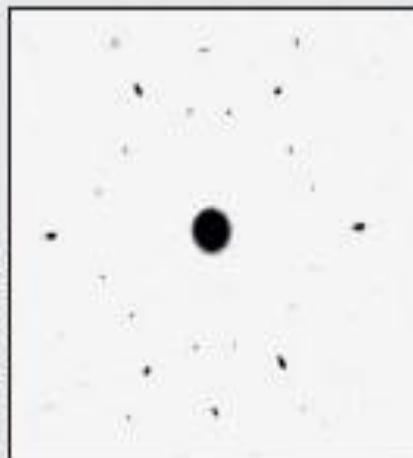
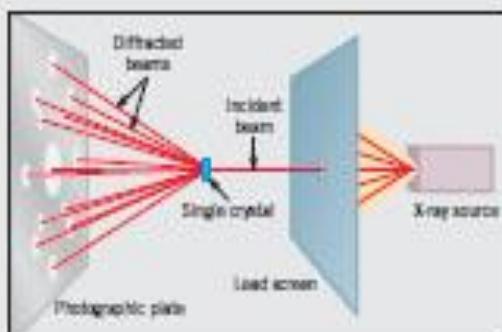


Боб 3 МЕТАЛЛАР СТРУКТУРАСИ

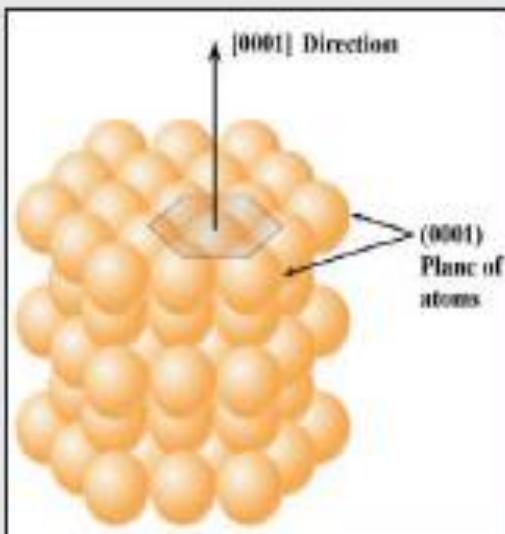
Courtesy of J. G. Byrnes



(a)



(b)



(c)



(d)



(e)

(а) Магний (3.16 бўлмда) монокристалидаги рентген нурларининг дифракцияси сининг фото сурати (ёки Лаузе фотосурати).
 (б) Юкоридаги (а) суратни олиш жараёнинг схематик тасвири (яний текширилаётган намунанинг дифракцияси).
 Кўргошиндан ясалган филоф ренген нурларини таркалишидан тўсади, ундан факат текширилаётган намуна тамон нур таркалади. Бу тушаётган нур монокристалдаги кристаллографик (хар хил йўналишга эга бўлган) нукталарнинг урилиб кайтиш жараёнида дифрагланиши, у форографик копконга тушган. Бу кайтган

нурлар фотографик копкон текислиги билан кесишганда кора доғлар пайдо бўлади. Кайтган нурдан тушган марказдаги (а) энг катта доғ кристаллографик [0001] йўналишга паралел. Шуни айтиб ўтиш кераки магниниг зич жойлашувга эга бўлган олти бурчакли кристаллографик структуранинг олтига симметрияси [(с) расмда кўрсатилган] ўтказилган тадқикотда диаракция оркали олтига кора нукта шаклида кўрсатилган.

(д) (0001) мос келувчи кристаллографик текислик бўйлаб (синган ёки узулган) магниниг монокристалл фотосурати.

(е) mag – wheel фирмасининг магний котишмасидан ясалган автомобил дискасининг фотосурати.

НИМА УЧУН БИЗ КАТТИК ЖИСМЛАР СТРУКТУРАСИНІ ҮРГАНАМИЗ?

Күпчилик (материаллар) каттик жисимларнинг хоссалари уларнинг кристаллографик структурасига боғлиқ. Мисол соғ деформацияланмаган магний ва бериллий, бир хил кристаллографик структурага эга бўлиб, етарли даражада мўртоликга эгадирлар (яний деформация жараёнида дарзлар тезда хосил бўлади), аммо бошқа кристаллографик структурага эга бўлган соғ металлардан олтин ва кумуш деформацияланмаган холда юкори

пластиклигга эга (7.4 бобга каранг). Бундан ташкари бир хил кимёвий таркиб аммо хар хил кристалл ва нокристал структурага эга бўлган каттик жисимларнинг хоссалари бир биридан тубдан фарқ килади. Мисол, кристалга эга бўлмаган керамика (шиша) ва полимер (органик шиша) одатда оптика шафоғ; худи шундай материаллар кристалл ёки ярим киристалга эга бўлганларида шафоғ эмас ёки ранги бўладилар.

Макса два вазифалар

Бу бобни ўрганиб чигганингиздан кейин сиз қуйдагиларни кила олиасиз:

1. Каттик кристаллик ва нокристаллик бўлган жисимларнинг атом/молекуляр структураларининг фаркларини келтиринг.
2. Ёклари марказлашган куб кристалл, хажми марказлашга куб кристалл ва зич жойлашувга эга бўлган олти бурчакли гексагонал панжараларнинг элементар ячайкаларини кетиринг.
3. Ёклари марказлашган куб кристалл, хажми марказлашга куб кристалл ва зич жойлашувга эга бўлган олти бурчакли гексагонал панжаралар ячайка ёкларининг улчамлари атом радиусига боғликлитини келтиринг.
4. Ёклари марказлашган куб кристалл, хажми марказлашга куб кристалл ва зич жойлашувга эга бўлган мателларнинг солиштирма оғирлиги ва элементар ячайкасининг габарит улчамларини аникланг.
5. Элементар ячайка чегарасига мос келувчи учта бутун сонлардан ташкил топган йўналишлар индексинини белгилашни ўрганинг.
6. Элементар ячайка чегарасига мос келувчи Миллер индексларини аникланг ва белгиланг.
7. Ёклари марказлашган куб кристалл, хажми марказлашга куб кристалл ва зич жойлашувга эга бўлган элементар ячайкалардаги атомларнинг жойлашиши кандай зич жойлашув принципларига тўғри келади.
8. Монокристалл ва поликристалл каттик жисимларнинг бир биридан фаркларини келтиринг.
9. Изотропик ва анизатропик материалларнинг хоссалари келтиринг.

3.1. КИРИШ

Иккинчи бобда гап асосан атомлараро боғланишларнинг турлари ҳақида бўлиб у орқали хар бир индивидуал атомнинг электрон структурасини аниқлашга имкон беради. Бу бобда гап асосан атомларнинг бир бирига нисбатан жойлашиши натижасида ҳосил бўлган қаттиқ жисимларнинг структура тузилишлар турлари ҳақида боради. Айнан шу концепция асосида кристалл ёки нокристал тузилишга эга бўлган каттик жисимлар бўйича хулосалар келиб чиқади. Кристалга эга бўлган қаттиқ жисимлар структураси кристаллографик ячайка бирлигининг терминлар орқали ифодаланади. Металл ва керамиканинг аник кристаллографик структураси, кристаллографик нұқта, кристаллографик йўналиш ва кристаллографик текисликлар деган иборалар билан тушинтириб берилади. Шуни ҳам айтиш керакки, бунда қаттиқ жисимлар, моно кристаллик, поли кристаллик ва нокристалл структура турларига бўлинади. Бундан ташқари бу бобда кристалл структураларни рентгенаструктуравий анализ орқали аниқлаш усуллари бўйича қисқача маълумотлар ҳам берилади.

