ***анизотропии***, т.е. зависимости ряда физических свойств (механических, тепловых, электрических, оптических) от направления.

Тела, свойства которых одинаковы по всем направлениям, называется ***изотропными***. Изотропны, кроме газов и, за отдельными исключениями, всех жидкостей, также аморфные твердые тела. Причиной анизотропии кристаллов служат упорядоченное расположение частиц (атомов или молекул), из которых они построены, упорядоченное расположение частиц проявляется в правильной внешней огранке кристаллов. Кристаллы ограниченны плоскими гранями, пересекающимися под некоторыми определенными для каждого данного рода кристаллов, углами. Раскалывание кристаллов легче происходит по определенным плоскостям, называемым плоскостями спайности.

Основной особенностью кристаллов, отличающих их от жидкостей и аморфных твердых тел, является периодичность пространственного расположения атомов молекул или ионов, из которых состоит кристалл. Совокупность таких периодически расположенных атомов (молекул, ионов) образует периодическую структуру, называемую ***кристаллической решеткой***. Точки, в которых расположены сами атомы, называются ***узлами кристаллической решетки***. Кристалл имеет прерывную периодическую структуру. С геометрической точки зрения такое периодически повторяющееся расположение частиц можно осуществить с помощью операции параллельного перемещения, которое называется трансляцией.

Представим себе, что мы перемещаем некоторую точку $\boldsymbol{p_0}$ (рис.1) вдоль прямой на расстояние $\boldsymbol{a}$ в положение $\boldsymbol{p_1}$, затем на такое же расстояние в положение $\boldsymbol{p_2}$ и т.д.

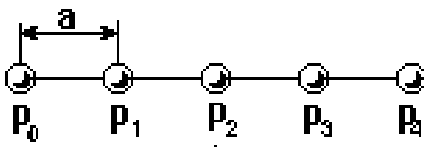
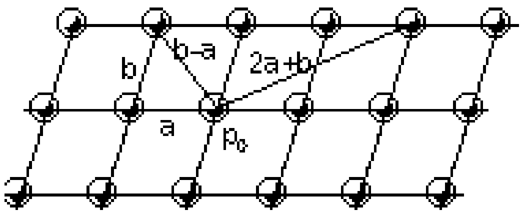


рис.1

С помощью трансляции $\boldsymbol{a}$ мы получаем ряд точек или одномерную цепочку точек. Трансляция $\boldsymbol{a}$ может быть представлена вектором, имеющим определенное направление и численное значение, равное $\boldsymbol{a}$, называемое ***периодом трансляции***. Понятно, что при помощи вектора трансляции $\boldsymbol{a}$ можно представить бесчисленное множество параллельных перемещений - ***2a, 3a*** и т.д., в общем случае ***ma*** трансляций, из которых ***a***- наименьшее.

Если повернуть точку p_0 по действию одновременно двух операций трансляции a и b , то в результате получится не ряд точек, а плоская сетка (рис.2).

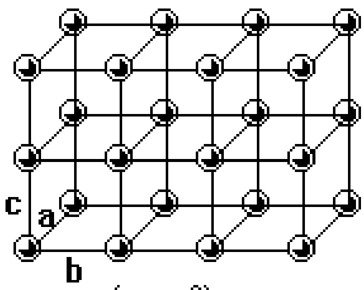


(рис 2)

Положение любой точки на этой сетке определяется векторной суммой $ma+nb$, где n и m - целые числа (включая нуль) Если наконец точка p_0 подвергается одновременно трем различным трансляциям a,b и c, то получится так называемая ***пространственная решетка.***

Положение любой точки определяется в этом случае соответствующей комбинацией перемещений $ma+nb+pc$.

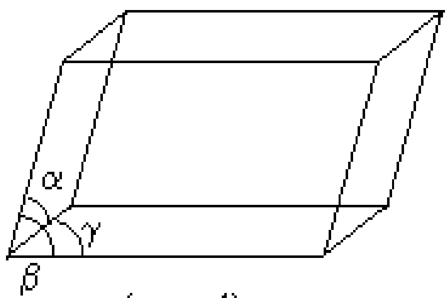
Комбинация трех векторов a,b и c , называется ***трансляционной группой.*** Параллелепипед, образованный векторами a,b и c , называются ***элементарной ячейкой*** (рис. 3).



