

**Арисова В. Н.  
Слаутин О.В**

# **ЭЛЕМЕНТЫ СТРУКТУРНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ**

**УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ**

**ВОЛГОГРАД 2007**

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ  
ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**

**В. Н. Арисова, О. В. Слаутин**

**ЭЛЕМЕНТЫ СТРУКТУРНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ**

**Учебное пособие**

«Политехник»

Волгоград

2007

УДК 548. 4

Рецензенты:

лаборатория службы технического надзора за оборудованием  
«ЛУКОЙЛ-Волгограднефтепереработка», начальник лаборатории,  
канд. техн. наук **Н.И.Теплова**;

доктор технических наук, профессор Волгоградского государственного  
архитектурно-строительного университета, Заслуженный деятель науки и  
техники РФ **В. Д. Орешкин**.

Печатается по решению редакционно-издательского совета  
Волгоградского государственного технического университета

Арисова, В.Н. Элементы структурной кристаллографии: учеб.пособие/

В. Н. Арисова, О.В. Слаутин. – ВолгГТУ. – Волгоград. 2007. – 94 с.

ISBN

Рассмотрены теоретические вопросы структурной  
кристаллографии: параметры и типы пространственных решеток  
кристаллических материалов, кристаллографические индексы плоскостей  
и направлений, построение их проекций, элементы симметрии  
континуума и дисконтинуума.

Предназначено для студентов специальности 121000 (150502)  
«Конструирование и производство изделий из композиционных  
материалов» при изучении дисциплины «Структура и свойства  
композиционных материалов».

Ил. . Табл. . Библиогр.: назв.

ISBN

© Волгоградский государственный  
технический университет, 2007

Составители: Вера Николаевна Арисова  
Олег Викторович Слаутин

## **Элементы структурной кристаллографии**

Учебное пособие

Авторская редакция

Темплан 2007, позиция №

Подписано в печать . Формат 60x84 1/16

Бумага газетная. Печать офсетная. Гарнитура Times.

Усл.печ.л. . Тираж 150 экз. Заказ .

Тираж 150 экз. Заказ .

Волгоградский государственный технический университет.  
400131 Волгоград, просп. им. В.И. Ленина, 28.

РПК «Политехник» Волгоградского государственного технического  
университета.

400131 Волгоград, ул.Советская, 35.

**СОДЕРЖАНИЕ:**

<u>Введение</u> .....	6
<u>ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №1 АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РЕШЕТОК</u> .....	8
<u>1. 1. Понятие о пространственной решетке и     элементарной ячейке</u> .....	8
<u>1.2. ПРАВИЛА ВЫБОРА ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ</u> .....	9
<u>1.3. ПРИМИТИВНЫЕ И СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ     ЯЧЕЙКИ</u> .....	11
<u>1.4. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЯЧЕЙКИ БРАВЕ</u> .....	13
<u>1.5. ПОНЯТИЕ О КООРДИНАЦИОННОМ ЧИСЛЕ</u> .....	17
<u>1.6. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ РЕШЕТКИ МЕТАЛЛОВ</u> .....	18
<u>1.7. ЗАДАЧИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НА ЛАБОРАТОРНОМ     ЗАНЯТИИ</u> .....	19
<u>1.8. ПРИМЕР РАБОТЫ С МОДЕЛЯМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ     СТРУКТУР. АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ХЛОРИСТОГО ЦЕЗИЯ.</u> ..	20
<u>1. 9. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ</u> .....	22
<u>1.10. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ</u> .....	22
<u>ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2 КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ</u> .....	23
<u>2.1. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ПЛОСКОСТИ</u> ..	23
<u>2.2. ОСОБЕННОСТИ ИНДИЦИРОВАНИЯ В ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ     СИНГОНИИ</u> .....	29
<u>2.3. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ УЗЛА</u> .....	31
<u>2.4. Кристаллографические индексы направления</u> .....	32
<u>2.4.1. Порядок нахождения индексов направления</u> .....	33
<u>2.4.2. ПОРЯДОК ПОСТРОЕНИЯ НАПРАВЛЕНИЯ ПО         ИЗВЕСТНЫМ ИНДЕКСАМ</u> .....	34
<u>2.5. УСЛОВИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НА     ЛАБОРАТОРНОМ ЗАНЯТИИ</u> .....	35
<u>2.6. Задание для самостоятельной работы (табл. 2.2).</u> .....	36
<u>2.7. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ</u> .....	38
<u>ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3 ЛИНЕЙНЫЕ И УГЛОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ В ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РЕШЕТКЕ</u> ...	38
<u>3.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕЖПЛОСКОСТНОГО РАССТОЯНИЯ</u> ..	38
<u>3.2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ УГЛА МЕЖДУ НАПРАВЛЕНИЯМИ,     ПЛОСКОСТЯМИ, ПЛОСКОСТЬЮ И ПРЯМОЙ</u> .....	41
<u>3.3. ПОНЯТИЕ О КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ЗОНЕ И УСЛОВИИ     ЗОНАЛЬНОСТИ</u> .....	43
<u>3.4. УСЛОВИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НА     ЛАБОРАТОРНОМ ЗАНЯТИИ</u> .....	46
<u>3.5. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ</u> .....	47
<u>3.6. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ:</u> .....	49
<u>ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 4 КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЕКЦИИ</u> .....	49

<u>4.1. ПОНЯТИЕ О КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И ПОЛЯРНОМ КОМПЛЕКСЕ</u> .....	50
<u>4.2. ПОНЯТИЕ О СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ И ГНОМОСТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ И ЕЕ ПОСТРОЕНИИ</u> .....	51
<u>4.3. ПОСТРОЕНИЕ СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ НАПРАВЛЕНИЯ</u> .....	52
<u>4.4. ПОСТРОЕНИЕ СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ ПЛОСКОСТИ</u> .....	53
<u>4.5. СВОЙСТВА СТЕРЕОГРАФИЧЕСКИХ ПРОЕКЦИЙ</u> .....	57
<u>4.6. СЕТКА ВУЛЬФА</u> .....	57
<u>4.7. СВЯЗЬ МЕЖДУ СФЕРИЧЕСКИМ КООРДИНАТАМИ И КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИМИ ИНДЕКСАМИ ПЛОСКОСТИ</u> .....	60
<u>4.8. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ С ПОМОЩЬЮ СЕТКИ ВУЛЬФА</u> .....	60
<u>4.9. УСЛОВИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НА ЛАБОРАТОРНОМ ЗАНЯТИИ</u> .....	66
<u>4.9. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ</u> .....	68
<u>4.10. Контрольные вопросы:</u> .....	69
<u>ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 5 СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОГРАННИКОВ (СИММЕТРИЯ КОНТИНУУМА)</u> .....	71
<u>5.1. ПОНЯТИЕ О СИММЕТРИИ</u> .....	71
<u>5.2. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ</u> .....	73
<u>5.3. ПОНЯТИЕ О КЛАССЕ СИММЕТРИИ</u> .....	80
<u>5.4. СВЯЗЬ МЕЖДУ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РЕШЕТКОЙ И ЭЛЕМЕНТАМИ СИММЕТРИИ</u> .....	81
<u>5.5. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ</u> .....	86
<u>5.6. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ:</u> .....	87
<u>ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 6 СИММЕТРИЯ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ (СИММЕТРИЯ ДИСКОНТИНУУМА)</u> .....	88
<u>6.1. ПОНЯТИЕ О СИММЕТРИИ ДИСКОНТИНУУМА И ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЕ</u> .....	88
<u>6.2. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РЕШЕТОК</u> .....	89
<u>6.3. ОБОЗНАЧЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ СИММЕТРИИ</u> .....	92
<u>6.4. ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ</u> .....	94
<u>6.5. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ</u> .....	99
<u>6.6. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ</u> .....	100
<u>Список литературы</u> .....	100

Большинство современных конструкционных материалов, в том числе и композиционных — это кристаллические вещества. Кристалл представляет собой совокупность правильно расположенных атомов, образующих закономерную структуру, возникшую самопроизвольно из окружающей его неупорядоченной среды. Причиной, вызывающей симметричное расположение атомов является стремление кристалла к минимуму свободной энергии. Кристаллизация (возникновение порядка из хаоса, то есть из раствора, пара) происходит с такой же неизбежностью, как, например, процесс падения тел. В свою очередь минимум свободной энергии достигается при наименьшей доле поверхностных атомов в структуре, поэтому внешним проявлением правильного внутреннего атомного строения кристаллических тел является ограничение кристаллов. В 1669 г. датский ученый Н. Стенон обнаружил закон постоянства углов: углы между соответствующими гранями кристалла постоянны и характерны для данного вещества. Любое твердое тело состоит из взаимодействующих частиц. Этими частицами, в зависимости от природы вещества, могут быть отдельные атомы, группы атомов, молекулы, ионы и т.п. Соответственно связь между ними бывает: атомная (ковалентная), молекулярная (связь Ван – дер – Вальса), ионная (полярная) и металлическая.

В современной кристаллографии можно выделить четыре направления, которые в известной мере связаны одно с другим:

- геометрическую кристаллографию, изучающую различные формы кристаллов и законы их симметрии;

- структурную кристаллографию и кристаллохимию, которые изучают пространственное расположение атомов в кристаллах и зависимость его от химического состава и условий образования кристаллов;

- кристаллофизику, изучающую влияние внутреннего строения кристаллов на их физические свойства;

- физико-химическую кристаллографию, которая изучает вопросы образования искусственных кристаллов.

Интерес к отступлениям от правильного внутреннего строения кристаллов, к разного рода дефектам кристаллической структуры, которые оказывают решающее влияние на прочность, пластичность, многие физические свойства и разнообразные процессы структурных изменений в материалах, стал быстро возрастать, начиная с середины тридцатых годов 20 века. Для материаловедения, при создании композиционных материалов весьма важно то, что в настоящее время экспериментально можно определять количество и расположение разного типа дефектов кристаллической структуры непосредственно в промышленных сплавах, изучать появление, перераспределение и исчезновение этих дефектов при получении, обработке давлением, термической обработке и эксплуатации изделий. Это не только позволяет глубже понять поведение кристаллических материалов в разных условиях обработки и эксплуатации, но и открывает новые возможности для целенаправленного формирования оптимальной кристаллической структуры с заданным количеством и распределением дефектов структуры, которые обеспечивают требуемые свойства материалов.

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №1 АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РЕШЕТОК

### ***1. 1. Понятие о пространственной решетке и элементарной ячейке***

При изучении вопроса кристаллического строения тел прежде всего необходимо иметь четкое представление о терминах: "пространственная решетка" и "элементарная ячейка". Эти понятия используются не только в кристаллографии, но и в целом ряде смежных наук для описания, как расположены в пространстве материальные частицы в кристаллических телах.

Как известно, в кристаллических телах, в отличие от аморфных,

материальные частиц» (атомы, молекулы, ионы) располагаются в определенном порядке, на определенном расстоянии друг от друга. *Пространственная решетка* — это схема, которая показывает расположение материальных частиц в пространстве.

Пространственная решетка (рис. 1.1.) фактически состоит из множества одинаковых параллелепипедов, которые целиком, без промежутков, заполняют пространство. Материальные частицы обычно располагаются в узлах решетки — точках пересечения ее ребер.

*Элементарная ячейка* — это наименьший параллелепипед, с помощью которого можно построить всю пространственную решетку путем непрерывных параллельных переносов (трансляций) в трех направлениях пространства.

Вид элементарной ячейки представлен на рис.1.2. Три вектора  $\bar{a}$ ,  $\bar{b}$ ,  $\bar{c}$ , являющиеся ребрами элементарной ячейки, называют векторами трансляции. Их абсолютная величина ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ) — это периоды решетки, или осевые единицы. Вводят в рассмотрение и углы между векторами трансляций —  $\alpha$  ( между векторами  $\bar{b}$ ,  $\bar{c}$  ),  $\beta$  ( между  $\bar{a}$ ,  $\bar{c}$  ) и  $\gamma$  ( между  $\bar{a}$ ,  $\bar{b}$  ). Таким образом, элементарную ячейку определяют шесть величин: три значения периодов ( $a$ ,  $b$ ,  $c$  ) и три значения углов между ними ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  ).

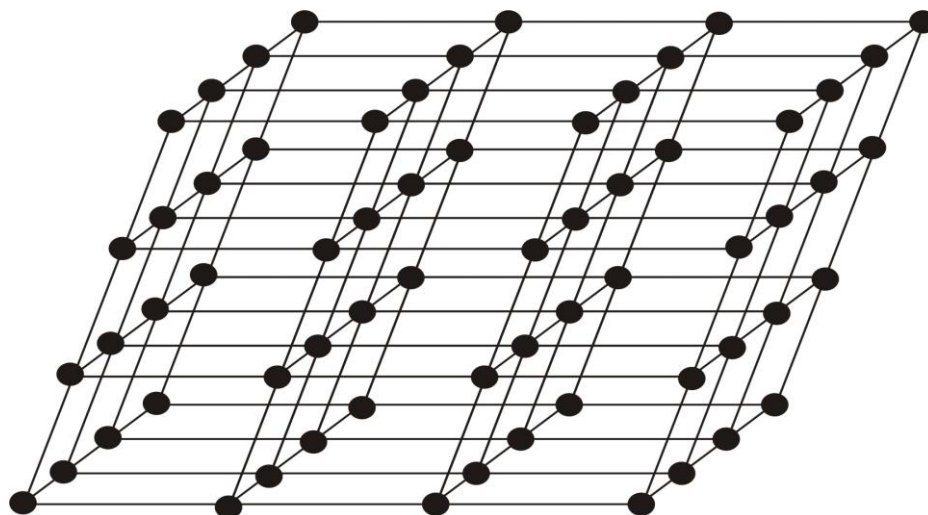


Рис. 1.1. Пространственная решетка



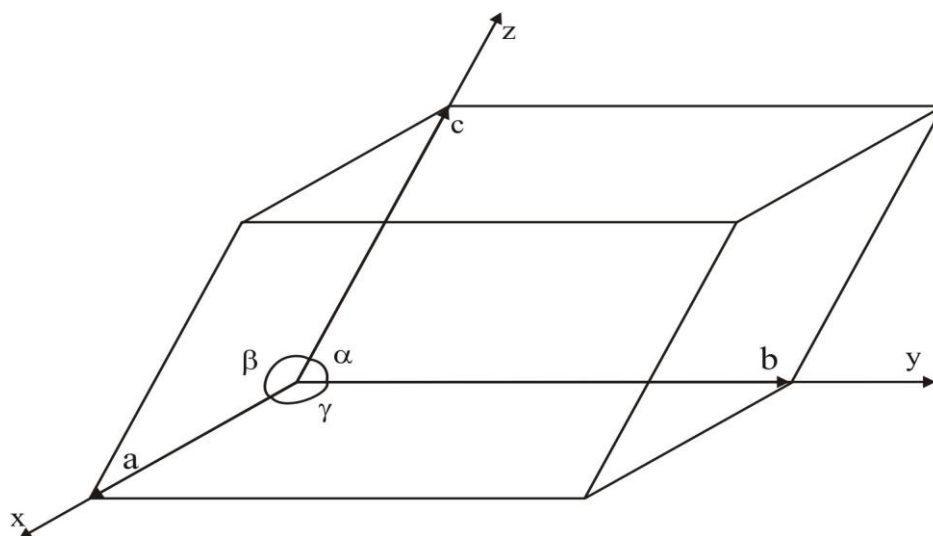


Рис. 1.2. Элементарная ячейка

### 1.2. ПРАВИЛА ВЫБОРА ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ

При изучении представлений об элементарной ячейке следует обратить внимание на то, что величину и направление трансляций в пространственной решетке можно выбрать по-разному, поэтому форма и размеры элементарной ячейки будут различны. На рис. 1.3 рассмотрен двумерный случай. Показана плоская сетка решетки и разные способы выбора плоской элементарной ячейки.

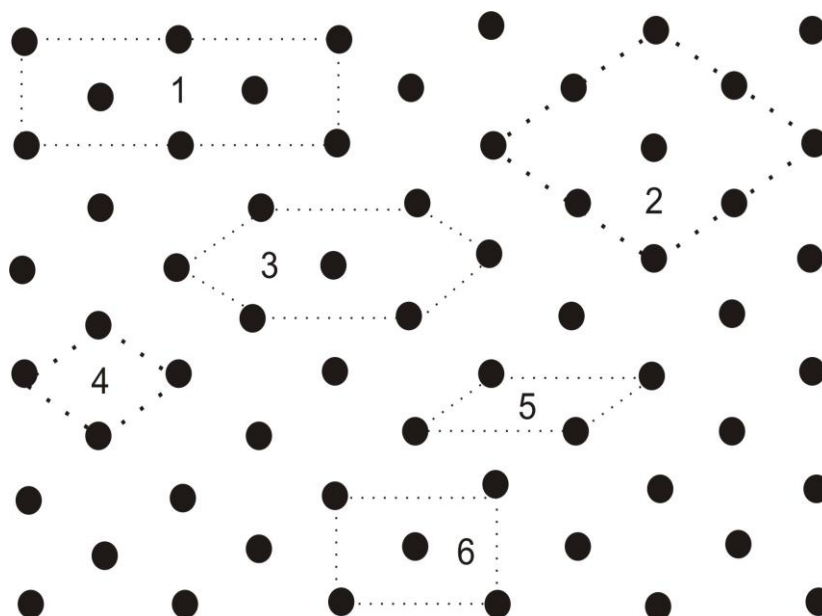


Рис. 1.3. Способы выбора элементарной ячейки

В середине XIX в. французский кристаллограф О. Браве предложил следующие условия выбора элементарной ячейки:

- 1) симметрия элементарной ячейки должна соответствовать симметрии пространственной решетки;
- 2) число равных ребер и равных углов между ребрами должно быть максимальным;
- 3) при наличии прямых углов между ребрами их число должно быть максимальным;
- 4) при соблюдении этих трех условий объем элементарной ячейки должен быть минимальным.

На основании этих правил Браве доказал, что существует только 14 типов элементарных ячеек, которые получили название трансляционных, поскольку строятся они путем трансляции — переноса. Эти решетки отличаются друг от друга величиной и направлением трансляций, а отсюда вытекает различие в форме элементарной ячейки и в числе узлов с материальными частицами.

### **1.3. ПРИМИТИВНЫЕ И СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЯЧЕЙКИ**

По числу узлов с материальными частицами элементарные ячейки подразделяются на примитивные и сложные. В примитивных ячейках Браве материальные частицы находятся только в вершинах, в сложных — в вершинах и дополнительно внутри или на поверхности ячейки. К числу сложных ячеек относятся объемноцентрированная  $I$ , гранецентрированная  $F$  и базоцентрированная  $C$ . На рис.1.4 показаны элементарные ячейки Браве.

В элементарной ячейке узел с материальной частицей, расположенный в вершине, принадлежит одновременно восьми соприкасающимся ячейкам; данной ячейке он приходится лишь  $1/8$  частью. Поэтому, на объем примитивной ячейки Браве, где таких вершин 8, приходится 1 узел ( $1/8 \times 8 = 1$ ).

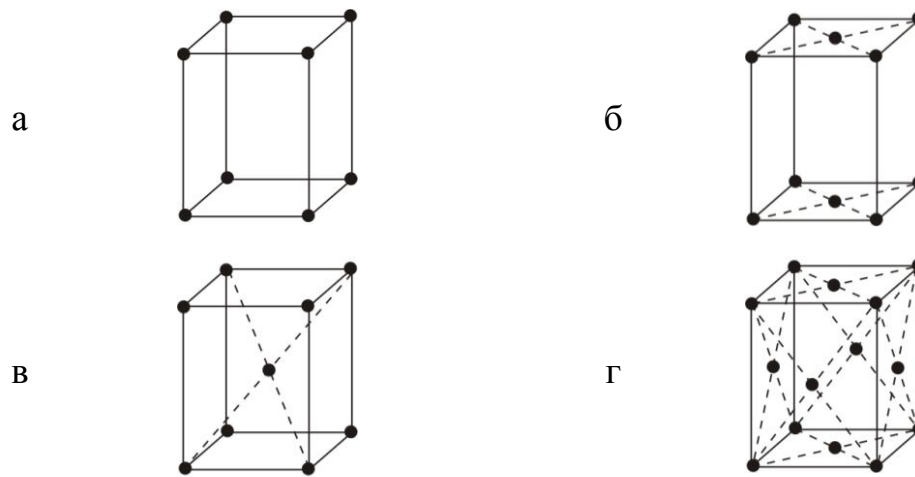


Рис. 1.4. Элементарные ячейки Браве: а – примитивная, б – базоцентрированная, в – объемноцентрированная, г – гранецентрированная

В объемноцентрированной ячейке имеется дополнительный узел в центре ячейки, принадлежащий только данной ячейке, поэтому здесь имеется два узла ( $1/8 \times 8 + 1 = 2$ ). В гранецентрированной ячейке узлы с материальными частицами находятся, кроме вершин ячейки, еще в центрах всех шести граней. Такие узлы принадлежат одновременно двум ячейкам: данной и другой, смежной с ней. На долю данной ячейки каждый из таких узлов принадлежит  $1/2$  часть. Поэтому в гранецентрированной ячейке будет четыре узла ( $1/8 \times 8 + 1/2 \times 6 = 4$ ). Аналогично в базоцентрированной ячейке находятся 2 узла ( $1/8 \times 8 + 1/2 \times 2 = 2$ ) с материальными частицами. Основные сведения об элементарных ячейках Браве приведены в табл. 1.1.

Примитивная ячейка Браве содержит трансляции  $\bar{a}$ ,  $\bar{b}$ ,  $\bar{c}$ , только вдоль координатных осей. В объемноцентрированной ячейке добавляется еще трансляция вдоль пространственной диагонали - к узлу, расположенному в центре ячейки. В гранецентрированной, кроме осевых трансляций  $\bar{a}$ ,  $\bar{b}$ ,  $\bar{c}$  имеются дополнительная трансляция вдоль диагоналей граней, а в базоцентрированной — вдоль диагонали грани, перпендикулярной оси Z.

## Основные сведения о примитивных и сложных ячейках Браве.

Тип решетки Браве	Число узлов	Основные трансляции	Базис
1. Примитивная $P$	1	$\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$	[[000]]
2. Объемноцентрированная $I$	2	$\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \frac{\bar{a}+\bar{b}+\bar{c}}{2}$	[[000; $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ ]]
3. Гранецентрированная $F$	4	$\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \frac{\bar{a}+\bar{b}}{2}, \frac{\bar{a}+\bar{c}}{2}, \frac{\bar{b}+\bar{c}}{2}$	[[000; $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ ; $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ ; $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ ]]
4. Базоцентрированная $C$	2	$\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \frac{\bar{a}+\bar{b}}{2}$	[[000, $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ ]]

Примитивная ячейка Браве содержит трансляции  $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ , только вдоль координатных осей. В объемноцентрированной ячейке добавляется еще трансляция вдоль пространственной диагонали — к узлу, расположенному в центре ячейки. В гранецентрированной, кроме осевых трансляций  $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$  имеются дополнительная трансляция вдоль диагоналей граней, а в базоцентрированной — вдоль диагонали грани, перпендикулярной оси  $Z$ .