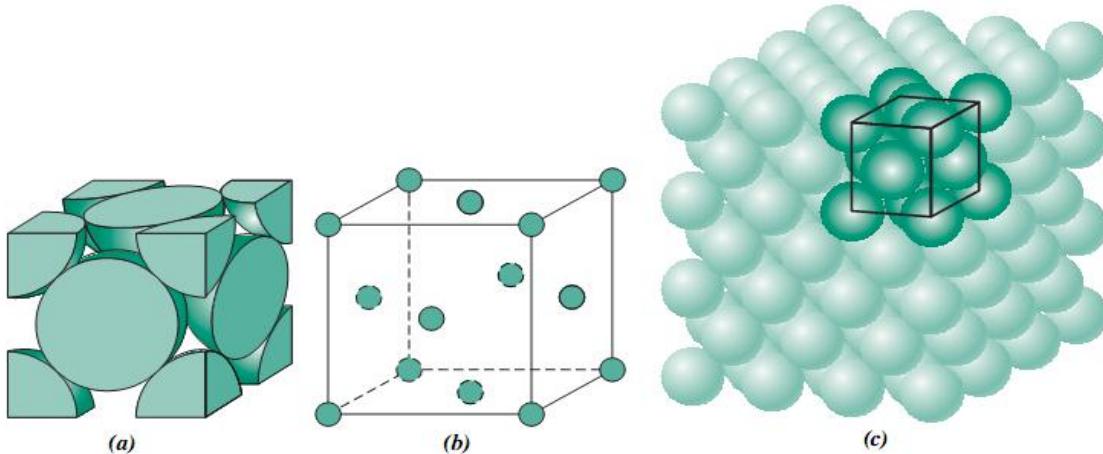
КРИСТАЛЛ СТРУКТУРА

3.2. УМУМИЙ ТУШИНЧАЛАР

Қаттиқ жисимлар уларни ташкил этувчи заррачаларнинг (атом, молекула) бир бирига нисбатан жойлашиши бўйича турларга бўлениши мумкин.

Кристаллик

Кристаллик жисим деганда, шу жисмни ташкил этувчи атомлар бир бирига



Расм 3.1. Ёқлари марказлашган қуб элементар ячейканинг тассвири: а – қаттиқ сфералардан ташкил топган якка ячейка; б – якка ячейканинг кристалл панжарадаги модели; в – жуда кўп атомлардан ташкил топган кристалл хажми

нисбатан бир хил тартибли кетма кетузоқ масофагача жойлашга бўлади. Шундай қилиб, узоқ тартибга эга бўлган тизимиҳосил бўлади, бу холат эриган металларни қотиш жараёнида кузатилиб уч ўлчамга эга бўлган структура шакилланади, бунда ҳар бир атомлар кўшнилар билан боғланган бўлади. Барча металлар, керамиканинг кўпчилик турлари ва айрим полимерлар оддий шароитда қотиш натижасида кристалл структура ҳосил қила оладилар. Агар қаттиқ жисмларин ташкил этувчи атомлар узоқ масофаларгача тартибли бир хил жойлашашни саклай олмасалар улар кристалл структура ҳосил қила олмайдилар. Бу турдаги жисмлар нокристаллик ёки амморф жисмлар деб аталади ва бу бобда улар хақида қисқача гап боради.

Кристалл структура лар Кристаллик қаттиқ жисмларнинг қўпгана хоссалари айнан модданинг **кристалл структурасига** боғлиқ бўлади, яъний ундаги атом, ион ёки молекулаларнинг бир бирига нисбатан фазода қандай тартибда жойлашганига боғлиқ. Узоқ тартибда жойлашишга эга бўлган жуда кўп турли кристаллик структуралар мавжуд. Бунда металларга хос бўлган оддий структура турлари бўлса, керамика ва полимерларда эса жуда мураккаб структура турлари кузатилади. Бу бобда асосан металла рва керамик структураси хакида гап боради, полимерлар структураси эса кейинги бобда кўриб чиқилади.

Кристалл панжара Кристаллик структураларни кўриб чиқишида улардаги атомлар (ионлар) қаттиқ сикилмайдиган аник диаметрга эга бўлган сфера шакилда тасавур килинади. Айнан шу қаттиқ сфера атомнинг модели бўлиб моддадаги сфералар бир бирига, яъний қўшни сфераларга тегиб турган холда турадилар. Мисол тариқасида 3.1 – расмда оддий металлга тегишли бўлган шундай турда жойлашган модел келтирилган. Бундай аник холатда барча атомлар бир хил деб қабул қилинган. Баъзи холларда кристалл структураларни таърифлашда **панжара** деган ибора қўлланилади, бунда бу ибора атомларнинг учта ўлчам бўйича бир бирига нисбатан жойлашиш ўрнини кўрсатиб беради.

3.3. ЭЛЕМЕНТАР ЯЧЕЙКА

Элементар ячейкаси Кристаллик қаттиқ жисмлардаги атомлар жойлашиш тартибини аниқлаш, структура тизимиҳосил қилувчи унчалик катта бўлмаган атомлар сони орқали аниқланади. Шунинг учун кристаллик структурани ифодалаш бутун кристаллни эмас, балки унинг битта **элементар** (ёки яккаланган) **ячейкаси** орқали аниқлаш куляй бўлади. Кўпгина холларда бундай элементар ячейка параллелепипед ёки призма геометрик шаклида бўлиб, улар сфералар жойлашган учта параллел ёқларига эга. 3.1, в – расмда шундай куб шаклига эга бўлган ячейка келтирилган. Яккаланган ячейка кристаллик структурасининг симетриясини ифодалайди,

яньий кристаллдаги барча атомларни жойлашишини шу якка ячейкани учта йұналиш бүйича параллел күчириш (трансляция) орқали аниклаш мүмкін. Шунинг учун элементар ячейка шу кристаллни ҳосил қылувчи асосий структуравий бўллаги ҳисобланади. Айнан у кристаллик структурада атомларни жойлашаш геометриясини ва атомларни бир бирига нисбатан фазода жойлашув тартибини аниклади. Одатда параллелепипеднинг бурчак кирралари қаттиқ сферанинг марказида ётади деб қабул қилинган. Ҳақиқатда эса аниқ кристалл структураларни ифодалаш учун фақат ягона мүмкін бўлган элементар шаклга эмас, балки юқори геометрик симметрия даражасига эга бўлган якка ячейкага таянишади.

3.4. МЕТАЛЛАРНИНГ КРИСТАЛЛ СТРУКТУРАСИ

Металлар гурухига кирадиган материаллардаги боғланишларнинг электрон структура йұналиши, жуда зарур йұналишларга кирмайди. Мос равишда күшни атомларнинг сони ва бир бирига нисбатан жойлашиши минимал чегараланган. Бу эса шундай холатга олиб келадики, бунда ҳар бир атом нисбатан жуда кўп қўшниларга эга бўлиб, кўп холларда эса металлар структураси зич жойлашувга эга бўлиб қолади. Бундан ташқари ҳар бир қатти сфералар модели ион ядроюнда айланади. 3.1 – жадвалда баъзи металларнинг атом радиуси келтирилган. Аниқлаб ўтилган эдики, кўпгина холларда оддий металлар учта кристалл структура – зич жойлашули ёқлари марказлашган куб (ЁМК), хажми марказлашган куб (ХМК) ва гексагонал (ГГ) структураларни ҳосил қиласидилар.

