##### ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ УПРАВЛЕНИЯ

###### ИНСТИТУТ СОЦИОЛОГИИ И УПРАВЛЕНИЯ ПЕРСОНАЛОМ

***СПЕЦИАЛЬНОСТЬ: МЕНЕДЖМЕНТ***

***СПЕЦИАЛИЗАЦИЯ: УПРАВЛЕНИЕ ПЕРСОНАЛОМ***

К У Р С О В А Я Р А Б О Т А

НА ТЕМУ:

**ТВЕРДЫЕ КРИСТАЛЛЫ**

*Выполнила студентка:* **Савдур А.С.**

*Студенческий билет №:* **С-84-98-УП**

*Курс* **I** *группа* **1**

*Дата выполнения работы:* **10.05.99**

*Руководитель:* **Горбатова**

***Содержание.***

### I. Аннотация……………………………………………………….2

II. Введение…………………………………………………………3

III. Основная часть……..……………………………………….4-35

1.Что такое кристалл……………………………………….4-5

2. Монокристаллы и кристаллические агрегаты……….....5-6

3.Симметрия в кристаллах………………………………….6-9

4.Форма кристаллов……………………………………….9-12

5. Закон постоянства двугранных углов . Отклонения

от закона……………………………………………12-15

6. Как определить вещество по форме его кристалла….15-17

7. Атомная структура кристаллов…………..…………...17-20

8. Теория плотнейших шаровых упаковок…..……….…20-23

9. Есть ли беспорядок в кристалле?……………………...23-27

10. О некоторых свойствах кристаллов..………………..27-28

11. Волны света в кристаллах…………………………….28-30

12. Как растет кристалл…………………………………...30-32

13. Атомы блуждают по кристаллу……………...……....32-34

14. О прочности кристаллов……………………………...34-35

IV. Заключение……..………………………………………………………36

V. Список используемой литературы……..………………………………37

***Аннотация.***

Данная работа посвящена кристаллам. Даны наиболее общие сведения о форме, структуре и симметрии кристаллов. Также раскрыт механизм роста. Отдельные главы посвящены теории плотнейших шаровых упаковок, закону о сохранении двугранных углов и прочности кристаллов. Работа содержит сведения о беспорядке и дефектах в кристалле. Для более наглядного описания классификации и свойств кристаллов приведены две таблицы.

Словно волшебный скульптор,

Светлые грани кристаллов

Лепит бесцветный раствор.

Н.А.Морозов

## Введение.

Кристаллы одни из самых красивых и загадочных творений природы. В настоящее время изучением многообразия кристаллов занимается наука кристаллография. Она выявляет признаки единства в этом многообразии, исследует свойства и строение как одиночных кристаллов, так и кристаллических агрегатов. Кристаллография является наукой, всесторонне изучающей кристаллическое вещество. Данная работа также посвящена кристаллам и их свойствам.

В давние времена считалось, что кристаллы представляют собой редкость. Действительно, нахождение в природе крупных однородных кристаллов - явление нечастое. Однако мелкокристаллические вещества встречаются весьма часто. Так, например, почти все горные породы: гранит, песчаники известняк - кристалличны. По мере совершенствования методов исследования кристалличными оказались вещества, до этого считавшиеся аморфными. Сейчас мы знаем, что даже некоторые части организма кристалличны, например, роговица глаза.

В настоящее время кристаллы имеют большое распространение в науке и техники, так как обладают особыми свойствами. Такие области использования кристаллов, как полупроводники, сверхпроводники, пьезо- и сегнетоэлектрики, квантовая электроника и многие другие требуют глубокого понимания зависимости физических свойств кристаллов от их химического состава и строения.

В настоящее время известны способы искусственного выращивания кристаллов. Кристалл можно вырастить в обыкновенном стакане, для этого требуется лишь определенный раствор и аккуратность с которой необходимо ухаживать за растущим кристаллом.

## Что такое кристалл.

В школьных учебниках кристаллами обычно называют твердые тела, образующихся в природных или лабораторных условиях и имеющие вид многогранников, которые напоминают самые непогрешимо строгие геометрические построения. Поверхность таких фигур ограничена более или менее совершенными плоскостями- гранями , пересекающимися по прямым линиям- ребрам. Точки пересечения ребер образуют вершины. Сразу же следует оговорится, что приведенное выше определение требует существенных поправок. Вспомним, например, всем известную горную породу границ, состоящую из зерен полевого шпата, слюды и кварца. Все эти зерна являются кристаллами, однако, их извилистые зерна не сохранили прежней прямолинейности и плоскогранности, а следовательно не подходят к вышеуказанному описанию. Одновременный рост всех составляющих гранит кристаллов, мешавших друг другу развиваться, и привел к тому, что отдельные кристаллы не смогли получить свойственную им правильную многогранную форму. Итак, для образования правильно ограненных кристаллов необходимо, чтобы ничто не мешало им свободно развиваться, не теснило бы их и не препятствовало их росту.

Кристаллов в природе существует великое множество и так же много существует различных форм кристаллов. В реальности, практически невозможно привести определение, которое подходило бы ко всем кристаллам. Здесь на помощь можно привлечь результаты рентгеновского анализа кристаллов. Рентгеновские лучи дают возможность как бы нащупать атомы внутри кристаллического тела и определяет их пространственное расположение. В результате было установлено, что решительно все кристаллы построены из элементарных частиц, расположенных в строгом порядке внутри кристаллического тела. Упорядоченность расположения таких частиц и отличает кристаллическое состояние от некристаллического, где степень упорядоченности частиц ничтожна.

Во всех без исключения кристаллических постройках из атомов можно выделить множество одинаковых атомов, расположенных наподобие узлов пространственной решетки. Чтобы представить такую решетку, мысленно заполним пространство множеством равных параллелепипедов, параллельно ориентированных и соприкасающихся по целым граням. Простейший пример такой постройки представляет собой кладка из одинаковых кирпичиков. Если внутри кирпичиков выделить соответственные точки, например, их центры или вершины, то мы и получим модель пространственной решетки. Для всех без исключения кристаллических тел характерно решетчатое строение.

Вот теперь мы подошли к возможности дать общее определение для кристаллов. Итак, кристаллами называются «*все твердые тела, в которых слагающие их частицы (атомы, ионы, молекулы) расположены строго закономерно наподобие узлов пространственных решеток*»[4]. Это определения является максимально приближенным к истине, оно подходит к любым однородным кристаллическим телам: и булям (форма кристалла, у которого нет ни граней, ни ребер, ни выступающих вершин), и зернам, и плоскогранным фигурам)

## Монокристаллы и кристаллические агрегаты.

В отличие от других агрегатных состояний, кристаллическое состояние многообразно. Одни и те же по составу молекулы могут быть упакованы в кристаллах разными способами. От способа же упаковки зависят физические и химические свойства вещества. Таким образом одни и те же по химическому составу вещества на самом деле часто обладают различными физическим свойствами. Для жидкого состояния такое многообразие не характерно, а для газообразного- невозможно.

Если взять, например, обычную поваренную соль, то легко увидеть даже без микроскопа отдельные кристаллики. Каждый кристаллик есть вещество NaCl, но одновременно он имеет черты индивидуума. Он может быть большим или малым кубическим или прямоугольно-параллелепипедальным, по-разному ограненным и т.д.

В жидкости нельзя увидеть отдельные индивидуумы- капельки, в кристаллическом же веществе они видимы.