Под базисом понимают совокупность координат минимального числа узлов, выраженную в осевых единицах, трансляцией которых можно получить всю пространственную решетку. Базис записывается в двоянных квадратных скобках. Координаты базиса для различных типов ячеек Браве приведены в табл.1.1.

### 1.4. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЯЧЕЙКИ БРАВЕ

В зависимости от формы все ячейки Браве распределяются между семью кристаллическими системами (сингониями). Слово «сингония» означает сходноугольность. Каждой сингонии соответствуют определенные элементы симметрии. В табл.1.2 указаны соотношения

между периодами решетки  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и осевыми углами  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  для каждой сингонии.

Таблица 1.2

### Характеристики сингоний кристаллов

Сингонии		Соотношения между периодами решетки и углами
1.	Триклинная	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
2.	Моноклинная	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
3.	Ромбическая	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
4.	Тетрагональная	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
5.	Гексагональная	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
6.	Ромбоэдрическая	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
7.	Кубическая	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

На рис. 1.5 представлены все четырнадцать типов элементарных ячеек Браве, распределенные по сингониям. Гексагональная ячейка Браве представляет собой базоцентрированную шестигранную призму. Однако очень часто ее изображают иначе — в виде четырехгранной призмы с ромбом в основании, которая представляет одну из трех призм, составляющих шестигранную (на рис. 1.5 она представлена сплошными линиями). Такое изображение проще и удобнее, хотя связано с нарушением принципа соответствия симметрии (первый принцип выбора элементарной ячейки по Браве).

Для ромбоэдрической сингонии элементарной ячейкой, удовлетворяющим условиям Браве, является примитивный ромбоэдр  $R$ , у которого  $a=b=c$  и  $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ . Наряду с  $R$ -ячейкой для описания ромбоэдрических структур пользуются и гексагональной ячейкой, поскольку ромбоэдрическую ячейку всегда можно свести к

гексагональной (рис. 1.6) и представить ее как три примитивные гексагональные ячейки. В связи с этим в литературе ромбоэдрическую сингонию иногда отдельно не рассматривают, представляя, ее как разновидность гексагональной.

Принято сингонии с одинаковыми соотношениями между осевыми единицами объединять в одну категории. Поэтому триклинную, моноклинную и ромбическую сингонии объединяют в низшую категорию ( $a \neq b \neq c$ ), тетрагональную, гексагональную (и производную от нее ромбоэдрическую) – в среднюю ( $a = b \neq c$ ), к высшей категории ( $a = b = c$ ) относится кубическая сингония.


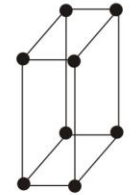
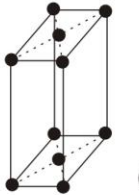
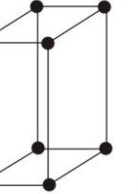
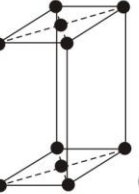
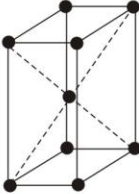
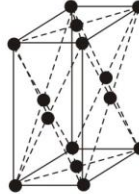
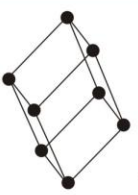
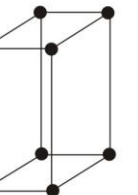
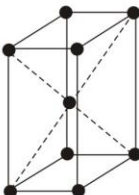
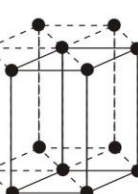
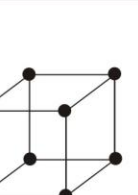

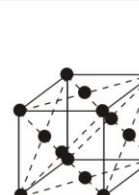
Сингония	Тип решетки			
	Примитивная	Базоцентриро- ванная	Объемно- центрированная	Гране- центрированная
Триклинная	 P			
Моноклинная	 P	 C		
Ромбическая	 P	 C	 I	 F
Тригональная (ромбоэдрическая)	 R			
Тетрагональная	 P		 I	
Гексагональная	 P			
Кубическая	 P		 I	 F

Рис. 1.5. 14 типов элементарных ячеек Браве

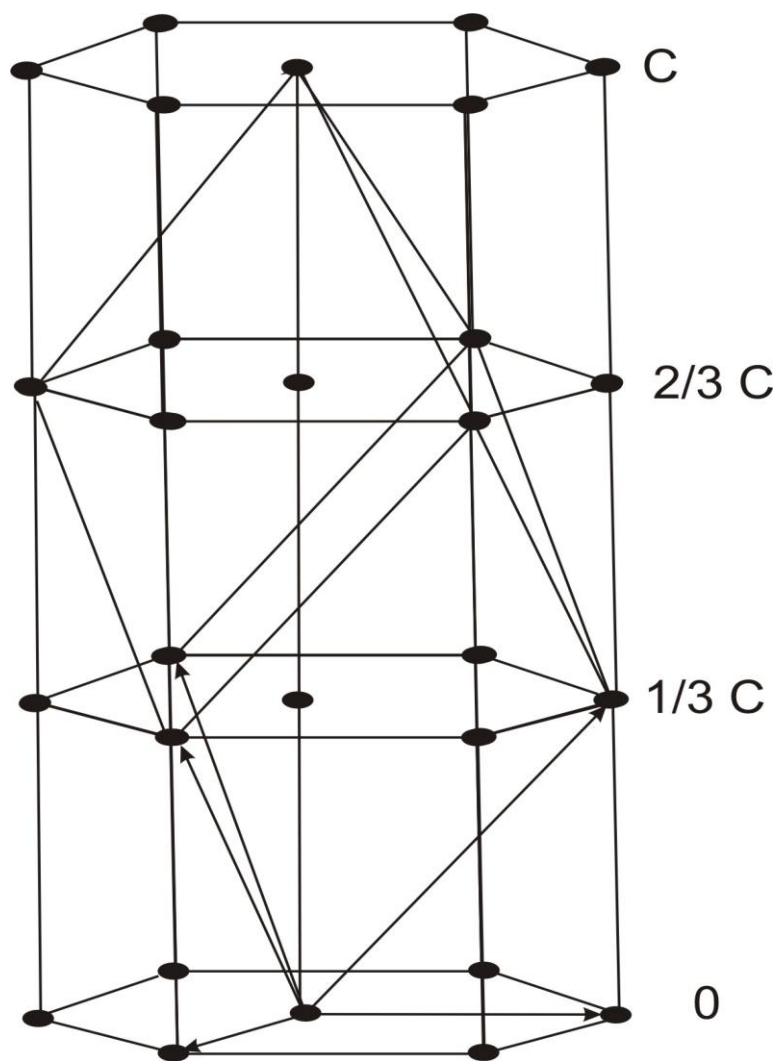


Рис. 1. 6. Три примитивные гексагональные ячейки, эквивалентные ромбоэдрической

### 1.5. ПОНЯТИЕ О КООРДИНАЦИОННОМ ЧИСЛЕ

В сложных ячейках материальные частицы уложены более плотно, чем в примитивных, более полно заполняют объем ячейки, больше связаны друг с другом. Для характеристики этого вводят понятие о координационном числе. *Под координационным числом* данного атома понимают число ближайших соседних атомов. Если речь идет о координационном числе иона, то подразумевается число ближайших к нему ионов противоположного знака. Чем больше координационное число, тем с большим числом атомов или ионов связан данный, тем больше места занято частицами, тем компактнее решетка.



## 1.6. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ РЕШЕТКИ МЕТАЛЛОВ

Наиболее распространенные среди металлов пространственные решетки относительно просты. Они большей частью совпадают с трансляционными решетками Браве: кубической объемноцентрированной и гранецентрированной. В узлах этих решеток располагаются атомы металлов. В решетке объемноцентрированного куба (ОЦК - решетки) каждый атом окружен восемью ближайшими соседями, и координационное число  $KЧ = 8$ . Решетку ОЦК имеют металлы:  $\alpha$  - Fe, Li, Na, K, V, Cr, Ta, W, Mo, Nb и др. В решетке гранецентрированного куба (ГЦК - решетки)  $KЧ = 12$ : любой атом, расположенный в вершине ячейки имеет двенадцать ближайших соседей, которыми являются атомы, находящиеся в центрах граней. Решетку ГЦК имеют металлы: Al, Ni, Cu, Pd, Ag, Ir, Pt, Pb и др.

Наряду с этими двумя, среди металлов (Be, Mg, Sc,  $\alpha$  - Ti,  $\alpha$  - Co, Zn, Y, Zr, Re, Os, Tl, Cd и др.) встречается еще гексагональная компактная. Эта решетка не является трансляционной решеткой Браве, так как простыми трансляциями ее нельзя описать. На рис. 1.7 представлена элементарная ячейка гексагональной компактной решетки.

Элементарная ячейка гексагональной компактной решетки представляет собой шестигранную призму, однако чаще всего ее изображают в виде четырехгранной призмы, основанием которой является ромб ( $a=b$ ) с углом  $\gamma = 120^\circ$ . Атомы (рис. 1.7, б) расположены в вершинах и в центре одной из двух трехгранных призм, образующих элементарную ячейку. Ячейке принадлежат два атома:  $1/8 \times 8 + 1 = 2$ , ее базис  $[[000; \frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2}]]$ .

Отношение высоты элементарной ячейки  $c$  к расстоянию  $a$ , т.е.  $c/a$ , равно 1,633; сами же периоды  $c$  и  $a$  для разных веществ различны.

Каждый атом гексагональной компактной решетки окружен двенадцатью ближайшими соседями: шестью в том же слое, тремя в соседнем слое сверху и тремя в соседнем слое снизу (рис. 1.7, а), то есть  $KЧ = 12$ .

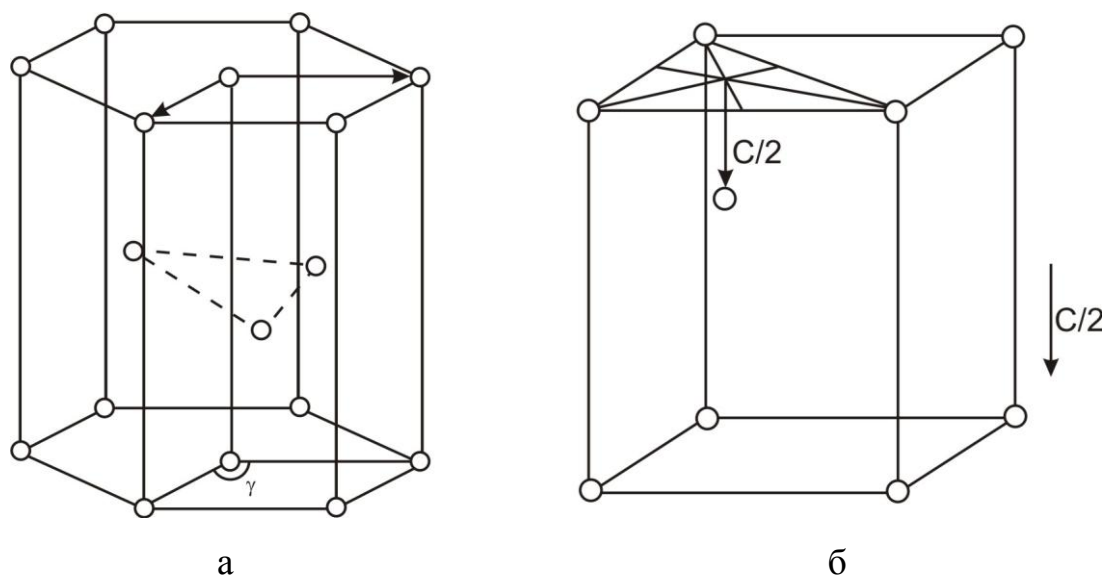


Рис. 1.7. Гексагональная компактная решетка: а – шестигранная призма, б – четырехгранная призма.

### 1.7. ЗАДАЧИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НА ЛАБОРАТОРНОМ ЗАНЯТИИ

Разобравшись с представлениями о пространственной решетке и элементарной ячейке, студенты приступают к анализу моделей кристаллических структур. Для заданных моделей кристаллических структур необходимо:

1. Зарисовать элементарную ячейку и определить ее сингонию.
2. Определить число материальных частиц (атомов или молекул) в элементарной ячейке.
3. Охарактеризовать тип элементарной ячейки Браве.
4. Записать базис ячейки.
5. Записать основные трансляции и показать их на рисунке.
6. Определить координационное число.

## 1.8. ПРИМЕР РАБОТЫ С МОДЕЛЯМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР. АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ХЛОРИСТОГО ЦЕЗИЯ.

Структура хлористого цезия CsCl изображена на рис. 1.8. Темными шарами обозначены ионы хлора, светлыми — цезия.

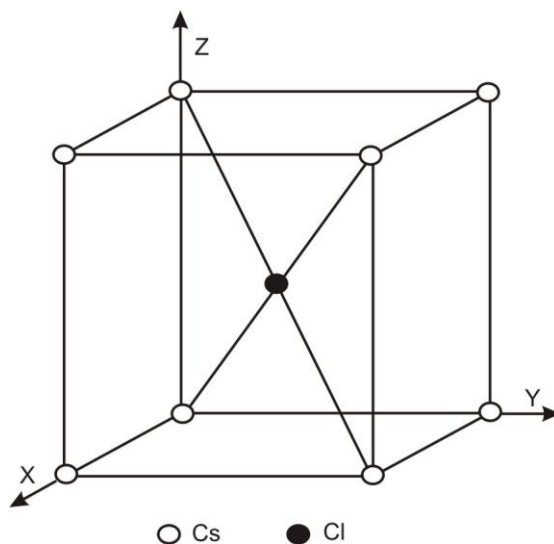


Рис. 1.8. Структура хлористого цезия

1. Из равенства осевых единиц  $a=b=c$  и осевых углов  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$  следует, что сингония является кубической.

2. Определим число ионов цезия  $Z_{Cs}$  и хлора  $Z_{Cl}$  в элементарной ячейке,  $Z_{Cs} = 1/8 \times 8 = 1$ , где  $1/8$  - доля каждого иона цезия, находящегося в вершине, в элементарной ячейке данной структуры; 8 — число таких ионов.

$Z_{Cl} = 1$ , так как ион хлора полностью принадлежит данной ячейке. Число ионов цезия равно числу ионов хлора. На одну элементарную ячейку приходится одна молекула хлористого цезия.

3. Из рис. 1.8 очевидно, что ионы цезия образуют примитивную ячейку Браве  $P$ , ей соответствует  $Z_{Cs} = 1$ . Чтобы определить, какую ячейку образует ионы хлора, нужно рассмотреть и соседние ячейки. Выделив в них ионы хлора, нетрудно видеть, что они также образуют примитивную ячейку Браве  $P$ , при этом  $Z_{Cl} = 1$ .

4. В структурах, состоящих из различных частиц, базис записывается отдельно для каждого вида частиц. Поэтому запишем базис для ионов цезия и ионов хлора. Поскольку ячейки ионов цезия к хлора примитивные, в базисе должны быть указаны координаты одного иона.

Для иона хлора —  $[[\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}]]$ , для иона цезия —  $[[000]]$ .

Записывая базис, мы указываем координаты того иона, трансляцией которого можно получить всю пространственную решетку: ион хлора находится в центре ячейки; из ионов цезия, расположенных в вершинах ячейки, удобно выбирать тот, который находится в начале координат.

5. Основные трансляции для ионов цезия —  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ . Они присущи примитивной ячейке Браве. Перемещая любой из ионов цезия (например, расположенный в начале координат) на величины  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ , мы получим все другие ионы цезия в пространственной решетке, расположенные в вершинах ячеек. Для ионов хлора трансляция те же.

6. В структуре хлористого цезия каждый ион хлора окружен восемью ионами цезия, расположенными в вершинах ячейки. Число ближайших ионов хлора к каждому иону цезия также равно восьми. Чтобы в этом убедиться, надо рассмотреть все восемь соседних ячеек, в которых участвует каждый ион цезия. Поэтому  $KЧ_{Cz \text{ по } Cl} = 8$  и  $KЧ_{Cl \text{ по } Cz} = 8$ .

## 1. 9. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Проанализировать модели кристаллических структур меди, вольфрама,  $\alpha$ -Ti, NaCl и записать ответы на вопросы 1 – 6 (п. 1. 7).

## *1.10. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ*

1. Что такое пространственная решетка, элементарная ячейка, каковы правила выбора элементарной ячейки?

2. Классификация пространственных решеток по числу материальных частиц, по форме (соотношение между осевыми единицами и углами).

3. Понятие о базисе решетки.

4. Координационное число и методика его вычисления в различных структурах (состоящих из атомов одного сорта, из различных атомов).

5. Какие пространственные решетки встречаются среди металлов?

## **ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2 КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ**

### *2.1. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ПЛОСКОСТИ*

В кристаллографии часто приходится описывать взаимное расположение отдельных плоскостей кристалла, его направлений, для чего удобно пользоваться кристаллографическими индексами. Кристаллографические индексы дают представление о расположении плоскости или направления относительно системы координат. При этом не имеет значения, прямоугольная или косоугольная система координат, одинаковые или разные масштабные отрезки по координатным осям.

Представим себе ряд параллельных плоскостей, проходящих через одинаковые узлы пространственной решетки. Эти плоскости расположены на одинаковом расстоянии друг от друга и составляют семейство параллельных плоскостей (рис. 2.1).

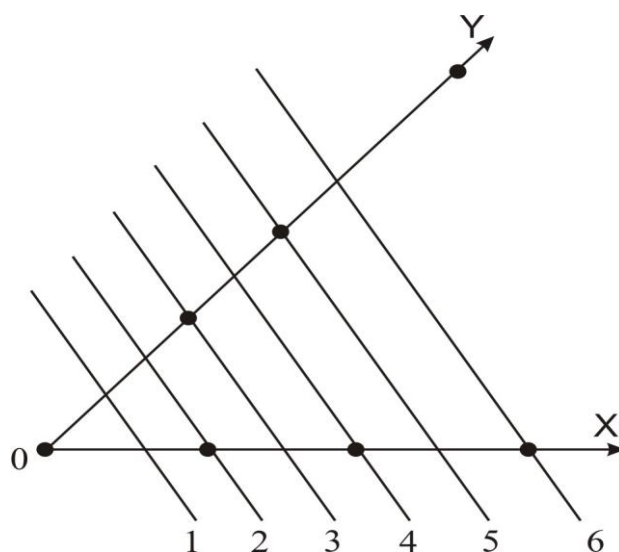


Рис. 2.1. К определению кристаллографических индексов семейства параллельных плоскостей

Они одинаково ориентированы в пространстве и потому характеризуются одинаковыми индексами. Выберем из этого семейства какую-либо плоскость и введем в рассмотрение отрезки, которые плоскость отсекает по координатным осям (координатные оси  $x$ ,  $y$ ,  $z$  обычно совмещают с ребрами элементарной ячейки, масштаб по каждой оси равняется соответствующей осевой единице — периоду  $a$ , ИЛИ  $b$ , или  $c$ ). Величины отрезков выражают в осевых единицах. *Кристаллографические индексы плоскости* — это три наименьших целых числа, которые обратно пропорциональны числу осевых единиц, отсекаемых плоскостью на координатных осях.

Индексы плоскости обозначаются буквами  $h$ ,  $k$ ,  $l$ , записываются подряд и заключаются в круглые скобки —  $(hkl)$ .

Для семейства параллельных плоскостей (рис. 2.1) имеем (табл. 2.1):

Таблица 2.1

**Определение индексов плоскостей по отсекаемым отрезкам**

Номер	Отрезки по осям	Отношение	Индексы
-------	-----------------	-----------	---------

ПЛОСКОСТИ	$x$	$y$	$Z$	ИНДЕКСОВ	ПЛОСКОСТИ
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\infty$	$2 : 3 : 0$	(230)
2	1	$\frac{2}{3}$	$\infty$	$1 : \frac{3}{2} : 0$	(230)
3	$\frac{3}{2}$	1	$\infty$	$\frac{2}{3} : 1 : 0$	(230)
4	2	$\frac{4}{3}$	$\infty$	$\frac{1}{2} : \frac{3}{4} : 0$	(230)

Индексами ( $hkl$ ) характеризуются все плоскости семейства параллельных плоскостей. Этот символ означает, что семейство параллельных плоскостей рассекает осевую единицу вдоль оси  $x$  на  $h$  частей, вдоль оси  $y$  на  $k$  частей и вдоль оси  $z$  на  $l$  частей. При этом плоскость ближайшая к началу координат, отсекает на координатных осях отрезки  $1/h$  (по оси  $x$ ),  $1/k$  (по оси  $y$ ),  $1/l$  (по оси  $z$ ).

Порядок нахождения кристаллографических индексов плоскости.

1. Находим отрезки, отсекаемые плоскостью на координатных осях, измеряя их в осевых единицах.

2. Берем обратные значения этих величин.

3. Приводим отношение полученных чисел к отношению трех наименьших целых чисел.

4. Полученные три числа заключаем в круглые скобки.

*Пример.* Найти индексы плоскости, которая отсекает на координатных осях следующие отрезки:

$$\frac{1}{2}; \frac{1}{4}; \frac{1}{4}.$$

Поскольку длины отрезков выражены в осевых единицах, имеем

$$\frac{1}{h} = \frac{1}{2}; \frac{1}{k} = \frac{1}{4}; \frac{1}{l} = \frac{1}{4}.$$

Находим обратные значения и берем их отношение

$$h : k : l = 2 : 4 : 4.$$

Сократив на два, приведем отношение полученных величин к отношению трех целых наименьших чисел:

$$h : k : l = 1 : 2 : 2.$$

Индексы плоскости записываем в круглых скобках подряд, без запятых — (122). Они читаются порознь — "один, два, два".

Если плоскость пересекает кристаллографическую ось в отрицательном направлении, над соответствующим индексом сверху ставится знак "минус".

Если плоскость параллельна какой-либо координатной оси, то в символе плоскости индекс, соответствующий этой оси, равен нулю. Например, символ  $(hko)$  означает, что плоскость пересекается с осью  $z$  в бесконечности и индекс плоскости по этой оси будет  $1/\infty = 0$ .

Плоскости, отсекающие на каждой оси по равному числу осевых единиц, обозначаются как (111). В кубической сингонии их называют плоскостями октаэдра, т. к. система этих плоскостей, равноотстоящих от начала координат, образует восьмигранник – *октаэдр* (рис. 2.2).

Плоскости, отсекающие по двум осям равное число осевых единиц и параллельные третьей оси (например, оси  $z$ ) обозначаются (110). В кубической сингонии подобные плоскости называют плоскостями ромбического додекаэдра, так как система плоскостей типа (110) образует двенадцатигранник (додека – двенадцать), каждая грань которого – *ромб* (рис. 2.3).