Ёқлари марказлашган куб ячейка

ёқлари марказлашган Одатда кўпгина металлар структураси куб геометрия шаклига эга бўлиб, бунда атомлар элементар ячайканинг бурчаклари ва ёқларининг марказида жойлашган бўлади. Бундай структура турига **ёқлари марказлашган** (ЁМ) дейилади. Барчамизга яхши маълум бўлган мис, алюминий, куму шва олтин металлари айнан шунлай структурага эга (3.1 – жадвалга қараймиз). 3.1, а – расмда қаттиқ сфералар молекуладан ташкил топган ёқлари марказлашган якка куб ячейка тассвириланган, 3.1, б – расмда эса атомларни фазода жойлашишини яънада яхшироқ тасавур қилиш учун улар кичрайтирилган. Кўплаб атомлардан ташкил топган 3.1, в – расмда кристалнинг кесими қўрсатилган бўлиб, у жуда кўп ёқлари марказлашган элементар ячайкалардан ташкил топган. Ион ядроини моделини билдирувчи сфералар кубнинг ёқлари диагонали бўйича бир бирига тегиб турадилар. Элементар ячайка кубининг ёқ узунлиги (а) ва ундаги атомнинг радиуси бир бири билан кучдагича муносабатда бўладилар:

$$a = 2R\sqrt{2} \quad (3.1)$$

Бу мунасобат 3.1 даги вазифани ечимидан келиб чиқади.

Жадвал

3.1. 16
металларнинг
кристалл
структураси
и ва атом
радиуси

Металлар	Кристалл структураси ¹	Атом радиуси, нм ²	Металлар	Кристалл структураси ¹	Атом радиуси, нм ²
Алюминий	ЁМ	0,1431	Молибден	ХМ	0,1363
Кадмий	ГЗ	0,1490	Никель	ЁМ	0,1246
Хром	ХМ	0,1249	Платина	ЁМ	0,1387
Кобальт	ГЗ	0,1253	Кумуш	ЁМ	0,1445
Мис	ЁМ	0,1278	Тантал	ХМ	0,1430
Олтин	ЁМ	0,1442	Титан (α)	ГЗ	0,1445
Темир (α)	ХМ	0,1241	Вольфрам	ХМ	0,1371
Кўрғошин	ЁМ	0,1750	Рух	ГЗ	0,1332

¹ЁМ – ёқлари марказдашган, ЁМ – хажми марказлашга, ГЗ – гексагонал зич

²нм – Нонометр бўлиб 10^{-9} м. агар нонометрдан ангстремга ўтиш зарур бўлса уни 10 га кўпайтириш харур.



Бази пайтларда хар бир элементар ячейкани бирлашдирадиган атомлар сонини аниклаш талаб этилади. Атомларнинг жойига боғлиқ равища уларни кандай кисми шу ячейкага тегишли эканлиги келиб чикади. мисол, ёклари марказлашган куб ячейканинг бурчакларида жойлашган атомлар бир пайтнинг ўзида яна саккизта шундай ячейкага тегишли бўлади, унинг марказидаги атомлар эса бир пайтнинг ўзида факат иккита ячейкага тегишли. Айнан ячейкага тегишли бўлган атомларнинг сони куйда келтирилган формула ёрдамида аникланади:

$$N = N_i + \frac{N_j}{2} + \frac{N_e}{8} \quad (3.2)$$

бунда: N_i – ячейканинг ички атомлар сони;

N_j – ячейканинг ёкларидағи атом сони;

N_e – ячейканинг бурчакларидағи атомлар сони.

ЁМ – кристалл структура учун бурчагидаги атомлар сони саккизта ($N_e = 8$), ёкларида эса олтига атом ($N_j = 6$), ва унда хеч кандай ички атомлар йўқ. Шунда 3.2 – формулага биноан:

$$N = 0 + \frac{6}{2} + \frac{8}{8} = 4$$

Хакикатда ячейканинг бурчаги ва марказидаги атомларнинг холатлари эквивалент, чунки агар структурада марказий атомдан ёкларларга кўчириш амалга оширилса, бунинг натижасида худи шундай элементар ячейканинг нукталари хосил бўлади.

Кристалл структураларнинг ена иккита муҳим характеристикаларига унинг координацион сони ва тўликллик коэффициенти (КТК) киради. Металлардаги хар бир атом худи ўзидаек тенг сонли кўшниларига тегиб туради. Ячейкадаги бита атомга тегиб турган кўшнилар сони шу ячейканинг координацион сони дейлади. Ёклари марказлашган куб панжаранинг координацион сони 12 га тенг. Бу хуласага 3.1, в – расмдаги тасвирдан келтириш мумкин: олтиндаги ёк бурчаклардаги атомлар тўртта кўшни атомлар тамонидан ўраб олинган, тўртта атом оркасида ва яна тасвирга тутмай колган тўртта атом кейнги ячейкади.

КТК – бу элементар ячейка чегарасига кирган атомлар хажм йиғинди (каттик сфералар моделида кўрилаётган) бўлиб, шу ячейка хажмининг кандай микдорини эгаллаган деган тушунчага эга.

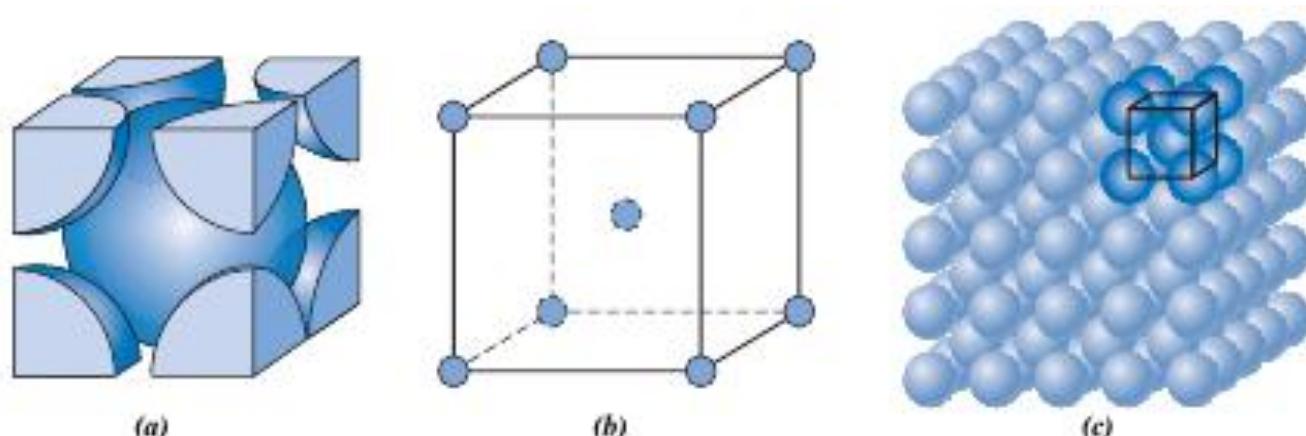
КТК кўйдагича аникланади:

$$KTK = \frac{\text{элементр · ячейка · чегарасига · кирган · атомлар · хажм · йииндиси}}{\text{элементар · ячейка · хажми}} \quad (3.3)$$

Ёклари марказлашган куб ячейканинг тўликллик коэффиценти 0,74 га тенг, бу бир хил радиусга эга бўлган сфераларнинг максимал зич жойлашиш имконияти. Барча структуралар учун КТК ни солиштириш шу бобнинг 3.2 вазифаларида кўриб чикилади.

