

## Анизотропия микротвердости и плотность атомов в элементарном объеме идентичности кристаллов

© В.Н. Гурин, М.М. Корсукова, Л.И. Деркаченко

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 20 июня 1997 г.  
В окончательной редакции 7 июля 1997 г.)

Предложен новый критерий ретикулярной и полярной анизотропии микротвердости — плотность атомов в элементарном объеме идентичности, т.е. отношение числа атомов одного сорта в атомных плоскостях (плоскости), заключенных в пределах элементарного объема идентичности, к сумме площадей этих плоскостей (плоскости) с атомами одного сорта. Показано, что такая плотность атомов лантаноидов, актиноидов и бора удовлетворительно коррелирует с ретикулярной и полярной анизотропией микротвердости их тетра- и гексаборидов. Этот критерий может быть использован для прогноза характера изменения ретикулярной и полярной анизотропии микротвердости и у других классов соединений.

Проблеме природы анизотропии микротвердости посвящено много исследований, однако до сих пор она все еще недостаточно изучена [1–3]. В настоящее время можно различить три наиболее общих подхода к оценке природы анизотропии: химический (или кристаллохимический), физический и структурный (или кристаллографический).

Химический подход рассматривает изменение микротвердости (прочности) вещества на различных и на одной грани кристалла в зависимости от количества и типа атомов, направленности и прочности химической связи между ними в кристаллической структуре [1]. Его трудности заключаются в экспериментальном и теоретическом получении для многих соединений точных данных о природе и прочности химической связи.

Физический подход объясняет природу анизотропии структурой решетки, первичными и вторичными процессами пластической деформации, деформационным объемом и структурами, возникающими вокруг отпечатка. Эти процессы рассматриваются на уровне коллективных решеточных явлений, и, в частности, не учитывается, атомная индивидуальность исследуемых химических соединений. Этот подход наиболее применим для материалов с высокой пластичностью [2–4]. Трудность его заключается в том, что для различных классов соединений, в особенности для тугоплавких (хрупких и малопластичных), процессы пластической деформации еще недостаточно исследованы в зависимости от температуры, величины и времени нагрузки и наличия примесей.

Структурный подход заключается в расчете плотности атомов на гранях различных простых форм [2] и установлении зависимости анизотропии микротвердости от такой плотности: чем выше ретикулярная плотность атомов (РП), тем тверже грань. Применение такого подхода связано с использованием, например, для алмаза понятия атомной плотности плоских сеток куба, ромбододекаэдра и октаэдра [5]. Это пригодно для чистых элементов, у которых все атомные плоскости во

всех направлениях содержат одинаковые атомы. Однако, если речь идет о соединениях, у которых в различных кристаллографических направлениях на грани выходят атомы различных элементов, то в этом случае такой подход недостаточен и не может объяснить природу ретикулярной анизотропии. К полярной анизотропии этот подход вообще неприменим.

Однако ни в одном из вышеуказанных подходов не учитывается в явном виде роль объема структуры под гранями разных простых форм и под различными направлениями на грани одной формы.

Авторы предлагают рассматривать плотность атомов в некотором объеме кристаллической структуры, в котором бы полностью повторялся структурный мотив [2], характерный для симметрии данной структуры. При этом в разных кристаллографических направлениях такие объемы будут различными, так как в этих направлениях будут различными и структурные мотивы. Такой объем будет наиболее представительной частью любой кристаллической структуры любого элемента и соединения. Он позволит более объективно сравнивать плотности атомов элементов как на различных, так и на одной грани в различных направлениях, так как плотность атомов будет рассчитываться в одной или в серии плоскостей, заключенных в таком объеме, и будет более точно характеризовать особенности структуры. В настоящей работе приводятся расчеты предлагаемого критерия, а также экспериментальные данные по микротвердости монокристаллов гекса- и тетраборидов лантаноидов и актиноидов и модельных материалов.

### 1. Расчет и экспериментальные данные

В настоящей работе предлагается уточненный структурный подход к проблеме анизотропии микротвердости. С этой целью предлагается использовать два новых понятия: элементарный объем идентичности и плотность атомов в элементарном объеме идентичности.