Если мы хотим подчеркнуть, что имеем дело с одиночным, отдельным кристаллом, то называем его *монокристаллом,* чтобы *подчеркнуть* что речь идет о скоплении многих кристаллов, используется термин *кристаллический агрегат.* Если в кристаллическом агрегате отдельные кристаллы почти не огранены, это может объяснятся тем, что кристаллизация началась одновременно во многих точках вещества и скорость ее была достаточно высока. Растущие кристаллы являются препятствием друг другу и мешают правильному огранению каждого из них.

В данной работе речь пойдет в основном о монокристаллах, а так как они являются составными частями кристаллических агрегатов, то их свойства будут схожи со свойствами агрегатов.

## Симметрия в кристаллах.

Рассматривая различные кристаллы мы видим ,что все они разные по форме, но любой из них представляет симметричное тело. И действительно симметричность это одно из основных свойств кристаллов. К понятию о симметрии мы привыкли с детства. Симметричными мы называем тела, которые состоят из равных одинаковых частей. Наиболее известными элементами симметрии для нас являются плоскость симметрии (зеркальное отображение), ось симметрии (поворот вокруг оси, перпендикулярной к плоскости ). По углу поворота различают порядок оси симметрии, поворот на 180о – ось симметрии 2-ого порядка, 120о – 3-его порядка и так далее. Есть и еще оди элемент симметрии - центр симметрии. Представьте себе зеркало, но не большое, а точечное: точку в которой все отображается как в зеркале. Вот эта точка и есть центр симметрии. При таком отображении отражение поворачивается не только справа налево , но и с лица на изнанку.

Все кристаллы симметричны. Это значит, что в каждом кристаллическом многограннике можно найти плоскости симметрии, оси симметрии, центры симметрии и другие элементы симметрии так, чтобы совместились друг с другом одинаковые части многогранника. Введем еще одно понятие относящиеся к симметрии *полярность.* Представим конус и цилиндр, у обоих объектов есть по одной оси симметрии бесконечного порядка, но они различаются полярностью, у конуса ось полярна (представим центральную ось в виде стрелочки, указывающей к вершине), а у цилиндра ось неполярна.

Поговорим о видах симметрии в кристалле. Прежде всего в кристаллах могут быть оси симметрии только 1, 2, 3, 4 и 6 порядков. Представим плоскость, которую надо полностью покрыть семи-,восьсми-, девятиугольниками и т.д., так чтобы между фигурами не оставалось пространства, это не получится, пятиугольниками покрыть плоскость так же нельзя. Очевидно, оси симметрии 5, 7-го и выше порядков не возможны, потому что при такой структуре атомные ряды и сетки не заполнят пространство непрерывно, возникнут пустоты, промежутки между положениями равновесия атомов. Атомы окажутся не в самых устойчивых положениях и кристаллическая структура разрушится.

В кристаллическом многограннике можно найти разные сочетания элементов симметрии – у одних мало, у других много. По симметрии, прежде всего по осям симметрии, кристаллы делятся на три категории.

К высшей категории относятся самые симметричные кристаллы, у них может быть несколько осей симметрии порядков 2,3 и 4, нет осей 6-го порядка, могут быть плоскости и центры симметрии. К таким формам относятся куб, октаэдр, тетраэдр и др. Им всем присуща общая черта: они примерно одинаковы во все стороны.

У кристаллов средней категории могут быть оси 3, 4 и 6 порядков, но только по одной. Осей 2 порядка может быть несколько, возможны плоскости симметрии и центры симметрии. Формы этих кристаллов: призмы, пирамиды и др. Общая черта: резкое различие вдоль и поперек главной оси симметрии.

У кристаллов низшей категории не может быть ни одной оси симметрии 3 4 и 6 порядков, могут быть только оси 2 порядка, плоскости или центр симметрии. Структура данных кристаллов самая сложная.

Из кристаллов к высшей категории относятся: алмаз, квасцы, гранаты германий, кремний, медь, алюминий, золото, серебро, серое олово вольфрам, железо; к средней категории – графит, рубин, кварц, цинк, магний, белое олово, турмалин, берилл; к низшей – гипс, слюда, медный купорос, сегнетовая соль и др. Конечно в этом списке не были перечислены все существующие кристаллы, а только наиболее известные из них. Категория, к которой принадлежит кристалл характеризует его физический свойства.

Категории в свою очередь разделяются на семь сингоний. В переводе с греческого «сингония» означает «сходноугольство». В сингонию объединяются кристаллы с одинаковыми осями симметрии, а значит, со сходными углами поворотов в структуре. Классификация кристаллов по категориям и сингониям приведена в таблице 1.

Плоскости и центр симметрии могут быть в любой сингонии. Всего сингоний семь.

Каждый кристаллический многогранник обладает определенным набором элементов симметрии. Полный набор всех элементов симметрии, присущих данному кристаллу называется *классом симметрии.* Сколько же всего таких наборов? Их количество ограничено. Математическим путем было доказано, что в кристаллах существует 32 вида симметрии.

Таб.1

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Категория | Сингония | Характерная симметрия кристаллов |
| Высшая | Кубическая | Несколько осей симметрии порядка выше,, чем 2; обязательно четыре оси симметрии 3-ого порядка |
| Средняя | Тригональная  Тетрагональная  Гексагональн  ая. | Одна ось симметрии порядка выше, чем 2, а именно:  Одна ось 3-ого порядка  Одна ось 4-ого порядка  Одна ось 6-ого порядка |
| Низшая | Ромбическая  Моноклинная  Триклинная | Нет осей симметрии порядка выше, чем 2.(Эти сингонии различаются по углам между кристаллографическими осями координат) |

## Форма кристаллов.

Изучение внешней формы кристаллов началось прежде изучения симметрии, однако только после вывода 32 видов симметрии появилась надежная основа для создания геометрического учения о внешней форме кристаллов. Основным его понятием является понятие простой формы.

# «Простой формой называется многогранник, который может быть получен из одной грани с помощью элементов симметрии(оси, плоскости и центра симметрии)»[4].

Простые формы могут быть общими и частными в зависимости от того, как расположена исходная грань по отношению к элементам симметрии. Если она расположена косо, то простая форма полученная из нее будет общей. Если же исходная форма расположена параллельно или перпендикулярно к элементам симметрии, то получается частная простая форма. Простые формы так же могут быть закрытыми и открытыми. Закрытая форма может одна образовать кристаллический многогранник, в то время как одна открытая простая форма замкнутого многогранника образовать не может.

Каждая грань кристалла представляет собой плоскость, на которой располагаются атомы. Когда кристалл растет все грани передвигаются параллельно сами себе, так как на них откладываются все новые и новые слои атомов. По этой причине, параллельно каждой грани в структуре кристалла располагается огромное количество атомных плоскостей, которые когда-то в начальных стадиях роста тоже располагались на гранях кристалла, но в процессе роста оказались внутри него.

Ребра кристалла представляют собой прямые, на которых атомы располагаются в ряд. Таких рядов в кристалле тоже огромное количество и они располагаются параллельно действительным ребрам кристалла.

Кристаллический многогранник обычно представляет собой комбинацию нескольких простых форм, грани (или ребра) которых являются *действительными гранями (ребрами)*. Грань, которой на данном кристалле нет, но которая может оказаться на других кристаллах того же вещества, называется *возможной гранью.* Возможной гранью может быть плоскость, проходящая через два действительных или возможных ребра кристалла. Точно так же, если возьмем две реальные грани, которые на данном кристаллическом многограннике не пересекаются, то линия, параллельная линии их пересечения, будет возможным ребром кристалла.

Совокупность граней, пересекающихся в параллельных ребрах, называется поясом или зоной. А параллельная этим ребрам линия называется осью зоны.