Хажми марказлашган куб ячейка

Металларга хос бўлган яна бир турдаги структура бу бурчакларида жойлашган саккизта отом ва кубнинг марказида жойлашган битта атомлардан ташкил топган куб. Шундай кўп атомлардан ташкил топган структура каттик сфералар модели тарзда 3.2, в – расмда кўрсатилган, 3.2. а – расмда эса каттик сфералар моделидаги хажми марказлашган кристалл учун якка ячейка ва уларга мос равища уларнинг кичрайтириган модели келтирилган.



Расм 3.2 Ҳажми марказлашган куб элементар ячейканинг таъсири: а – қаттиқ сфералардан ташкил топган якка ячейка; б – якка ячейканинг кристалл панжарадаги модели; в – жуда кўп атомлардан ташкил топган кристалл ҳажми

Марказидаги ва бурчаклардаги атомлар бир бирига кубнинг диаганали бўйлаб тегиб туради бунда куб ёкининг a ўлчами ва ундаги атомларнинг радиуси R бир бири билан кўйдаги муносабатларда бўладилар:

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}, \quad (3.4)$$



Одатда бундай ҳажми марказлашган элементар ячайкани асосан хром, темир ва вольфрам металларида кузатилади (3.1 – жавдалга каранг). Хаар бир ячейканинг бурчакларида саккизта ва ҳажмининг марказида битта атом бўлиб, марказий атом шу ячейкага бутунлай тегишли, шунинг учун 3.2 – формула кўйдагича хисобланади:

$$\begin{aligned} N &= N_i + \frac{N_j}{2} + \frac{N_e}{8} \\ &= 1 + 0 + \frac{8}{8} = 2 \end{aligned}$$

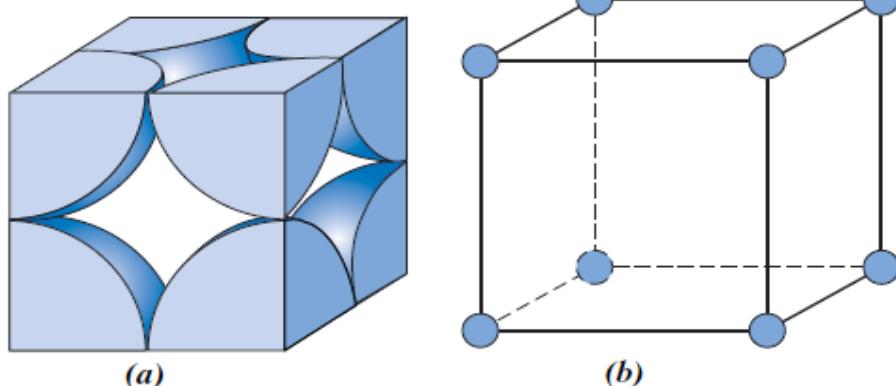
Хар бир ҳажми марказлашган ячейкага иккита атом тегишли (эквивалент) бўлиб улардан биттаси – саккизта бурчаклард жойлашган атомларнинг сакиздан бир кисми ва яна битта марказда жойлашган атом унга тўлик тегишилдири. Яна шуни айтиб ўтиш керакки бурчакдаги ва марказдаги аомлар бир бирига тўлик эквивалентдирлар.

Ҳажми марказлашган ячейканинг коорденацион сони 8 га teng, яний ячейканинг ҳажм марказидаги атомни саккизта куб бурчакларидағи атом ўраб олган. Ҳажми марказлашган ячеканинг коорденицион сони ёклари марказлашган кристалнинг коорденацион сонидан кичик бўлгани учун, унинг тўликллик коэффициенти хам кичик – 0,68 га 0,74.

Гексаганал зич жойлашувга эга бўлган ячейка

Барча холларда металларнинг кристаллографик ячайкаси куб симетриясига эга. Бу бобда охирги умумий холда мухакама килинадиган кристалл структура гексаганал ячейка. Шундай структура 3.4 – расмда келтирилган, 3.4, а – расмда сфералар кирайтирилган холатда тасвиirlанган, 3.4, б – расмда эса кўп атомлардан ташкил топган ҳажм.

¹Alternatively, the unit cell for HCP may be specified in terms of the parallelepiped defined by the atoms labeled A through H in Figure 3.4a. Thus, the atom denoted J lies within the unit cell interior.



3.3 – расм. Оддий куб кристалл структуранинг ячейкаси, (а) элементар ячейкадаги сфералар, ва (б) элементар ячейканинг модели

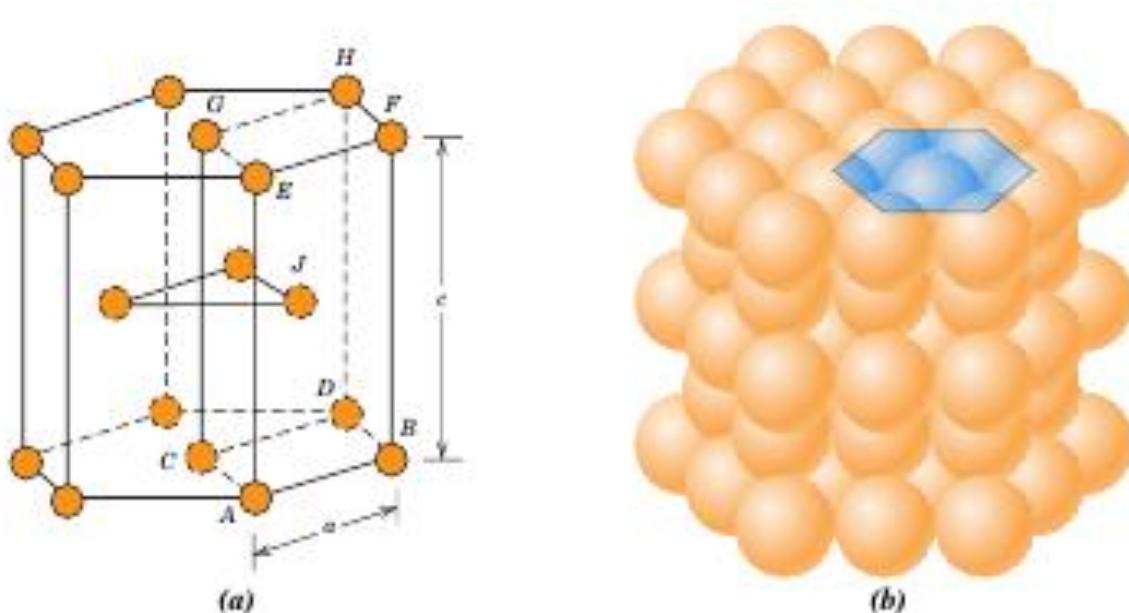


Элементар ячейканинг пастги ва устги ёклари тўғри олтибурчак хосил килувчи олтита атомлардан ташкил топган, унинг марказида эса яна битта атом жойлашган. Устги ва пастги текисликлар орасида учта атомга эга бўлган ён тамон ёклар жойлашган. Ўрта текислиқдаги атомлар эса каларга уланган иккита текисликларда жойлашган якин кўшнилари тамонида ўраб олинган.