Элементарный объем идентичности  $V_i$  — это объем в кристаллической структуре в пределах одного элементарного повторяющегося мотива, определяемого гранью простой формы и тремя элементарными трансляциями, или периодами идентичности. Он может быть установлен в любой кристаллической структуре в любом кристаллографическом направлении. Так, в кубической структуре для грани простой формы куба  $\{100\}$  такой объем можно определить с помощью трансляции, или периода идентичности — кратчайшего из возможных расстояний между одинаковыми точками кристаллической структуры ([7], стр. 9). В этом случае он совпадает с объемом элементарной ячейки. В общем случае такой объем для любого кристаллографического направления можно получить тремя способами ([2], стр. 11): 1) с помощью трех некопланарных (не лежащих в одной плоскости) трансляций; 2) с помощью системы эквивалентных точек, преобразующихся друг в друга с помощью трех некопланарных трансляций; 3) с помощью системы одинаковых параллелепипедов, плотно заполняющих пространство и совмещающихся друг с другом с помощью трех основных трансляций.

Плотность атомов в элементарном объеме идентичности  $\rho_{vi}$  — это отношение числа одинаковых атомов, находящихся в одной  $n_i$  или во всех атомных плоскостях  $\sum n_i$ , содержащих такие атомы и заключенных в элементарном объеме идентичности  $V_i$ , определяемом гранью простой формы данной кристаллической структуры, к площади одной  $S_i$  или всех таких плоскостей с одинаковыми атомами  $\sum S_i$

$$\rho_{vi} = n_i/S_i \quad \text{или} \quad \sum n_i / \sum S_i.$$

Такой критерий в отличие от РП для плоскости является характеристикой объема кристаллической структуры химических соединений для грани каждой простой формы. Поэтому с его помощью можно полнее описать отклик структуры на внешнее воздействие. Будем условно рассматривать такое воздействие (например, алмазной пирамиды) лишь на атомные плоскости, заключенные в пределах  $V_i$  (при измерении ретикулярной микротвердости), или на одну плоскость, заключенную в пределах  $V_i$  (при измерении полярной микротвердости), а не в пределах реального деформационного объема, возникающего вокруг отпечатка. Для удобства расчетов примем еще одно допущение: все атомы, лежащие на ребрах или в углах грани (плоской сетки атомов), будем считать целыми (а не их долями, как это принято при подсчете РП для грани).

Корреляция рассчитанных значений  $\rho_{vi}$  с данными по микротвердости будет свидетельствовать о наличии ретикулярной (для граней разных простых форм) и полярной (для грани одной простой формы) анизотропии как характеристики, зависящей от плотности атомов того или иного элемента (или обоих) в пределах  $V_i$ .

