Kvant. Кристаллы из шариков

Косоуров Г.И. Кристаллы из шариков //Квант. — 1970. — № 1. — С. 44-49.

Первым шагом к пониманию, объяснению и предсказанию свойств кристалла является определение его структуры. Зная конфигурацию атомов в кристаллической решетке и поняв симметрию их расположения, можно, например, заранее сказать, будет ли кристалл пьезоэлектриком, то есть будет ли на его гранях появляться электрическое напряжение при механическом сжатии; будет ли кристалл обладать сегнетоэлектрическим переходом, который происходит при определенной температуре и заключается в том, что внутри кристалла возникает электрическое поле; будет ли в веществе возникать световая волна двойной частоты, если через него пропустить свет лазера и т. д. Структура кристалла — это паспорт, который может многое рассказать о своем владельце.

Познакомиться с различной «упаковкой» атомов в кристалле можно при помощи несложных вспомогательных средств. Воспользовавшись металлическими шариками от подшипников, мы можем строить модели кристаллов, применяя тот же самый принцип, по которому природа строит кристаллы. Именно такому практическому знакомству с некоторыми формами кристаллических решеток и посвящена настоящая статья. Постройкой пространственных моделей, на которых ясно видны все особенности расположения атомов в сложных структурах, не пренебрегает ни один кристаллограф. Но прежде чем приступить к опытам, необходимо сделать несколько теоретических замечаний.

Существование кристаллической решетки обусловлено силами взаимодействия между атомами. На малых расстояниях преобладают силы отталкивания, которые быстро возрастают при попытке сблизить атомы. На больших расстояниях преобладают сравнительно медленно убывающие с расстоянием силы притяжения. При сближении атомов под действием сил притяжения потенциальная энергия взаимодействия убывает аналогично тому, как убывает потенциальная энергия камня, падающего на землю. На расстоянии, при котором силы притяжения и отталкивания становятся равными, потенциальная энергия имеет минимум, после чего резко возрастает за счет работы против сил отталкивания. Зависимость потенциальной энергии от расстояния выглядит примерно так, как показано на рисунке 1. В состоянии равновесия атомы займут места, соответствующие минимуму потенциальной энергии. Когда атомов много, это приведет в конечном счете к периодическому повторению некоторой наиболее выгодной в смысле энергии конфигурации небольшой группы атомов, образующих так называемую элементарную ячейку.

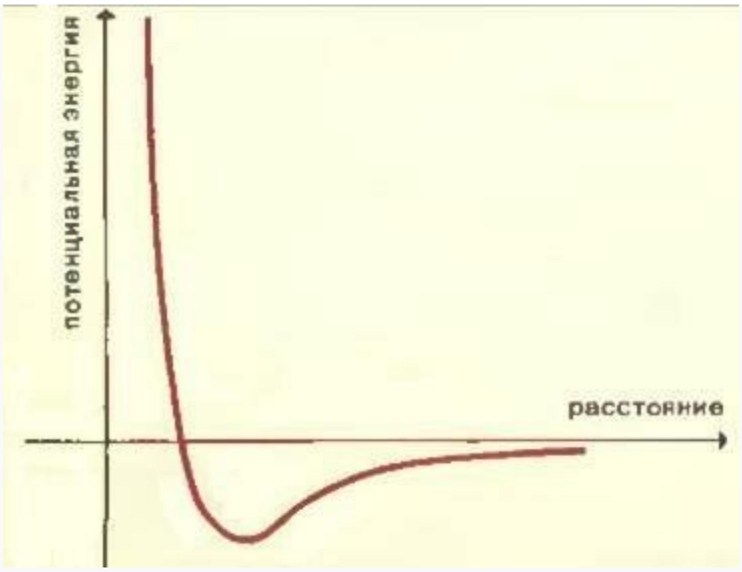

Рис. 1

Существуют вещества с очень сложной структурой, как, например, некоторые силикаты, элементарная ячейка которых содержит более двухсот атомов. Другие вещества, например, многие металлы, образуют кристаллическую решетку по очень простому закону. Мы, естественно, начнем с простейших образований. В наших опытах роль атомов будут играть металлические шарики, силами отталкивания будут упругие силы, возникающие при соприкосновении шаров, а силу притяжения заменит сила тяжести.