Плоскости, пересекающие одну ось и параллельные двум другим (например, осям  $y$  и  $z$ ), обозначают — (100) и называют в кубической сингонии плоскостями куба, то есть система подобных плоскостей образует *куб*.

При решении различных задач, связанных с построением в элементарной ячейке плоскостей, систему координат целесообразно выбрать так, чтобы искомая плоскость располагалась в заданной элементарной ячейке. Например, при построении плоскости  $(\bar{2}11)$  в кубической ячейке начало координат удобно перенести из узла  $O$  в узел  $O'$  (рис 2.4).



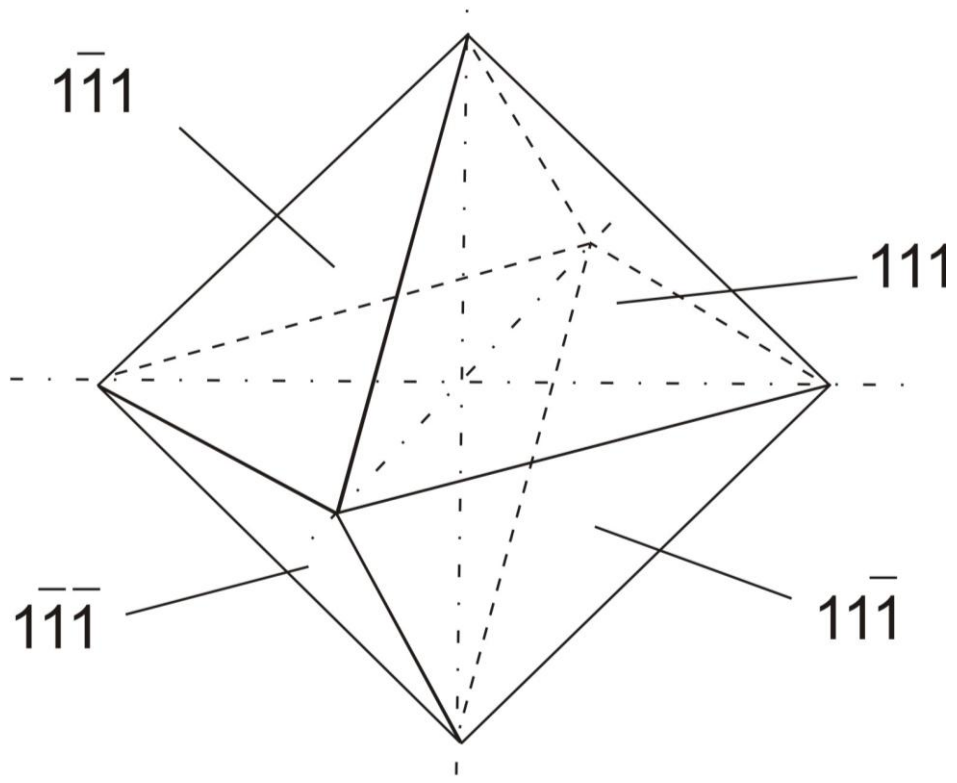


Рис. 2.2. Октаэдр

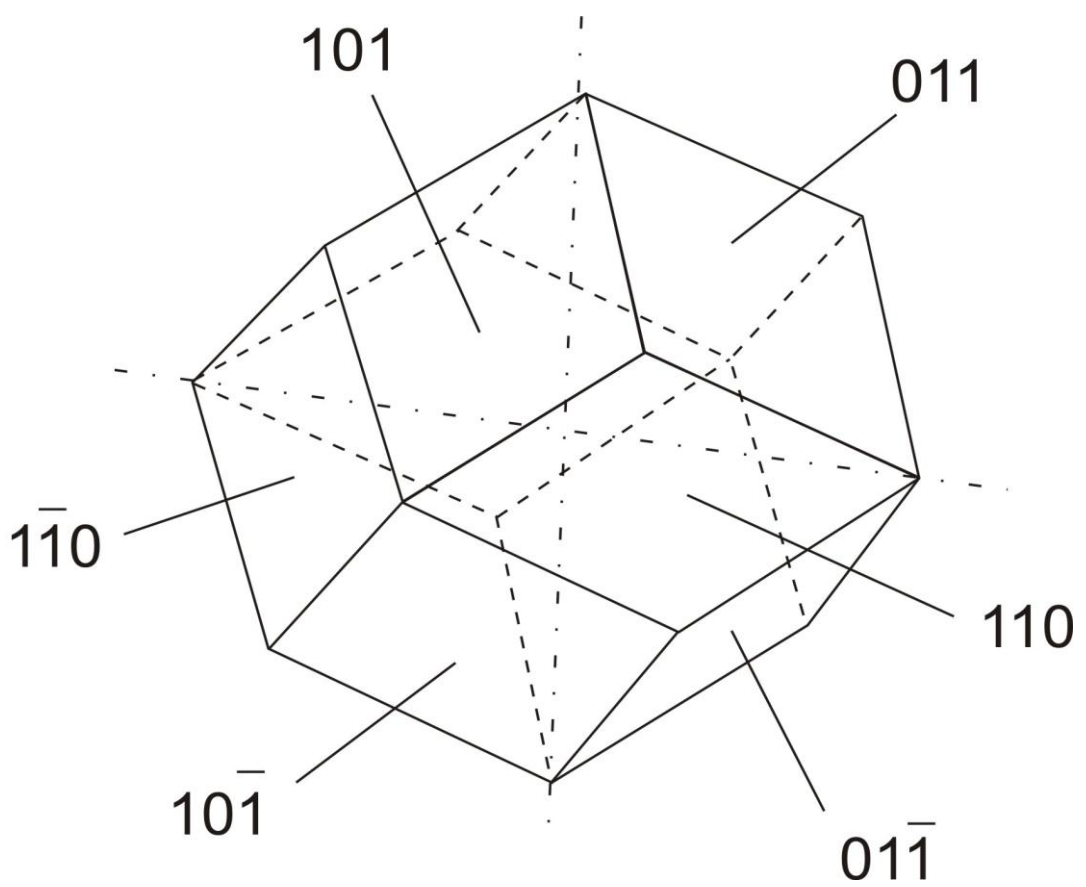


Рис. 2.3. Ромбический додекаэдр

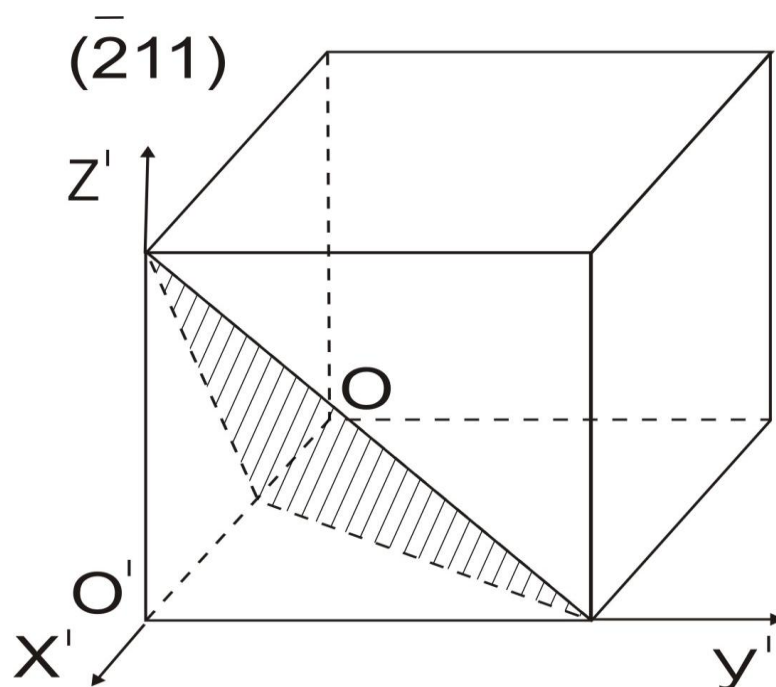


Рис. 2.4 Плоскость  $(\bar{2}11)$

Иногда индексы плоскости записывают в фигурных скобках  $\{hkl\}$ . Эта запись означает символ совокупности идентичных плоскостей. Такие плоскости проходят через одинаковые узлы в пространственной решетке, симметрично расположены в пространстве и характеризуются одинаковым межплоскостным расстоянием (понятие о межплоскостном расстоянии рассматривается в следующей теме). Плоскости октаэдра в кубической сингонии принадлежат к одной совокупности  $\{111\}$ , они представляют грани октаэдра и имеют следующие индексы:  $\{111\} \rightarrow (111), (\bar{1}11), (1\bar{1}1), (11\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), (\bar{1}1\bar{1}), (1\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ . Символы всех плоскостей совокупности находят путем перестановки местами и изменения знаков отдельных индексов. Для плоскостей ромбического додекаэдра обозначение совокупности:  $\{110\} \rightarrow (110), (\bar{1}10), (1\bar{1}0), (\bar{1}\bar{1}0), (101), (\bar{1}01), (10\bar{1}), (\bar{1}0\bar{1}), (011), (0\bar{1}1), (01\bar{1}), (0\bar{1}\bar{1})$ .

## 2.2. ОСОБЕННОСТИ ИНДИЦИРОВАНИЯ В ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ

В гексагональной сингонии индцирование плоскостей имеет некоторые особенности. Рассмотрим боковые плоскости шестигранной призмы (рис. 2.5). Они принадлежат одной совокупности идентичных

плоскостей. Однако по индексам отдельных плоскостей невидно, что это идентичные плоскости. Например, передняя грань имеет индексы (100), боковая левая ( $1\bar{1}0$ ) и т. д. В связи с этим для гексагональной *сингонии* рассматривается система координат из четырех осей: вертикальной  $z$  и трех горизонтальных  $x$ ,  $y$ ,  $t$ , параллельных ребрам оснований и составляющих друг с другом угол  $120^\circ$  (рис. 2.6). Любая плоскость характеризуется четырьмя индексами ( $hkil$ ), где третий индекс  $i$  соответствует оси  $t$ . Индекс  $i$  не является независимым,  $i=-(h+k)$ , он определяется значениями  $h$  и  $k$ . Индексом  $i$  часто пренебрегают и ставят на третьем месте в символе плоскости точку: ( $hkl$ ).

В новой системе координат индексы рассматриваемых боковых граней шестигранной призмы будут, соответственно, ( $10\bar{1}0$ ) и ( $1\bar{1}00$ ). Индексы указывают, что плоскости принадлежат к одной совокупности, и их индексы можно получить перестановкой и переменной знака первых трех индексов. Все они параллельны оси  $z$ .  $\{1100\} \rightarrow (\bar{1}100), (1\bar{1}00), (10\bar{1}0), (\bar{1}010), (01\bar{1}0), (0\bar{1}10)$ .

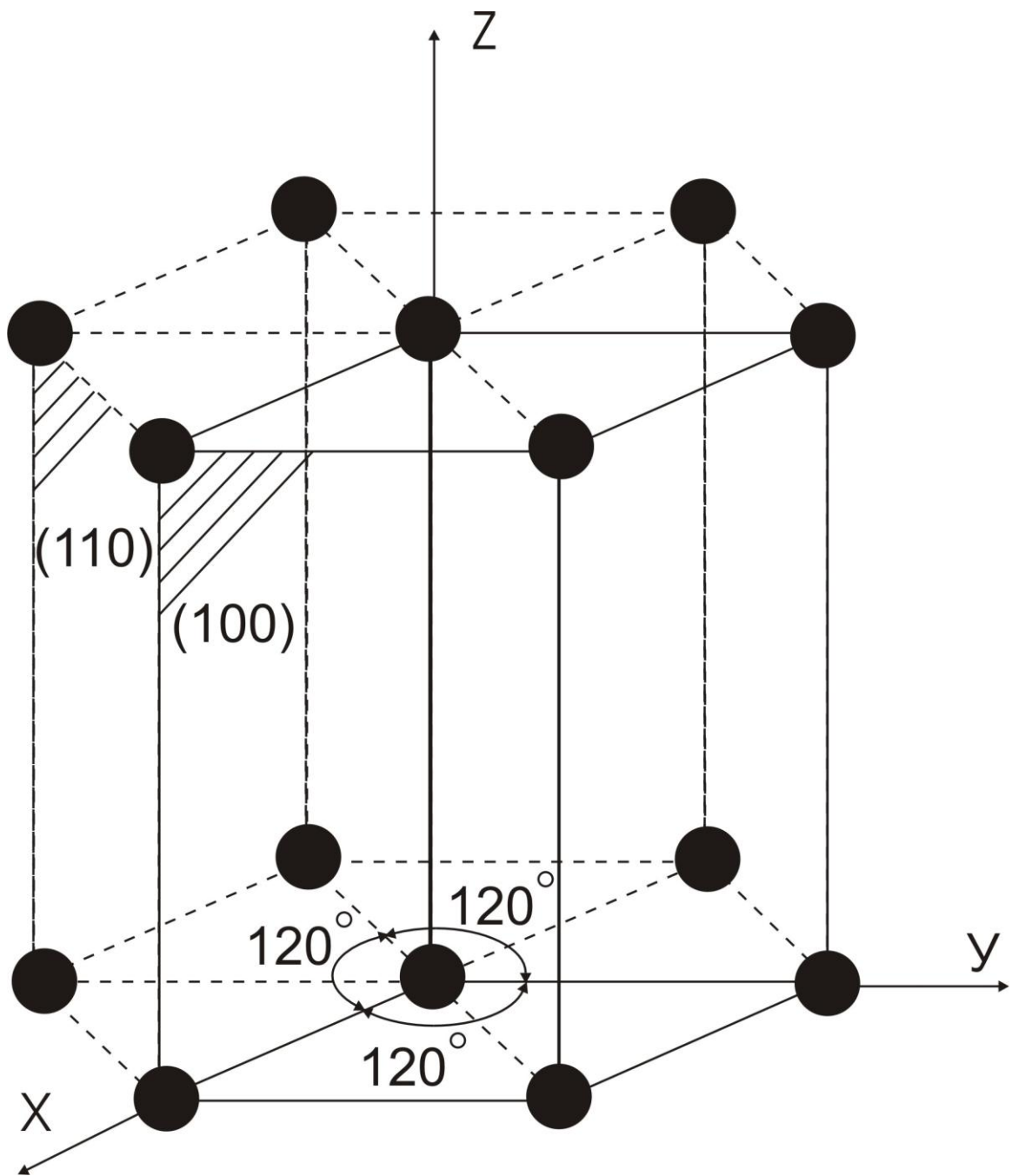


Рис. 2.5. Некоторые плоскости гексагональной решетки

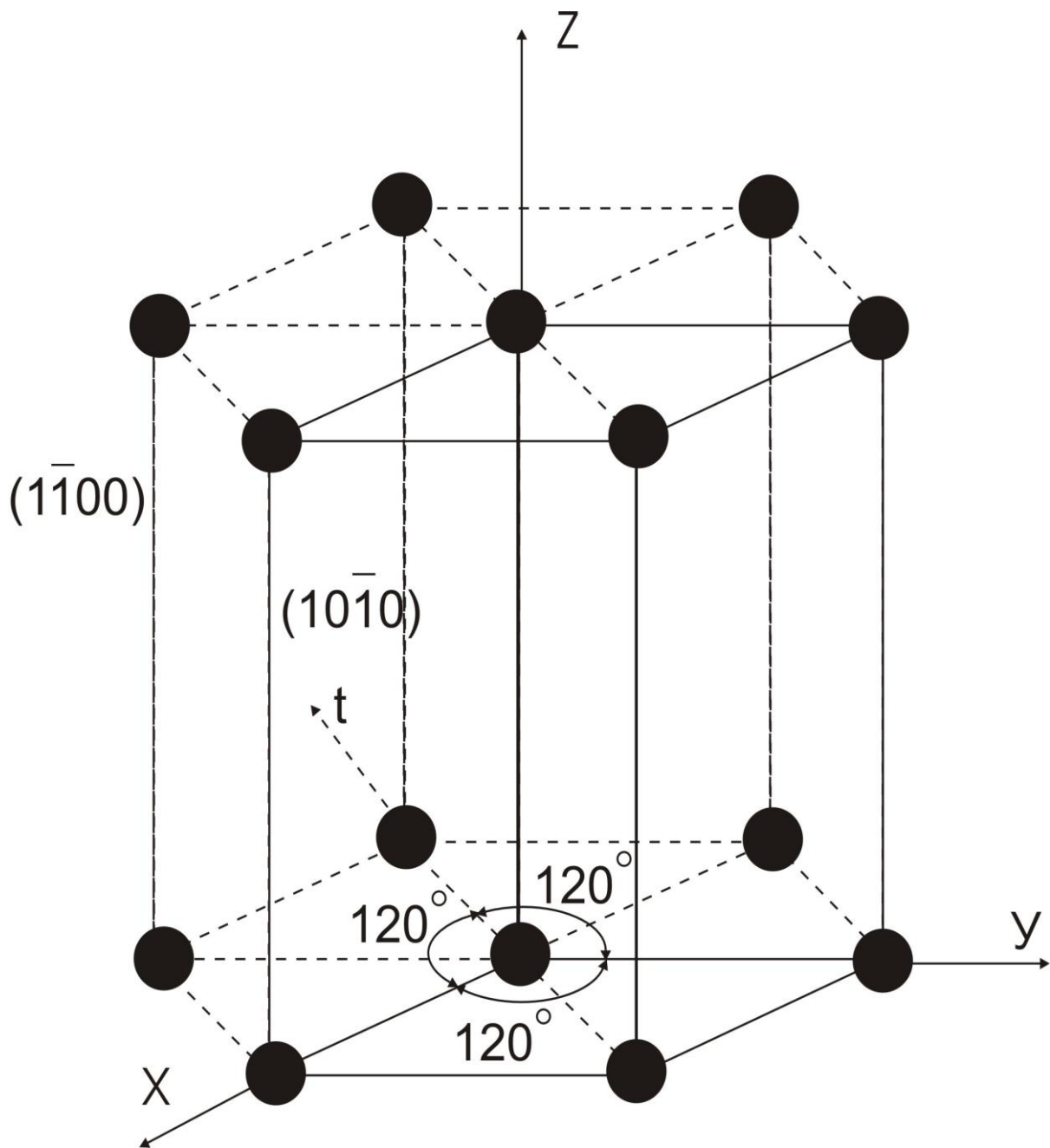


Рис. 2.6. Система координат в гексагональной сингонии

### 2.3. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ УЗЛА

Кристаллографические индексы узла — это его координаты, взятые в долях осевых единиц и записанные в двойных квадратных скобках. При этом координата, соответствующая оси  $x$ , обозначается в общем виде буквой  $u$ , для оси  $y$  —  $v$ , для оси  $z$  —  $w$ . Символ узла имеет вид  $[[uvw]]$ . Символы некоторых узлов в элементарной ячейке показаны на рис. 2.7.

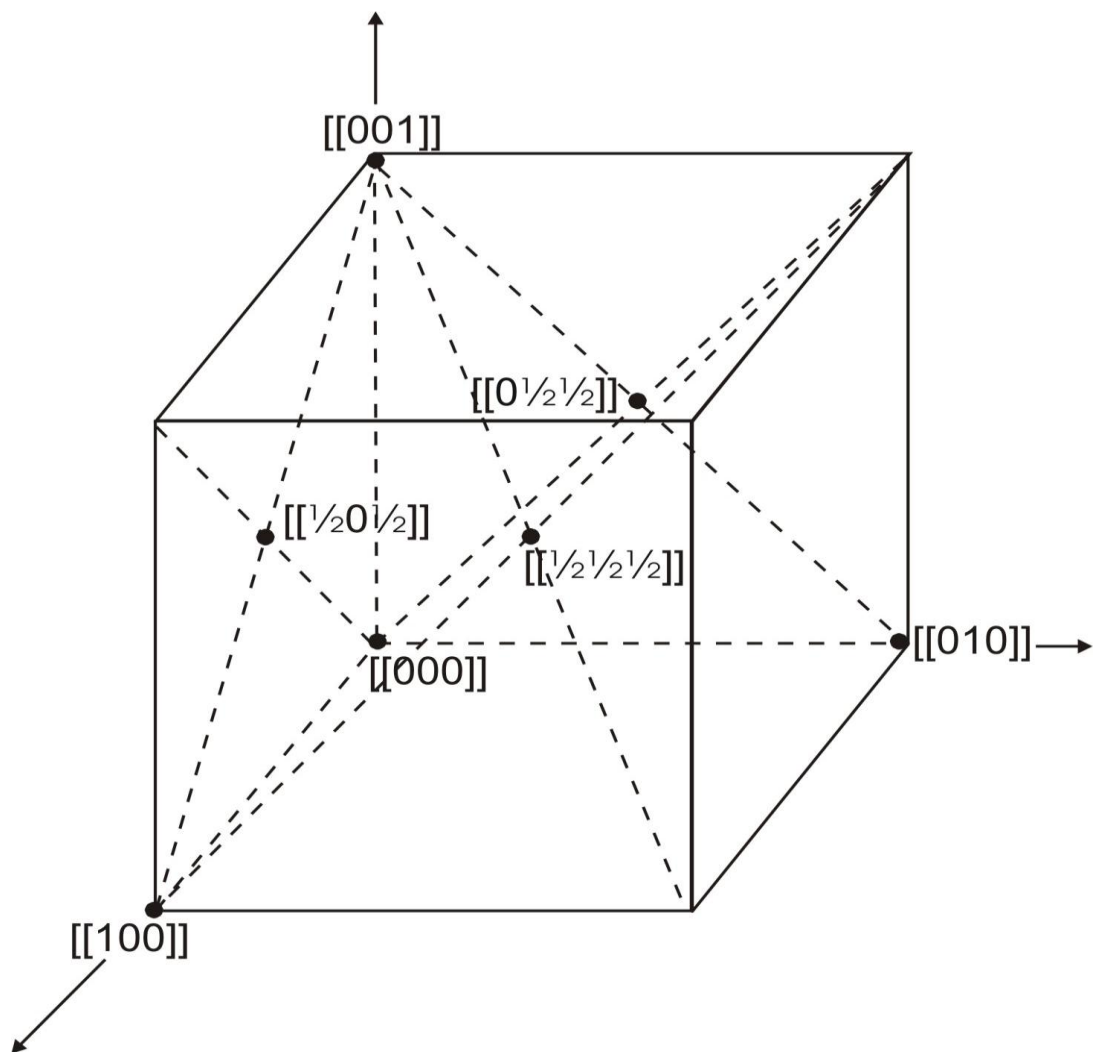


Рис. 2.7. Некоторые узлы в элементарной ячейке

#### **2.4. Кристаллографические индексы направления**

В кристалле, где все параллельные направления идентичны друг другу, направление, проходящее через начало координат, характеризует все данное семейство параллельных направлений. Положение в пространстве направления, проходящего через начало координат, определяется координатами любого узла, лежащего на этом направлении. Координаты любого узла, принадлежащего направлению, выраженные в долях осевых единиц и приведенные к отношению трех целых наименьших чисел, и есть кристаллографические индексы направления. Они обозначаются целыми числами  $U$ ,  $V$ ,  $W$  и записываются слитно в квадратных скобках  $[UVW]$ .