Необходимо упомянуть, что кристаллографами был создан строго математический вывод всех возможных на свете кристаллических форм, и теперь можно не только предположить, какова будет форма кристалла, а с большой уверенностью рассчитать будущую форму.

В течении долгих лет геометрия кристаллов казалась таинственной и неразрешимой загадкой. В 1619 великий немецкий математик и астроном Йоган Кеплер обратил внимание на шестерную симметрию снежинок. Он попытался объяснить ее тем, что кристаллы построены из мельчайших одинаковых шариков, теснейшим образом присоединенных друг к другу (вокруг центрального шарика можно в плотную разложить только шесть таких же шариков). По пути намеченному Кеплером пошли в последствии Роберт Гук и М. В. Ломоносов. Они так же считали, что элементарные частицы кристаллов можно уподобить плотно упакованным шарикам. В наше время принцип плотнейших шаровых упаковок лежит в основе структурной кристаллографии, только сплошные шаровые частицы старинных авторов заменены сейчас атомами и ионами.

Через 50 лет после Кеплера датский геолог, кристаллограф и анатом Николас Стенон впервые сформулировал основные понятия о формировании кристаллов: "Рост кристалла происходит не изнутри, как у растений, но путем наложения на внешние плоскости кристалламельчайших частиц, приносящихся извне некоторой жидкостью". Эта идея о росте кристаллов в результате отложения на гранях все новых и новых слоев вещества сохранила свое значение и до сих пор.

Очень часто кристаллы одного и того же вещества срастаются друг с другом закономерным образом, образуя так называемый двойник. При этом обычно возникают дополнительные элементы симметрии, называющиеся в данном случае двойниковые элементы симметрии. Если сросток состоит из многих кристаллов, закономерно чередующихся друг с другом, то он называется полисинтетическим двойником. Двойниковые кристаллы являются очень распространенным явлением в природе. Многие вещества, получаемые в лаборатории, также часто имеют двойники как простые, так и полисинтетические.

## Закон постоянства двухгранных углов. Отклонения от закона.

Симметричность кристаллов всегда привлекала внимание ученых. Уже в 79 г. нашего летоисчисления Плиний Старший упоминает о плоскогранности и прямобедренности кристаллов. Этот вывод и может считается первым обобщением геометрической кристаллографии. С тех пор на протяжении многих столетий весьма медленно и постепенно накапливался материал, позволивший в конце XVIII в. открыть важнейший закон геометрической кристаллографии -закон постоянства двугранных углов. Этот закон связывается обычно с именем французского ученого Роме де Лиля, который в 1783г. опубликовал монографию, содержащую обильный материал по измерению углов природных кристаллов. Для каждого вещества (минерала), изученного им, оказалось справедливым положение, что углы между соответственными гранями во всех кристаллах одного и того же вещества являются постоянными.

Не следует думать, что до Роме де Лиля никто из ученых не занимался данной проблемой. История открытия закона постоянства углов прошла огромный, почти двухвековой путь, прежде чем этот закон был отчетливо сформулирован и обобщен для всех кристаллических веществ. Так, например, И. Кеплер уже в 1615г. указывал на сохранение углов в 60о между отдельными лучиками у снежинок. В 1669 г. Н. Стенон открыл закон постоянства углов в кристаллах кварца и гематита. Внимательно разглядывая реальные кристаллы кварца, Стенон также обратил внимание на их отклонение от идеальных геометрических многогранников с плоскими гранями и прямыми ребрами. В своем трактате он впервые ввел в науку реальный кристалл с его несовершенствами и отклонениями от идеализированных схем. Однако все эти отклонения не помешали ученому открыть на тех же кристаллах кварца основной закон геометрической кристаллографии. Однако написал он об этом очень кратко в пояснениях к рисункам, приложенным к его сочинению, поэтому честь называться автором закона досталась Лилю. Годом позже Стенона Э. Бартолин сделал тот же вывод применительно к кристаллам кальцита, а в 1695 г. Левенгук - к кристаллам гипса. Он показал, что и у микроскопически малых и у больших кристаллов гипса углы между соответственными гранями одинаковы. В России закон постоянства углов был отурыт М. В. Ломоносовым для кристаллов селитры (1749г.) пирита, алмаза и некоторых других минералов. Однако вернемся к определению данному Лилем. В его версии закон постоянства углов звучит следующим образом: "Грани кристалла могут изменятся по своей форме и относительным размерам, но их взаимные наклоны постоянны и неизменны для каждого рода кристаллов."

Итак, все кристаллы обладают тем свойством, что углы между соответственными гранями постоянны. Грани у отдельных кристаллов могут быть развиты по-разному: грани, наблюдающиеся на одних экземплярах, могут отсутствовать на других - но если мы будем измерять углы между соответственными гранями, то значения этих углов будут оставаться постоянными независимо от формы кристалла.

Однако, по мере совершенствования методики и повышения точности измерения кристаллов выяснилось, что закон постоянства углов оправдывается лишь приблизительно. В одном и том же кристалле углы между одинаковыми по типу гранями слегка отличаются друг от друга. У многих веществ отклонения двухгранных углов между соответственными гранями достигает 10 -20', а в некоторых случаях и градуса.

Грани реального кристалла никогда не представляют собой идеальных плоских поверхностей. Нередко они бывают покрыты ямками или бугорками роста, в некоторых случаях грани представляют собой кривые поверхности, например у кристаллов алмаза. Иногда замечаются на гранях плоские участки, положение которых слегка отклонено от плоскости самой грани, на которой они развиваются. Эти участки называются в кристаллографии вицинальными гранями , или просто вициналями. Вицинали могут занимать большую часть плоскости нормальной грани, а иногда даже полностью заменить последнюю. Иногда на гранях наблюдаются ступеньки имеющие форму пандуса. Таким образом можно говорить о скульптуре граней, являющейся причиной отклонения от равенства двугранных углов. Изучением различных наростов занимается раздел кристаллографии - Морфология внешней формы кристаллов.

Наблюдаются, конечно, и более закономерные изменения двугранных углов, например зависимость от температуры. В таблице 2 приведены значения углов между гранями кварца при разной температуре.

### Таб.2

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| T, oC | Угол | T, oC | Угол |
| -166  0  21  100  200 | 128o11’54’’  128o12’51”  128o13’12”  128o13’36”  128o14’54” | 300  400  500  550  575 | 128o16’12”  128o17’54”  128o20’12”  128o22’00”  128o23’18” |

В заключении раздела о главном геометрическом законе кристаллографии необходимо сказать о случаях резкого изменения углов кристаллов., которое возникает при полиморфном превращении вещества ( образование данным веществом разные по симметрии и форме кристаллы), явлении, открытом позже формулировки закона постоянства углов. Одно и то же вещество при полиморфном превращении скачком меняет свои свойства. Например, переход ромбической серы в моноклинную сопровождается увеличением удельного объема на 0.014 сантиметра на грамм и термическим эффектом в 3.12 калорий на грамм. Еще резче меняет свои свойства кристаллический углерод при переходе алмаза в графит. Плотность алмаза 3.5, графита 2.2; твердость алмаза 10, графита 1 и т.д.

При полиморфном превращении наряду со скачкообразным изменением физических свойств, скачком меняется и внешняя форма кристаллов, при этом совокупность двугранных углов одной модификации может совсем не соответствовать совокупность двугранных углов другой.