Рис. 2

Натянем на отверстие круглой банки, коробки или отрезка трубы тонкую резиновую пленку (например, от хирургической перчатки) и закрепим ее с помощью резинового кольца. Положим на пленку два шарика. Они слегка прогнут пленку и «притянутся» друг к другу. Их потенциальная энергия в зависимости от расстояния изменяется примерно так, как показано на рисунке 3, что очень похоже на график рисунка 1 .Положив на пленку штук тридцать шариков и слегка встряхнув коробку, мы увидим, что шарики расположатся правильными рядами. Центры шаров будут лежать в вершинах равносторонних треугольников со стороной, равной диаметру шара, а сами шарики заполнят всю плоскость и образуют сеть, которую называют гексагональной[1]. Каждый шар окружен шестью касающимися его и друг друга шарами. Их центры образуют правильные шестиугольники (рис. 2).

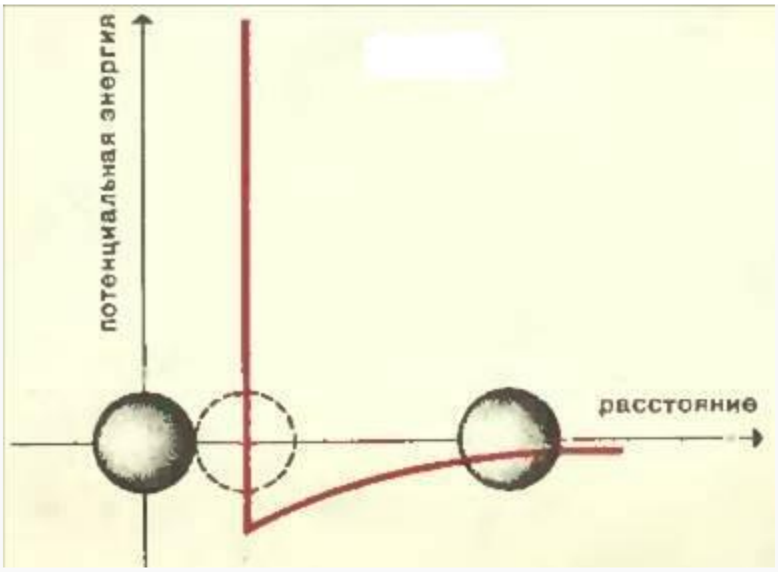

Рис. 3

Если повернуть всю сеть вокруг оси, проходящей через центр любого шара, на одну шестую оборота, то одни шары встанут наместо других, а общее расположение системы в пространстве останется неизменным. Сеть шаров перейдет сама в себя. После шести таких поворотов каждый шар встанет на прежнее место. Кристаллограф скажет в этом случае, что через центр каждого шара проходит перпендикулярная к плоскости шаров ось симметрии шестого порядка. Из-за этих-то осей сеть и получила название гексагональной. Кроме осей симметрии шестого порядка, имеются также оси третьего порядка, проходящие через центры лунок между шарами. (Ось симметрии третьего порядка — это такая прямая, при повороте вокруг которой — каждый раз на угол в 120° — мы возвращаемся к первоначальной картине. Тело неправильной формы имеет ось симметрии первого порядка, то есть оно переходит само в себя только при полном обороте. Напротив, через центр круга перпендикулярно к его плоскости проходит ось симметрии бесконечного порядка, так как круг переходит сам в себя при любом бесконечно малом угле поворота.)

Все дальнейшее будет понятно лишь в том случае, если у вас под руками будут шарики, из которых вы будете строить модели различных кристаллов.