### 2.4.1. Порядок нахождения индексов направления

1. Из семейства параллельных направлений выбрать такое, которое проходит через начало координат, или перенести данное направление параллельно самому себе в начало координат, или перенести начало координат в узел, лежащий на данном направлении.

2. Найти координаты любого узла, принадлежащего данному направлению, выразив их в осевых единицах.

3. Взять отношение координат узла и привести его к отношению трех целых наименьших чисел.

4. Полученные три числа заключить в квадратные скобки.

Важнейшие направления в кубической решетке и их индексы представлены на рис. 2.8.

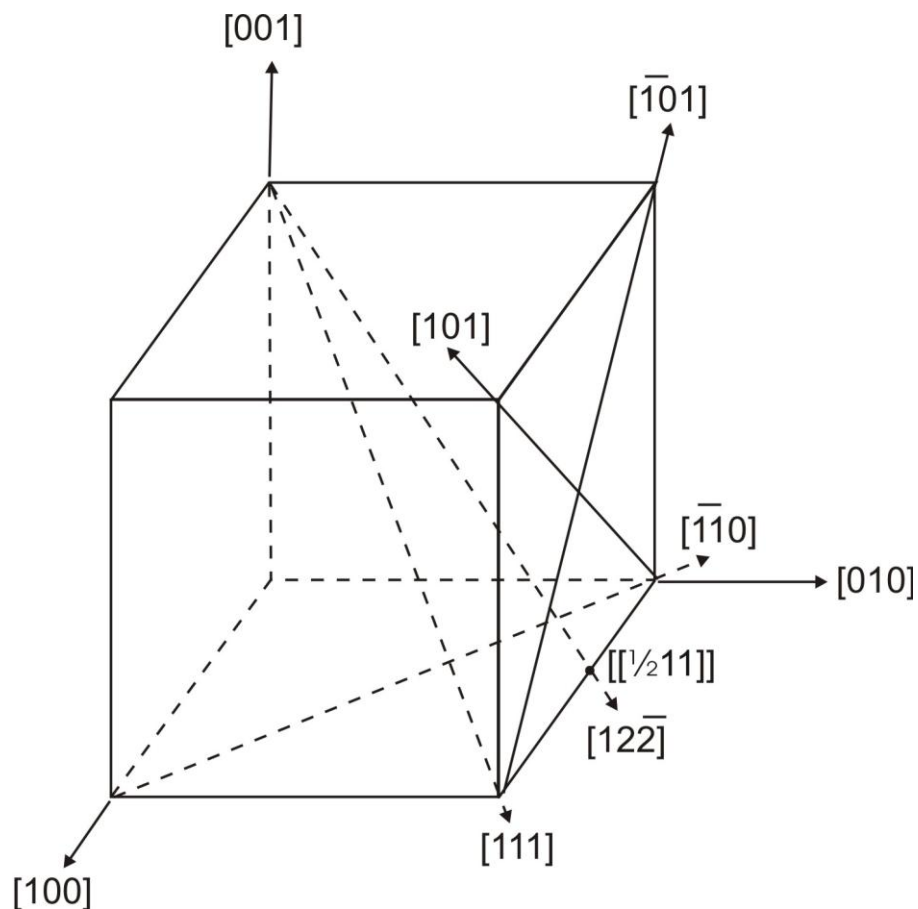


Рис. 2.8. Некоторые направления в кубической решетке

## 2.4.2. ПОРЯДОК ПОСТРОЕНИЯ НАПРАВЛЕНИЯ ПО ИЗВЕСТНЫМ ИНДЕКСАМ

Для того, чтобы построить в элементарной ячейке направление с индексами  $[UVW]$ , нужно:

1) Найти положение характерного узла  $[[UVW]]$ , через который должно проходить направление. При этом следует иметь в виду, что индексы направления не обязательно численно равны координатам узла. Они должны быть им прямо пропорциональны. Например, если проводится направление с индексами  $[12\bar{2}]$ , то необязательно строить узел с индексами  $[[12\bar{2}]]$ . Такой узел находится за пределами элементарной ячейки, поэтому можно взять в качестве характерного узла следующий:  $[[\frac{1}{2} 1 \bar{1}]]$  (рис. 2.8).

2) Из начала координат в характерный узел  $[[UVW]]$  провести прямую, — это и есть искомое направление  $[UVW]$ .

В кристаллографии рассматривается представление о совокупности идентичных направлений. Это направления, которые проходят через аналогичные узлы, характеризуются одинаковой плотностью расположения частиц и симметрично расположены в пространстве. Совокупность идентичных направлений обозначают индексами одного из направлений и заключают в ломаные скобки. Например, совокупность ребер куба может обозначаться  $\langle 100 \rangle$ , она содержит шесть направлений  $\langle 100 \rangle \rightarrow [100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]$ .

## 2.5. УСЛОВИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НА ЛАБОРАТОРНОМ ЗАНЯТИИ

1) Найти индексы плоскости, которая отсекает на координатных осях следующие отрезки:

$$1; 2; 3$$

$$1; \infty; 2$$

$$\frac{1}{3}; \infty; -\frac{1}{6}$$



$$-\frac{1}{2}; \frac{1}{4}; \frac{3}{4}$$

2) Показать в ячейке кубической сингонии расположение плоскостей куба, октаэдра, ромбического додекаэдра и записать их индексы.

3) Показать в ячейке кубической сингонии расположение следующих плоскостей:

$$(1\bar{1}0) \quad (211)$$

$$(11\bar{1}) \quad (021)$$

4) Показать в ячейке гексагональной системы расположение следующих плоскостей:

$$(0001)$$

$$(10.0)$$

$$(11\bar{2}0)$$

$$(1\bar{1}.1)$$

5) Определить индексы следующих направлений в кубической решетке:

— ребер;

— диагоналей граней;

— пространственных диагоналей.

6) Показать в ячейке кубической системы расположение следующих направлений:

$$[112]$$

$$[231]$$

## 2.6. Задание для самостоятельной работы (табл. 2.2).

1) Найти индексы плоскости, отсекающей по координатным осям заданные отрезки. Построить положение плоскости в кубической ячейке.

2) Построить плоскость с заданными индексами в кубической ячейке.

3) Построить направление с заданными индексами в кубической ячейке.

4) Построить плоскость с заданными индексами в ячейке гексагональной сингонии.

**Варианты условий задач для самостоятельной работы**

*Таблица 2.2*

Номер варианта	Номер задачи			
	1	2	3	4
1	$-1/2; \infty; 1/2$	$(11\bar{2})$	$[112]$	$(11\bar{2}0)$
2	$-1/2; 1/4; 3/4$	$(2\bar{1}0)$	$[\bar{1}12]$	$(1\bar{1}00)$
3	$1/4; \infty; 1/2$	$(21\bar{1})$	$[1\bar{1}2]$	$(10\bar{1}0)$
4	$1/2; -3/4; \infty$	$(1\bar{2}1)$	$[11\bar{2}]$	$(\bar{1}010)$
5	$\infty; 1/3; -1/2$	$(3\bar{1}1)$	$[\bar{1}\bar{1}2]$	$(\bar{1}100)$
6	$3/4; -1/2; \infty$	$(\bar{2}11)$	$[\bar{1}1\bar{2}]$	$(01\bar{1}0)$
7	$3/4; 2/3; -2/3$	$(012)$	$[1\bar{1}\bar{2}]$	$(0\bar{1}10)$
8	$\infty; 1/3; 1/6$	$(\bar{1}22)$	$[211]$	$(\bar{1}\bar{1}20)$
9	$-1/3; 1/2; \infty$	$(1\bar{1}2)$	$[\bar{2}11]$	$(\bar{1}\bar{2}10)$
10	$3/4; -1/2; 3/4$	$(2\bar{1}1)$	$[2\bar{1}1]$	$(\bar{1}2\bar{1}0)$
11	$\infty; 1/4; 3/4$	$(\bar{1}21)$	$[21\bar{1}]$	$(2\bar{1}\bar{1}0)$
12	$-1/4; 3/4; \infty$	$(12\bar{1})$	$[\bar{2}\bar{1}1]$	$(\bar{2}110)$
13	$-3/4; \infty; -1/4$	$(113)$	$[\bar{2}1\bar{1}]$	$(1\bar{1}01)$
14	$1/2; -3/4; 1/2$	$(210)$	$[2\bar{1}\bar{1}]$	$(10\bar{1}1)$
15	$3/4; -3/4; 1/2$	$(\bar{2}10)$	$[121]$	$(01\bar{1}1)$
16	$1/4; 1/4; 3/4$	$(021)$	$[\bar{1}21]$	$(\bar{1}101)$
17	$1/4; 1/4; 1/4$	$(02\bar{1})$	$[1\bar{2}1]$	$(\bar{1}011)$
18	$-3/4; 1/4; 1/2$	$(0\bar{1}2)$	$[12\bar{1}]$	$(0\bar{1}11)$
19	$-3/4; \infty; 3/4$	$(\bar{1}12)$	$[\bar{1}\bar{2}1]$	$(0001)$
20	$-1/4; \infty; 1/2$	$(\bar{3}11)$	$[1\bar{2}\bar{1}]$	$(1\bar{1}02)$
21	$\infty; -1/2; 3/4$	$(31\bar{1})$	$[\bar{1}2\bar{1}]$	$(10\bar{1}2)$
22	$-1/3; 2/3; \infty$	$(1\bar{1}3)$	$[2\bar{1}2]$	$(01\bar{1}2)$
23	$1/4; -3/4; 3/4$	$(01\bar{2})$	$[21\bar{2}]$	$(\bar{1}102)$
24	$3/4; -1/2; 1/2$	$(310)$	$[\bar{2}12]$	$(\bar{1}012)$
25	$3/4; -3/4; -1/2$	$(131)$	$[\bar{2}\bar{1}2]$	$(0\bar{1}12)$
26	$1/2; 3/4; -3/4$	$(\bar{1}31)$	$[\bar{2}1\bar{2}]$	$(1\bar{1}03)$
27	$1/3; 5/6; \infty$	$(11\bar{3})$	$[2\bar{1}\bar{2}]$	$(10\bar{1}3)$
28	$-2/3; \infty; 1/2$	$(013)$	$[212]$	$(01\bar{1}3)$
29	$-3/4; -3/4; -1/2$	$(1\bar{3}1)$	$[221]$	$(\bar{1}103)$
30	$-1/2; 1/4; 1/2$	$(13\bar{1})$	$[122]$	$(\bar{1}013)$
31	$-1/4; 3/4; \infty$	$(012)$	$[\bar{1}\bar{2}1]$	$(\bar{1}102)$

## 2.7. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

При изучении материала обратить внимание на следующие вопросы:

1. Кристаллографические индексы плоскости, узла, направления.
2. Порядок нахождения кристаллографических индексов.
3. Особенности индицирования в гексагональной сингонии.

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3 ЛИНЕЙНЫЕ И УГЛОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ В ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РЕШЕТКЕ

При решении ряда задач в кристаллографии, рентгеноструктурном анализе и других науках приходится вычислять межплоскостные расстояния, узлы между отдельными плоскостями, кристаллографическими направлениями, углы между прямой и плоскостью и т.п. В данной теме рассматриваются основные формулы и приемы определения подобных величин.

### 3.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕЖПЛОСКОСТНОГО РАССТОЯНИЯ

Любое семейство параллельных плоскостей имеет определенные кристаллографические индексы  $(hkl)$  и характеризуется определенным межплоскостным расстоянием  $d$ . Под *межплоскостным расстоянием* понимают кратчайшее расстояние между двумя соседними параллельными плоскостями данного семейства параллельных плоскостей.

Между индексами  $(hkl)$  семейства параллельных плоскостей, его межплоскостным расстоянием и периодами решетки существует математическая связь. Формула, показывающая зависимость между этими величинами, получила название квадратичной формы. Вид квадратичной формы различен в разных сингониях. Для ортогональных сингоний (осевые углы прямые) квадратичные формы имеют следующий вид:

$$\text{кубическая сингония } \frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \quad (3.1),$$

$$\text{тетрагональная сингония } \frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (3.2),$$

$$\text{ромбическая сингония } \frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (3.3).$$

Из формул видно, что чем больше индексы плоскости, тем меньше межплоскостное расстояние для данного семейства плоскостей.

Межплоскостное расстояние является важнейшим признаком кристаллографически идентичных плоскостей. Пользуясь выражением квадратичной формы, можно проверить, принадлежит ли какая-то плоскость к данной совокупности идентичных плоскостей, так как у всех плоскостей, принадлежащих к одной совокупности, должно быть одинаковое межплоскостное расстояние.

Например, в кубической сингонии плоскость с индексами (310) будет принадлежать к совокупности {103}, так как для всех плоскостей этой совокупности межплоскостное расстояние одинаково:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{10}{a^2}; \quad d = \frac{a}{\sqrt{2}}.$$

В тетрагональной сингонии рассматриваемая *плоскость* не будет принадлежать к совокупности {103}, поскольку для плоскостей совокупности {103}

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{a^2} + \frac{9}{c^2},$$

а для плоскости (310)

$$\frac{1}{d^2} = \frac{10}{a^2}.$$

Количество кристаллографически идентичных плоскостей равно числу возможных перестановок местами и знаками индексов, входящих в данную совокупность, без изменения величины межплоскостного расстояния. Кристаллографически идентичные плоскости симметрично расположены в пространстве.

В качестве примера рассмотрим двенадцать плоскостей ромбического додекаэдра в кубической решетке:

$\{110\} \rightarrow (110), (101), (011), (\bar{1}10), (1\bar{1}0), (\bar{1}\bar{1}0), (\bar{1}01), (10\bar{1}), (\bar{1}0\bar{1}), (0\bar{1}1), (01\bar{1}), (0\bar{1}\bar{1})$ . Все эти плоскости симметрично расположены в пространстве, образуя грани многогранника на рис. 11, характеризуются одинаковым межплоскостным расстоянием  $d = \frac{a}{\sqrt{2}}$  и кристаллографически идентичны, входят в одну совокупность, В случае не тетрагональной сингонии они разбиваются на две совокупности с разным межплоскостным расстоянием. Для совокупности  $\{110\}$  межплоскостное расстояние  $d = \frac{a}{\sqrt{2}}$ , в нее входят четыре плоскости  $(110), (\bar{1}\bar{1}0), (1\bar{1}0), (\bar{1}10)$ . Вторая совокупность  $\{110\}$  объединяет восемь плоскостей  $(101), (011), (\bar{1}01), (10\bar{1}), (\bar{1}0\bar{1}), (0\bar{1}1), (01\bar{1}), (0\bar{1}\bar{1})$ , для нее межплоскостное расстояние имеет другое значение:  $\frac{1}{d^2} = \frac{1}{a^2} + \frac{1}{c^2}$ .

Количество плоскостей в совокупности принято обозначать буквой  $P$ . В кубической СИНГОНИИ  $P_{\{110\}} = 12$ . В тетрагональной сингонии  $P_{\{110\}} = 4$  И  $P_{\{101\}} = 8$ .

В ромбической сингонии, где  $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$ , данная совокупность  $\{110\}$  разобьется уже на три:

1) совокупность  $\{110\}$ ; для нее квадратичная форма имеет вид:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}; \{110\} \rightarrow (110), (1\bar{1}0), (\bar{1}10), (\bar{1}\bar{1}0); P = 4;$$

2) совокупность  $\{101\}$ ; для нее квадратичная форма  $\frac{1}{d^2} = \frac{1}{a^2} + \frac{1}{c^2}$ ;

$$\{101\} \rightarrow (101), (\bar{1}01), (10\bar{1}), (\bar{1}0\bar{1}); P = 4;$$

3) совокупность  $\{011\}$ ; для нее  $\frac{1}{d^2} = \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}$ ;

$$\{011\} \rightarrow (011), (0\bar{1}1), (01\bar{1}), (0\bar{1}\bar{1}); P = 4.$$

Наибольшее значение  $P$  имеет в кубической сингонии и составляет 48 – для случая, когда все индексы  $hkl$  разные числа и не равны нулю.

### 3.2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ УГЛА МЕЖДУ НАПРАВЛЕНИЯМИ, ПЛОСКОСТЯМИ, ПЛОСКОСТЬЮ И ПРЯМОЙ.

Исходя из кристаллографических индексов, можно зачислить углы между направлениями в пространственной решетке, между плоскостями, между направлением и плоскостью, не прибегая к графическим построениям. Наиболее простой вид имеют формулы в случае кубической сингонии.

Если через  $\varphi$  обозначить угол между двумя какими-то направлениями, то в кубической сингонии

$$\cos \varphi = \frac{U_1 U_2 + V_1 V_2 + W_1 W_2}{\sqrt{U_1^2 + V_1^2 + W_1^2} \sqrt{U_2^2 + V_2^2 + W_2^2}} \quad (3.4),$$

где  $[U_1 V_1 W_1]$  и  $[U_2 V_2 W_2]$  — кристаллографические индексы направлений.

Если направления взаимно перпендикулярны ( $\varphi = 90^\circ$ ), то

$$U_1 U_2 + V_1 V_2 + W_1 W_2 = 0 \quad (3.5).$$

Это уравнение представляет условие перпендикулярности двух направлений в кубической решетке.

Угол  $\psi$  между плоскостями с индексами  $(h_1 k_1 l_1)$  и  $(h_2 k_2 l_2)$  в кубической сингонии вычисляется по аналогичной формуле:

$$\cos \psi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \quad (3.6).$$

Условие перпендикулярности двух плоскостей в кубической сингонии:

$$h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2 = 0 \quad (3.7).$$

Угол между направлением и плоскостью вычисляем следующим образом.

В кубической сингонии используется формула:

$$\cos \delta = \frac{uh + vk + wl}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (3.8),$$

где  $(hkl)$  - кристаллографические индексы плоскости;

$[uvw]$  — кристаллографические индексы направления;  $\delta$  — угол между направлением  $[uvw]$  и нормалью к плоскости  $(hkl)$ , (рис. 3.1).

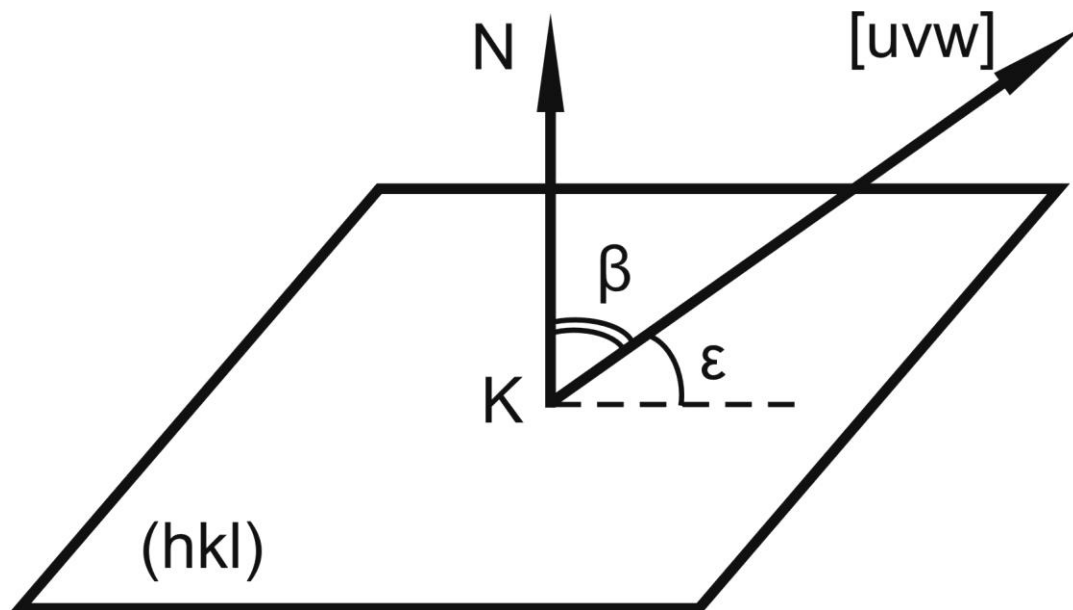


Рис. 3.1. К вычислению угла между направлением и плоскостью

Если прямая и плоскость перпендикулярны: ( $\epsilon = 90^\circ$ ,  $\delta = 0$ ), то

$$\frac{uh + vk + wl}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = 1$$

и уравнение (3.8) превращается в тождество. Числитель и знаменатель тождественно при условии

$$u = h, v = k, w = l \quad (3.9).$$

Соотношение (3.9) рассматривается как условие перпендикулярности прямой к плоскости: индексы взаимоперпендикулярных направления и плоскости в кубической сингонии одинаковы.

Если прямая и плоскость параллельны ( $\epsilon = 0$ ,  $\delta = 90^\circ$ ), то

$$uh + vk + wl = 0 \quad (3.10)$$

Формулы для нахождения углов в других сингониях можно найти в учебной литературе по кристаллографии.



### 3.3. ПОНЯТИЕ О КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ЗОНЕ И УСЛОВИИ ЗОНАЛЬНОСТИ

Понятие о кристаллографической зоне применяется в кристаллографии, в рентгеноструктурном анализе.