(рис. 3)

В каждой плоскости, проходящей через три любые точки пространственной решетки, точки (частицы) расположены в правильном порядке, образуя плоскую сетку.

Этот параллелепипед,~~д~~ кроме ребер ***a, b, c,*** характеризуется также углами α, β и γ между ребрами (рис. 4).



(рис. 4)

Вектор трансляции ***a,b*** и ***c*** - это межатомное расстояние в кристаллической решетке. Их численные значения обычно порядка 10^{-8} см.

Кристаллическая ячейка, включающая наименьшее число атомов, характеризующих химический состав кристаллического вещества (например, один атом кислорода и два атома водорода для кристалла льда), называется ***примитивной ячейкой***.

Классификация кристаллов

Кристаллическая решетка может обладать различными симметриями. Под симметрией кристаллической решетки понимается свойства решетки совладать самой собой при некоторых пространственных перемещениях.

Всякая решетка, прежде всего, обладает трансляционной симметрией, т.е. совпадает сама с собой при перемещении (трансляции) на величину периода идентичности.

Если решетка совпадает сама с собой при повороте вокруг некоторой оси на угол 2 П/n следовательно за один первый поворот вокруг оси решетка совпадает сама с собой n-раз, то решетка называется ***осью симметрии n-го порядка***. Плоскости при зеркальном отражении, от которых решетка совпадает сама с собой, называется ***плоскостями симметрии*** кристаллической решетки. Различные виды симметрии называются ***элементами симметрии***. В порядке возрастающей симметрии кристаллографические системы располагаются следующим образом:

1. ***Кристаллическая система***. Для нее характерно, что $a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$, элементарная ячейка имеет вид косоугольного параллелепипеда.

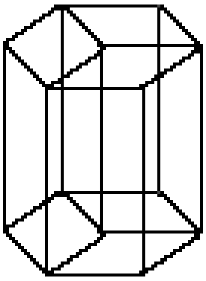
2. ***Моноклинная система***. Два угла – прямые, третий (в качестве которого принято выбирать угол β) отличен от прямого. Следовательно, $a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^0$, $\beta \neq 90^0$. Элементарная ячейка имеет форму прямой призмы, в основании которой лежит параллелограмм, (т.е. форму параллелепипеда).

3. ***Ромбическая система***. Все углы – прямые, все ребра – разные: $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^0$. Элементарная ячейка имеет форму прямоугольного параллелепипеда.

4. ***Тетрагональная система***. Все углы – прямые, два ребра – одинаковые: $a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^0$. Элементарная ячейка имеет форму прямой призмы с квадратным основанием.

5. ***Ромбоэдрическая*** (или ***тригональная***) ***система***. Все ребра одинаковые, все углы также одинаковые и отличные от прямого:
   $a = b = c\,;\, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$. Элементарная ячейка представляет собой форму куба деформированного сжатием или разжатием вдоль диагонали.

1. ***Гексагональная система***. Ребра и углы между ними удовлетворяют условиям: $a = b \neq c\,;\, \alpha = \beta = 90^0\,,\gamma = 120^0$. Если составить вместе три элементарные ячейки так как показано на рис.5, то получается правильная шестигранная призма.

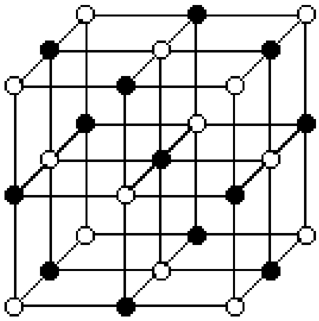


(Рис. 5)

2. ***Кубическая система***. Все ребра – одинаковые, все углы – прямые:
   $a = b = c\,;\; \alpha = \beta = \gamma = 90^0$. Элементарная ячейка имеет форму куба.

