Курсовой проект по кристаллографии

«Исследование кристалла,заданного с помощью символов, определение его прямой и обратной решетки»

Выполнил:

Студент 3 курса

Кафедры «Теоретическая Механика»

Лапин Руслан

Дана формула кристалла $P\frac{6_3}{m}mc$

Первый символ P означает, что кристалл соответствует простейшей ячейке Бравэ.

Символ $\frac{6_3}{m}$ означает, что имеется главная ось 6 порядка, перпендикулярная плоскости m. Индекс 3 показывает, что так же имеется винтовая трансляция вдоль главной ось. Трансляция происходит вдоль главной оси на расстояние-половина вектора «с» (ось решетки) на угол равный половине угла соответствующего главной оси. Ось 6 порядка, значит ей соответсвует угол 60 рад. А угол трансляции равен 30 рад.

Символ m означает наличие плоскости симметрии m.

Для данной формулы изображение структуры кристалла имеет вид:

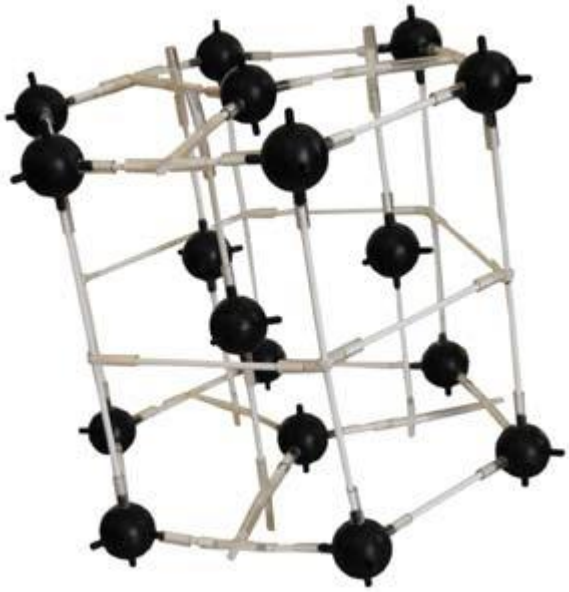

Рис1. Схема кристалла.

В условии сказано, что размеры решетки равны: a = 0,398нм, c = 0,652нм.

Данному типу и размерам соответствует элемент: бериллий.

Найдем теперь объем прямой решетки. Помним: $(\vec{a}\wedge\vec{b})=60$

Тогда $V=|\vec{c}*(\vec{a}\,x\,\vec{b})|=a^2*c*\sqrt{(3)}/2=0{,}089\,нм^3$

Найдем вектора обратной решетки.

$\vec{c}_*=\frac{\vec{a}\,x\,\vec{b}}{V}=\frac{1}{c^2}\vec{c}$ $\vec{a}_*=\frac{\vec{b}\,x\,\vec{v}}{V}=\frac{2}{\sqrt{(3)}a}\vec{e}_{bc}$ $\vec{b}_*=\frac{\vec{b}\,x\,\vec{v}}{V}=\frac{2}{\sqrt{(3)}a}\vec{e}_{ac}$, где $\vec{e}_{bc}=\frac{\vec{b}\,x\,\vec{c}}{|\vec{b}\,x\,\vec{c}|}$ $\vec{e}_{ac}=\frac{\vec{a}\,x\,\vec{c}}{|\vec{a}\,x\,\vec{c}|}$

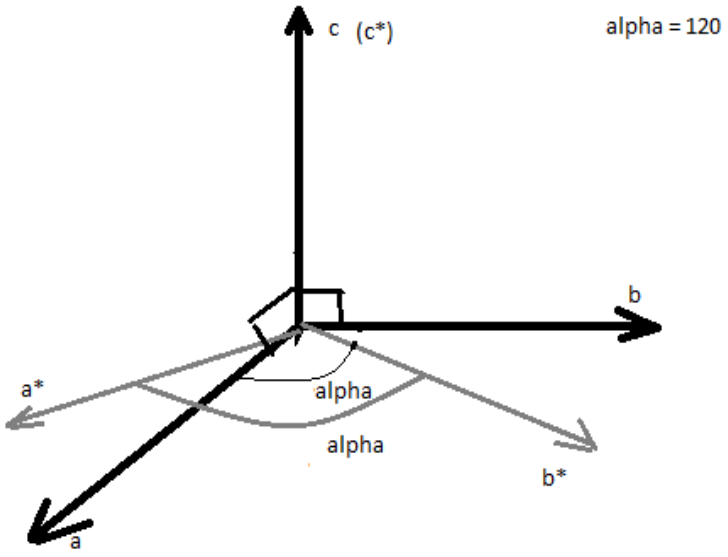

Рис2. Прямая и обратные решетки

Тогда объем обратной решетки будет равен : $V_* = |\vec{c}_* * (\vec{a}_* x \vec{b}_*)| = \frac{2}{\sqrt{(3)} a^2 c} = 11{,}24\, нм^3$

Проверим будет ли выполнено основное свойство объемов прямой и обратной решетки:

$V_* * V = 11{,}24\, нм^3 * 0{,}089\, нм^3 = 1$. Да, основное свойство выполнено, значит решетки найдены верно.