Под кристаллографической зоной понимают серию плоскостей, параллельных какому-то направлению  $[uvw]$  в решетке, а само направление называют осью зоны. На рис. 3.2 показано несколько плоскостей, принадлежащих к одной зоне, осью которой является направление  $[001]$ :

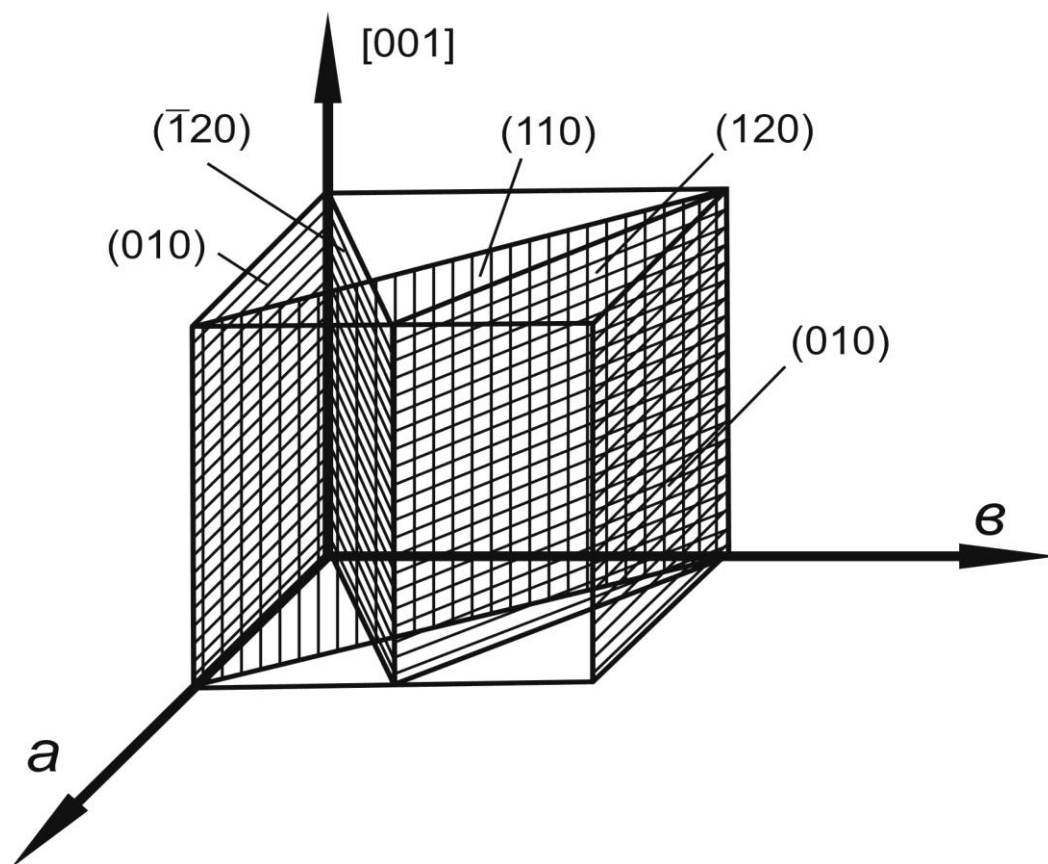


Рис. 3.2. Зона  $[001]$

Условие, параллельности прямой и плоскости (3.10) применительно к зоне плоскостей, характеризует принадлежность какой-либо плоскости и индексами  $(hkl)$  к зоне с осью зоны  $[uvw]$ . Для того чтобы проверить принадлежит ли какая-то плоскость к рассматриваемой зоне плоскостей, нужно индексы этой плоскости подставить в уравнение (3.10) и убедиться в том, что ее индексы удовлетворяют этому уравнению. Поэтому

уравнение (3.10) применительно к зоне плоскостей получило название условия зональности.

**Пример.** Проверить, что плоскость  $(\bar{1}20)$  принадлежит к зоне  $[001]$  представленной на рис. 3.2.

Проверку можно провести, не прибегая к построению положения плоскости в ячейке. С этой целью индексы плоскости подставляем в уравнение (3.10):

$$1 \cdot 0 + 2 \cdot 0 + 0 \cdot 1 = 0$$

Индексы плоскости удовлетворяют условию зональности, значит, данная плоскость принадлежит рассматриваемой зоне.

Используя условие зональности, можно определять индексы направления  $[uvw]$ , по которому пересекаются две плоскости в решетке. Если направление считать осью зоны, к которой принадлежат рассматриваемые плоскости  $(h_1k_1l_1)$  и  $(h_2k_2l_2)$  записав условие зональности применительно к каждой плоскости, мы получим систему двух уравнений с тремя неизвестными величинами –  $u, v, w$ .

$$\begin{cases} \underline{u}h_1 + vk_1 + wl_1 = 0, \\ \underline{u}h_2 + vk_2 + wl_2 = 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

Такая система уравнений решается с помощью определителя II порядка с точностью до постоянного множителя (который можно не писать, поскольку  $u, v, w$  - наименьшие целые числа).

$$\begin{vmatrix} \underline{h_1} & k_1 & l_1 \\ \underline{h_2} & k_2 & l_2 \end{vmatrix}$$

Составляем таблицу коэффициентов из значений  $h_1k_1l_1$  и  $h_2k_2l_2$ :

Вычеркивая поочередно, первый, второй, третий столбец, находим  $u, v, w$ :

$$u = \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} = k_1l_2 - k_2l_1; \quad v = \begin{vmatrix} h_1 & l_1 \\ h_2 & l_2 \end{vmatrix} = -(h_1l_2 - h_2l_1); \quad w = \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix} = h_1k_2 - h_2k_1 \quad (3.12)$$



Рис. 3.3. Направления  $[\bar{1}10]$  и  $[\bar{1}12]$ , лежащие в плоскости  $(110)$ .

### **3.4. УСЛОВИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НА ЛАБОРАТОРНОМ ЗАНЯТИИ**

1) Записать индексы всех плоскостей, входящих в совокупность  $\{110\}$  в кубической сингонии, и найти их число. Определить, на сколько совокупностей разобьется данная совокупность в случае тетрагональной и ромбической сингоний. Записать индексы плоскостей, входящих в каждую совокупность, и найти число плоскостей в каждой совокупности.

2) Найти угол между плоскостями совокупности  $\{110\}$  в кубической сингонии.

3) Показать, что в кубической сингонии плоскость  $(110)$  принадлежит к зоне с осью зоны  $[001]$ . Проверку провести расчетом и построением.

4) Показать, что в кубической сингонии плоскости  $(\bar{1}\bar{1}1)$ ,  $(001)$ ,  $(\bar{1}\bar{1}0)$ ,  $(\bar{1}\bar{1}2)$  образуют зону. Найти индексы оси зоны. (Решение провести расчетным путем, проверить правильность расчета построением).

5) Найти в кубической сингонии индексы направления, по которому пересекаются плоскости  $(310)$  и  $(\bar{1}\bar{1}0)$  [или  $(211)$  и  $(011)$ ]. Проверить расчет построением плоскостей и направления.

6) Найти в кубической сингонии индексы плоскости, которой принадлежат следующие направления:  $[\bar{1}20]$  и  $[10\bar{2}]$  (или  $[\bar{1}\bar{3}\bar{3}]$  и  $[\bar{1}33]$ ). Проверить расчет построением направлений и плоскости.

### **3.5. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ**

1) Записать индексы всех плоскостей в заданной совокупности  $\{. . .\}$  для кубической сингонии и найти их число. Определить, на сколько совокупностей разобьется данная совокупность в случае . . . — сингонии; найти индексы плоскостей, входящих в каждую совокупность, и их число.

2) Найти индексы линии пересечения плоскостей  $(\dots)$  и  $(\dots)$  кубической сингонии. Проверить расчет построением плоскостей и направления в ячейке кубической сингонии.

3) Найти индексы плоскости, в которой лежат направления и  $[\dots]$  (кубическая сингония). Проверить расчет построением направлений и плоскости в ячейке кубической сингонии.

Таблица 3.1

**Варианты условий задач для самостоятельной работы**

Номер варианта	Номер задачи		
	1	2	3
<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
1	{210} тетрагональная	(110) и ( $\bar{1}\bar{1}0$ )	[110] и [221]
2	{210} ромбическая	(110) и (210)	[110] и [331]
3	{211} тетрагональная	(110) и (120)	[110] и [332]
4	{211} ромбическая	(110) и ( $2\bar{1}0$ )	[111] и [221]
5	{310} тетрагональная	(110) и ( $\bar{1}20$ )	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{1}\bar{1}2]$
6	{310} ромбическая	( $10\bar{1}$ ) и (101)	$\bar{1}\bar{1}1$ и $[\bar{1}\bar{1}2]$
7	{311} тетрагональная	(101) и ( $\bar{1}02$ )	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{2}\bar{2}1]$
8	{311} ромбическая	(101) и ( $10\bar{2}$ )	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{1}\bar{1}2]$
9	{221} тетрагональная	( $10\bar{1}$ ) и (102)	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{2}\bar{1}1]$
10	{221} ромбическая	( $10\bar{1}$ ) и ( $\bar{1}02$ )	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{1}\bar{2}1]$
11	{321} тетрагональная	(011) и ( $0\bar{1}\bar{1}$ )	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{2}\bar{1}1]$
12	{321} ромбическая	(011) и ( $0\bar{1}2$ )	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{1}\bar{1}2]$
13	{320} тетрагональная	(011) и ( $0\bar{1}\bar{2}$ )	[110] и [021]
14	{320} ромбическая	( $0\bar{1}\bar{1}$ ) и (012)	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{2}\bar{3}1]$
15	{322} тетрагональная	( $0\bar{1}\bar{1}$ ) и ( $0\bar{1}\bar{2}$ )	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{1}\bar{1}2]$
16	{322} ромбическая	( $\bar{1}\bar{1}0$ ) и ( $2\bar{1}0$ )	[110] и $[20\bar{1}]$
17	{331} тетрагональная	( $\bar{1}\bar{1}0$ ) и (210)	$[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$ и $[1\bar{1}\bar{1}]$
18	{331} ромбическая	( $\bar{1}\bar{1}0$ ) и (120)	[101] и [112]
19	{332} тетрагональная	( $\bar{1}\bar{1}0$ ) и ( $\bar{1}20$ )	[111] и [331]
20	{332} ромбическая	( $0\bar{1}\bar{1}$ ) и (021)	[011] и [112]
21	{410} тетрагональная	( $0\bar{1}\bar{1}$ ) и ( $0\bar{2}\bar{1}$ )	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{1}\bar{1}2]$
22	{410} ромбическая	( $10\bar{1}$ ) и ( $20\bar{1}$ )	$[10\bar{1}]$ и $[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$
23	{411} тетрагональная	( $10\bar{1}$ ) и (201)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ и $[\bar{2}\bar{2}\bar{1}]$
24	{411} ромбическая	( $10\bar{1}$ ) и ( $\bar{1}02$ )	$[10\bar{1}]$ и $[\bar{2}\bar{1}\bar{3}]$
25	{421} тетрагональная	( $10\bar{1}$ ) и (102)	$\bar{1}\bar{1}0$ и $[\bar{1}2\bar{3}]$
26	{421} ромбическая	(011) и ( $0\bar{1}\bar{2}$ )	$[\bar{1}\bar{1}2]$ и $[\bar{1}\bar{1}1]$

27	{431} тетрагональная	(011) и (012)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ и $[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$
28	{431} ромбическая	(011) и (021)	$[\bar{2}\bar{2}\bar{1}]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
29	{430} тетрагональная	(011) и (02 $\bar{1}$ )	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ и $[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$
30	{430} ромбическая	(011) и (02 $\bar{1}$ )	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ и $[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$
31	{433} тетрагональная	(011) и (02 $\bar{1}$ )	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$

### 3.6. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ:

1. Понятие о межплоскостном расстоянии и квадратичной форме.
2. Квадратичная форма для разных сингоний.
3. Понятие о совокупности идентичных плоскостей.
4. Как найти индексы всех плоскостей, принадлежащих к одной совокупности ?
5. Определение угла между направлениями, между плоскостями, между направлением и плоскостью.
6. Условие перпендикулярности двух направлений, двух плоскостей в кубической сингонии.
7. Условие перпендикулярности направления и плоскости в кубической сингонии.
8. Условие параллельности направления и плоскости в кубической сингонии.
9. Понятие с кристаллографической зоне, оси зоны, условия зональности.

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 4 КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЕКЦИИ

Для решения различных задач кристаллографии и рентгеноструктурного анализа, таких, как определение взаимной ориентации плоскостей и направлений, нахождения углов между ними, изображения симметрии, анализа текстур и др., используют кристаллографические проекции. Кристаллографические проекции

представляют собой особое графическое изображение кристаллов. Они дают представление не о внешней форме, а об угловых соотношениях в кристалле, позволяют производить количественные расчеты этих соотношений. Определение углов между плоскостями, между прямыми с помощью кристаллографических проекций проводится гораздо проще, чем при аналитических методах расчета с помощью формул.

#### **4.1. ПОНЯТИЕ О КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И ПОЛЯРНОМ КОМПЛЕКСЕ**

Метод кристаллографических проекций основан на одной из характерных особенностей кристаллов — законе постоянства углов, заключающемся в том, что углы между определенными гранями и ребрами кристалла всегда постоянны. Так, когда кристалл растет, меняются размеры граней, их форма, но углы остаются неизменными. Поэтому в кристалле можно перенести все ребра к грани параллельно самим себе в одну точку пространства; угловые соотношения при этом сохраняются. Такая совокупность плоскостей и направлений, параллельных плоскостям и направлениям в кристалле и проходящая через одну точку, получила название кристаллического комплекса, а сама точка называется центром комплекса. При построении кристаллографических проекций кристалл всегда заменяют кристаллическим комплексом. Однако чаще рассматривают не кристаллический комплекс, а полярный (обратный). Полярный комплекс, получают из кристаллического (прямого) путем замены плоскостей нормальными к ним, а направлений - перпендикулярными к ним плоскостями. На рис. 4.1 показано расположение шести плоскостей куба (а), кристаллический комплекс для этих плоскостей - три плоскости, параллельные граням куба и проходящие через точку  $O$  (б), полярный комплекс - совокупность нормалей к этим плоскостям (в).

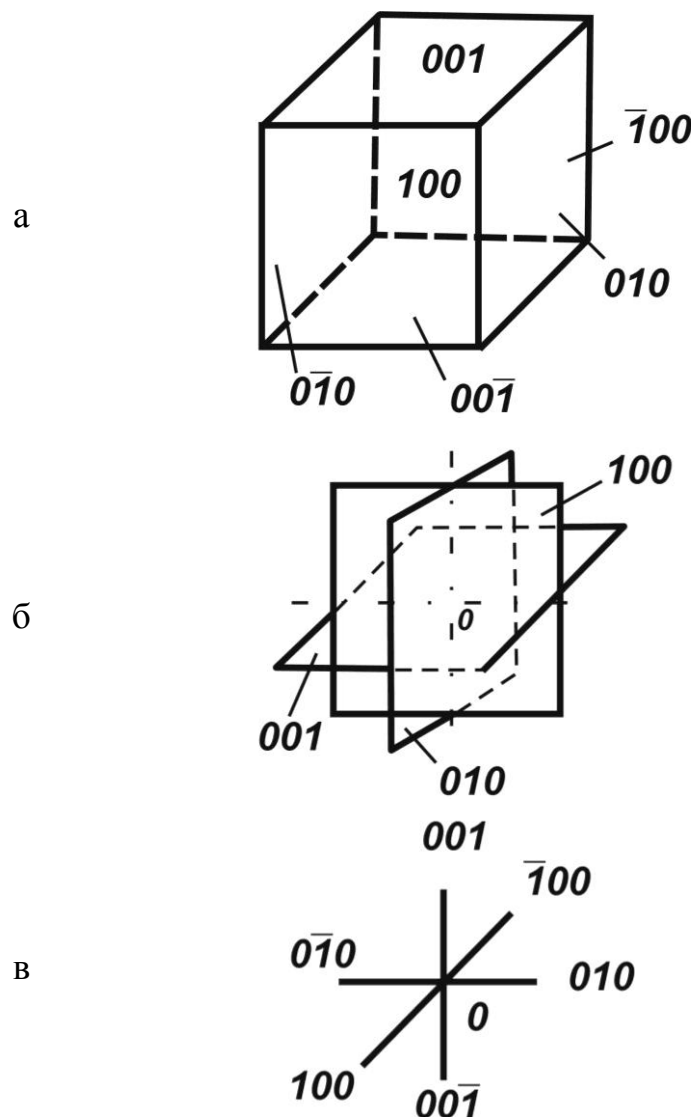


Рис. 4.1. Куб (а), его кристаллический (б) и полярный комплекс (в)

#### 4.2. ПОНЯТИЕ О СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ И ГНОМОСТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ И ЕЕ ПОСТРОЕНИИ.

Существует несколько видов кристаллографических проекций, наиболее распространенный среди них являются стереографическая и тесно, связанная с ней гномостереографическая проекции (от греческого слова "гномон" — нормаль).

Стереографическая и гномостереографическая проекции строятся по общим законам, только в первом случае кристаллический многогранник заменяют кристаллическим (прямым) комплексом, а во втором — полярным (обратным).



Построение стереографической (гномостереографической) проекции производится в два этапа. Сначала строится сферическая проекция (проекция комплекса на поверхности сферы), а потом сферическая проекций переносится на плоскость.

#### 4.3. ПОСТРОЕНИЕ СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ НАПРАВЛЕНИЯ

На рис. 4.2 показано построение стереографической проекции направления. Через центр кристаллического комплекса  $O$  проведена сфера произвольного радиуса, на которой строится сферическая проекция. Сферическая проекция какого-то направления  $Oa_1$  будет расположена в точке  $A$  на сфере проекций. Для построения стереографической проекции проводится горизонтальная плоскость  $Q$ , проходящая через точку  $O$ . Часть этой плоскости, находящаяся внутри сферы, называется основным кругом проекций; стереографическая проекция изображается на основном круге проекций. Чтобы получить стереографическую проекцию направления, его сферическую проекцию соединяют прямой линией с противоположащим полюсом сферы. Для направления  $Oa_1$  точку  $A$  соединяют с южным полюсом  $S$ . Точка пересечения луча  $AS$  с основным кругом проекции (точка  $a$ ) и есть стереографическая проекция направления  $Oa_1$ .

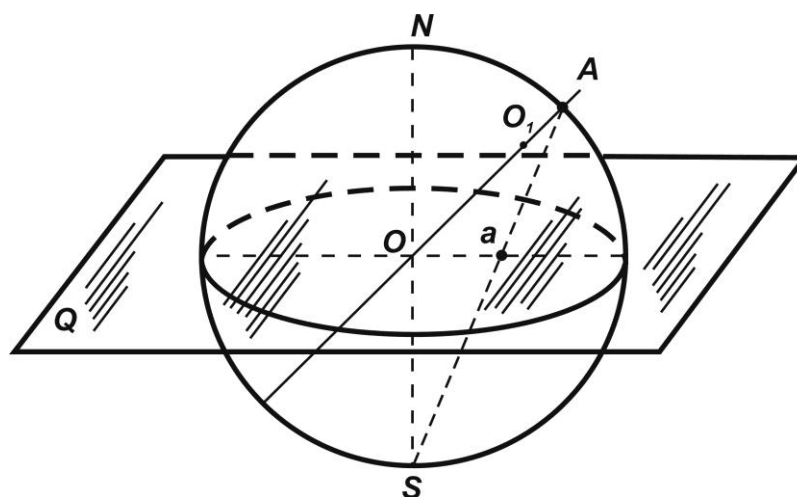


Рис. 4.2. Построение стереографической проекции направления

Таким образом, стереографическая проекция направления, изображается точкой на основном круге проекций. Точка отмечается на чертеже кружком, если сферическая проекция направления лежит на верхней полусфере, как в рассматриваемом случае, с направлением  $Oa_1$ , или крестиком, если сферическая проекция расположена на нижней полусфере - соединять эту точку нужно с северным полюсом  $N$ .

Очевидно, вертикальное направление проектируется в центр круга проекций, горизонтальное - в точку на окружности основного круга проекций.

Точкой, на плоскости проекций изображается и гномостереографическая проекция плоскости. В этом случае кристалл заменяется полярным комплексом, где каждая плоскость представлена нормалью, сферическая поверхность этой нормали — точка на сфере, соединяя которую с противоположающим полюсом, мы и получим точку на плоскости проекции.

#### **4.4. ПОСТРОЕНИЕ СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ ПЛОСКОСТИ**

Построение стереографической проекции плоскости производится по тем же законам, что и направления. Плоскость кристаллического комплекса, проходящую через его центр, точку  $O$  продолжают до пересечения со сферой проекций и получают сферическую проекцию плоскости — окружность. Далее переносят сферическую проекцию на основной круг проекции, для чего каждую точку окружности на сфере последовательно соединяют прямой линией с соответствующим полюсом — северным или южным. Геометрическое место точек пересечения этих прямых с плоскостью проекций и есть стереографическая проекция плоскости (рис. 4.3).

Совершенно очевидно, что стереографическая проекция горизонтальной плоскости совпадает с окружностью основного круга проекций, а вертикальной плоскости изображается прямыми линиями, диаметрами основного круга проекций. Для наклонной плоскости

получаются кривые линии, дуги окружности. Они пересекают окружность основного круга в диаметрально противоположных точках и получили название — дуги большого круга.

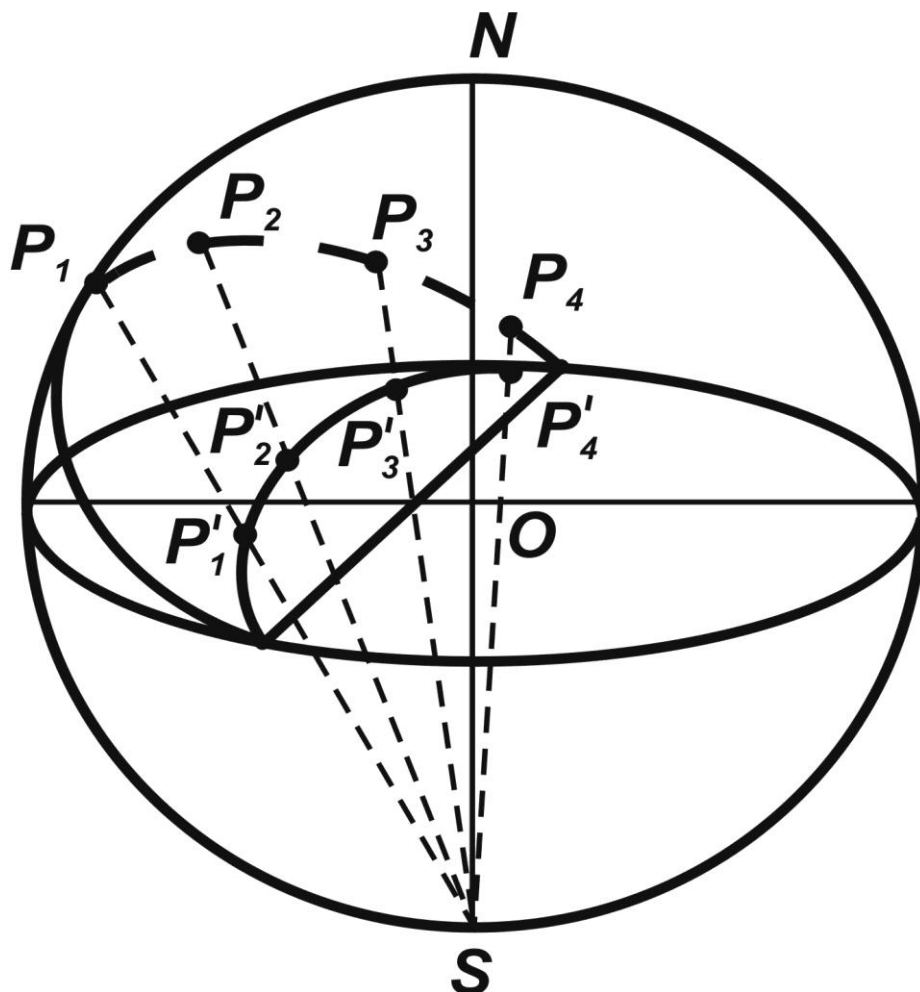


Рис. 4.3. Построение стереографической проекции плоскости

Дуга большого круга изображается сплошной линией, если сферическая проекция плоскости находится в верхней полусфере, и пунктиром, если сферическая проекция расположена в нижней полусфере (рис. 4.4).