Физические типы кристаллических решеток

В зависимости от природы частиц, помещающихся в узлах кристаллической решетки, и от характера сил взаимодействия между частицами различают четыре типа кристаллических решеток и соответственно четыре типа кристаллов: ионные, атомные, металлические и молекулярные.
1. ***Ионные кристаллы***. В узлах кристаллической решетки помещаются ионы разных знаков. Сила взаимодействия между ними является в основном электростатическими (кулоновскими.) Связь, обусловленная электростатическими силами притяжения между разноименно заряженными ионами, называется ***гетерополярной*** (или ***ионной***). Типичным примером ионной решетки может служить изображенная на рис.6 решетка каменной соли ($NaCl$).



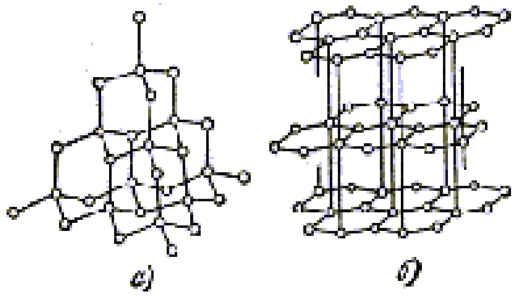
(Рис. 6)

Эта решетка принадлежит кубической системе. Белыми кружками изображены несущие положительный заряд ионы натрия, черными кружками – отрицательные ионы хлора. Как видно из рисунка, ближайшими соседями данного знака будут ионы противоположного знака. В газообразном состоянии NaCl состоит из молекул, в которых объединяются попарно ионы натрия с ионами хлора. Образующая молекулу группировка из иона Na и иона Cl утрачивает в кристалле обособленное существование. Ионный кристалл состоит не из молекул, а из ионов. Весь кристалл в целом можно рассматривать как одну гигантскую молекулу.

2. ***Атомные кристаллы***. В узлах кристаллической решетки помещаются нейтральные атомы. Связь, объединяющая в кристалле (а также и в молекуле) нейтральные атомы, называется ***гомеополярной*** (или ***ковалентной***). Силы взаимодействия при гомеополярной связи имеют также электрический (но не кулоновский) характер. Объяснение этих сил может быть дано только на основе квантовой механики.

Гомеополярная связь осуществляется электронными парами. Это означает, что в обеспечении связи между двумя атомами участвуют по одному электрону от каждого атома. По этой причине гомеополярная связь имеет направленный характер. При гетерополярной связи каждый ион воздействует на все достаточно близкий к нему ионы. При гомеополярной связи воздействие направленно на тот атом, с которым у данного атома имеется совместная электронная пара. Гомеополярная связь может осуществляться только валентными, т.е. наименее связанными с атомом, электронами. Поскольку каждый электрон может обеспечить связь только с одним атомом, число связей, в которых может участвовать данный атом (число соседей, с которыми он может быть связан) равно его валентности.

Типичными примерами атомных кристаллов могут служить алмаз и графит. Оба эти вещества тождественны по химической природе (они построены из атомов углерода), но отличаются кристаллическим строением. На рис.7,*а* показана решетка алмазов, на рис.7, *б* – решетка графита.