Рассмотрим один прямолинейный ряд лунок между двумя рядами шаров (рис. 4). В нем имеются лунки двух сортов: одни сдвинуты к одному ряду шаров, другие — ко второму. Как тех, так и других столько же, сколько и шаров в ряду. Таким образом, в бесконечной сети лунок вдвое больше, чем шаров. Они образуют две гексагональные сетки, такие же, какие образуют центры шаров. Эти три сетки сдвинуты друг относительно друга так, что оси шестого порядка каждой сети совпадают с осями третьего порядка двух других.

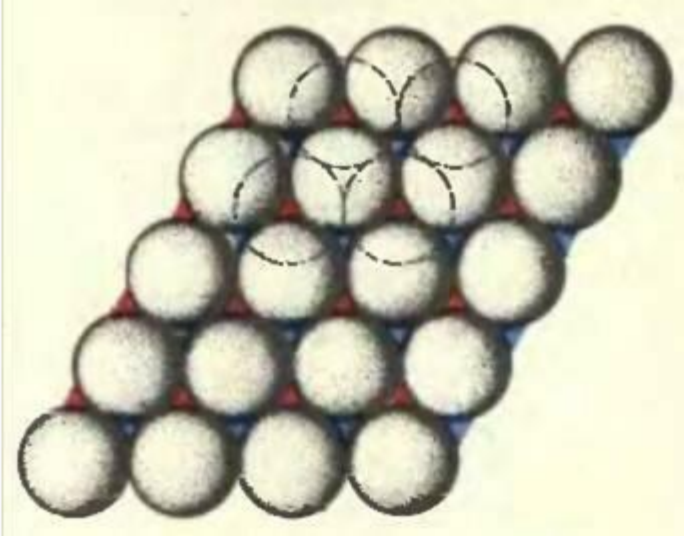

Рис. 4

В одну из этих систем лунок лягут шары второго слоя, образуя гексагональную сеть соприкасающихся шаров, подобную первой. Однако сил притяжения за счет упругости пленки может не хватить, чтобы удержать шары второго, а тем более третьего слоя. Поэтому, зная, как ложатся шары в нижнем слое, сделаем из фанеры лоток в форме правильного треугольника (рис. 5), такой, чтобы вдоль каждой стороны плотно укладывалось целое число шаров (в нашей модели их семь), и заполним его шарами первого слоя.

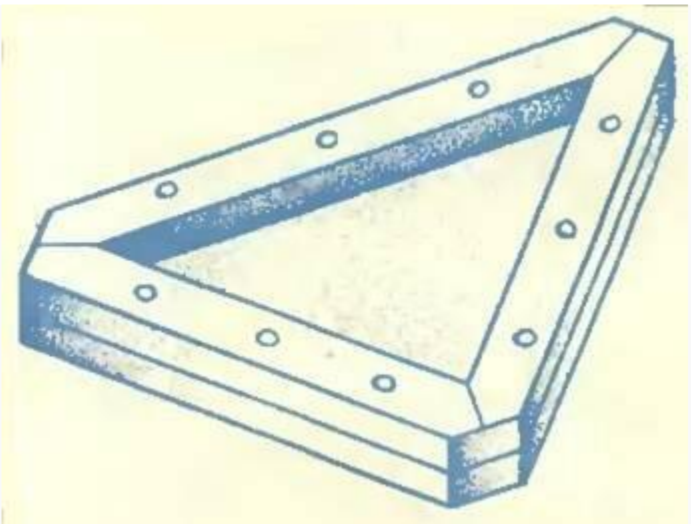

Рис. 5

В какую систему лунок укладывать шары, второго слоя, безразлично, а для третьего слоя системы лунок оказываются неэквивалентными: центры одной системы располагаются над центрами шаров первого слоя, а вторая система находится над пустыми лунками первого слоя. Начнем с укладки шаров в лунки, лежащие над шарами первого слоя. При этом третий слой по расположению шаров в точности Повторит первый, четвертый — второй и т. д. Слои будут повторяться через один. Мы получим не очень устойчивую пирамиду (рис. 6), что, впрочем, связано только с тем, что в нашей модели сила «притяжения» действует только вниз и шары, лежащие в крайних лунках, легко выдавливаются шарами верхних слоев.