Совершенно очевидно, что в гномостереографической проекции дуги большого круга представляет собой проекцию направлений.

Стереографические проекции применяются главным образом для изображения элементов симметрии кристалла. При определении взаимного расположения плоскостей удобнее гномостереографические проекции. Зону плоскостей представляют обычно в гномостереографической проекции. Здесь плоскости, принадлежащие

одной зоне, изображаются точками, расположенными на одной дуге большого круга, а сама дуга большого круга — это гномостереографическая проекция оси зоны.

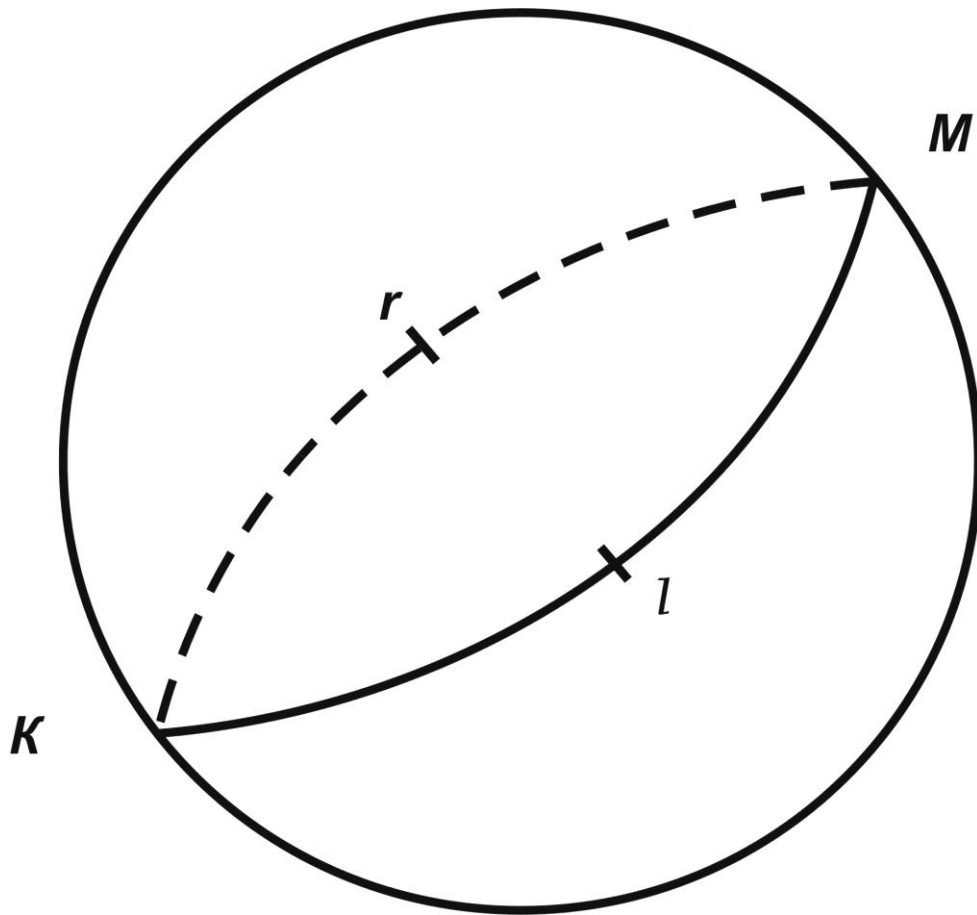


Рис. 4.4. Стереографическая проекция наклонной плоскости

Гномостереографическую проекцию плоскости — точку на основном круге проекции — называют еще полюсом плоскости, а гномостереографическую проекцию плоскостей кристалла — полюсной фигурой. Полюсные фигуры применяются в рентгеноструктурном анализе при определении ориентации монокристаллов и расшифровка текстур. Для кристаллов кубической сингонии гномостереографическая и стереографическая проекции совершенно одинаковы. Это обусловлено тем, что в кубической сингонии плоскость и нормаль к ней имеют одинаковые кристаллографические индексы.

## 4.5. СВОЙСТВА СТЕРЕОГРАФИЧЕСКИХ ПРОЕКЦИЙ

Для стереографической (и гномостереографической) проекции особенно важны следующие два свойства:

1) Любая окружность, проведенная на сфере проекций, изображается на плоскости проекций также окружностью (в частном случае — прямой линией).

2) Угловые соотношения на стереографической проекции не искажаются: угол между полюсами плоскостей на сфере проекций равен углу между плоскостями на плоскости проекций.

Эти свойства стереографической проекции используются на практике.

## 4.6. СЕТКА ВУЛЬФА

Для проведения количественных расчетов и определения угловых соотношений в кристалле по его стереографической (гномостереографической) проекции нужна координатная градусная сетка. Наиболее употребительна сетка, предложенная русским кристаллографом Ю.В. Вульфом и носящая его имя.

Чтобы получить сетку Вульфа, выберем любую точку "a" на поверхности сферы проекции. Его положение можно охарактеризовать двумя сферическими координатами (рис. 4.5):  $\rho$  — широта, или полярное расстояние; отсчитывается вдоль любого меридиана от нуля (северный полюс) до  $180^\circ$  (южный полюс);  $\varphi$  — долгота измеряется по экватору (окружности основного круга проекций) от меридиана, принятого за нулевой, до меридиана, проходящего через заданную точку на сфере. Долгота  $\varphi$  отсчитывается по часовой, стрелке и может изменяться в пределах от 0 до  $360^\circ$ .

Ю.В. Вульф спроектировал на плоскость проекции меридианы и параллели, нанесенные на поверхности сферы (рис. 4.5), при этом в качестве плоскости проекции была выбрана вертикальная плоскость, проходящая через северный и южный полюсы сферы проекций.

Стандартный диаметр сетки Вульфа составляет 20 см, линии параллелей и меридианов проходят через  $2^\circ$ . Сетка обеспечивает

проведение всех расчетов и построений на плоскости проекций с точностью до  $1^\circ$ , что достаточно для большинства технических расчетов.

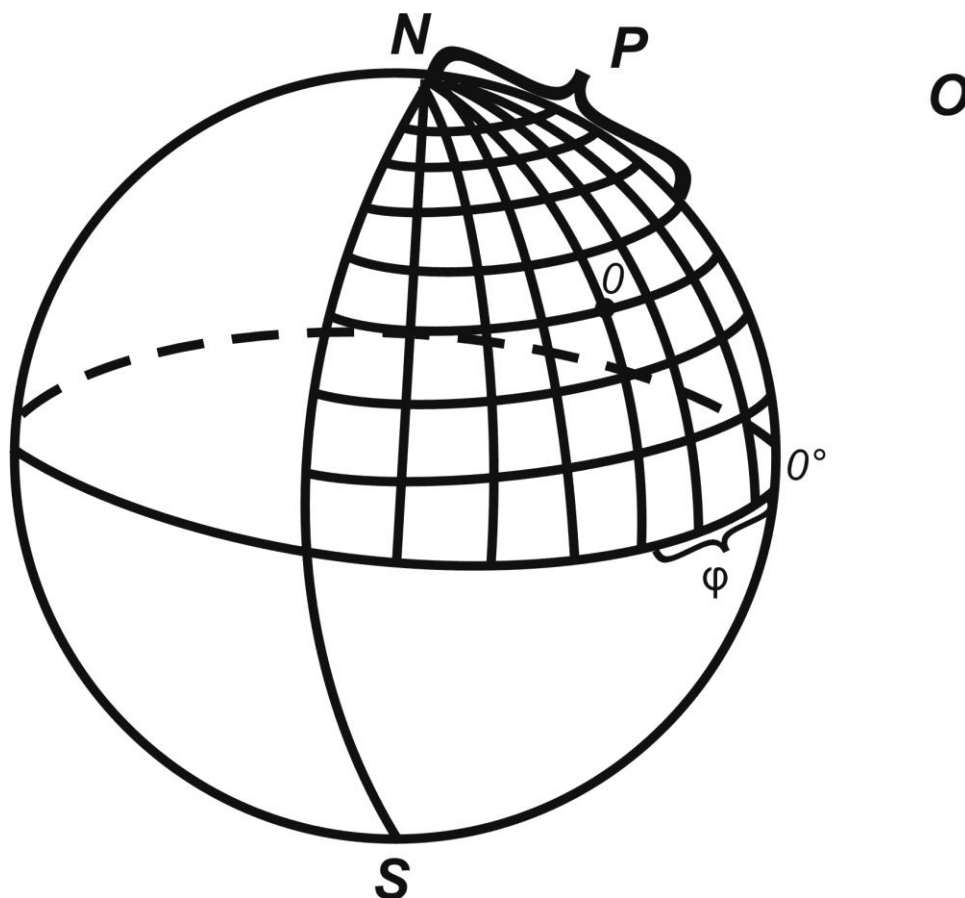


Рис. 4.5. Сферические координаты на поверхности сферы

Все построения и расчеты, выполняемые с помощью сетки Вульфа, производятся на кальке, наложенной на сетку Вульфа. При этом на кальке обязательно отмечает крестиком центр проекции и горизонтальной черточкой у правого конца экватора сетки нулевую точку. По этим двум отметкам чертеж на кальке всегда можно привести в исходное положение. На кальку предварительно наносится стереографическая (гномографическая) проекция кристалла.

Положение любой точки на основном круге проекций характеризуется ее сферическими координатами  $\varphi$  и  $\rho$ , которые отсчитываются с помощью сетки Вульфа. В соответствии с рис. 4.6, широта  $\rho$  отсчитывается на плоскости проекций по радиусу от центра до окружности основного круга проекций (в пределах от  $0$  до  $90^\circ$ ). Если  $90^\circ \leq \rho \leq 180^\circ$ , отсчет производится в радиальном направлении от центра до

окружности ( $\rho = 90^\circ$ ) и далее продолжается в обратном направлении, к центру.

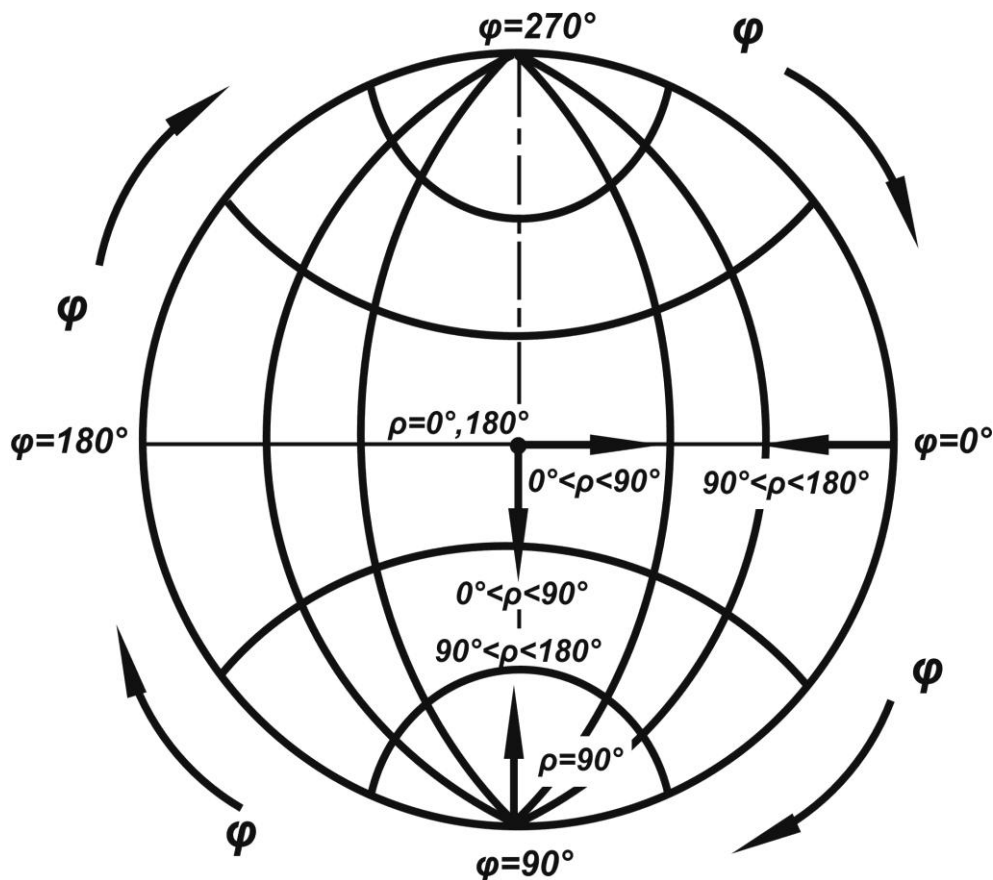


Рис. 4.6. Схема сетки Вульфа и отсчета углов на ней

Если положение точки на плоскости проекций совпадает с вертикальным или горизонтальным диаметром сетки Вульфа, то угол  $\rho$  отсчитывается непосредственно по этому диаметру. Если точка не находится на диаметре, то ее нужно вывести на один из этих диаметров концентрическим поворотом кальки относительно центра и по нему отсчитывать угол  $\rho$ .

Долгота  $\varphi$  отсчитывается вдоль окружности основного круга проекций от правого конца горизонтального диаметра (начало отсчета,  $\varphi = 0$ ) по часовой стрелке, в пределах от 0 до  $360^\circ$ .

Если положение точки на плоскости проекции совпадает с окружностью основного круга проекций, то угол  $\varphi$  отсчитывается непосредственно. Если точка находится внутри основного круга проекций, то через нее необходимо провести радиус до пересечения с окружностью основного круга или, что проще, концентрическим поворотом кальки

вывести точку на ближайший диаметр. Угол между точкой начала и концом этого диаметра и есть угол  $\varphi$ .

#### 4.7. СВЯЗЬ МЕЖДУ СФЕРИЧЕСКИМИ КООРДИНАТАМИ И КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИМИ ИНДЕКСАМИ ПЛОСКОСТИ

Между кристаллографическими индексами плоскости  $(hkl)$  и ее сферическими координатами (и гномостереографической проекции) существует строгая математическая зависимость. Вид этого соотношения различен для разных сингоний и зависит от установки кристалла, то есть от того, какая плоскость кристалла совпадает с плоскостью проекции.

Для кубической сингонии при условии, что плоскость куба расположена в плоскости проекции, соотношение имеет следующий вид:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{h}{k}; \quad \operatorname{tg} \rho = \frac{\sqrt{h^2 + k^2}}{l} \quad (4.1),$$

$$h : k : l = \sin \varphi : \cos \varphi : \operatorname{ctg} \rho \quad (4.2).$$

Соотношение (4.1) используется обычно для вычисления сферических координат по известным индексам  $(hkl)$ , соотношение (4.2) — для нахождения индексов  $(hkl)$  по сферическим координатам.

#### 4.8. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ С ПОМОЩЬЮ СЕТКИ ВУЛЬФА

**Задача 1.** Построить на плоскости проекции точку  $K$  со сферическими координатами  $\varphi$  и  $\rho$ .

##### **Решение**

1) Накладываем кальку на сетку Вульфа, отмечаем крестиком центр проекции и черточкой - нулевое значение  $\varphi$  (рис. 4.7, а).

2) По часовой стрелке от нулевой точки вдоль основного круга проекций отсчитываем угол  $\varphi$  и ставим вспомогательную точку  $K_l$  (рис. 4.7, б).



3) Путем концентрического поворота кальки относительно центра сетки выведем точку  $K_1$  на конец одного из диаметров сетки и от центра сетки в направлении точки  $K_1$  отсчитываем координату  $\rho$ . Полученную точку обозначаем буквой  $K$  (рис. 4.7, в).

4) Возвращаем кальку в исходное положение (рис. 4.7, г).

Данная задача применяется при построении стереографической проекции направления или гномостереографической проекции плоскости по известным сферическим координатам.

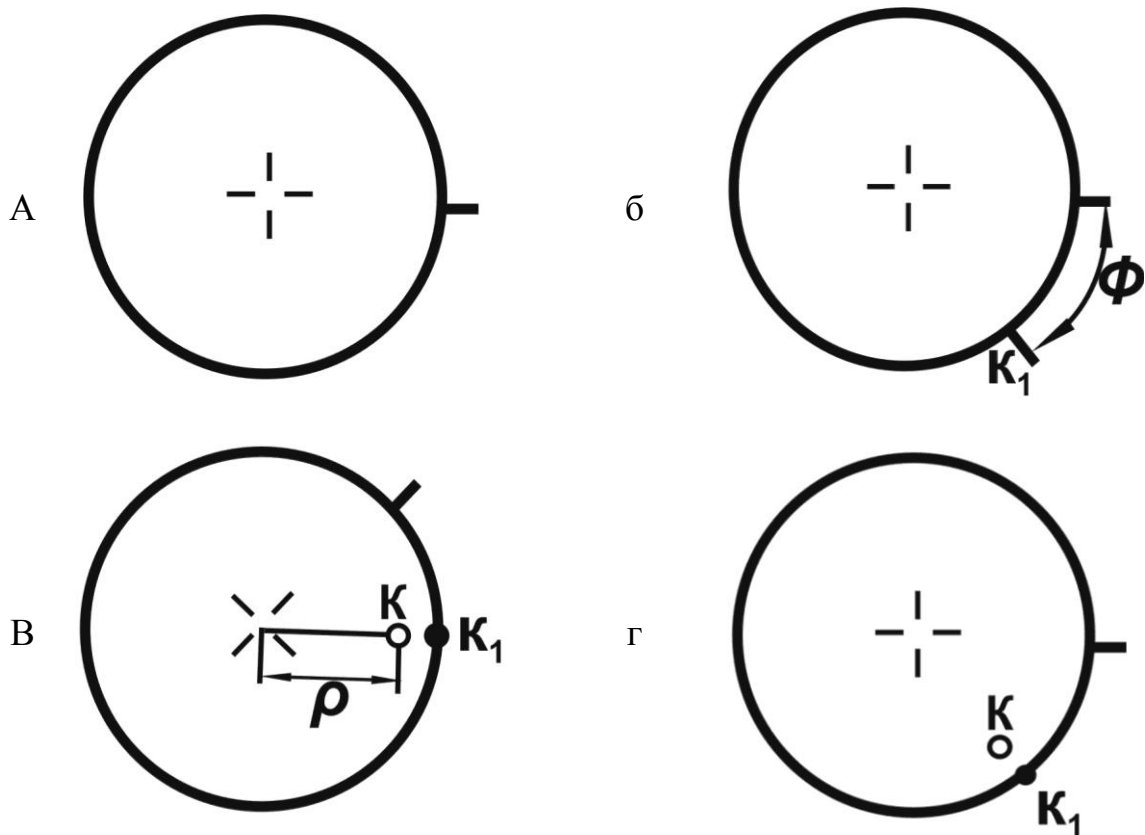


Рис. 4.7. Построение точки  $K$  по заданным сферический координатам

**Задача 2 (обратная).** Определить сферические координаты точки на плоскости проекций.

### **Решение**

1) Вращением кальки приводим заданную точку на ближайший диаметр сетки. По этому диаметру от центра сетки до заданной точки измеряем сферическую координату  $\rho$  и отмечаем вспомогательной точкой на круге проекций тот конец диаметра, в направлении которого лежит заданная точка.

2) Приводим кальку в исходное положение и по основному кругу проекций отсчитываем сферическую координату  $\varphi$  от нулевой точки по часовой стрелке до вспомогательной точки.

**Задача 3.** Определить угол между двумя направлениями по их стереографической проекции.

Два пересекающихся направления (именно с таким мы имеем дело в кристаллическом комплексе) всегда лежат в одной плоскости. Угол между ними удобно измерить на сфере проекций как длину дуги окружности, которая опирается на центральный угол, образованный данными направлениями. В качестве окружностей на сфере проекций можно использовать меридианы. На плоскости проекций направления изображаются точками, и угловые расстояния между ними можно измерить по меридиану сетки Вульфа. Если обе точки находятся в одной полусфере (обе изображаются кружками или обе крестиками), то, вращая кальку относительно центра, выводим обе точки на один меридиан, по которому и отсчитываем угол (точки 1 и 2 на рис. 4.8). Если же точки лежат в разных полусферах (кружок и крестик, например, точки 1 и 3 на рис. 4.8), то поворачивают кальку так, чтобы обе точки попали на меридианы, симметричные относительно центра сетки, и отсчитывают угол сначала по одному меридиану от точки до полюса, а затем по симметричному меридиану - от полюса до второй точки.

Совершенно аналогично решается задача об определении угла между двумя плоскостями по их гномостереографической проекции.

**Задача 4.** Построить на плоскости проекций точку, диаметрально противоположную данной.

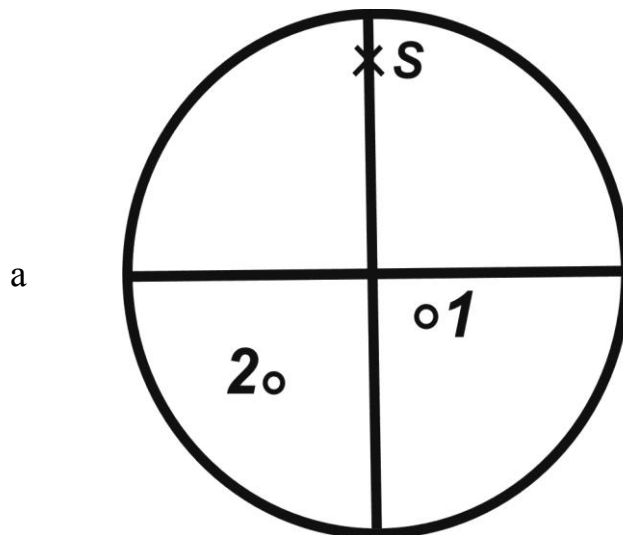
Концентрическим поворотом кальки приводим данную точку на один из меридианов сетки и отсчитываем по нему угол  $180^\circ$  (рис.4.9). Диаметрально противоположные точки  $A$  и  $A'$  находятся в разных

полусферах и на плоскости проекция отмечаются разными знаками (кружок и крестик).

**Задача 5.** Построить зону и найти ось зоны.

Для этой задачи обычно пользуются гномостереографической проекцией.

*Зона* — это совокупность плоскостей, параллельных какому-либо направлению в кристалле (оси зоны), или совокупность плоскостей, перпендикулярных определенной плоскости. Поэтому гномостереографические проекции всех плоскостей должны находиться на угловом расстоянии  $90^\circ$  от проекции, изображающей ось зоны. Они находятся на одном меридиане сетки Вульфа, если проекция оси зоны располагается на экваторе.