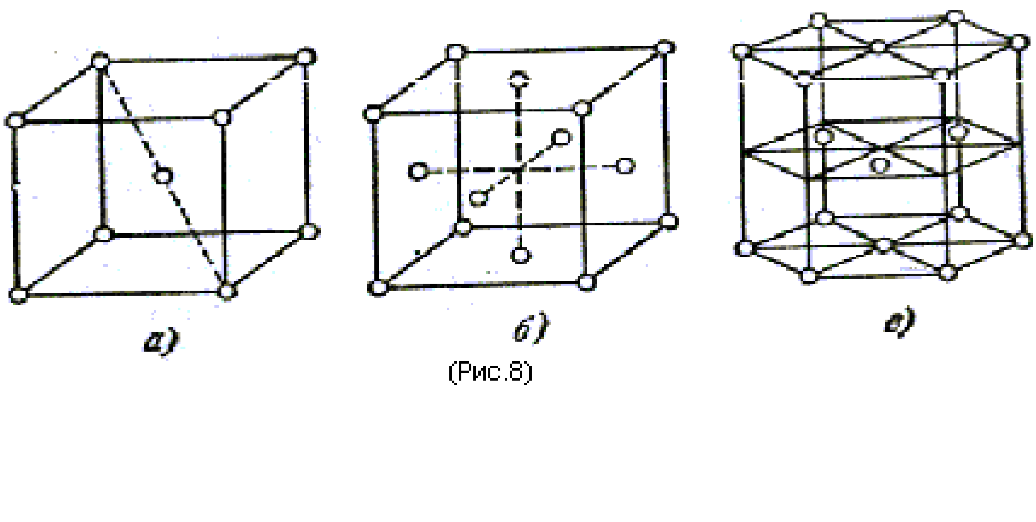
(Рис.7)

На этом примере отчетливо видно влияние кристаллической структуры на свойства вещества.

Такую же решетку, как у алмаза (решетку типа алмаза), имеют типичные полупроводники – германий (Ge) и кремний (Si). Для этой решетки характерно то, что каждый атом окружен четырьмя равноотстоящими от него соседями, расположенными в вершинах правильного тетраэдра. Каждый из четырех валентных электронов входит в электронную пару, связывающую данный атом с одним из соседей.

3. ***Металлический кристаллы***. Во всех узлах кристаллической решетки расположены положительные ионы металла. Между ними беспорядочно, подобно молекулам газа, движутся электроны, отщепившиеся от атомов при образовании ионов. Эти электроны играют роль «цемента», удерживая вместе положительные ионы; в противном случае решетка распалась бы под действием сил отталкивания между ионами. Вместе с тем и электроны удерживаются ионами в пределах кристаллической решетки и не могут ее покинуть.

Большинство металлов имеет решетки одного из трех типов: кубическую объемноцентрированную (рис.8,*а*), кубическую гранецентрированную (рис.8,*б*) и так называемую плотную гексагональную (рис.8,*в*).



(Рис.8)

Последняя представляет собой гексагональную решетку с отношением *c/a*, равным $\sqrt{8/3}$. Кубическая гранецентрированная и плотная гексагональная решетки соответствуют наиболее плотной упаковке одинаковых шаров.

4. ***Молекулярные кристаллы***. В узлах кристаллической решетки помещаются определенным образом ориентированные молекулы. Силы связи между молекулами в кристалле имеют ту же природу, что и силы притяжения между молекулами, приводящие к отклонению газов от идеальности. По этой причине их называют **ван-дер-ваальсовскими** силами. Молекулярные решетки образуют, например, следующие вещества: H2, N2, O2, CO2, H2O. Таким образом, обычный лед, а также так называемый сухой лед (твердая углекислота) представляют собой молекулярные кристаллы.

Следующий вопрос, который мы рассмотрим это вопрос о том, как рассчитать число атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку. Для этого обратимся, например, к ячейке следующего вида (рис.9).