Учитывая все вышесказанное, можно так сформулировать закон постоянства углов: *«Во всех кристаллах, принадлежащих к одной полиморфной модификации данного вещества, при одинаковых условиях углы между соответствующими гранями (и ребрами) постоянны.»*

## Как определить вещество по форме его кристалла.

К концу XIX-XX века в науке накопилось множество данных о внешней форме и углах кристаллов Е. С. Федоров критически пересмотрел и суммировал весь фактический материал по измерениям кристаллов, накопленный к тому времени; произвел сам множество кристаллографических измерений ; обработал эти измерения новым, созданным им, оригинальным методом; сопоставил эти измерения с развитой им теорией строения кристаллов и, соединив воедино опыт и теорию создал *кристаллохимический анализ.*

На основе кристаллохимического анализа можно было определять состав вещества, исходя из внешней формы его кристаллов. По внешней форме кристалла этот анализ позволял получить первые схематические представления о внутреннем строении кристалла.

Кроме углов между гранями, Федоров принял во внимание еще и то, как развиваются грани природных кристаллов. Формы одного и того же вещества могут быть весьма разнообразными. При идеальных условия роста все грани кристалла развиваются свободно, но в реальных условия они чаще всего развиваются неодинаково. Природные кристаллы одного и того же минерала из разных месторождений могут оказаться совсем различными, вовсе не похожими друг на друга. Тем не менее, как указал ученый, некоторые грани кристалла все же наиболее характерны для данного вещества, они встречаются на разных кристаллах чаще всего – почти всегда.

В кристаллохимическом анализе соединены представления о внешней форме и о внутреннем строении кристаллов. Гениально предвычислив все законы симметрии структуры кристаллов задолго до того, как существование атомных решеток в кристаллах было доказано на опыте, Федоров считал несомненным, что внешние грани кристалла соответствуют его плоским сеткам, т. е. тем плоскостям кристаллических решеток, вдоль которых расположены частицы (атомы, ионы, молекулы), а наиболее развитые, чаще всего встречающиеся грани кристалла совпадают с теми плоскими сетками, на которых частицы расположены гуще всего.

Таким образом, по внешней форме кристалла можно судить о расположении частиц в его решетке. Расчетные методы Федорова и таблицы, составленные им и его учениками, позволяли по углам кристалла определить тип структуры вещества и его химический состав.

Кристаллохимический анализ Е.С. Федорова был значительно развит и предельно упрощен впоследствии его учеником, профессором А. К. Болдыревом. Было выпущено два тома таблиц, под названием «Определитель кристаллов», позволяющих определить химический состав вещества по углам между гранями кристаллов.

«В наши дни, однако, анализ кристаллов по их внешней форме в значительной мере вытеснен достижением ХХ века – рентгеноструктурным анализом. Этот метод, основывающийся на симметрии структуры кристаллов и на дифракции рентгеновских лучей в кристаллах, дает возможность определять кристаллическую структуру вещества независимо от того, какова его внешняя форма. Не нужно иметь многогранный кристалл, хватит и малой крупинки кристаллического вещества, что бы с помощью рентгеноструктурного анализа полностью определить симметрию его структуры»[2].

## Атомная структура кристаллов.

Теперь пришло время углубится в рассмотрение атомной структуры кристаллов, о которой так часто упоминалось выше.

«Все найдено!»- воскликнул Рене Жюст Гаюи (1743-1822), заметив, что случайно выпавший из его рук большой кристалл кальцита раскололся на множество маленьких параллелепипедальных (ромбоэдрических) осколков (кальцит обладает хорошей спайностью - способностью раскалываться – по ромбаэдру). В этот именно момент в его уме зародилась новая теория строения кристаллов. В отличие от Кеплера, Гука и Ломоносовы, Гаюи предположил, что кристаллы построены не из мельчайших шариков, а из молекул параллелепипедальной формы и что предельно малые спайные осколки и являются этими самими молекулами. Иными словами, кристаллы представляют собой своеобразные кладки из молекулярных «кирпичиков» Несмотря на всю свою наивность с современной точки зрения эта теория сыграла в свое время большую историческую роль, дав толчок к зарождению теории решетчатого строения кристаллов.

Во всем мире вы не найдете ни одного атома или иона, ни одной молекулы, которые покоились бы: все они движутся, но движения эти различны.

«Кристаллы построены правильно, строго закономерно. И в них тоже атомы, ионы и молекулы не находятся в покое, но частицы не сталкиваются друг с другом, потому что все они расположены правильным строем и каждая может только колеблется около определенного положения. Ряды частиц в пространстве, подобны трехмерным решеткам из атомов, которые образуют *кристаллическую структуру*»[5].

Структура всех кристаллических веществ периодична и закономерна. Во всех кристаллах частицы выстраиваются симметричными правильными рядами, плоскими сетками, трехмерными решетками. В твердом кристаллическом веществе каждая частица движется “вольно”, колеблется, но только у своего места в строю. Строй частиц в кристаллическом веществе похож на пчелиные соты или на строительные леса: влево и вправо, вперед и назад, вверх и вниз тянутся ровные, правильные, бесконечные ряды частиц. Однако отделиться, выйти из такой решетки частицы твердого тела не могут, только если, например, нагреть кристалл так, чтобы он начал плавится.

Порядок, закономерность, периодичность, симметрия расположения атомов - вот что характерно для кристаллов. Во всех кристаллах, во все твердых веществах частицы расположены правильным, четким строем, выстроены симметричным, правильным повторяющимся узором. Пока есть этот порядок существует твердое тело, кристалл. Нарушен порядок, рассыпался строй частиц -это значит, что кристалл расплавился, превратился в жидкость или испарился, перейдя в пар.

Одинаков ли порядок, строй атомов, в различных кристаллах? Конечно, нет. Природа бесконечно разнообразна и не любит повторений: строй атомов железа совсем не похож на постройку атомов кристалла льда. В каждом веществе есть именно свой характерный узор и порядок расположения атомов, и от того, каков этот порядок, зависят свойства вещества. Одни и те же атомы, частицы одного сорта, располагаясь по-разному, образуют вещества с совсем разными свойствами. Посмотрим например на атомы углерода: сажа или копоть - мягкий черный порошок; уголь - более твердый камень; графит - мягкий стерженек, оставляющий след на бумаге; алмаз- кристалл, твердостью которого восхищаются люди, крохотный кристаллик алмаза, вставленный в металлическую оправу, легко режет стекло. Все эти вещи состоят из атомов углерода, а разнообразие их свойств зависит от разнообразия кристаллической структуры.

К началу ХХ века об атомах знали совсем мало, и не было известно, что же именно группируется или правильно повторяется в пространстве, создавая геометрические формы и неизменные углы между гранями кристаллов, симметрию и анизотропию их свойств. И уж совсем ничего не было известно об атомном строении поликристаллических тел, у которых нет правильной внешней формы, - о технических металлах и их сплавах, о горных породах, о порошках.

В 1912 г. Физику Максу Лауэ и его ученикам Фридриху и Книппингу удалось доказать, что рентгеновские лучи претерпевают дифракцию на атомных решетках кристаллов. С тех пор отпала необходимость определять структуру кристалла по методу Федорова, основываясь на внешней форме. Английский ученый Виллиам Лоренс Брегг, изучая рентгеновсое облучение кристаллов сделал 2 интересных вывода: 1)различные атомные плоскости в кристаллах действуют как зеркала, отражая рентгеновские лучи; 2) Способность атом рассеивать рентгеновские лечи зависит от его атомного номера . Эти два заключения сделали анализ кристаллов по результатам рентгеновского облучения еще более детальным.