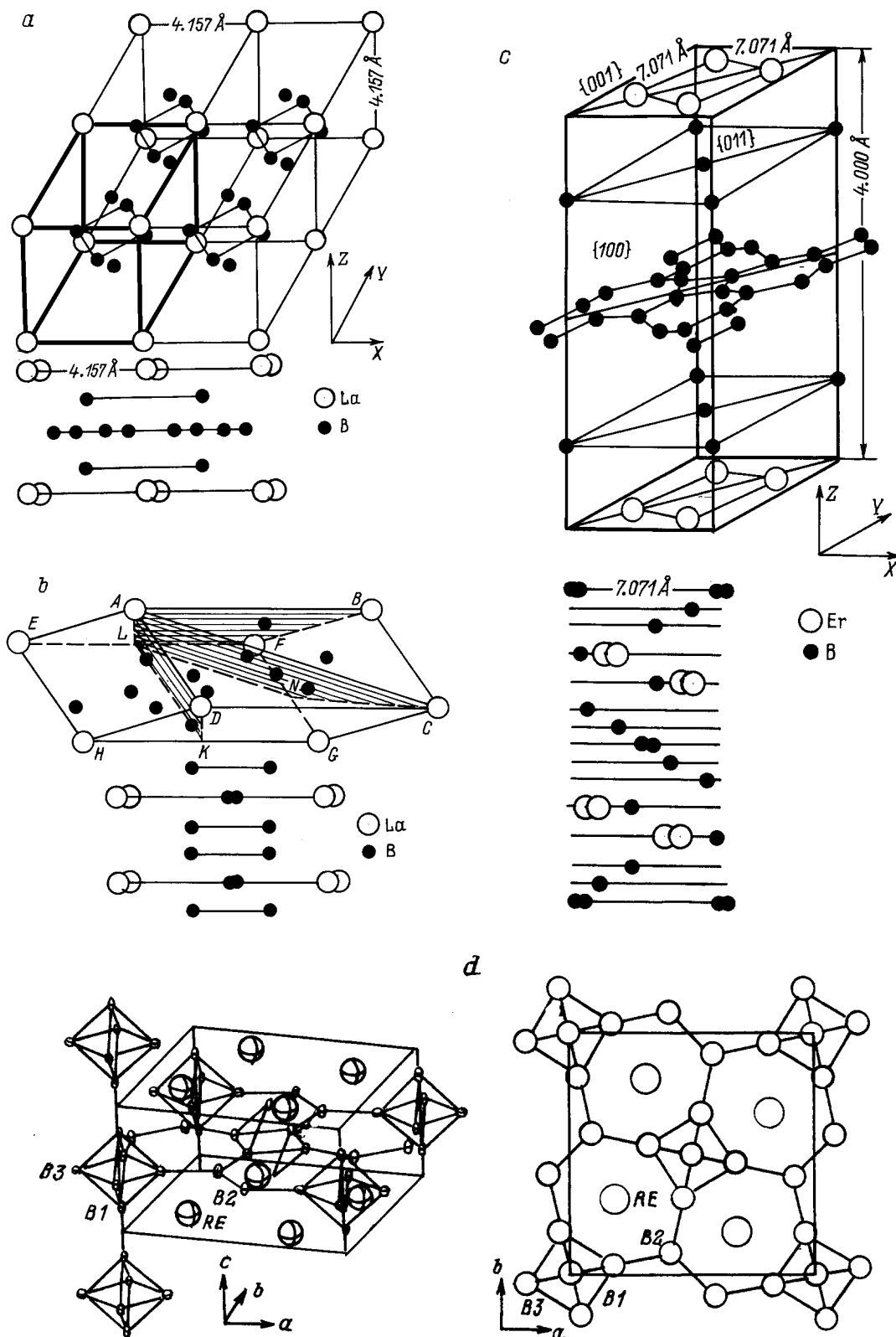
Расчет  $\rho_{vi}$  для граней разных простых форм проводится для атомов каждого сорта из суммарной площади всех содержащих такие атомы плоскостей, заключенных в  $V_i$  и параллельных плоскости грани простой формы,  $\rho_{vi}$  которой рассчитывается.

Если  $\rho_{vi}$  находится для определенного направления на плоскости грани одной простой формы, то в этом случае площадь атомной плоскости, расположенной строго под выбранным направлением  $(0, 45, 90^\circ)$  на этой грани, перпендикулярной последней и заключенной в пределах  $V_i$ , делится на число содержащихся в ней атомов одного (каждого) сорта.

1) Плотность атомов и ретикулярная анизотропия микротвердости гекса- и тетраборидов. Из рис. 1, *a* видно, что для  $\text{LaB}_6$  сечения, проведенные параллельно граням куба и ромбододекаэдра через расположенные в пределах  $V_i$  атомы, образуют ряд параллельных плоскостей, содержащих такие атомы. Площади всех плоскостей, содержащих атомы одного сорта, суммируются, и рассчитывается  $\rho_{vi}$  как частное от деления суммарной их площади на общее число одинаковых в них атомов (см. таблицу). Как видно из расчетов  $\rho_{vi}$  для атомов металла и В, у  $\text{LaB}_6$  грань куба должна быть тверже грани ромбододекаэдра, а у  $\text{ErB}_4$  грань пинакоида тверже грани призмы  $\{100\}$ . В то же время для РП полное сравнение невозможно из-за нулевых значений РП как для атомов металла, так и для атомов В (так как их атомы в этих случаях не выходят на поверхность граней).