$$N = N_i + \frac{N_j}{2} + \frac{N_e}{6} \quad (3.5)$$

Хар бир элементар ячейка олтита эквивалент атомнинг олтидан бир кисми, 12 та устги ва пастги атомлар ва марказий текисликда ётган учта атомнинг иккидан бир кисми. Бунда a ва c киска ва узун ёклар ўлчами бўлиб (3.4 , a - расм) c/a муносабати $1,633$ ни ташкил этиши керак, аммо бази металларда бу муносабатдан чекланиш мавжуд.

$$N = 3 + \frac{2}{2} + \frac{12}{6} = 6$$



Расм 3.4. Гексаганал зич жойлашувли ячейканинг тассвири: а – қаттиқ сфералардан ташкил топган якка ячейка; в – жуда кўп атомлардан ташкил топган кристалл ҳажми

58 • Боб 3 / Металлар структураси

Гексаганал ячейканинг коорденацион соани ва тўлиқлик коэффициенти ёклари марказлашган ячейканинидек мос равишда 12 ва 0,74 ни ташкил этади. Бундай гексаганал зич жойлашуви ячейкни асосан кадмий, магний, титан ва цинк металлари хосил килади (3.1 – жадвалга каранг).

ВАЗИФА 3.1.

Элементар ёклари марказлашган куб кристалл ячейканинг ҳажмини топинг.

Вазифа: элементар ёклари марказлашган куб ячейка ҳажми ҳисоблансин.

Ечими: Ёклари марказлашган куб ячейканинг схематик тассвири ва ўлчамлари расмда келтирилган.

Атомлар ёклар диагоналлари бўйича бир бирига тегиб туради, шунга мос равишда ёкининг узунлиги $4R$ га teng.

Бунда якка ячейканинг ҳажми куб шакилга эга бўлгани учун унинг ҳажми a^3 , бунда a – кубнинг ёклар узунлиги.

Шундай қилиб қўйдаги тегламани келтириш мумкин:

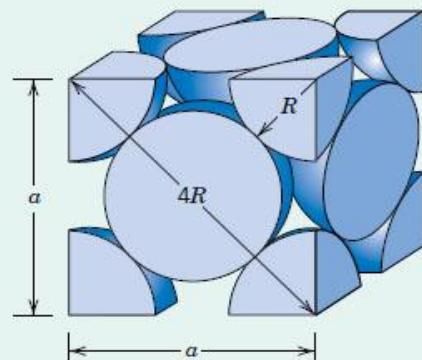
$$a^2 + a^2 = (4R)^2.$$

Уни a га нисбатан ечими бизга қўйдагини беради:

$$a = 2R\sqrt{2}, \quad (3.1)$$

Ёклари марказлашган ячейканинг V_c ҳажми қўйдаги формуладан аниқлаш мумкин:

$$V_c = a^3 = (2R\sqrt{2})^3 = 16R^3\sqrt{2} \quad (3.6)$$



ВАЗИФА 3.2.

Ёклари марказлашган элементар куб ячейканинг тўлиқлик коэффициентини аниқлаш.

Вазифа: ёклари марказлашган элементар куб ячейканинг тўлиқлик коэффициенти 0,74 га teng эканлигини кўрсатинг.

Ечими: Ҳар қандай ячейканинг тўлиқлик коэффициенти (КТК) ячайкани ташкил этувчи қаттиқ сфералар ҳажмининг шу ячейканинг тўлиқ ҳажмининг нисбатига teng:

$$KTK = \frac{\text{элементр ячейка чегарасига кирган атомлар ҳажм йииндиси}}{\text{элементар ячейка ҳажми}}$$

Бу формулага кирувчи иккита катталик ҳам атомлар R оркали ифодаланиши мумкин. Каттиқ сферанинг ҳажми $4/3\pi R^3$ – га teng бўлгани учун хамда битта ҳажми марказлашган элементар ячейкада 4 та атмо бўлгани учун сфераларнинг умумий ҳажми:

$$V_s = 4 \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right) = \frac{16}{3} \pi R^3$$

теппада кўриб чикилган Зю1 – вазифанинг ечимига кўра:

$$V_c = 16R^3\sqrt{2}$$

Шунда атомларнинг тўлиқлик жойлашиш коэффициенти кўйдагича:

$$KTK = \frac{V_s}{V_c} = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{16R^3\sqrt{2}} = 0,74$$

3.1 Назорат учун саволлар

- (а) Оддик куб кристалл структура ячейкасининг координацион сонини топинг?
 (б) Оддий куб кристалл структура ячейкаси учун зич жойлашув даражасини аникланг?

МУАМОЛИ ВАЗИФА 3.3.

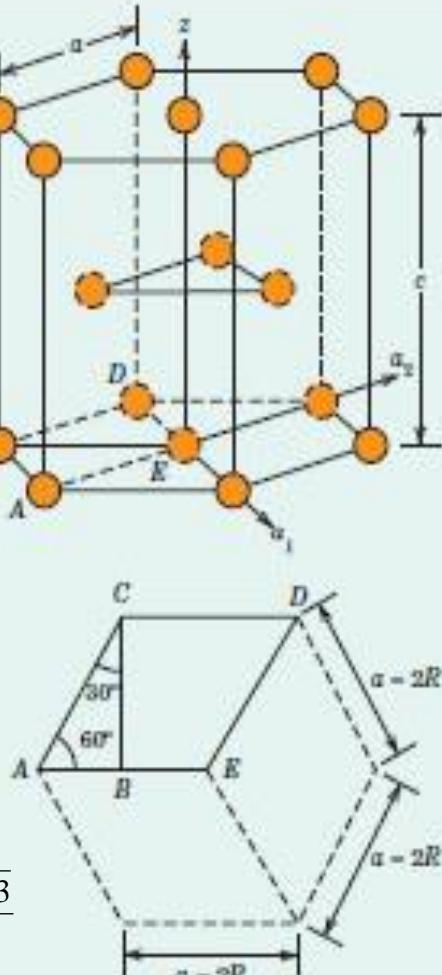
Элементар ячейка хажмини хисоблаш

- (а) ГЗ – ячайканинг a ва c параметрларини ионбатга олган холда унинг хажмини хисобланг.
 (б) Атом радиуси R ва c параметрларини инобатга олган холда панжаранинг сиклувчанлигини хисоблаб топинг

Ечими:

- (а) Бу вазифани ечимини топиш учун ГЗ – ячайканинг моделидан файдаланамиз.
 Энди, элементар ячайканинг хажмини топиш учун бизга факат базес, яний c - баландлиги берилган. Бу базес учта ACDE параллелепипеддан ташкил топган, у юкоридаги расмда кўрсатилган. (бундан ташкири бу ACDE параллелепипед ячайканинг тепа кисмидахам кўрсатилган).
 Бу ACDE – текисликнинг баландлиги ва шу текисликда ётувчи сферанинг R радиусини инобатга олсанк олтибурчак шакилнинг a – ён тамон кийматини куйдагича топиш мумкин:

$$\overline{AN} = a \cos(30^\circ) = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$