Лишь через пару месяцев после открытия Лауэ был найден способ определения расстояния между атомами (d) по рентгенограммам. Пучок рентгеновских лучей с длинной волны l, отражающихся от серии параллельных атомных плоскостей, отстоящих друг от друга на одинаковые расстояния d, будет усиливаться, если выполняется простое геометрическое соотношение, которое теперь носить названия формулы Вульфа - Брегга:

nl=2dsinq

Здесь n - целое число, а q - угол между лучом и отражающей атомной плоскостью. Если знать длину волны рентгеновских лучей, а величины n и q измерить на опыте, то по рентгенограмме можно определить расстояние между атомными плоскостями в кристалле. Это и удалось сделать Бреггу и он получил значение d=2.8\*10-8 сантиметра.

Так родилась структурная (рентгеновская) кристаллография - определение структур кристаллов с помощью рентгеновских лучей.

Симметрия структуры кристалла отражается в его внешней форме, но и в отсутствии внешней характерной формы кристалл остается кристаллом, потому что сохраняется симметрия его структуры и его физические свойства.

Кристаллическое состояние является нормальным состоянием твердого вещества, аморфное - нарушенным, временным состоянием. Поэтому в кристаллическом состоянии вещество обнаруживает свои физические свойства в самом чистом виде и в самых богатых сочетаниях, а в аморфном же веществе свойств как бы затуманены.

Структура кристалла определяет его свойства и форму. Однако, кристаллическая структура обнаружена не только в природных многогранниках камней, в кристаллических горных породах и металлах, но и в очень многих других телах, о которых никому и в голову не приходило подумать, что они состоят из кристаллов. Вот, например, глина, она не похожа на кристалл, но и она состоит из мельчайших кристаллических частичек. Даже в таких вещах, как сажа, человеческие кости, волосы, волокна шерсти, шелк, целлюлоза и т. п., обнаружено кристаллическое состояние.

## Теория плотнейших шаровых упаковок.

Рентгенограммы кристаллических веществ и их расшифровка на основе федоровских законов построения пространственной решетки позволяют судить о симметрии кристаллических структур. Но это только остов, скелет структуры кристалла. Каковы же свойства частиц из которых сложены кристаллические решетки? Чем обусловлены геометрические структуры строения кристаллов? Какова природа сил, связывающих эти частица? На эти и многие другие вопросы отвечает кристаллохимия.

Неоценимым вкладом в развитие кристаллохимии являются работы академика Николая Васильевича Белова по обоснованию и углублению *теории плотной упаковки частиц* в кристаллах. Геометрическая задача о максимальном заполнении пространства шарами имеет множество решений, но только два из них имеют для кристаллографии наибольшее значение.

Хорошо известно, что плотность газов меняется очень сильно, в тысячи и более раз. Уплотнить жидкость уже значительно труднее: частицы расположены здесь гораздо плотнее, чем в газе. В твердых же телах частицы расположены наиболее плотно, максимально близко друг к другу.

Атомы и ионы каждого элемента характеризуются определенным размером – сферой действия, внутрь пределов которой не могут проникать другие частицы. Известно также, что размеры анионов (отрицательно заряженных ионов) значительно превышают размеры катионов (положительных ионов). Представим себе катионы и анионы в виде шаров соответствующих радиусов. Как можно уложить такие шары наиболее плотно?

Начнем с шаров одинакового радиуса. Ясно, что в одном слое можно наиболее плотно уложить равновеликие шары лишь одним способом: каждый шар окружен в слое шестью ближайшими соседями, между ним и его соседями имеются треугольные промежутки. Попробуем теперь закрыть этот плотно упакованный слой вторым слоем, тоже наиболее плотно упакованным. Очевидно, шары второго слоя должны попасть в углубления между шарами первого слоя. Это можно так же сделать лишь одним способом: взять аналогичный первому слой и сдвинуть его так, чтобы «верхушки» шаров второго слоя попадали как раз в углубления между шарами первого слоя. У каждого верхнего шара будут три одинаковых соседа в нижнем слое, и наоборот, каждый нижний шар будет соприкасаться с тремя верхними. Третий плотно упакованный слой можно уложить уже двумя способами: В варианте *а* каждый шар третьего слоя лежит на трех шарах второго слоя таким образом, что под шаром третьего слоя нет шара в первом слое. В варианте *б* каждый шар третьего слоя так же лежит на трех шарах второго слоя, однако, под каждым шаром третьего слоя оказывается шар в первом слое. Первый вариант называется кубической упаковкой, второй – гексагональной.

Между ними существует и еще одно различие, кроме метода упаковки. В гексагональной структуре имеется лишь одно направление, нормально (перпендикулярно) к которому расположены плотнейшие плоские слои, тогда как в кубической таких направлений 4, соответственно четырем объемным диагоналям куба. Это обстоятельство приводит к существенным физическим различиям. Плотность заполнения пространства шарами в обоих вариантах, конечно одинакова, и соответственно число шаров одинакова на единицу пространства (при условиино четырем объемным диагоналям куба. Это обстоятельство приводит к существенным физическим различиям. Плотность заполнения пространства шарамиЗная строение двух простейших упаковок шаров, легко понять, что число слоев в кристалле очень велико. На самом деле в гексагональной упаковке третий слой повторяет первый, поэтому упаковка двухслойная. В кубической упаковке четвертый слой повторяет первый: упаковка трехслойная.

Представим теперь, что в плотной упаковке одинаковых шаров должны разместится шары меньшего размера. В металлах так размещаются кремний, углерод, кислород, водород, азот, образуя силициды, карбиды, оксиды, гидриды и нитриды.

В плотной упаковке равновекликих шаров-анионов меньшие шары-катионы размещаются в пустотах между анионами. В зависимости от разных типов пустот возникаю различные типы взаимного расположения катионов и анионов, а значит и разные типы кристаллических структур. Пустоты бываю двух типов. Одни окружены четырьмя шарами, центры которых располагаются по вершинам тетраэдра, поэтому они называются *тетраэдрические пустоты.* Другие располагаются между шестью шарами, центры шаров, замыкающих эту пустоту располагаются по вершинам октаэдра, соответственно такой тип пустот называется *октаэдрическими пустотами.* Если радиус упаковки принять за единицу, то радиусы шаров, которые могут быть помещены в тетраэдрические и октаэдрические промежутки, будут соответственно выражаться числами 0.22 и 0.41. На один шар плотнейшей упаковки приходится 1 октаэдрическая и 2 тетраэдрических пустоты. Это относится к обоим видам упаковок.

Принцип плотнейшей укладки получил подтверждение для веществ с ненаправленными связями между структурными единицами, особенно для металлов и ионных соединений. Он остается справедливым и для структур молекулярных, в частности и органических соединений, хотя в этом случае применение его осложняется тем что форма сложных молекул обычно сильно отличается от шаровой.

Однако данный принцип характерен почти для всех кристаллических структур, поэтому его можно рассматривать как единственный возможный для кристаллов.

## Есть ли беспорядок в кристалле?

После открытия дифракции рентгеновских лучей в кристаллах и рождения рентгеноструктурного анализа не стало сомнений в том, что в кристаллах частицы расположены правильным трехмерным строем. Уже в первые десятилетия после 1812 г. были расшифрованы структуры почти всех известных кристаллических веществ, измерены междуатомные расстояния, определены силы связи между частицами.

Структурщики как бы расставили атомы по их местам в решетках и определили силы взаимодействия между атомами. Появилась возможность вычислять величины физических свойств на основе структуры кристаллов. Теоретически расчеты хорошо совпадали с данными опытов. Анизотропия (различие свойств в зависимости от выбранного направления) физических свойств кристаллов нашла свое объяснение в законах кристаллического строения.