Таким образом, использование  $\rho_{vi}$  для выявления ретикулярной анизотропии плотности атомов в кристаллической структуре соединений (и связанных с такой плотностью свойств, например, микротвердости) по сравнению с РП является более определенным и предпочтительным. В таблице представлены экспериментальные данные по определению микротвердости по Кнупу для гекса- и тетраборидов лантаноидов и актиноидов по методике, описанной ранее [7,8].

2) Плотность атомов и полярная анизотропия микротвердости гекса- и тетраборидов. Пример расчета  $\rho_{vi}$  для различных направлений (например,  $0, 45, 90^\circ$ ) на одной плоскости можно привести для грани ромбододекаэдра  $\text{LaB}_6$  на основе вышеприведенного правила (при этом промежуточное направление на ней будет равно примерно  $45^\circ$  при ориентации длинной оси пирамиды Кнупа на угол грани, так как грань ромбододекаэдра является прямоугольником, а не квадратом). На грани ромбододекаэдра  $ABCD$  (рис. 1, *b*) выберем три направления:  $AD$  ( $0^\circ$ ),  $AC$  ( $\sim 45^\circ$ ) и  $AB$  ( $90^\circ$ ). Строго под этими направлениями и перпендикулярно им в пределах  $V_i$  находятся три фигуры (заштрихованы):  $ADKL$  ( $0^\circ$ ),  $ACNL$  ( $\sim 45^\circ$ ) и  $ABFL$  ( $90^\circ$ ), площадь которых, а также число и вид заключенных в них атомов необходимо узнать. Анализ показывает, что прямоугольник  $ADKL$  содержит два атома La и два атома В, а трапеции  $ACNL$  и  $ABFL$  содержат соответственно два и три атома La и



**Рис. 1.** Схема кристаллической решетки  $\text{LaB}_6$  с габитусной формой куба (a) и ромбододекаэдра (b), элементарный объем идентичности кристаллической структуры  $\text{ErB}_4$  (c) и общий вид структуры тетраборидов [6] (проекция на грань пинакоида) (d). a) Жирными линиями выделен элементарный объем идентичности  $V_i$  (в этом случае он совпадает с объемом элементарной ячейки); b) заштрихованы плоскости, перпендикулярные трем направлениям на плоскости ромбододекаэдра ( $0, 45, 90^\circ$ ) и заключенные в пределах  $V_i$ , в которых определяется  $\rho_{vi}$  и измеряется полярная микротвердость. Внизу показана схема атомных слоев, параллельных граням куба  $\{100\}$  и ромбододекаэдра  $\{110\}$ ; c) для граней пинакоида (001) и призмы (100)  $\rho_{vi}$  совпадает (для наглядности рисунок вытянут по оси Z). Внизу показана схема атомных слоев, параллельных грани призмы (100).

Плотность атомов ( $\text{atom}/\text{\AA}^2$ ) металла  $\rho_{vi}$  и бора  $\rho_{vi}$  В в пределах  $V_i$  и микротвердость  $H_k$  ( $\text{kg}/\text{mm}^2$ ,  $P = 20 \text{ g}$ ) в различных направлениях на различных гранях монокристаллов  $\text{LaB}_6$  и  $\text{ErB}_4$ , а также других гекса- и тетраборидов