Шундай бўлгани учун куйдаги хисоб ўринли бўлади:

$$AREA = (3)(\overline{CD})(\overline{BC}) = (3)(a)(\frac{a\sqrt{3}}{2}) = \frac{3a^2\sqrt{3}}{2}$$

AREA – худуд юзасини ячайканинг баландлиги бўлган c га кўпайтириш оркали бутун ячайканинг хажмини топамиз:

$$V_c = AREA(c) = (\frac{3a^2\sqrt{3}}{2})(c) = \frac{3a^2c\sqrt{3}}{2} \quad (3.7a)$$

- (б) Бу муоммани ечимини топиш учун, бизнинг киладиган ишимиз панжара параметрини ундаги атом R радиуси билан боғлаш, яний:

$$a = 2R$$

энди хосил бўлган катталикни 3.7а – формуладаги a билан алмаштирамиз:

$$V_c = \frac{3(2R)^2 c \sqrt{3}}{2} = 6R^2 c \sqrt{3} \quad (3.7b)$$

3.5 ЗИЧЛИКНИ ХИСОБЛАШ

Агар металнинг кристалл панжара тури маълум бўлса, унда шу металнинг назарий p зичлигини формула ёрдамида хисоблаш мумкин:

$$p = \frac{nA}{V_C N_A}, \quad (3.8)$$

бунда:

n – элементар ячейкага тегишли бўлган атомлар сони;

A – шу металнинг нисбий атомар массаси;

V_C – элементар ячейка хажми;

N_A – Авагадро сони ($6,02 \cdot 10^{23}$ атом/моль).

МУАМОЛИ ВАЗИФА 3.4

Метал зичлигини назарий хисоблаш

Вазифа: Мис металининг атом радиуси $0,128$ нм. га тенг бўлиб мис ёклари марказлашган куб ячейка хосил килади, унинг нисбий атомар массаси – $63,5$ г/моль. Мисс металининг зичлигини хисоблаб топинг.

Ечими;

Бу вазифани ечиш учун (3.8) формуладан файдоланилади. Металнинг кристалл панжараси – ёклари марказлашган ячейка бўлгани учун битта ячейкага 4 та атомб тегишли. Миснинг нисбий атом массаси $A_{Cu} = 63,5$ г/моль. Элементар ячейканинг хажми эса 3.1 – вазифажа аникланган бўлиб ёклари марказлашган куб кристалл ячейканинг хажми $16R^3\sqrt{2}$ га тенг, ундаги $R = 0,128$ нм.

Аникланган катталикларни 3.8 – формулага кўямиз;

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{nA_{Cu}}{V_C N_A} = \frac{nA_{Cu}}{(16R^3\sqrt{2})N_A} \\ &= \frac{(4 \text{ atoms/unit cell})(63.5 \text{ g/mol})}{[16\sqrt{2}(1.28 \times 10^{-8} \text{ cm})^3/\text{unit cell}](6.022 \times 10^{23} \text{ atoms/mol})} \\ &= 8.89 \text{ g/cm}^3 \end{aligned}$$

Кўпгина адабийтларда миснинг зичлиги $8,89$ г/см 3 га тенг деб келтирилган. Назарий хисобларни амалий экспериментал олинган натижаларга мос келишилигини кўрсатябди.

3.6 ПОЛИМОРФИЗМ ВА АЛЛОТРОПИЯ

полиморфизм Бази метал ва нометаллар бир эмас бир нечта кристалл структура тузилишига эга бўлиши мумкин, бу холат **полиморфизм** деб ном олган ибора билан маълум. Каттиқ жисимларн ташкил этадиган заррачалар маълум шароитда бир

аллотропия

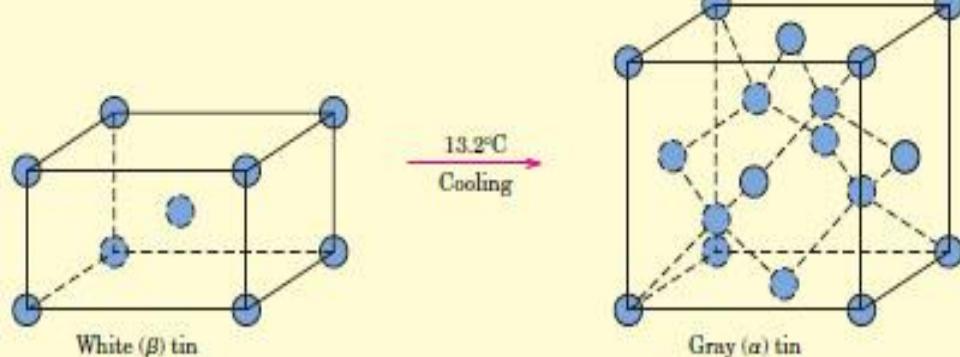
кристалл структурадан бошка кристалл структурага ўтиш ходисаси **аллотропия** деб аталади. Бир кристалл туридан иккинчи кристалл турига ўтиши энг аввало атроф мухит харорати ва босимига боғлик. Бунга хозирда маълум бўлган мисоллардан бири бу углерод: графит – углероднинг аллатропик модификацияси бўлиб у оддий шароитда хосил бўлади, аммо олмос - углероднинг яна бир модификацияси эса жуда юкори босимларда хосил бўлади. Бундан ташкири бундай холат темирда хам кузатилади, мисол, оддий хона хароратида соф темир ХМК – кристалл панжарага эга бўлса, харорат 912 °C (1674 °F) да ЁМК – кристалга ўтиб олади. Кўп холларда полиморфик ўзгаришлар материалнинг физик-механик хоссаларини ўзгаришига олиб келади.

ҚИЗИҚА РЛИ МАЪЛУМОТ

Калай (унинг аллатропик ўзгаришлари)

Аллатропик шикил ўзгаришга учрайдиган металларда бири бу калай метали. Ок (ёки β) калай хона хароратида хажми марказлашган куб кристалл панжара эга, ўзгариш $13,2^{\circ}\text{C}$ ($55,8^{\circ}\text{F}$)

бўлса, кўнғир (ёки α) калай, олмос кристалл панжара турига эга (яний, олмос куб кристалл структура тури); унинг бу кристалл структураси схематик равишда келтирилган:

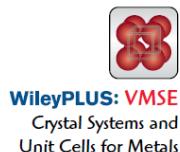


Бу ўзгаришларнинг кечиб ўтиш даражаси ва тезлиги жуда кичик, аммо $13,2^{\circ}\text{C}$ ($55,8^{\circ}\text{F}$) хароратда бу жараён жуда тез содир бўлади. Ок калайнинг кўнғир калайга ўтиши натижасида металнинг хажми (27%) каттаяди, шунга мос равишида унинг зичлиги камаяди ($7,3$ дан $5,77$ g/cm^3 га камаяди). Металда содир бўладиган хажмий ўзгаришлар уни бутун металдан майдаланган кукунга айланниб колишига сабаб бўлади. Бу жараён оддий шароитларда хеч кандай хавф туғдирмайди чунки хажим ўзгаришлар жуда секин содир бўлади. Ок калайнинг кўнғир холатига ўтиши туфайли 1850 йилда жуда кўнгилсиз вакиялар рўй берган. Айнан шу иили узок вакт киши жуда совук келган. Буни натижасида Русс аскарларнинг калайдан ясалган тутмалари ва черкавларнинг конғироклари майдаланиб кетган. Бўлиб ўтган бу ходиса тарихда калай касаллийги деб ном олган. Расмда тадқикотлар ўтказиш учун



ишлатиладиган ок калайни намунаси кўрсатилган. Унинг тепа кисмидаги $-13,2^{\circ}\text{C}$ хароратда узок вакт ушлаб туриш натижасида парчаланган кўнғир калай бўлакчалари кўрсатилган.