Стройная схема законов атомного строения могла объяснить многие физические свойства кристаллов. Она была логична, ясна и казалась незыблемой. Но бессильна оказалась она в двух областях: в физике пластичности и прочности и в учении о росте кристаллов.

Началось все со споров о прочности кристаллов и об их механической деформации.

Что же такое деформация твердого тела? Всякое твердое тело деформируется следующим образом: сначала, при небольшом усилии, деформация идет упруго, затем начинается деформация пластическая . Упруго –это значит, что после того, как внешняя сила убрана, тело полностью восстановит свою изначальную форму, все следы деформации исчезнут. Пластически – это значит, что изменения останутся.

Так же, как правило, деформируется поликристалл, если он вообще способен деформироваться.

Но монокристалл и тут ведет себя особенно, из-за своей анизотропии. Даже и при упругой деформации кристалл далеко не всегда деформируется так, как вы хотите. Вы его сжимаете, а он сдвигается в сторону; хотите сдвинуть, а он не только сдвигается, но и растягивается. Если же вы доводите деформацию до пластической, то кристалл вообще начинает проявлять «свой характер». И с этим надо считаться, если вы хотите деформировать кристалл.

Пластическая деформация кристаллов чаще всего происходит путем скольжения: отдельные слои кристалла соскальзывают параллельно друг другу, как карты в колоде. Это не отдельные атомные слои, а «пачки» атомных слоев параллельных друг другу.

Пластическое скольжение происходит отнюдь не в том направлении, в котором приложена сила, а только по определенным плоскостям и в определенных направлениях, заданных структурой кристалла. Обычно это те плоскости, в которых атомы упакованы плотнее всего. Оно и понятно: если атомная плоскость скользит параллельно самой себе, то движение ее легче идет там, где расстояние между атомами самое маленькое, короче всего переход от одного атома, к другому такому же.

Конечно и анизотропия деформации, и выбор плоскостей скольжения определяется структурой кристалла.

Вопрос о прочности кристаллов всегда вызывал интерес у ученых. Первым из ученых расчеты на прочность кристаллов были сделаны в 1924 г. советским физиком-теоретиком Я. И. Френкелем. Расчеты прочности различных кристаллических структур были сделаны, однако на практике оказалось, что расчетная прочность кристалла в тысячи раз больше реальной прочности. Френкель оказал огромную услугу проблеме прочности кристаллов, вскрыв кричащее противоречие между теорией процесса скольжения и результатами эксперимента.

Представьте себе, что воздвигнуто стройное высотное здание, каркас которого сложен из стальных балок. Но одна из балок попалась бракованная, надрезанная, надломанная. Чем определить прочность всего здания? Конечно ее «слабым местом» – надломленной балкой, из-за которой может начаться сдвиг и разрушение всей постройки.

Вот такие слабые места, как оказалось, неизбежно существуют в каждом кристалле. Сначала их так и называли «слабые места» или «места разрыхления», однако позже стали называть *дислокациями*. Сначала ученые лишь предположили их существование, затем убедились на опыте, а затем научились управлять.

Итак, дислокация – это нарушение правильности расположения атомов в структуре вдоль определенной линии.

Представьте себе, что в серии параллельных плоскостей решетки одна из плоскостей недостроена, не кончена: это уже не плоскость, а полуплоскость. Край такой оборванной плоскости образует *краевую дислокацию.*

Достаточно разорвать одну связь между атомами рядом с дислокацией – и дислокация (край оборванной плоскости) передвинется на одно междуатомное расстояние, а связь между атомами за ней восстановится. Разорвется следующая связь – оборванная плоскость передвинется дальше на один шаг. Так, шаг за шагом, перемещаясь путем поочередного разрыва по одной связи, дислокация перейдет через весь кристалл. А в результате атомная плоскость переместится на один междуатомный шаг. Итогом этого перемещения будет сдвиг одной половины кристалла относительно другой его половине, т.е. пластическое скольжение.

Очевидно, кристалл, в котором есть дислокация, деформировать гораздо легче, чем идеально построенный кристалл, - ведь здесь не надо разрывать все атомные связи, достаточно осуществлять работу разрыва последовательно по одному ряду связей.

Данное явление очень ярко можно прокомментировать с помощью модели «ковра». Ковер лежит на гладком полу: перемещать такой ковер по полу, если он к полу прилегает плотно, -дело нелегкое: площадь соприкосновения ковра с полом велика, ковер тяжелый, и усилия для его смещения понадобятся немалые. А вот если поперек ковра имеется узкая складка, вдоль которой ковер отделен от пола, переместить ковер можно существенно меньшими усилиями. Они нужны лишь для того, чтобы разгладить складку. Когда складка пройдет через весь ковер, он сместится на ширину складки. Складка –это легкоподвижный дефект в системе «ковер – пол», так как в области складки ковер не соприкасается с полом.

Аналогично ковру со складкой, одна из тех атомных плоскостей кристалла, которые ориентированы перпендикулярно плоскости скольжения, обрывающаяся на этой плоскости, должна перемещаться легче прочих.

Итак, почему же реальная прочность кристаллов оказалась намного меньше теоретической? Теоретической прочностью обладал бы кристалл, если бы он был построен безукоризненно, идеально правильно. На самом же деле, в реальном кристалле всегда есть отступления от порядка, нарушения расположения атомов. Обладая такими знаниями, человек научился извлекать из данного дефекта кристаллов выгоду.

## О некоторых свойствах кристаллов.

Физические свойства кристаллов чаще всего зависят от их структуры и химического строения.

Сначала стоит упомянуть два основных свойства кристаллов. Одним из них является *анизотропия*, о которой уже упоминалась выше. Под этим термином подразумевается изменение свойств в зависимости от направления. Так, например, если вырезать из кристалла поваренной соли в различных направлениях стержни в поперечным сечением 1мм2 и испытать их на разрыв, то окажется, что они имеют различную прочность.

Вместе с тем кристаллы являются телами *однородными.* Однородность кристаллического вещества состоит в том, что два его участка одинаковой формы и одинаковой ориентировки одинаковы по свойствам.

Поговорим сначала об электрических свойствах. В принципе электрические свойства кристаллов можно рассматривать на примере металлов, так как металлы, в одном из состояний, могут представлять собой кристаллические агрегаты. Электроны, свободно передвигаясь в металле, не могут выйти наружу, для этого нужно затратить энергию. Если при этом затрачивается лучистая энергия, то эффект отрыва электрона вызывает так называемый фотоэлектрический эффект. Аналогичный эффект наблюдается и в монокристаллах. Вырванный из молекулярной орбиты электрон, оставаясь внутри кристалла, обуславливает у последнего металлическую проводимость (внутренний фотоэлектрический эффект). В нормальных же условиях (без облучения) такие соединения не являются проводниками электрического тока.

## Волны света в кристаллах.

Поведением световых волн в кристаллах занимался Эразм Бертолин, он первый заметил, что волны ведут себя нестандартно при прохождении через кристалл. Однажды Берталин зарисовывал двугранные углы исландского шпата, затем он положил кристалл на чертежи, тогда ученый в первый раз увидел, что каждая линия раздваивается. Он несколько раз убедился, что все кристаллы шпата раздваивают свет, лишь тогда Берталин написал трактат «Опыты с двупреломляющим исландским кристаллом, которые привели к открытию чудесного и необыкновенного преломления»(1669г.). Ученый разослал результаты своих опытов в несколько стран отдельным ученым и академиям. Работы были приняты с полным недоверием. Английская Академия наук выделила группу ученых на проверку данного закона (Ньютон, Бойль, Гук и др.). Эта авторитетная комиссия признала явление случайным, а закон несуществующим. О результатах опытов Берталина было забыто.