Direction		0°		45°		90°		
LaB <sub>6</sub> (LnB <sub>6</sub> ) cube, {100}	$N^a$		La — 4, B — 0		La — 4, B — 2			
	$\rho_{vi}$ B		0		0.082			
	crystall	$a, \text{\AA}$	$H_k$	$\rho_{vi}$	$H_k$	$\rho_{vi}$		
	LaB <sub>6</sub>	4.1570	2350 ± 260	0.231	2160 ± 160	0.164		
	CeB <sub>6</sub>	4.1396	2460 ± 220	0.233	2130 ± 130	0.165		
	PrB <sub>6</sub>	4.1327	2460 ± 210	0.234	2220 ± 120	0.166		
	NdB <sub>6</sub>	4.1266	2460 ± 190	0.235	2050 ± 120	0.166		
	SmB <sub>6</sub>	4.1334	2120 ± 190	0.234	1950 ± 120	0.166		
	EuB <sub>6</sub>	4.1844	2330 ± 200	0.228	2100 ± 120	0.162		
YbB <sub>6</sub>	4.1468	2330 ± 200	0.233	2200 ± 130	0.164			
ThB <sub>6</sub>	4.1108	1830 ± 70	0.237	1710 ± 60	0.167			
LaB <sub>6</sub> (LnB <sub>6</sub> ) rhombododecahedron, {110}	$N^a$		La — 2, B — 2		La — 2, B — 0		La — 3, B — 0	
	$\rho_{vi}$ B		0.164		0		0	
	crystall		$H_k$	$\rho_{vi}$	$H_k$	$\rho_{vi}$	$H_k$	$\rho_{vi}$
	LaB <sub>6</sub>		1950 ± 120	0.164	1740 ± 100	0.126	2070 ± 120	0.231
	SmB <sub>6</sub>		1500 ± 90	0.166	1740 ± 100	0.127	1600 ± 90	0.234
YbB <sub>6</sub> , $P = 50 \text{ g}$		1850 ± 70	0.165	1700 ± 70	0.127	1990 ± 80	0.233	
ErB <sub>4</sub> (LnB <sub>4</sub> ) pinac, {001}	$N^a$		Er — 0, B — 4		Er — 0, B — 6			
	$\rho_{vi}$ B		0.080		0.150			
	crystall		$H_k$	$\rho_{vi}$ B	$H_k$	$\rho_{vi}$ B		
	ErB <sub>4</sub>		1790 ± 130	0.080	2140 ± 110	0.150		
	SmB <sub>4</sub>		2710 ± 150	0.078	1950 ± 110	0.145		
	GdB <sub>4</sub>		1740 ± 130	0.078	2190 ± 120	0.147		
	TbB <sub>4</sub>		1830 ± 140	0.079	2220 ± 120	0.148		
	DyB <sub>4</sub>		2140 ± 160	0.081	2050 ± 110	0.152		
	HoB <sub>4</sub>		2070 ± 150	0.080	1600 ± 80	0.149		
UB <sub>4</sub>		2260 ± 110	0.080	2190 ± 130	0.151			
ErB <sub>4</sub> (LnB <sub>4</sub> ) prism, {100}	$N^a$		Er — 4, B — 0		Er — 2, B — 2		Er — 0, B — 4	
	$\rho_{vi}$ B		0		0.035		0.080	
	crystall		$H_k$	$\rho_{vi}$	$H_k$	$\rho_{vi}$ B	$H_k$	$\rho_{vi}$ B
	ErB <sub>4</sub>		2570 ± 150	0.141	2800 ± 170	0.035	2330 ± 140	0.080
	SmB <sub>4</sub>		2530 ± 150	0.137	2700 ± 160	0.034	2140 ± 130	0.078
	GdB <sub>4</sub>		2480 ± 150	0.138	2520 ± 150	0.034	2200 ± 130	0.078
	TbB <sub>4</sub>		2050 ± 120	0.139	2580 ± 150	0.034	1950 ± 110	0.079
	DyB <sub>4</sub>		1910 ± 100	0.143	2220 ± 120	0.035	1740 ± 90	0.081
	HoB <sub>4</sub>		2500 ± 150	0.141	2720 ± 160	0.035	2050 ± 120	0.080
	TmB <sub>4</sub>		2280 ± 130	0.142	2420 ± 140	0.035	1950 ± 110	0.080
LuB <sub>4</sub>		2150 ± 120	0.143	2200 ± 130	0.035	1950 ± 110	0.081	
ThB <sub>4</sub>		2050 ± 120	0.134	2140 ± 130	0.033	1740 ± 100	0.076	

Примечание. Чистота всех соединений не менее 99 mass.%.  $N^a$  — число атомов в плоскостях, параллельных исследуемой грани и заключенных в пределах  $V_i$ . Заметим, что для граней куба и пинакоида направления 0 и 90° эквивалентны.