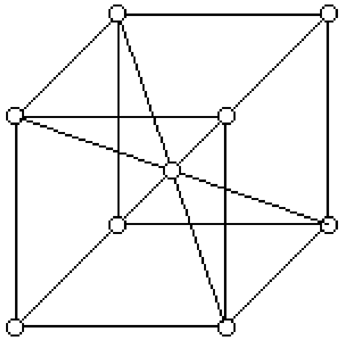


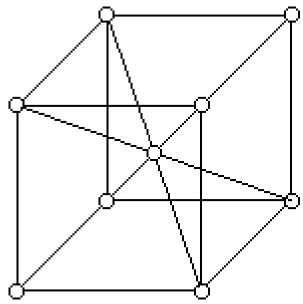
Рис.9

Определим сначала, скольким ячейкам принадлежит каждый атом. Из пространственного представления можно увидеть, что атом *k* принадлежит 8 элементарным ячейкам, следовательно, данной ячейке он принадлежит на 1/8. Мы знаем, что в ячейке есть атомы, находящиеся в эквивалентном положении (т.е. атомы имеют одинаковое окружение), и атомы, находящиеся в неэквивалентном положении. В данном примере с атомом k в эквивалентном положении находятся еще 8 атомов (атомы располагаются в вершинах куба). Умножив 1/8 на 8, получаем, что данной ячейке принадлежит один атом. Но в центре куба имеется еще один атом, который находится с остальными в неэквивалентном положении. Он принадлежит всего лишь одной ячейке. Просуммировав, получаем, что в данном примере на одну элементарную ячейку приходятся два атома.

Теперь, используя выше описанные рассуждения, решим несколько задач.

Задача №1

Кристаллическая решетка железа при комнатной температуре - кубическая объемоцентрированная. Атомы железа расположены в вершинах куба и в центре на пересечениях пространственных диагоналей куба. Сколько атомов железа приходится на одну элементарную ячейку? Определить постоянную решетки (ребро куба), если атомная масса железа A=55.9 , его плотность ρ =7.87 г/см^3



Решение:

Для того чтобы определить длину ребра куба, нужно рассчитать объём V элементарной ячейки.

$$V = a^3 \qquad (1)$$

Зная, что $m = V\rho$, можно выразить отсюда объём $V = \dfrac{m}{\rho}$

Определим m - массу элементарной ячейки.

$$N = \nu \cdot N_A \ , \qquad \nu = \frac{m}{M} \ ,$$

значит, $$N = \frac{m}{M} N_A \qquad (2)$$

N - число атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку, M - молярная масса вещества.

Для данной ячейки $N = \dfrac{1}{8} * 8 + 1 = 2$ (из рассмотренного выше примера).

Из формулы (2) получаем, что $m = \dfrac{NM}{N_A}$ Подставляем это выражение в равенство (1):

$$V = \frac{NM}{N_A \rho}$$

И с учётом формулы для объёма имеем, что:

$$a = \sqrt[3]{\frac{NM}{N_A \rho}}$$

Подставив числовые данные, получаем ребро куба (элементарной ячейки)
$a = 2.87 \cdot 10^{-8}$ см

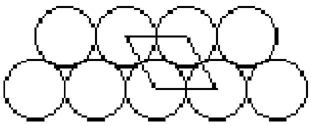
Рассмотрим теперь задачу немного другого характера.

Задача 2.

Измерив массу капли оливкового масла, пущенной на поверхности воды, и площадь, по которой она растекается, можно судить о толщине плёнки масла. Она примерно равна $2.3 \cdot 10^{-7}$ см. Предполагая, что в толщине плёнки укладывается два слоя молекул, найти массу одной молекулы оливкового масла, если плотность масла равна $\rho = 0.9$ г/см^3

Решение:

При растекании масла возможна сплошная упаковка двух слоёв на поверхности воды. Т. е. возможно только лишь такое расположение слоёв друг относительно друга, как показано на рисунке.

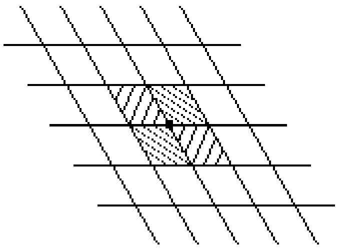


Такое расположение молекул возможно и в одном слое (вид сверху). Масса одной молекулы оливкового масла равна:

$$m = \frac{M}{2n}$$

Здесь M - масса всей капли масла, n - число молекул масла в одном слое. Чтобы найти число молекул n в одном слое проведём следующие рассуждения.

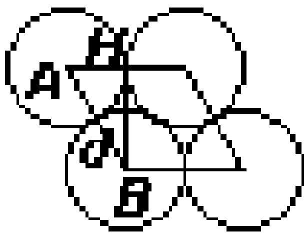
В одном слое молекул при сплошной упаковке элементарная ячейка представляет собой ромб. На эту ячейку приходится одна молекула. Покажем это.