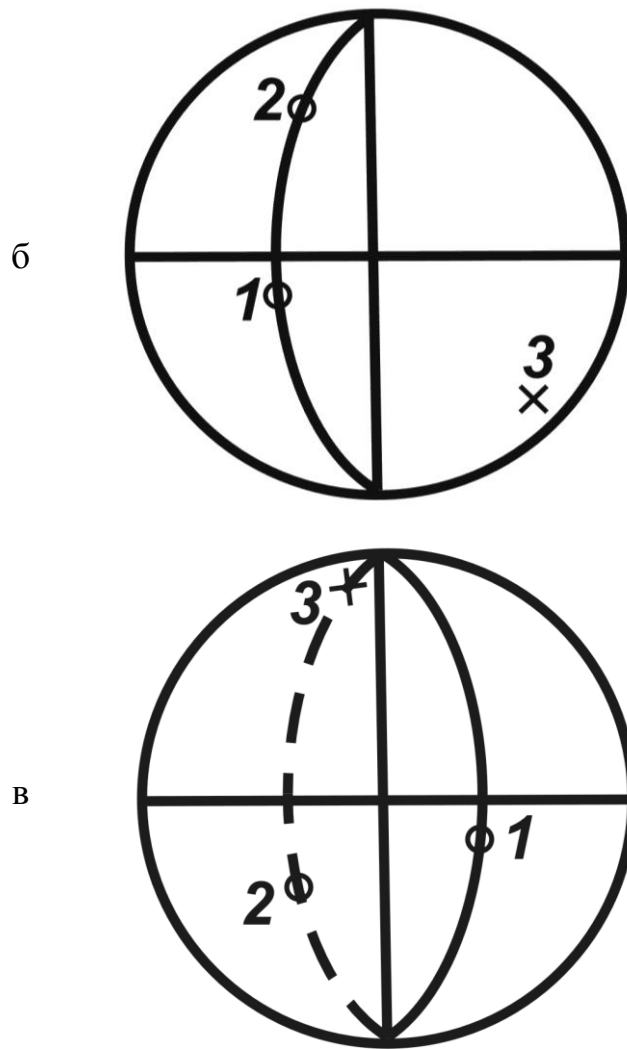


Рис. 4.8. К определению угла между направлениями

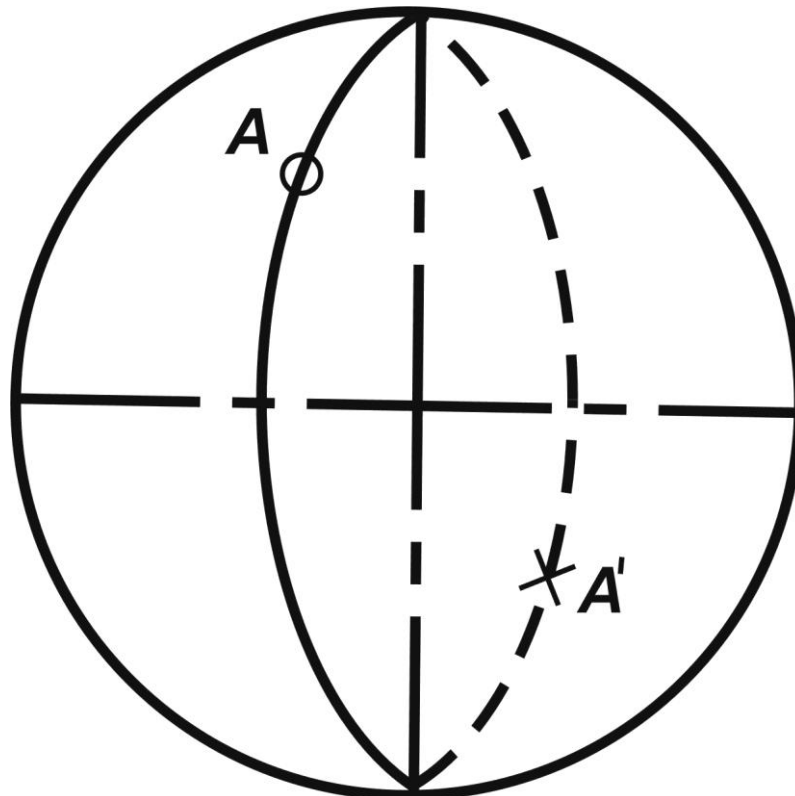


Рис. 4.9. Построение диаметрально противоположной точки

Практически задача решается следующим образом. Если заданы точки — гномостереографические проекции двух плоскостей, то concentрическим поворотом кальки эти точки выводят на один меридиан сетки и от точки пересечения с экватором отсчитывают  $90^\circ$  к центру проекций (рис. 4.10). Полученная точка и есть проекция оси зоны.

Взаимное расположение важнейших, плоскостей кристалла обычно анализируют по стандартным проекциям — проекциям всех плоскостей кристалла на какую-либо плоскость кристалла с малыми индексами. Важнейшие стандартные проекции кристалла приведены в учебной литературе.

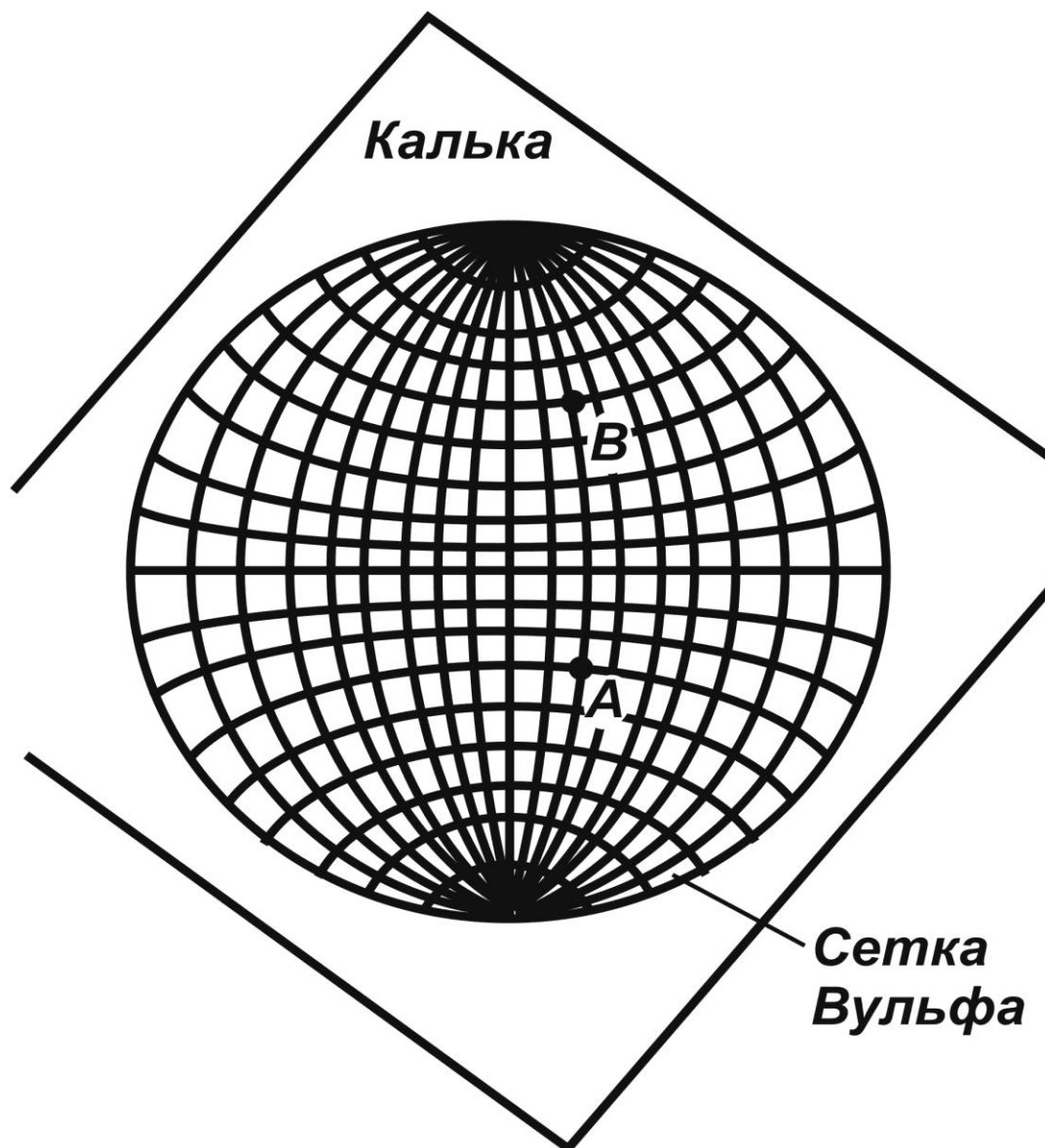


Рис. 4.10. Построение зоны

#### 4.9. УСЛОВИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НА ЛАБОРАТОРНОМ ЗАНЯТИИ

**Задача 1.** Построить стереографическую проекцию направления по сферическим координатам:  $\varphi_1 = 120^\circ$ ,  $\rho_1 = 30^\circ$ ;  
 $\varphi_2 = 60^\circ$ ,  $\rho_2 = 100^\circ$ .

Построение следует проводить на кальке с помощью сетки Вульфа в соответствии с п. 4.7 (задача 1).

**Задача 2.** Определить сферические координаты диаметрально противоположной точки (по задаче 1, п. 4.8).

Решение задачи производится на основании п. 4.8 (задачи 4 и 2).

**Задача 3.** Построить стереографическую проекцию двух направлений по сферическим координатам  $\varphi_1 = 150^\circ$ ,  $\rho_1 = 60^\circ$ ;

$$\varphi_2 = 290^\circ, \rho_2 = 30^\circ.$$

Найти стереографическую проекцию плоскости, в которой лежат оба направления. Определить угол между направлениями.

Ход решения задачи описан в п. 4.8 (задача 3).

**Задача 4.** Построить гномостереографическую проекцию двух плоскостей по известным сферическим координатам:  $\varphi_1 = 240^\circ$ ,  $\rho_1 = 60^\circ$ ;

$$\varphi_2 = 150^\circ, \rho_2 = 30^\circ.$$

Определить угол между этими плоскостями.

**Задача 5.** Построить гномостереографические проекции плоскостей  $A$  ( $\varphi_A = 270^\circ$ ,  $\rho_A = 45^\circ$ ) и  $B$  ( $\varphi_B = 45^\circ$ ,  $\rho_B = 90^\circ$ ). Найти угол между этими плоскостями. Найти индексы этих плоскостей, если сингония кристалла кубическая, а плоскость проекции совпадает с плоскостью (001). Указать зону, к которой принадлежат плоскости  $A$  и  $B$ , найти индексы оси зоны и ее положение.

Решение задачи проводится в следующей последовательности:

— на основании п. 4.8 (задача 1) по заданным сферическим координатам с помощью сетки Вульфа на кальке строятся точки — гномостереографические проекции плоскостей  $A$  и  $B$ ;

— в соответствии с задачей 3 (п. 4.8) надо найти угол между ними;

— по соотношению 4.2 определяются кристаллографические индексы плоскостей  $A$  и  $B$ ;

— на основании задачи 5 (п. 4.8) находится положение оси зоны и по п. 8 (задача 2) измеряют сферические координаты  $\varphi$ ,  $\rho$  найденной точки;

— по соотношениям 4.2 по найденным  $\varphi$ ,  $\rho$  вычисляют кристаллографические индексы.

**Задача 6.** Построить гномостереографические проекции плоскостей (313) и (131), если сингония кристалла кубическая и с плоскостью

проекция совпадает плоскость (001). Найти угол между плоскостями. Указать зону, найти индексы оси зоны и ее положение.

### ***Последовательность решения задачи:***

- вычислить сферические координаты для заданных плоскостей по известным индексам (соотношение (4.1));
- построить на кальке точки — гномостереографические проекции плоскостей (п. 8, задача 1);
- определяют угол между плоскостями (п. 4.8 задача 3);
- находят положение оси зоны (задача 5) к ее сферические координаты (задача 2);
- вычисляют кристаллографические индексы оси зоны (соотношение (4.2)).

## **4.9. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ**

**Задача 1.** Построить стереографическую проекцию двух направлений по сферическим координатам  $(\varphi_1, \rho_1)$  и  $(\varphi_2, \rho_2)$ . Определить сферические координаты диаметрально противоположных направлений.

**Задача 2.** Построить стереографические проекции направлений  $A$  и  $B$  по заданным сферическим координатам  $(\varphi_A, \rho_A)$  и  $(\varphi_B, \rho_B)$ . Определить угол между направлениями. Построить стереографическую проекцию плоскости, в которой лежат оба направления.

**Задача 3.** Построить гномостереографические проекции плоскостей  $C$  и  $D$  по сферическим координатам  $(\varphi_C, \rho_C)$  и  $(\varphi_D, \rho_D)$ . Определить угол между этими плоскостями. Найти индексы плоскостей  $C$  и  $D$ , если сингония кристалла кубическая и с плоскостью проекции совпадает плоскость (001). Определить положение оси зоны, к которой относятся плоскости  $C$  и  $D$ , и ее индексы.



#### **4.10. Контрольные вопросы:**

1. Что такое "кристаллический комплекс"? Как он строится ?
2. Что такое "полярный (обратный) комплекс"? Как он строится ?
3. Как строится стереографическая проекция направления в кристалле?
4. Как изображается стереографическая проекция вертикального направления ? Горизонтального ? Наклонного ?
5. Как строится стереографическая проекция плоскости ?
6. Как изображается стереографическая проекция вертикальной плоскости ? Горизонтальной ? Наклонной ?
7. Как строится гномостереографическая проекция направления в кристалле?
8. Как изображается гномостереографическая проекция вертикального направления ? Горизонтального ? Наклонного ?
9. Как строится гномостереографическая проекция плоскости ?
10. Как изображается гномостереографическая проекция вертикальной плоскости ? Горизонтальной ? Наклонной ?
11. Почему стереографическая и гномостереографическая проекции кубического кристалла выглядят одинаково ?
12. Какие сферические координаты применяют в кристаллографии ? Как их отсчитывают на сфере проекций ? На круге проекций ?
13. Как построить стереографическую проекцию направления по заданным сферическим координатам ?
14. Как определить сферические координаты точки на плоскости проекций ?
15. Как определить угол между двумя направлениями по их стереографической проекции ?
16. Как определить угол между двумя плоскостями по их гномостереографической проекции ?
17. Как связаны индексы плоскости со сферическими координатами ?
18. Как найти положение оси зоны и ее индексы по гномостереографической проекции плоскостей ?

### Варианты условий для п.4.9

Номер варианта	Номер задачи											
	1				2				3			
	$\varphi_1$	$\rho_1$	$\varphi_2$	$\rho_2$	$\varphi_A$	$\rho_A$	$\varphi_B$	$\rho_B$	$\varphi_C$	$\rho_C$	$\varphi_D$	$\rho_D$
<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>	<b>9</b>	<b>10</b>	<b>11</b>	<b>12</b>	<b>13</b>
1	30°	120°	230°	30°	180°	110°	330°	90°	0°	45°	90°	90°
2	120°	120°	280°	45°	240°	60°	150°	30°	90°	45°	0°	90°
3	150°	45°	250°	100°	310°	120°	30°	150°	270°	90°	0°	45°
4	180°	60°	50°	170°	120°	30°	160°	60°	90°	45°	0°	45°
5	210°	30°	70°	90°	210°	100°	300°	140°	0°	90°	270°	45°
6	240°	75°	90°	110°	30°	25°	320°	70°	45°	90°	0°	45°
7	280°	100°	110°	10°	220°	110°	330°	150°	180°	45°	90°	90°
8	45°	135°	330°	45°	45°	35°	320°	70°	180°	45°	270°	90°
9	60°	100°	300°	40°	220°	90°	340°	120°	90°	45°	45°	90°
10	75°	45°	190°	120°	60°	45°	230°	60°	270°	45°	0°	90°
11	100°	60°	240°	135°	30°	110°	150°	150°	270°	45°	180°	90°
12	80°	30°	270°	150°	140°	90°	350°	30°	180°	45°	270°	45°
13	135°	70°	20°	160°	110°	120°	310°	150°	90°	45°	180°	45°
14	160°	80°	310°	170°	40°	45°	160°	90°	270°	45°	0°	45°
15	190°	110°	30°	80°	50°	30°	220°	70°	45°	55°	0°	90°
16	200°	135°	40°	20°	90°	130°	190°	160°	45°	55°	90°	45°
17	270°	150°	60°	70°	320°	100°	60°	150°	90°	90°	45°	55°
18	220°	110°	140°	40°	40°	30°	230°	60°	315°	55°	45°	55°
19	250°	130°	170°	10°	170°	135°	310°	170°	270°	90°	45°	55°
20	260°	130°	100°	60°	80°	20°	250°	70°	180°	90°	45°	55°
21	290°	160°	120°	20°	120°	90°	210°	150°	135°	55°	45°	55°
22	300°	20°	10°	130°	60°	45°	135°	90°	135°	55°	90°	90°
23	310°	50°	80°	140°	60°	135°	280°	170°	135°	55°	270°	90°
24	320°	140°	130°	50°	35°	60°	150°	90°	135°	55°	180°	45°
25	330°	170°	160°	75°	290°	100°	110°	150°	135°	55°	225°	55°
26	340°	150°	180°	55°	220°	40°	340°	90°	225°	55°	180°	90°
27	350°	20°	200°	145	50°	150°	300°	100°	225°	55°	270°	45°
28	20°	140°	340°	80°	30°	20°	145°	75°	225°	55°	315°	55°
29	10°	50°	250°	120°	180°	105°	120°	160°	225°	55°	0°	90°
30	40°	160°	320°	30°	30°	35°	150°	45°	135°	55°	0°	90°
31	210°	50°	45°	150°	250°	45°	45°	60°	90°	90°	315°	55°

# ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 5 СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОГРАННИКОВ (СИММЕТРИЯ КОНТИНУУМА)

## 5.1. ПОНЯТИЕ О СИММЕТРИИ

Кристаллы существуют в природе в виде кристаллических многогранников. Кристаллы разных веществ отличаются друг от друга по своим формам. Каменная соль — это кубики; горный хрусталь — шестигранные призмы, заостренные на концах; алмаз — чаще всего правильные восьмигранники (октаэдры); кристаллы граната — двенадцатигранники (рис. 5.1). Такие кристаллы обладают симметрией.

Характерной особенностью кристаллов является анизотропия их свойств: в различных направлениях они разные, но в параллельных направлениях одинаковы, а также одинаковы и в симметричных направлениях.

Не всегда кристаллы имеют форму правильных многогранников.

В реальных условиях роста, при затруднении в свободном росте симметричные грани могут развиваться неравномерно и правильная внешняя форма может не получиться, однако правильное внутреннее строение при этом полностью сохраняется, а также сохраняется симметрия физических свойств. Поэтому для кристаллов с плохой огранкой их симметрию можно определить по зависимости физических свойств от направления.

Рассматривая симметрию внешней огранки кристалла, кристаллическую среду представляют себе как непрерывную, сплошную, так называемый континуум (в переводе с латинского на русский - означает непрерывный, сплошной). Все точки такой среде совершенно одинаковы. Элементы симметрии континуума описывают внешнюю форму кристаллического многогранника, поэтому их еще называют макроскопическими элементами симметрии.

Фактически же кристаллическая среда является дискретной. Кристаллы состоят из отдельных частиц (атомов, ионов, молекул), которые расположены в пространстве в виде бесконечно простирающихся пространственных решеток. Симметрия в расположении этих частиц, конечно, сложнее и богаче, чем симметрия внешних форм кристаллических многогранников. Поэтому наряду с континуумом рассматривается и дисконтинуум — дискретная, реальная структура материальных частиц и ее законы симметрии, получившие название, микроскопических элементов симметрии.

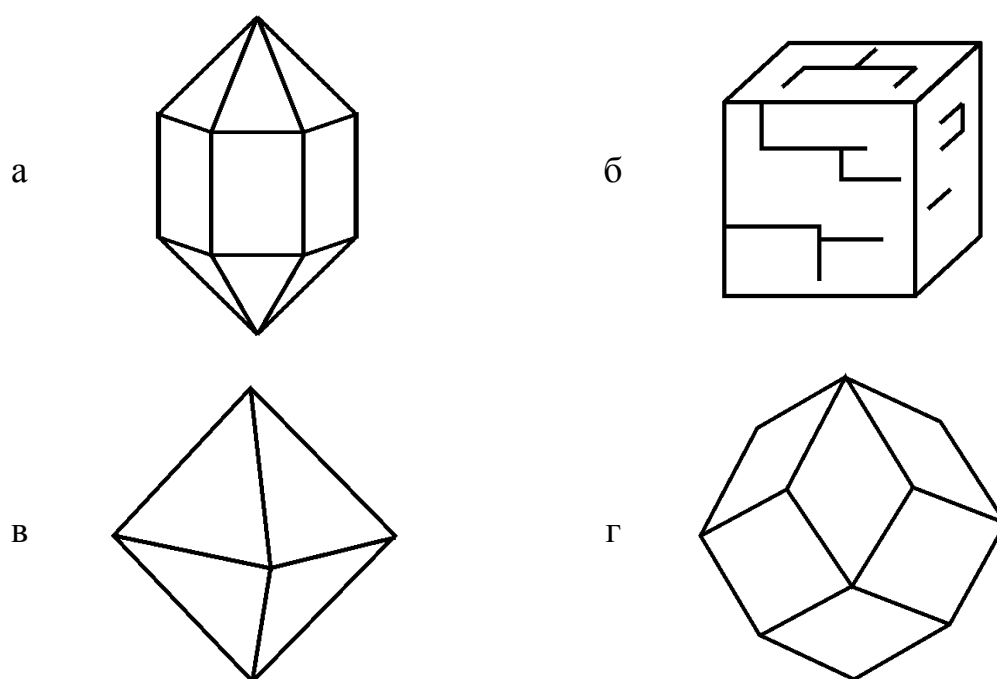


Рис. 5.1. Различные формы природных кристаллов: а – каменная соль, б – горный хрусталь, в – алмаз, г – гранат

Греческое слово "симметрия" означает соразмерность. Симметричная фигура состоит из равных, одинаковых частей. Под симметрией понимают свойство тел или геометрических фигур совмещать отдельные части друг с другом при некоторых симметрических преобразованиях. В идеально развитом кристалле путем операций симметрии — поворотов, отражений — совмещаются равные элементы (грани, ребра, вершины). Геометрические образы, с помощью которых задаются и осуществляются симметрические преобразования, называют элементами симметрии.