не содержат атомов В. Рассчитав площади этих фигур, можно определить  $\rho_{vi}$  атомов La и В для всех трех направлений (см. таблицу). Необходимо отметить, что плоскость  $ACNL$  проходит вблизи двух (по крайней мере) атомов бора, заключенных в пределах  $V_i$ . Все данные расчетов  $\rho_{vi}$  для  $\text{LaB}_6$  и  $\text{ErB}_4$  приведены в таблице, где они сопоставлены с экспериментальными данными по микротвердости  $H_k$ .

## 2. Обсуждение результатов

Сравнение  $\rho_{vi}$  как для разных граней, так и для различных направлений на одной грани можно проводить для каждого сорта атомов в отдельности, если значение  $\rho_{vi}$  во всех случаях не равно нулю. Если же  $\rho_{vi} = 0$  для одного сорта атомов, то в этом случае следует сравнивать значения  $\rho_{vi}$  атомов разного сорта. Для объяснения

ретикулярной анизотропии микротвердости сравним  $\rho_{vi}$  и  $H_k$  для разных граней у  $\text{LaB}_6$  и  $\text{ErB}_4$ , представленные в таблице. Естественно, что такое сравнение можно проводить по какому-либо одному направлению на грани. Это приводит к заключению, что сравнение монокристаллов соединений по величине микротвердости на различных или на одной грани целесообразно лишь при наличии данных для сравниваемых граней по определенному направлению (например,  $0, 45, 90^\circ$ ). В противном случае можно говорить лишь о некоем усредненном значении микротвердости монокристаллов.

Из таблицы следует, что у  $\text{LaB}_6$  грань куба тверже грани ромбододекаэдра, чему соответствует как ход расчетных данных  $\rho_{vi}$ , так и характер изменения  $H_k$ . Аналогично изменяется  $H_k$  и у других гексаборидов (разность для всех соединений составляет  $2-3\sigma$ ). Значения  $H_k$  в различных направлениях на грани куба у всех гексаборидов также коррелируют с величинами  $\rho_{vi}$  для атомов металла (разность составляет  $< 1-2\sigma$ ). Для грани ромбододекаэдра такая корреляция наблюдается у двух ( $\sigma \approx 2-4$ ) из трех исследованных гексаборидов, а отсутствие данных для остальных гексаборидов связано с отсутствием у них этой грани или же с несовершенством поверхности и очень малой ее площадью. Таким образом, и ретикулярная и полярная анизотропия микротвердости гексаборидов хорошо описываются предложенным критерием  $\rho_{vi}$ .

У  $\text{ErB}_4$  рассчитанная величина  $\rho_{vi}$  показывает, что пинакоид  $\{001\}$  должен быть тверже призмы  $\{100\}$  в направлении  $\sim 45^\circ$ , иметь примерно одинаковую  $H_k$  в направлении  $90^\circ$  и быть мягче в направлении  $0^\circ$  (см. таблицу). Однако  $H_k$  в направлении  $\sim 45^\circ$  на пинакоиде у всех тетраборидов меньше, чем у призмы (разность составляет  $1.5-5\sigma$ ). В направлении  $0^\circ$  пинакоид действительно мягче призмы (исключение составляют  $\text{SmB}_4$  и  $\text{DyB}_4$ , разность  $\approx 1.5\sigma$ ), а в направлении  $90^\circ$  у трех соединений пинакоид мягче (разность  $\approx 1-2\sigma$ ) и у трех тверже призмы (разность у двух  $\approx 2\sigma$ , а у  $\text{HoB}_4$  значения практически совпадают). Это противоречие легко снимается, если учесть возможность ошибки в установлении простой формы (пинакоида или призмы) на очень малых образцах ( $< 0.2 \text{ mm}$ ). Разброс данных в направлении  $90^\circ$  можно объяснить несовершенством поверхности граней исследованных образцов. Таким образом, объяснение ретикулярной анизотропии микротвердости тетраборидов с помощью  $\rho_{vi}$  представляется удовлетворительным.