3.7 КРИСТАЛЛИК СИСТЕМАЛАР



кристалл системани

Кристалл структураларнинг жуда кўп турлари бўлгани учун уларни ўрганиш асосан кристалл ячейка турига кўра ёки улардаги атомларнинг жойлашиш тартибига кўра гурухларга ажратиб ўрганиш кулай. Худи шундай гурухланиш элементра ячейканинг геометриясига, яний унинг паралелепипед элементар ячейка шаклига, бунда панчарадаги атомларнинг жойлаш тартиби ахамиятга эга эмас. Бу асос чегараси элементар ячейканинг бирор бир бурчакларидан ўтган XYZ ўклари ичида ётади; хар бир X , Y , ва Z ўклари паралелипеднинг бошланиш бурчагидан кейинги бурчакгача чўзилиб ёкларига устма уст тушган бўлиб бу холат 3.5 – расмда кўрсатилган. Элементар ячейканинг геометрияси айнан олтита прараметрлар: a , b , ва c тамонлар ўлчамлари хамда учта ўклар орасидаги: α , β , γ бурчаклар нуктаи назаридан аникланади. Уларнинг жойлари ва белгиланишлари 3.5 – расмда кўрсатилган кўпинча уларга кристалл структурасининг параметрлари дейлади.

Параметр: a , b , ва c хамда : α , β , γ асосида еттига комбенация (имконият) мавжуд бўлиб уларнинг хар бири ўзига тегишли бўлган кристалл системан ташкил этади. Бу еттига система куб **кристалл системани** ташкил этади: куб, гексагонал, тетрагонал, ромбейдрик, орторомбик, моноклик ва триклиник. Хар бир панжара параметрлари ва уларга тегишли бўлган элементар ячейка эскизлари 3.2 – жадвалда келтирилган. Куб: $a = b = c$ ва бурчаклари $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ системаси энг юкори симметрия даражасига эга. Энг паст: $a \neq b \neq c$ ва $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ геометрик симметрияга эга бўлгани бу триклиник система хисобланади.

Юкоридаги мулохазаларда келиб чикадики металларнинг кристалл структураси асосан ХМК ва ЁМК кристалл бўлиб кам холларда ГК панжаралар хосил килади. Умуман олиб карайдиган бўлсак олтибурчакли ГК панжара асосан учта паралелепипеддан ташкил топган, буни 3.2 – жадвалдан кўриш мумкин.

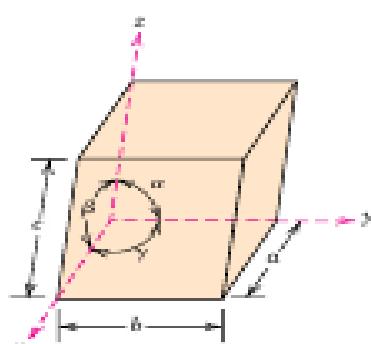


3.2 Назорат учун саволлар

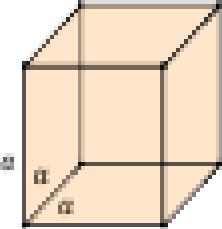
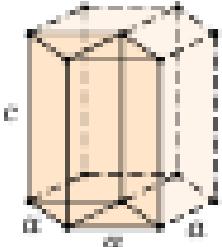
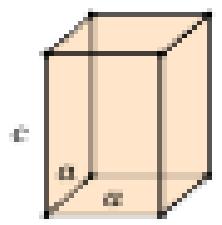
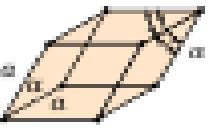
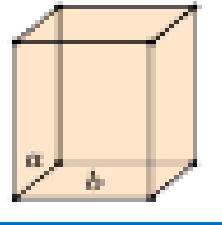
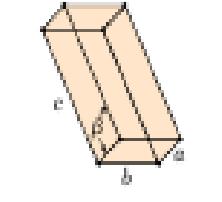
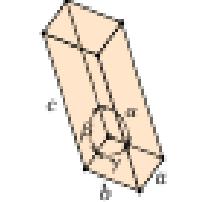
Кристалл структура билан кристалл системанинг бир биридан кандай фарки бор?

Шуни айтиб ўтиш кераки юкорида кўриб чикилган асосий тушинчалар ва коидалар бу бобда хам айнан каттик керамик ва полимер системаларга хам тегишли (12 ва 14 боблар). Мисол, кристалл системалар асосан элементар ячейка нуктаи назаридан изохланаги бу эса бошка турдаги кристалл системаларни тадқик килишда бир катор кийнчиликларни келтириб чикаради. Бундан ташкари бошка системаларни атомлар зич жойлашув коэффиценти ва солиштирма зичлигини 3.3 ва 3.6 – формулаарар ёрдамида аниклаш хамда элементар ячейканинг геометрия нуктаи назаридан кристалл система чегарачида бази материалларнинг гурухланишини кўриб чикамиз.

3.5 – расм. Элементар ячейка: XYZ –
кардената ўклари, (a , b , c) ячейка даврлари ва
(α , β , γ) ўклар аро бурчаклари



3.2 – жадвал Еттиң кристалл системасын тегишли бўлган элементар ячейканинг эскизлари ва уларнинг параметрлари

<i>Кристалл системалар</i>	<i>Давларининг богликлиги</i>	<i>Бурчакларнинг богликлиги</i>	<i>Ячейкалар эскизлари</i>	
 WileyPLUS: VMSE Crystal Systems and Unit Cells for Metals	Куб	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
 Гексагонал	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$		
 Тетраганла	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		
 Ромбэйдрик	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$		
 Орторомбик	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$		
 Моноклик	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$		
 Триклик	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$		

КРИСТАЛЛОГРАФИК НУТА, ТЕКИСЛИК ВА ЙЎНАЛИШЛАР

Кристалли материаллар билан ишлашда элементар ячайка ичидағи атомлар ётган нуктанинг жойлашишини, кристаллографик йўналишини ва кристаллографик текисликларни аниклашга тўғри келади. Шу максадда халкаро кристаллография жамяти шартли учта сон ёки индекслар деб номланадиган белгиланиш киритган, улар нуктанинг жойини, йўналишини ва жойлашиш теккислигини билдиради. Биуни асосини ячейканинг битта бурчак учидан бошланган учта X, Z, ва Y ўклардан ташкил топган фазовий координата системаси ташкил этади ўклар ячейканинг ён тамонларига устма уст тушади, у 3.5 – расмда кўрсатилган. Баз бир кристаллографик, айнан: гексагонал, робоэйдрик, моноклин ва триклин системалар учун декарт координатлар системасидан фарқли ўларок учта ўқ бир бири билан перпендикуляр эмас.