Из рисунка видно, что эта молекула принадлежит одной элементарной ячейке на 1/4 таких молекул 4. Поэтому на одну ячейку приходится одна молекула. Чтобы найти число молекул в одном слое разделим площадь растекшегося масла S на площадь одной ячейки $S_{яч}$:

$$n = \frac{S}{S_{яи}}$$

Найдем $S_{яч}$. Ячейка представляет собой ромб.



Площадь ромба $S_{яч}$ =dH, здесь d - сторона ромба и одновременно диаметр молекулы, H - высота в ромбе. Найдем H. В треугольнике ABH неизвестна BH. Угол ABH равен 30^0, т.к. AB (AB равна диаметру) в два раза больше AH - радиуса молекулы. Значит:

$$BH = AB \cdot \sin AH \ , \qquad BH = H = \frac{d\sqrt{3}}{2}$$

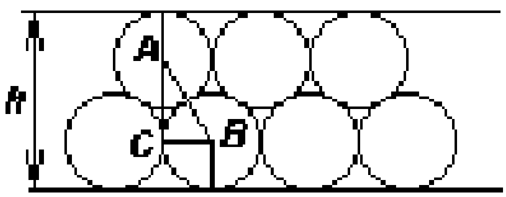
Следовательно:

$$S_{яи} = \frac{d^2\sqrt{3}}{2}$$

Теперь найдем S по определению:

$$V = Sh = \frac{m}{\rho} \ , \qquad S = \frac{m}{\rho \cdot h} \, .$$

Найдем связь между d и h. Вид сбоку на два слоя масла:



Из рисунка видно, что $h \neq d$. h - будет складываться из 2r (радиус молекул) и AC.

AC из треугольника ABC равна:

$$AC=\frac{AB\sqrt{3}}{2}$$, где AB=d т.е.

$$h=d+\frac{d\sqrt{3}}{2}=d\left(\frac{\sqrt{3}}{2}+1\right)$$

Теперь мы можем найти S и n:

$$S=\frac{M}{\rho\cdot d\left(\frac{\sqrt{3}}{2}+1\right)}\ ,\quad n=\frac{2M}{\rho\cdot d\left(\frac{\sqrt{3}}{2}+1\right)d^2\sqrt{3}}=\frac{4M}{\sqrt{3}\rho\cdot d^3\left(\sqrt{3}+2\right)}$$

Подставляем полученное выражение для m и получаем, что масса одной молекулы оливкового масла равна:

$$m=\frac{\sqrt{3}M\rho\cdot d^3\left(\sqrt{3}+2\right)}{8M},\qquad m=\frac{\sqrt{3}\rho\cdot d^3\left(\sqrt{3}+2\right)}{8}$$

Диаметр молекул d не известен, но мы знаем зависимость h от d:

$$h=d\left(\frac{\sqrt{3}}{2}+1\right)$$

Отсюда:

$$d=\frac{h}{\frac{\sqrt{3}}{2}+1}=\frac{2h}{\sqrt{3}+2}$$

Возвращаемся к выражению для m:

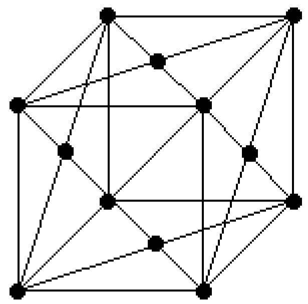
$$m=\frac{\sqrt{3}\rho\cdot 8h^3\left(\sqrt{3}+2\right)}{\left(\sqrt{3}+2\right)^3}\quad ,\qquad m=\frac{\sqrt{3}\rho\cdot h^3}{\left(\sqrt{3}+2\right)^2}$$

Это и есть конечный результат, в который осталось лишь подставить числовые значения и получить, что $m=3\cdot 10^{-24}$ г.

Решим теперь задачу подобную задаче №1

Задача №3

Кристаллическая решетка алюминия - кубическая гранецентрированная. Атомы алюминия расположены в вершинах куба и в центрах граней. Сколько атомов алюминия приходится на одну элементарную ячейку? Определить постоянную решетки (ребро куба), если атомная масса алюминия A=27, его плотность ρ=2.74 г/см^{3}.