Что касается полярной анизотропии, то для пинакоида у тетраборидов наблюдается как максимум (три соединения), так и минимум (четыре соединения)  $H_k$  в направлении  $45^\circ$ , хотя  $\rho_{vi}$  для В имеет здесь максимум ( $\rho_{vi} = 0$  для Er). Можно предположить, что при неточной ориентации длинной диагонали пирамиды Кнупа возникает возможность отклонения плоскости, в направлении которой она воздействует, от плоскости, содержащей максимальное количество атомов В. При этом такое отклонение, судя по большому количеству тетраборидов,

имеющих минимум  $H_k$  в направлении  $\sim 45^\circ$ , является скорее неизбежным, чем вероятным (рис. 1, d).

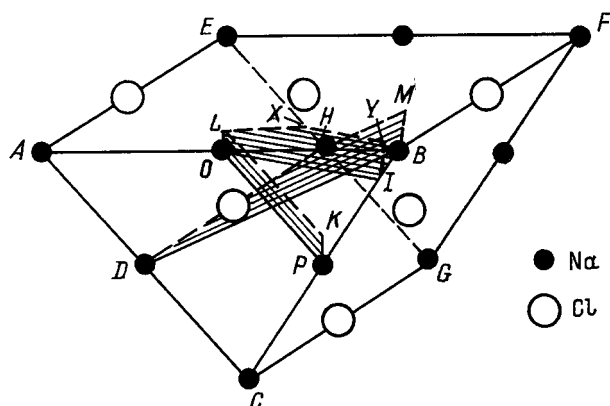
В случае призмы все без исключения тетрабориды (в том числе и при различных нагрузках [7]) имеют максимум  $H_k$  в направлении  $\sim 45^\circ$  и  $\rho_{vi} > 0$  для атомов Er и В, хотя по абсолютной величине эти значения меньше, чем значения  $\rho_{vi}$  для  $0^\circ$  (только Er) и для  $90^\circ$  (только В). Объяснить такой максимум можно тем, что плоскость в направлении  $\sim 45^\circ$  содержит по крайней мере два атома В и два атома металла (анализ, проведенный авторами, показывает весьма близкое расположение двух атомов В и двух атомов металла к плоскости, которая перпендикулярна этому направлению и грани призмы и по которой происходит измерение микротвердости) (рис. 1, c, d). Кроме того, эта плоскость перпендикулярна также "торцам" сеток из атомов В, образованных "основаниями" борных октаэдров и связующих их атомами В (рис. 1, d). В этих случаях пирамида Кнупа "встречает" многие химические связи между атомами В, направленные перпендикулярно ее движению. Более того, этому движению перпендикулярны также "торцы" плоскостей с атомами металла. Все это сказывается на совершенстве этой грани кристалла, которая для некоторых тетраборидов имеет, по наблюдениям авторов, явную "штриховку" (отдельность, спайность, слоистость и другие проявления деформационных процессов в материале).

Можно отметить, что с учетом вышеизложенного характер изменения  $\rho_{vi}$  для всех направлений на призме соответствует характеру изменения  $H_k$ .

Таким образом, предложенный критерий —  $\rho_{vi}$  — и условия его применения помогают объяснять и прогнозировать изменения микротвердости как на различных, так и на одной грани монокристаллов тугоплавких боридов.

У всех гекса- и тетраборидов лантаноидов и актиноидов изменение  $\rho_{vi}$  будет происходить в соответствии с изменением периодов решетки каждого соединения [9] (см. таблицу). Можно также отметить, что  $\rho_{vi}$  в изоструктурных рядах соединений не является "чувствительным" параметром, так как, несмотря на заметные различия в периодах решетки,  $\rho_{vi}$  имеет одинаковые значения для нескольких соединений (см. таблицу).

Для проверки возможности применения предложенного критерия к соединениям с другим (например, ионным) типом связи авторы измерили  $H_k$  для  $\text{NaCl}$  и  $\text{LiF}$  ( $a = 5.64$  и  $4.03 \text{ \AA}$ ) во всех трех направлениях для граней куба ( $\text{LiF}$ ), ромбододекаэдра и октаэдра и рассчитали для них  $\rho_{vi}$  и РП для каждого сорта атомов (рис. 2). Измерения микротвердости проводились по стандартной методике [8].  $\text{NaCl}$  (97.8; Mg — 1.5; I — 0.5 mass.%) и  $\text{LiF}$  (99.99 mass.%) были выбраны как модельные материалы в связи с различным характером полярной анизотропии микротвердости [2-4,10,11]. Сравнение расчетных данных  $\rho_{vi}$  и  $H_k$  ( $\sigma \leq 3\%$ ) для всех граней у  $\text{NaCl}$  показывает хорошую корреляцию. Например, для грани октаэдра (рис. 2):  $0^\circ$  ( $\rho_{vi}$  для Na — 0.205,  $H_k$  —  $35 \text{ kg/mm}^2$ ),  $45^\circ$  (0.108, 32),  $90^\circ$  (0.211, 36). Значения