3.8. КОРДЕНЕТА НУКТАЛАРИ

Куп холларда элементар панжара доирасида ётган нукталарнинг жойини аниклашга тўғри келади. Буни нуктанинг учта: q, r, ва s индекслари оркали аниклаш мумкин. Бу индекслар – элементар ячейканинг ён тамонидан ўтувчи q, r, ва s учта ўқга тегишли бўлган улишлари, яний q – ячейканинг X ўқининг узунлиги бўйча улиши, r – худи шундай аммо Y ўқининг узунлик улиши, ва s – Z ўқининг узунликдаги улиши ёки бундай:

$$qa = X \text{ ўқига тегишли бўлган координата нукта оролиги} \quad (3.9a)$$

$$rb = Y \text{ ўқига тегишли бўлган координата нукта оролиги} \quad (3.9b)$$

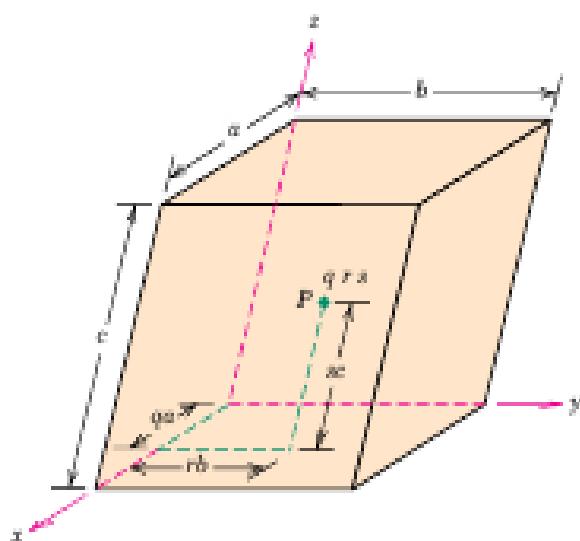
$$sc = Z \text{ ўқига тегишли бўлган координата нукта оролиги} \quad (3.9c).$$

Бу холатни тўлик тушунтриб берувчи холат 3.6 – расмда келтирилган. Берилган P – нуктани жойини учта q, r, ва s катталик оркали аниклаймиз: бунда q – X ўқида ётган a – бўлакнинг улиши; r – эса Y ўқида ётган b – бўлакнинг улиши, худи шу тарзда s – Z ўқида ётган c – бўлакнинг улиши. Шундай килиб P – нуктанинг холати учта q, r, ва s индекслар ётдамида аникланади, улар бирга тенг ёки ундан кичик. келажақда биз бу индексларни велгуллар билан ажратмаймиз.

3.6 – расм. Учта q, r, ва s индекслар ёрдамида

P – нуктанинг корденацасини аниклаш.

Карденақати q – бу a – га тегишли бўлган ён тамон узунлиги, r – эса b – га тегишли бўлган ён тамон узунлиги, s – эса c – га бегишли бўлган ён тамон узунлиги.

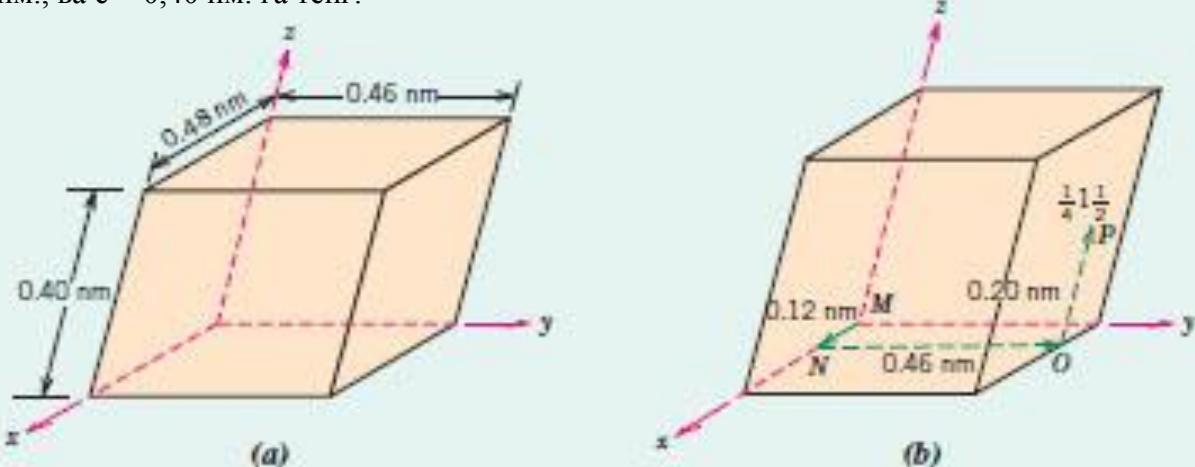


МУАМОЛИ ВАЗИФА 3.5.

Ячейка бирлигиде $\frac{1}{4} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ а – расмда келтирилган нуктанинг координатасини топинг.

Ечими

Рамса ячейка бирлигиде ячейканынг ён тамонларининг узунлиги $a = 0,48$ нм., $b = 0,46$ нм., ва $c = 0,40$ нм. га тенг.



Юкорида кўриб чикилган муроҳазага биноан ён тамон узунликлар мос равища: $q = \frac{1}{4}$, $r = 1$ ва $s = \frac{1}{2}$. Шунинг учун энг аввало координата бошини М нукта деб белгилаймиз, у б – рамда кўрсатилган.

Хисоблар 3.9а 3.9с га биноан, шундай натижа беради:

Юкорида келтирилган элементар ячейка доирасидаги координаталарга эга бўлган нуктанинг жойини аниклаш учун, энг аввало барча ўкларнинг кесишган жойига белгилаб олинади ($M -$

$$\begin{aligned} \text{lattice position referenced to the } x \text{ axis} &= qa \\ &= \left(\frac{1}{4}\right)a = \frac{1}{4}(0.48 \text{ nm}) = 0.12 \text{ nm} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{lattice position referenced to the } y \text{ axis} &= rb \\ &= (1)b = (1)(0.46 \text{ nm}) = 0.46 \text{ nm} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{lattice position referenced to the } z \text{ axis} &= sc \\ &= \left(\frac{1}{2}\right)c = \left(\frac{1}{2}\right)(0.40 \text{ nm}) = 0.20 \text{ nm} \end{aligned}$$

нукта билан белгиланган) кейин нуктадан X ўки йўналиши бўйлаб 0,12 нм. бўлак кўйилади, буни натижасида яна битта нукта хосил бўлади (бу нукта N билан кўрсатилган) бирлик улиш кўйилади (M – нукта хзосил бўлади). Худи шу тарзда N нукта дан Y ўки йўналиши бўйлаб 0,46 нм. бўлаги кўйилади, буни натижасида О нукта хосил бўлади. Нихоят худи шу тарзда О нуктадан Z ўки йўналиши бўйлаб 0,20 нм. бўлак кўйилади, бўлакнинг охири Р нуктани келтириб чиқаради. Шундай килиб биз $\frac{1}{4}, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ -индексларга мос келувчи Р нуктанинг жойини аниклаб оламиз.