Лишь через 20 лет Христиан Гюйгенс подтвердил правильность открытие Берталина и сам открыл двупреломление в кварце. Многие ученые, в последствии занимавшиеся этим свойством подтвердили что не только исландский шпат но и многие другие кристаллы раздваивают свет.

Не раздваивают свет кристаллы высшей категории такие как алмаз каменная соль, квасцы, гранаты, флюорит. У них ведь вообще анизотропия многих свойств проявляется слабее чем в остальных кристаллах а некоторые свойства изотропны. Во всех кристаллах низшей и средней категорий, конечно если они прозрачны наблюдается *двойное преломление света.*

Рис.1

*Воздух Воздух*

*Стекло*  *Кристалл*

Преломление возникает из-за различия скорости света в разных средах.. Так в стекле скорость света в 1,5 раза меньше, чем в воздухе, следовательно коэффициент преломления равен 1,5.

Причиной двупреломления является анизотропия скорости света в кристаллах. В изотропной среде волны расходятся во все стороны одинаково, как бы по радиусам шара. Не так в кристаллах. И световые и звуковые волны расходятся в них не кругами, и скорость этих волн , а значит и показатели преломления, в разных направлениях различны.

Представим, что в кристалле луч света раздваивается, один ведет себя как «обыкновенный», т. е. идет во все стороны по радиусам шара, другой - «необыкновенный» - идет по радиусам эллипсоида. В таком кристалле существует одно-единственное направление, в котором двупреломления нет. Обыкновенный и необыкновенный лучи идут вместе, луч света не раздваивается. Оно называется *оптической осью.* Так ведут себя по отношению к свету кристаллы средней категории, поэтому их называют *оптически одноосными*. В кристаллах низшей категории свет тоже испытывает двойное преломление, но уже оба луча ведут себя как необыкновенные, у обоих показатели преломления во всех направлениях разные и оба распростроняются по радиусам эллипсоида. Кристаллы низшей категории называются *оптически двуосными*. Кристаллы высшей категории, где свет расходится по радиусам шара во все стороны одинаково, называются *оптически изотропны*.

Проходя через двупреломляющий кристалл, волна света не только раздваивается, но каждый из образованных лучей еще и поляризуется, раскладываются на две плоскости перпендикулярных друг другу. Является ли поляризация причиной двупреломления?

Представим себе вспаханное поле, разложим его по двум главным направлениям: вдоль и поперек борозд – естественно, что вдоль борозд идти проще, чем поперек. Теперь попробуем тащить по вспаханному полю вкось какой-нибудь предмет. Мы заметим, что предмет будет двигаться не ровно, то скользя вдоль борозд, то перескакивая поперек них. Явно видно, что движение предмета как бы разлагается на два перпендикулярных движения, притом с разными скоростями.

Волна ведет себя подобным образом, ведь она должна пройти сквозь атомную решетку, ряды которой лежат перед ней, как борозды на пашне. И она поэтому распадается в кристалле на две волны.,у которых плоскость колебаний взаимно перпендикулярные. Скорость этих волн в кристалле различны, как различны скорости хода вдоль борозд и перпендикулярно им А раз различны скорости значит и показатели преломления различны, в результате волны разойдутся как это показано на рисунке 1.

Как видно из вышесказанного, явления поляризации света и двупреломления тесно связаны друг с другом.

## Как растут кристаллы.

Еще Стенон писал, что на наружные плоскости ранее ограненного кристалла осаждается новое вещество. Частицы (атомы, ионы, молекулы) из раствора, пара или расплава оседают на гранях кристаллического зародыша, продолжая его рост слой за слоем. Теоретически кристаллизация должна начинаться при перенасыщенности раствора на 30-50%. Эти цифры были рассчитаны учеными в двадцатые – тридцатые годы нашего столетия. Однако на практике кристалл может расти и при малой пересыщенности раствора. Еще одна несостыковка имеет место быть при сравнении теории с практикой. Долгое время ученые считали, что кристалл растет подобно кирпичной кладке: пока недостроен предыдущий ряд, новый не строится. Естественно атому легче осесть на плоскость «зацепившись» за находящийся рядом атом, но, когда ряд достроен и плоскость не нуждается в новых частицах, куда деваться «вновьприбывшему» атому? Считалось, что он отскакивает обратно в среду, из которой выпал. Тогда рост кристалла прекратился бы уже после построения первой грани. Как же происходит на самом деле?

В 1948 году английский кристаллограф Франк выдвинул остроумную догадку: Кристалл растет не параллельными слоями, не как кирпичная кладка, а подобно винтовой лестнице или спирали. Кристалл при росте как бы накручивается сам на себя, все время продвигая вперед одну и ту же ступень. На выходе этой ступеньки на грани кристалла как бы заготовлена уютная «посадочная площадка» для каждой вновь присоединяющейся частицы. И хитрость здесь в том, что частицы, оседая, присоединяются к ступеньке, а ступенька не зарастает, только число оборотов в винтовой лестнице увеличивается, и грань, продвигаясь вперед, непрерывно растет. Именно так, по представлению Франка, в некоторых местах в кристалле нарушено правильное чередование атомных слоев: атомные слои не параллельны друг другу, а закручены в единую винтовую лестницу. Схема такой атомной винтовой лестницы называется *винтовая дислокация.*

Однако, когда Франк рассказал о своей гипотезе на конференции по росту кристаллов в 1948 г., слушатели с недоверием отнеслись к его теории, ведь в таком случае на грани кристалла должен быть незарастающий выступ, меж тем спокон веков известно, что грани у кристаллов гладкие. И тем не менее Франк оказался прав: на гранях кристаллов действительно имеются спиральные выступы. Оказалось, что тремя годами ранее в 1945 г. в Москве Г. Г. Леммлейн обнаружил, что на зеркально-гладкой, ровной, плоской грани кристалла имеются спиральные ступеньки. Он обнаружил это при помощи росы нанесенной на грань кристалла. Росинки оседают и выделяют каждую неровность на поверхности, тогда в микроскоп ученый и разглядел эти выступы. Найденный им метод был назван «методом росы».

Сегодня уже нет сомнений в том, что именно так растут кристаллы из паров, расплавов и из слабо пересыщенных растворов: рост облегчается тем, что в кристалле есть винтовые дислокации и кристалл растет вдоль дислокации, образуя единую винтовую лестницу из атомных плоскостей.

## Атомы блуждают по кристаллу.

Сам факт, что некоторые из атомов в кристаллах блуждают, а не находятся в устойчивом состоянии вызывает долю скептицизма. Ведь всем известно, что в кристаллах атомы расположены в узлах кристаллических решеток и они лишь совершают колебательные движения в пределах не больше междуатомного расстояния. Однако из каждого правила есть исключения. То что некоторые атомы не находятся в узлах кристаллической решетки доказал один из основоположников физики твердого тела, советский физик-теоретик Яков Ильич Френкель.

«Сам механизм перемещений атомов в кристаллах похож на диффузионные процессы или скорее на испарение, только не во внешнюю среду, а во внутреннюю»[6].

“*Диффузия* - это перенос вещества приводящий к самопроизвольному выравниванию концентрации различных веществ”. Атомы или молекулы сорта А перемещаются туда, где их меньше всего или нет совсем и где больше атомов сорта В, и наоборот. В результате происходит диффузионное перемешивание в газах, жидкостях и твердых телах. *При испарении* происходит произвольный отрыв единичных атомов вещества от привычных им позиций. Освободившиеся атомы уходят во внешнюю среду. Надо заметить, что скорости как диффузии, так и испарения зависят от температуры, то есть эти процессы термодинамические, чем выше температура, тем больше скорость.