**Рис. 2.** Элементарный объем идентичности NaCl для грани простой формы октаэдра {111}. Заштрихованы плоскости, перпендикулярные направлениям  $(0, 45, 90^\circ)$ , для определения  $\rho_{vi}$ .

$\rho_{vi}$  для Cl в меньшей степени соответствуют экспериментальным данным. Такая картина наблюдается при данном выборе элементарной ячейки NaCl (с атомами Na в вершинах куба). Однако такой выбор является произвольным, и атомы Na могут быть заменены атомами Cl. Другая картина наблюдается в случае гексаборидов, где экспериментально подтвержден [12] выход атомов La на грань куба (100) у LaB<sub>6</sub>. Что касается LiF, то полярная анизотропия, в частности, для куба здесь очень мала и результаты на свежих сколах при малых нагрузках ( $P = 5$  и  $20$  g) и временах индентирования согласуются с данными [3,4]. Однако на старых сколах и при больших нагрузках ( $P = 200$  g) наблюдается изменение характера анизотропии. Поэтому LiF является особым материалом, требующим специального исследования.

Таким образом, предложенный новый критерий может быть использован для объяснения и прогноза ретикулярной и, в особенности, полярной анизотропии микротвердости у соединений с различным типом химической связи.

Элементарный объем идентичности и плотность атомов в его пределах являются новыми объективными структурными характеристиками твердого состояния любых элементов и соединений.

Ретикулярная и полярная анизотропия микротвердости гекса- и тетраборидов лантаноидов и актиноидов, а также NaCl и LiF могут быть объяснены изменением атомной плотности в пределах мотива кристаллической структуры — элементарного объема идентичности.

В заключение авторы считают своим приятным долгом выразить глубокую благодарность С.П. Никанорову за плодотворные дискуссии, а также признательность В.М. Крымову, О.В. Клявину и Ю.М. Чернову за помощь в работе и дискуссии.

## Список литературы

- [1] А.С. Поваренных. Твердость минералов. Изд-во АН УССР, Киев (1963). 304 с.
- [2] М.П. Шаскольская. Кристаллография. Высш. шк., М. (1976). 392 с.
- [3] Ю.С. Боярская, Д.З. Грабко, М.С. Кац. Физика процессов микроиндентирования. Штиинца, Кишинев (1986). 294 с.
- [4] С.П. Никаноров. Докт. дис. ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Л. (1976).
- [5] И.И. Шафрановский. Алмазы. Наука, М.-Л. (1964). С. 148.
- [6] G. Will, W. Schäfer, F. Pfeiffer, F. Elf, J. Etourneau. J. Less-Comm. Met. **82**, 349 (1981).
- [7] В.Н. Гурин, Л.И. Деркаченко, М.М. Корсукова, С.П. Никаноров, В. Юнг, Р. Мюллер. ФТТ **38**, 9, 2750 (1996).
- [8] Б.В. Мотт. Испытание на твердость микровдавливанием. Гостехиздат, М. (1960). 338 с.
- [9] Т.И. Серебрякова, В.А. Неронов, П.Д. Пешев. Высокотемпературные бориды. Металлургия (Челяб. отд-ние), М. (1991). С. 12, 148.
- [10] А.А. Воробьев. Механические и тепловые свойства щелочно-галогидных монокристаллов. Высш. шк., М. (1968). 270 с.
- [11] Б.И. Смирнов. Дислокационная структура и упорядочение кристаллов. Наука, Л. (1981). 233 с.
- [12] R.E. Watson, M.L. Perlman. Surf. Sci. **122**, 371 (1982).