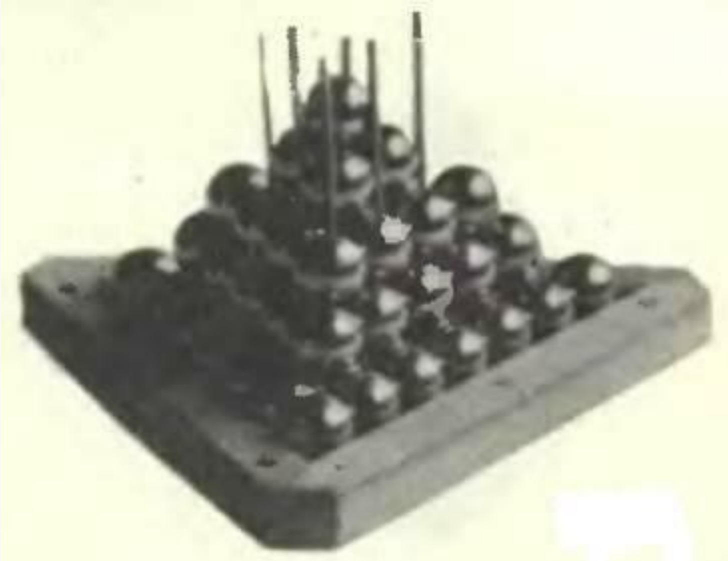

Рис. 6

Подобная укладка шаров называется плотнейшей гексагональной упаковкой. Так кристаллизуются бериллий, магний, кадмий, гелий при низкой температуре и давлении более двадцати пяти атмосфер. Она имеет только одну систему параллельных плотно упакованных слоев. Перпендикулярно к этой системе слоев через центр любого шара проходит ось симметрии третьего порядка. Снижение симметрии связано с тем, что если ось проходит через центры шаров, например, четных слоев, являясь для них осью шестого порядка, то для нечетных слоев она пройдет через центры лунок, и порядок их симметрии относительно этой оси будет только третьим. Тем не менее упаковка называется гексагональной, потому что ее можно рассматривать как две гексагональные решетки отдельно четных и нечетных слоев, вдвинутые одна в другую со сдвигом. Обратите также внимание на то, что пустые лунки во всех слоях находятся друг над другом и через всю гексагональную структуру проходят каналы, в которые можно вставить стержни диаметром 0,155 диаметра шара. Центры этих каналов также являются осями симметрии третьего порядка. На рисунке 6 модель гексагональной структуры представлена со вставленными стержнями.