Френкель, в своей статье “О тепловом движении в твердых и жидких телах” проводит аналогию между “внешним” и “внутренним” испарением, т. е. переходом атома (в кристалле) из узла в пространство между узлами. Согласно Френкелю, принципиального отличия между характером теплового движения атомов на поверхности тела и внутри него не существует. Если возможен отрыв атомов вещества от его поверхности, то мыслим так же и срыв атома из положения равновесия внутри тела. Однако мы должны считаться с тем, что в нормальных условиях атомы образуют в основном правильную кристаллическую решетку, и что внутреннее испарени6е может сопровождаться нарушением в правильности расположения атомов.

Предположим, что какой-нибудь атом набравший случайно избыточную энергию, вырывается из клетки, образованной его соседями, как бы “раздвигая” прутья этой клетки, и вылетает из исходного положения равновесия в исходную плоскость. Атомы не занимают всего объема тела, между ними остаются еще свободные промежутки (междоузлия), благодаря которым они оказываются способными совершать колебания. Конечно, если атом внедряется в одно из междоузлий, то он должен несколько потеснить своих новых соседей. Узлы решетки вблизи такого “дислоцированного” атома окажутся смещенными; однако на небольшом расстоянии от этого места восстанавливается правильная структура.

Таким образом, в результате внутреннего испарения один из узлов, именно тот, где ранее находился рассматриваемый атом, окажется вакантным, зато одно из междоузлий занятым. Такой процесс может многократно повторятся с тем же самым атомом. Переходя из одного междоузлия в другое, дислоцированный атом может странствовать по всему внутреннему пространству кристалла.

В результате теплового движения некоторые узлы обнажаются, оставаясь вакантными, а некоторые междоузлия заполняются сорвавшимися атомами. Реальный кристалл представляет собой как бы двойной раствор, в котором наряду с “основными” атомами, находящимися в узлах, имеются два типа растворенных частиц: дислоцированные атомы и свободные узлы “вакансии”. Дислоцированные атомы расположены так же, как располагаются посторонние атомы в случае их внедрения в междоузлие. Что же касается вакансий, то они занимают место реальных атомов, т.е. располагаются подобно чужеродным атомам по принципу замещения.

Не только дислоцированные атомы перемещаются по кристаллу, но и вакансии. Освободился один узел, образовалась вакансия, тут же в нее перескочил атом, например из нижнего ряда, на его месте образовался пустой узел, следовательно, вакансия сместилась на один ряд вниз.

Это наиболее общее описание механизма перемещение атома по кристаллу. В настоящее время, существует множество формул и условий, помогающих определить частоту перемещения, направление и другие параметры.

***О прочности кристаллов.***

Ранее было описано, что кристалл заполнен дефектами. Как же влияют дефекты на прочность кристаллов. О одном, о прочности, мы уже говорили: дефекты понижают прочность, в сотни, тысячи раз. Если к кристаллу приложить внешнюю силу, то атомная постройка начнет разрушаться именно в месте слабины, там, где есть дефект. Дефект - дислокация - начинает двигаться по кристаллу.

Но не так все просто, по мере того, как растет деформация кристалла, растет и число дефектов в нем. А так как дефекты взаимодействуют друг с другом, то, чем их больше, тем труднее им двигаться в кристалле. Получается парадокс: если есть дефект кристалл - кристалл деформируется и разрушается легче, чем если дефекта нет. А если дефектов слишком много, то кристалл опять становится прочным , и чем больше дефектов, тем он более упорядочивается. Значит, если мы научимся управлять числом и расположением дефектов, мы сможем управлять прочностью материалов.

Еще сильнее удалось бы изменить свойства кристаллов, если бы удалось вырастить кристалл совсем без дефектов. Как в стальном каркасе здания, если бы не было ни одной дефектной балки, прочность здания была бы расчетной. Без дефектов кристалл “не хочет” расти. И все же ученым удалось перехитрить природу. Научились выращивать кристаллы, в которых нет, совсем нет, дефектов, или есть один единственный дефект, очень удачно расположенный.

Такие идеальные кристаллы удивительно прочны. «Обычное техническое железо выдерживает, не разрушаясь, усилие в 20-30 кг/мм2, самая лучшая конструкционная сталь - 200-300 кг/мм2, а бездефектный кристаллик железа - 1400 кг/мм2. Иначе говоря, бездефектные кристаллы железа прочнее обычного в 40-50 раз»[2].

Такие кристаллы научились растить, измерять их свойства и прочность, но эти кристаллы очень и очень малы. Это “нитевидные кристаллы”, или “усы” - волоски диаметром не более 1-2 микрон. Растить такой кристалл очень сложно, а вырастет он чуть потолще - в нем обязательно проявляются дефекты и прочность сразу снижается.

Такой усик выдерживает нагрузку значительно большую, чем обычная проволока. Он деформируется упруго, восстанавливает свою форму после деформации, не меняется при высоких температурах. Уже широко применяются нитевидные кристаллы для создания высокопрочных композитных материалов. Композит, или композитный материал - это сплошная основа, металл или полимер пронизанный нитевидными кристаллами.

Созданы кристаллизационные установки в которых вытягивают монокристаллические нити сапфира длинной до 30 метров. Кристалл получается такой упругий и гибкий, что его наматывают как нить на катушку. А затем этими гибкими нитями упрочняют основу. Из композитных материалов делают листы для обшивки самолетов и ракет. Человек научился получать материалы, гораздо прочнее природных.

Кристаллы из-за их прочности используют и в различных режущих аппаратах, так как кристалл один из самых прочных материалов на Земле.

Человек применяет кристаллы почти во всех областях материальной сферы их цена и значение чрезвычайно велики.

***Заключение.***

Итак, в данной работе была рассказана лишь малая часть того, что известно о кристаллах в настоящее время, однако и эта информация показала, насколько неординарны и загадочны кристаллы по своей сущности.

В облаках, в глубинах Земли, на вершинах гор, в песчаных пустынях, в морях и океанах, в научных лабораториях, в клеточках растений, в живых и мертвых организмах – везде встретим мы кристаллы. Но может кристаллизация вещества совершается только на нашей планете? Нет, мы знаем теперь, что и на других планетах и далеких звездах все время непрерывно возникают, растут и разрушаются кристаллы. Метеориты, космические посланцы, тоже состоят из кристаллов, причем иногда в их состав входят кристаллические вещества, на Земле не встречающиеся. Кристаллы везде.

Люди привыкли использовать кристаллы, делать из них украшения, любоваться ими. Теперь, когда изучены методы искусственного выращивания кристаллов, область их применение расширилась, и, возможно, будущее новейших технологий принадлежит кристаллам и кристаллическим агрегатам.

***Список используемой литературы.***

1. «Кристаллы», М.П. Шаскольская, Москва «наука», 1978г.
2. «Очерки о свойствах кристаллов», М. П. Шаскольская, Москва «наука», 1978г.
3. «Симметрия в природе», И.И. Шафрановский, Ленинград «недра», 1985г.
4. «Кристаллохимия», Г. Б. Бокий, Москва «наука», 1971г.
5. «Живой кристалл», Я. Е. Гегузин, Москва «наука», 1981г.
6. «Очерки о диффузии в кристаллах», Я. Е. Гегузин, Москва «наука», 1974г.