Решение:

Как и в задаче №1 ребро куба $a = \sqrt[3]{V}$, где V - объем элементарной ячейки

$$V = \frac{m}{\rho} = \frac{NM}{N_A \rho},$$

здесь N - число атомов приходящихся на ячейку, M - молярная масса алюминия, ρ - плотность, $a = \sqrt[3]{\frac{NM}{N_A \rho}}$. Нам неизвестна N. Из пространственного расположения видно, что атом k принадлежит 8 элементарным ячейкам, следовательно, данной ячейке он принадлежит на 1/8. Атомов, находящихся в эквивалентном положении с атомом k - 8. Другой атом λ принадлежит двум элементарным ячейкам, значит, данной он принадлежит на 1/2. Таких атомов в эквивалентном положении - 6. Следовательно, N будет равно

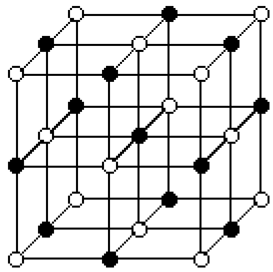
$$N = \frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 \quad , \quad N = 4$$

Теперь подставляем числовые значения в выражение для a и получаем, что $a = 4.05 \cdot 10^{-8}$ см.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Задача №1

Кристаллы поваренной соли NaCl кубической системы состоят из чередующихся атомов (ионов) Na и Cl. Определить наименьшее расстояние ме-



жду его центрами. Молярная масса $M = 59.5 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, а ее плотность $\rho = 2.2 \cdot 10^{3}$ кг/м^3

$$\left(d = 2.8 \cdot 10^{-8}\right)$$

Задача №2

Считая, что океаны покрывают 2/3 площади поверхности Земли, определите массу нефти М, которая, растекаясь, покрыла бы пленкой все водное пространство планеты. Считайте, что толщина пленки составляет d=20 молекулярных слоев, средняя молярная масса нефти M=1кг/моль, плотность нефти $\rho = 0.8 \cdot 10^{3}$ кг/м^3, радиус Земли R=6400км и Земля имеет форму шара. Молекулы нефти сферические и образуют кубическую решетку .

$$\left(M = \frac{8}{3}\pi \cdot \rho \cdot R^{2} d \sqrt{\frac{M}{\rho \cdot N_{A}}} = 6.10^{11}\, кг.\right)$$

Задача №3

Определить число элементарных ячеек кристалла объемом 1 м^3: а) хлористого цезия (решетка объемно-центрированная кубической сингонии); в) меди (решетка гранецентрированная кубической сингонии; с) кобальта, имеющего гексагональную структуру с плотной упаковкой.

$1{,}44 \cdot 10^{28}$

$2{,}1 \cdot 10^{28}$

$4{,}54 \cdot 10^{28}$

Задача №4

Найти плотность кристалла неона (при 20К), если известно, что решетка гранецентрированная кубической сингонии. Постоянная решетки при той же температуре равна 0,452 нм.

$1{,}46 \cdot 10^3$ кг/м^3

Задача №5

Найти плотность кристалла стронция, если известно, что решетка гранецентрированная кубической сингонии, а расстояние между ближайшими соседними атомами d=0,43 нм.

$2{,}6 \cdot 10^3$ кг/м^3

Задача №6

Определить относительную атомную массу A_r кристалла, если известно, что расстояние между ближайшими соседними атомами d=0,304 нм. Решетка объемно-центрированная кубической сингонии. Плотность кристалла равна 534 кг/м^3.

6,95 (литий)

Задача №7

Используя метод упаковки шаров, найти отношение параметров c/a в гексагональной решетке с плотнейшей упаковкой.

1,63

Задача №8

Определить постоянные a и c решетки кристалла магния, который представляет собой гексагональную структуру с плотной упаковкой. Параметр решетки a =0,359 нм. Плотность кристалла бериллия равна $\rho = 1{,}74 \cdot 10^3$ кг/м^3.

0,320 нм и 0,521 нм