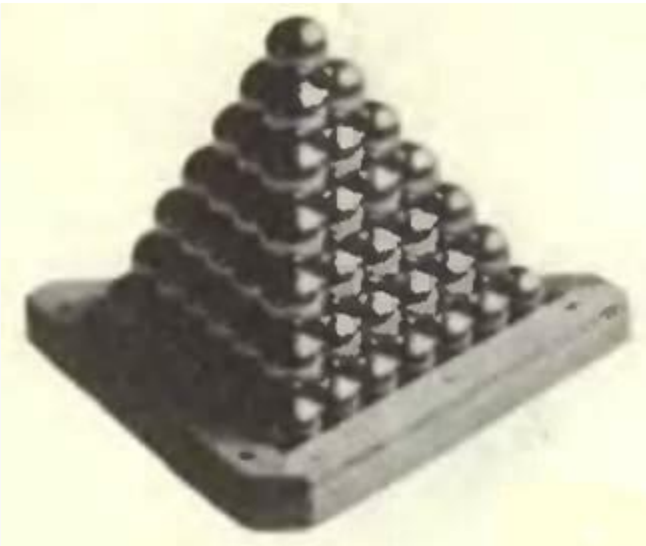

Рис. 7

Теперь будем укладывать шары третьего слоя в лунки, лежащие над свободными лунками первого слоя. В зависимости от того, в какую систему лунок мы положим шары второго слоя, могут получиться две пирамиды (рис. 7 и 8). Первая пирамида огранена правильными треугольниками с гексагональной укладкой шаров в плоскостях граней, которые ничем не отличаются от первого слоя нашей укладки, лежащего в основании пирамиды. Другими словами, наша пирамида является одним из пяти возможных правильных многогранников - тетраэдром. В полученной упаковке имеется четыре семейства плотно упакованных слоев, нормали к которым совпадают с осями симметрии третьего порядка тетраэдра, проходящими через его вершины. В такой укладке ряды повторяются через два на третий.

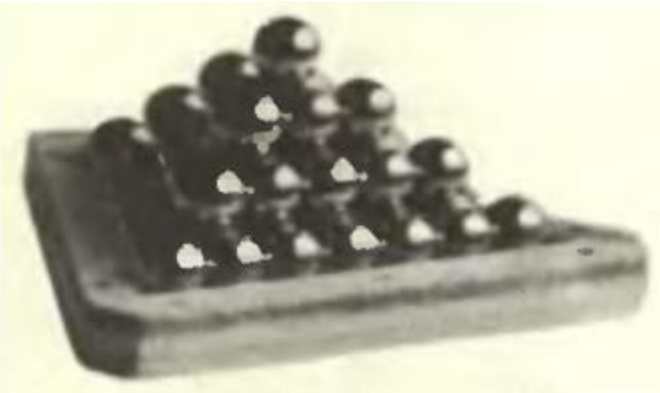

Рис. 8

Боковые грани второй пирамиды равнобедренные прямоугольные треугольники, а сама пирамида является частью куба, отсеченной плоскостью, проходящей через диагонали граней, имеющих общую вершину (рис. 9). Укладка шаров на боковых гранях пирамиды происходит по квадратной сетке с рядами, параллельными диагоналям грани куба.

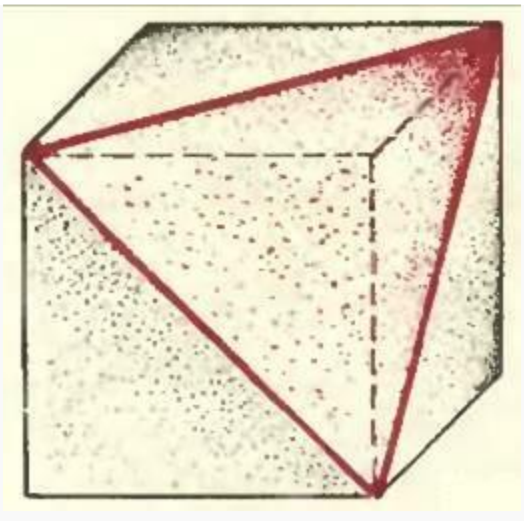

Рис. 9

Легко обнаружить, что мы получили не две разные упаковки, а одну, только с разной ориентацией. Достаточно начать удалять шарики, расположенные на ребрах тетраэдра, как начнут обнажаться грани куба, так же, как, убирая шарики, лежащие вдоль ребер куба, мы постепенно превращаем куб в тетраэдр. Такую укладку называют плотнейшей кубической упаковкой. Так кристаллизуются неон, аргон, медь, золото, платина, свинец. Плотнейшая кубическая упаковка обладает всеми элементами симметрии куба. В частности, оси симметрии третьего порядка тетраэдра совпадают с пространственными диагоналями куба, являющимися для него также осями симметрии третьего порядка. В основе построения этой упаковки лежит элементарный куб из четырнадцати шаров. Восемь из них расположены в вершинах куба и шесть — в центрах его граней. При внимательном рассмотрении второй пирамиды (рис. 8) этот куб можно найти в вершине пирамиды. Плотнейшую кубическую упаковку можно рассматривать также как совокупность четырех простых кубических решеток, вдвинутых со сдвигом одна в другую. При таком рассмотрении становится особенно ясна равноправность всех шаров упаковки. По самому способу получения гексагональной и кубической плотнейших упаковок наложением гексагональных слоев очевидно, что обе упаковки, несмотря на разную симметрию, имеют одинаковую плотность, или, как говорят, одинаковый коэффициент заполнения.

Если мы сделаем квадратный лоток и уложим шары по квадратной сетке, то тоже получится плотная упаковка. Хотя шары в каждом слое упакованы не самым плотным образом, лунки между шарами будут более глубокими, и поэтому слои расположатся более тесно, чем при гексагональной структуре. Закончив укладку, мы получим четырехгранную пирамиду (рис. 10), боковые грани которой являются равносторонними треугольниками с гексагональной укладкой шаров. Если дополнить мысленно пирамиду такой же, но с вершиной, обращенной вниз, то получим третий после тетраэдра и куба правильный многогранник — октаэдр, имеющий восемь граней. Нетрудно догадаться, что мы получили снова плотнейшую кубическую упаковку, только теперь грани куба параллельны плоскости основания. Уберите шары, идущие вдоль ребер, и вы обнаружите на верхнем сечении пирамиды пять шаров, образующих грань элементарного куба.

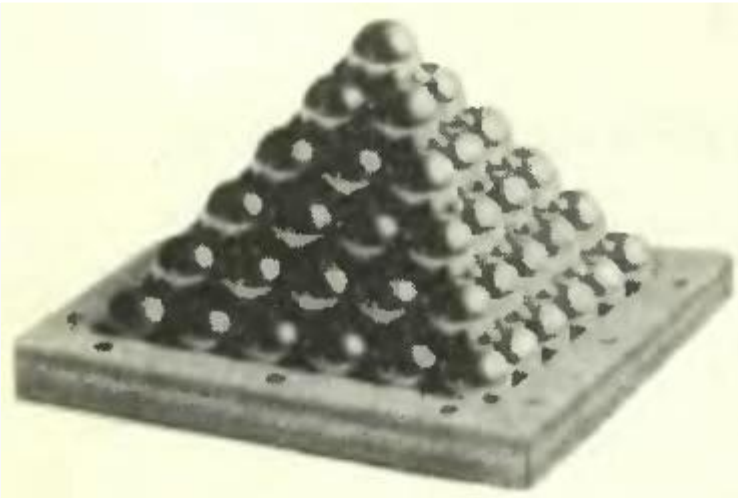

Рис. 10

С построенными моделями можно проделать ряд физических опытов.

Встряхивая резиновую пленку, можно моделировать тепловое движение атомов. (Вы видите, как с «повышением температуры» разрушается правильная укладка шаров.)

Так как один гексагональный слой входит в сравнительно мелкие лунки другого, слои оказываются слабо связанными, в них легко может возникать скольжение. Попробуйте двигать один гексагональный слой по другому и вы убедитесь, что существует три направления легкого скольжения, в которых слои передвигаются, как целое. То же самое имеет место в кристаллах. Скольжением в этих трех направлениях объясняются особенности пластической деформации кристаллов.

Рис. 11

Модели можно строить из любых шариков. Если нет возможности достать шарики от подшипников, то можно воспользоваться крупными бусами или в крайнем случае рябиной или мелкими яблоками. На рисунках 11 и 12 показаны элементарные ячейки кубической и гексагональной упаковок, склеенные из мячей для настольного тенниса. Этот сравнительно доступный и удобный материал мы рекомендуем для изготовления моделей, особенно для школьного физического кабинета.

Рис. 12

Укладки соприкасающихся шаров как плотнейшие, так и другие играют в кристаллографии очень большую роль, и у нас еще будет повод о них поговорить. А пока запасайтесь шарами и стройте модели!

Примечания

1. ↑ От греческого «*гекса*» — шесть и «*гониа*» — угол.