## 5.2. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ

В кристаллических многогранниках встречаются простые элементы симметрии (центр симметрии, плоскость симметрии, поворотная ось) сложный элемент симметрии (инверсионная ось). Для обозначения элементов симметрии используются две системы обозначений: международная символика, принятая Интернациональным союзом кристаллографов, и старая символика, основанная на формулах симметрии»

*Центр симметрии* (или центр инверсии) — особая точка внутри фигуры, при отражении в которой любая точка фигуры имеет эквивалентную себе, то есть обе точки (например, пара вершин) расположены на одной прямой, проходящей через центр симметрии, и равноудалены от него. При наличии центра симметрии каждая грань пространственной фигуры имеет параллельную и противоположно направленную грань, каждому ребру соответствует равноудаленное, равное, параллельное, но противоположно направленное ребро. Поэтому центр симметрии представляет собой как бы зеркальную точку.

На рис. 5.2 показан многогранник — куб, который имеет центр симметрии, расположенный в точке пересечения его пространственных диагоналей. Обозначается центр симметрии двояко: буквой  $C$  (старое обозначение) и  $\bar{1}$  (международное обозначение). Графически отмечается буквой  $C$ .

*Плоскость симметрии* — это такая плоскость, которая делит фигуру на две части, расположенные друг относительно друга как предмет и его зеркальное отражение, то есть на две зеркально равные части. Обозначения плоскости симметрии —  $P$  (старое) и  $m$  (международное). Графически плоскость симметрии обозначается сплошной линией. У фигуры может быть одна или несколько плоскостей симметрии, и все они

пересекаются друг с другом. В кубе имеется девять плоскостей симметрии (рис. 5.3).

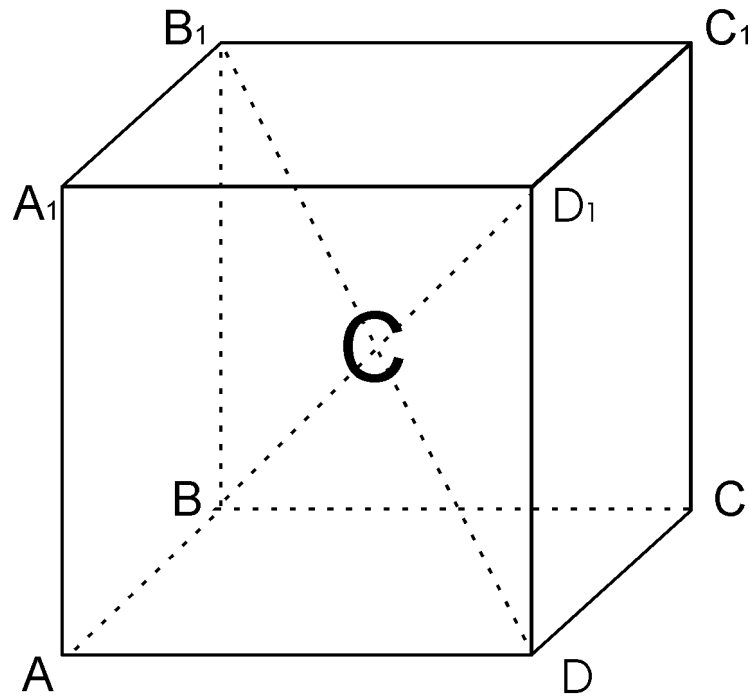


Рис. 5.2. Центр симметрии куба

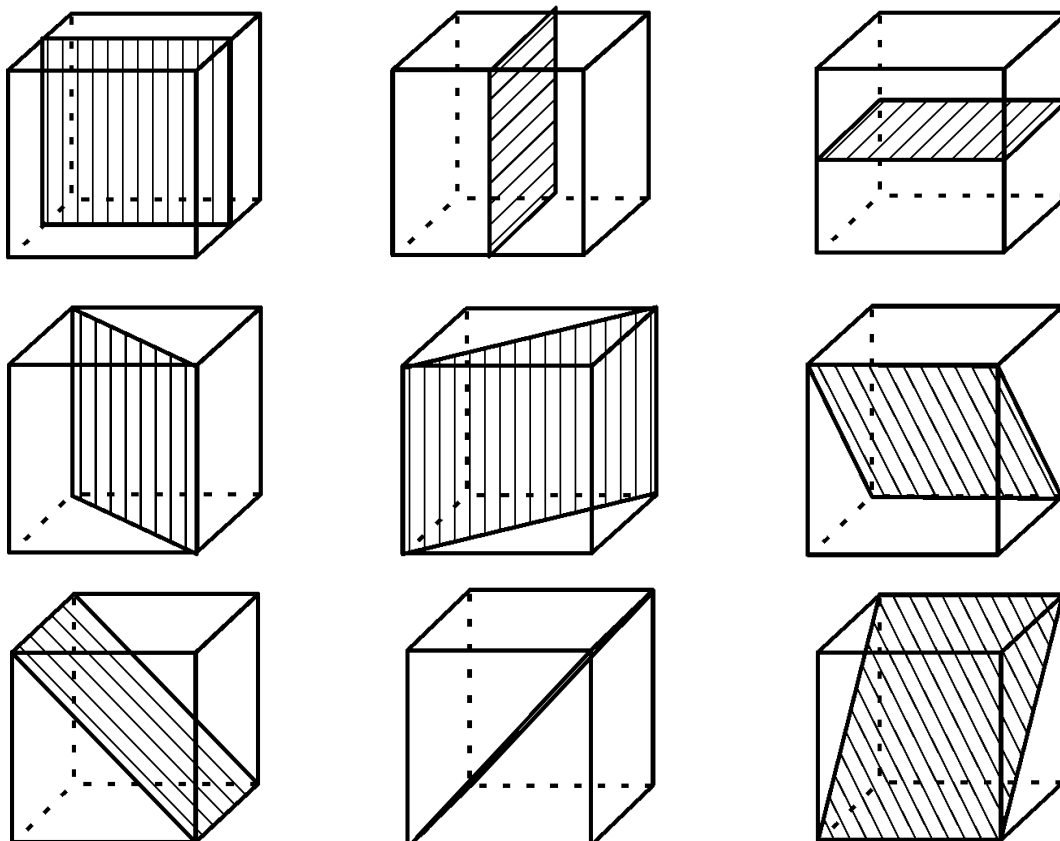


Рис. 5.3. Плоскости симметрии куба

*Поворотная ось* — это такая прямая, при повороте вокруг которой на некоторый определенный угол  $\alpha$  фигура совмещается сама с собой. Величина угла поворота  $\alpha$  определяет порядок поворотной оси  $n$ , который показывает, сколько раз фигура совместится сама с собой при полном обороте вокруг этой оси (на  $360^\circ$ ):

$$n = \frac{360^\circ}{\alpha} \quad (5.1).$$

В геометрических фигурах возможны оси симметрии любых порядков, но в кристаллических многогранниках порядок оси ограничен, он может иметь только следующие значения:

$$n = 1, 2, 3, 4, 6.$$

В кристаллических многогранниках невозможны оси симметрии пятого и выше шестого порядков. Это вытекает из принципа непрерывности кристаллической среды. Обозначения осей симметрии: старые — буквой  $L$  с цифровым индексом  $n$  —  $L_n$  ( $L_1, L_2, L_3, L_4, L_6$ ) и международные арабскими цифрами, соответствующими порядку поворотной оси (1, 2, 3, 4, 6). Графически поворотные оси изображаются многоугольниками:

$$\blacklozenge — 6; \blacksquare — 4; \blacktriangle — 3; \bullet — 2.$$

На рис. 5.4 — 5.6 показано расположение в кубе поворотной оси второго, третьего и четвертого порядка и на рис. 5.7 — всех осей симметрии куба.

*Инверсионная ось* — сложный элемент симметрии. Она позволяет совмещать равные части фигуры путем двойной операции — поворота на определенный угол, задаваемый порядком оси, и отражения в точке на этой оси, как в центре симметрии. Обозначения инверсионной оси: старые  $L_{in}$ , и международные  $\bar{n}$ . На чертежах инверсионные оси обозначаются светлыми многоугольниками:

$$\whitehexagon — 6; \square — 4; \triangle — 3; \circ — 2.$$

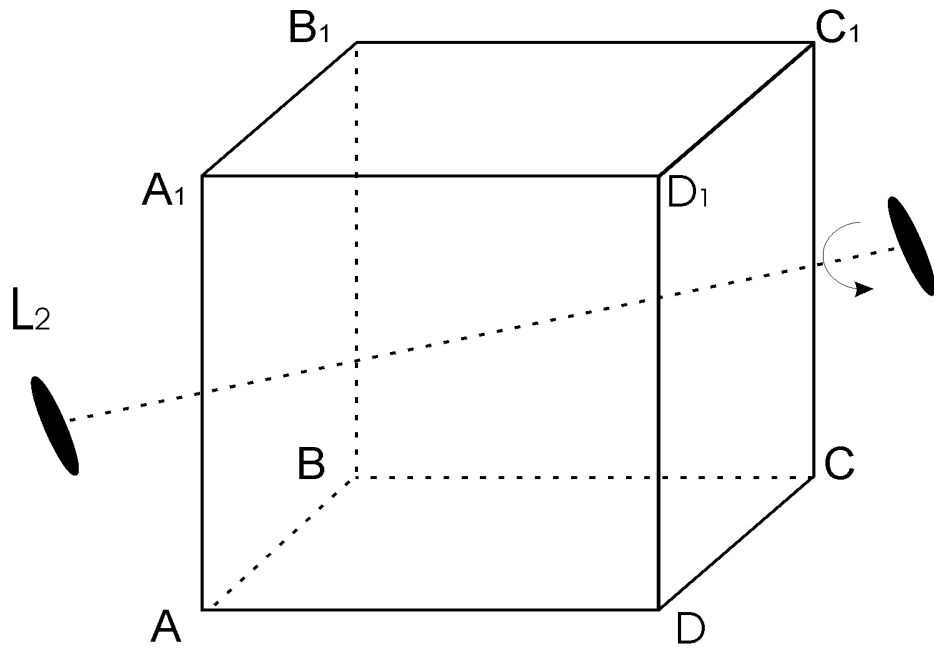


Рис. 5.4 . Поворотная ось второго порядка  $L_2$  в кубе

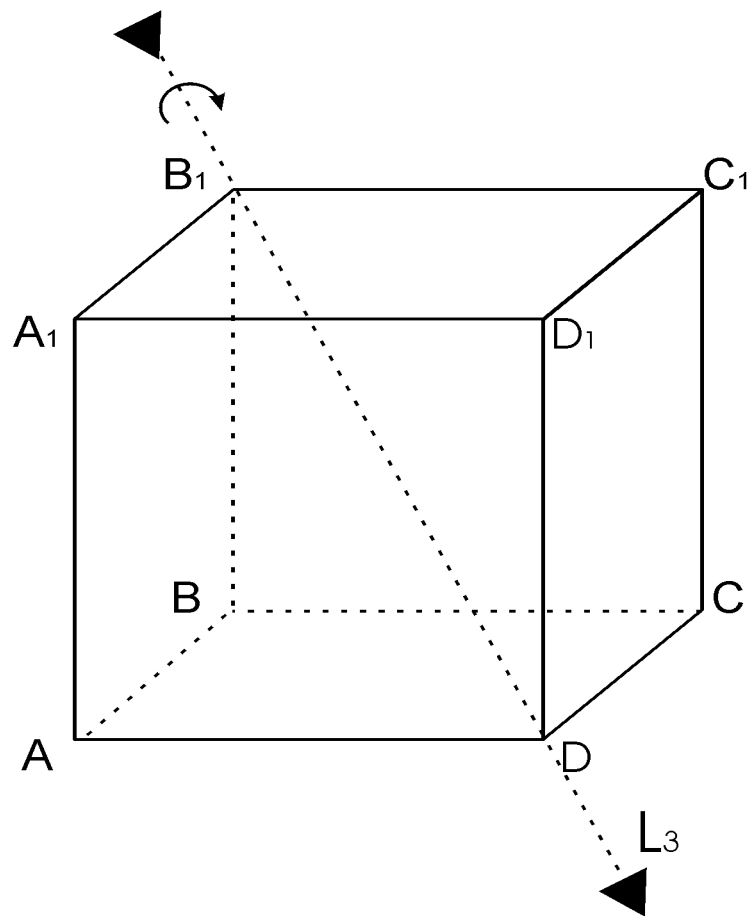


Рис. 5.5. Пространственная диагональ куба  $B_1D$  – поворотная ось третьего порядка  $L_3$



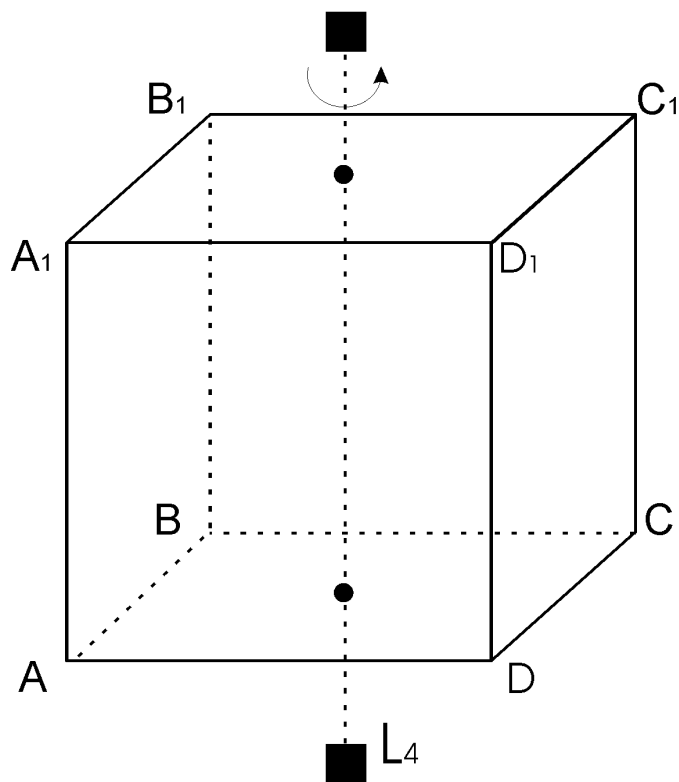


Рис. 5.6. Поворотная ось четвертого порядка  $L_4$  в кубе

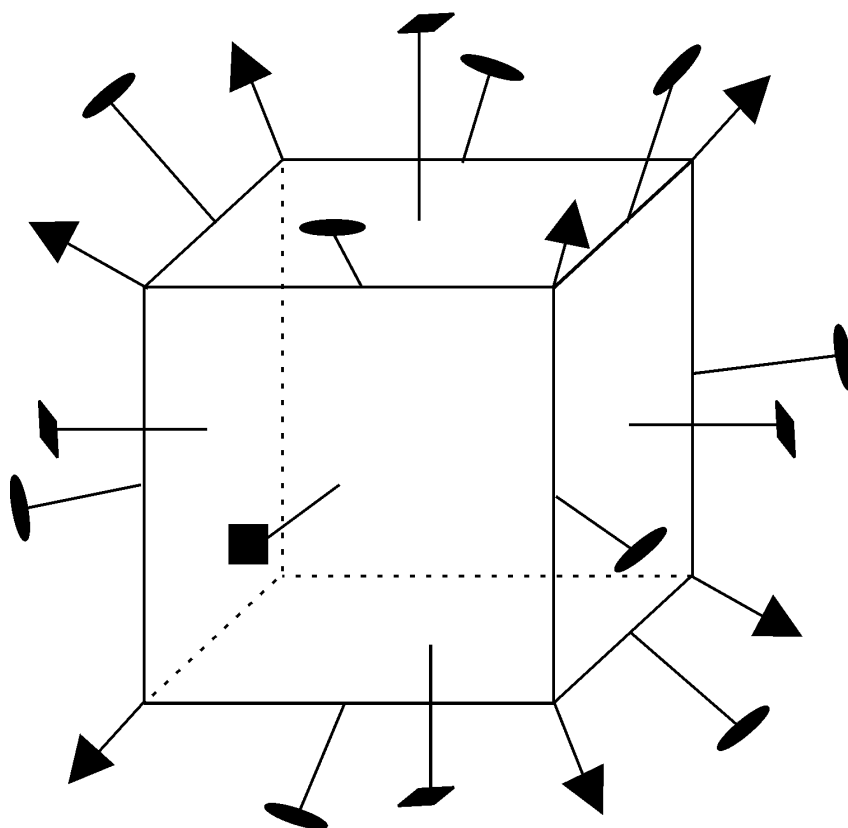


Рис. 5.7. Оси симметрии в кубе

Формально могут существовать оси  $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ , однако самостоятельным элементом симметрии является лишь ось  $\bar{4}$ .

Инверсионная ось первого порядка эквивалентна центру симметрии, инверсионная ось второго порядка — перпендикулярной ей плоскости симметрии, то есть

$$\bar{1} \equiv C ; \quad \bar{2} \equiv m .$$

Инверсионная ось третьего порядка может рассматриваться как совокупность отдельно действующих поворотной оси 3 и центра симметрии:

$$\bar{3} = 3 + C, \quad \text{а инверсионная ось} \quad \bar{6} = 3 + m .$$

В этом нетрудно убедиться, рассматривая на гномостереографической проекции расположение точек, симметричных относительно осей  $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$  (рис. 5.8).

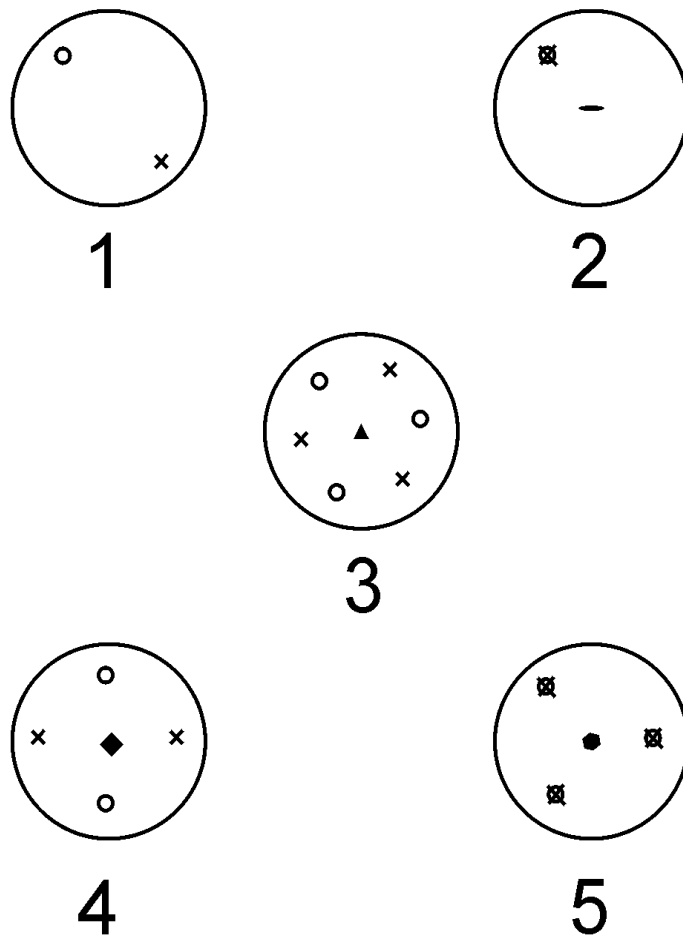


Рис. 5.8. Расположение точек, симметричных относительно инверсионных осей 1, 2, 3, 4, 6 (гномостереографическая проекция)

### 5.3. ПОНЯТИЕ О КЛАССЕ СИММЕТРИИ

Каждый кристаллический многогранник обладает сочетанием, набором элементов симметрии; у одних кристаллов эти наборы элементов симметрии могут быть богатыми, у других — бедными. Сочетаясь друг с другом, элементы симметрии кристалла обязательно пересекаются, и при этом возможно появление новых элементов симметрии. В кристаллографии доказываются следующие теоремы сложения элементов симметрии:

1. Линия пересечения двух плоскостей симметрии есть ось симметрии, для которой угол поворота вдвое больше угла между плоскостями.
2. Через точку пересечения двух осей симметрии проходит третья ось симметрии.
3. В точке пересечения плоскости симметрии с перпендикулярной к ней осью симметрии четного порядка возникает центр симметрии.
4. Число осей второго порядка, перпендикулярных главной оси симметрии высшего порядка (третьего, четвертого, шестого), равно порядку главной оси.
5. Число плоскостей симметрии, пересекающихся по главной оси высшего порядка, равно порядку этой оси.

Число сочетаний элементов симметрии друг с другом в кристаллах строго ограничено. Все возможные сочетания элементов симметрии в кристаллах выводятся строго математически, принимая во внимание теоремы сложения элементов симметрии. Полный набор элементов симметрии, присущих данному кристаллу, называется его классом симметрии. Строгий математический вывод показывает, что все возможные для кристаллических многогранников сочетания элементов симметрии исчерпываются тридцатью двумя классами симметрии.

#### 5.4. СВЯЗЬ МЕЖДУ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РЕШЕТКОЙ И ЭЛЕМЕНТАМИ СИММЕТРИИ

Наличие тех или иных элементов симметрии определяет геометрию пространственной решетки, накладывая определенные условия на взаимное расположение координатных осей и равенство осевых единиц. Существуют общие правила выбора координатных осей, учитывающие набор элементов симметрии кристалла.

1. Координатные оси совмещают с особыми направлениями — поворотными или инверсионными осями, для которых порядок оси больше единицы, и нормальными к плоскости симметрии.

2. Если в кристалле только одно особое направление, с ним совмещают одну из координатных осей, обычно ось  $Z$ . Две другие оси располагают в плоскости, перпендикулярной особому направлению параллельно ребрам кристалла.

3. При отсутствии особых направлений координатные оси выбирают параллельно трем не лежащим в одной плоскости ребрам кристалла.

Исходя из этих правил, можно получить все семь кристаллических систем, или сингоний. Они отличаются друг от друга соотношением масштабных единиц  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и осевыми углами  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ . Три возможности:  $a \neq b \neq c$ ,  $a = b \neq c$ ,  $a = b = c$  позволяют распределить все кристаллографические координатные системы (сингонии) по трем категориям - низшей, средней и высшей (табл. 5.1). Каждая категория характеризуется наличием определенных элементов симметрии. Так, у кристаллов низшей категории нет осей высшего порядка, то есть осей 3, 4 и 6, а могут быть оси второго порядка, плоскости и центр симметрии. У кристаллов средней категории имеется ось высшего порядка, а также могут быть оси второго порядка, плоскости симметрии, центр симметрии. Самые симметричные кристаллы относятся к высшей категории. У них имеется несколько осей высшего порядка (третьего и четвертого), могут

быть оси второго порядка, плоскости и центр симметрии. Однако отсутствуют оси шестого порядка.

Таблица 5.1

### Классы симметрии кристаллов

Категория		Сингония			Классы симметрий
Название	Характерная симметрия	Название	Характерная симметрия	Расположение осей	Обозначение
Нет осей симметрии высшего порядка		Триклинная	Ось 1 или $\bar{1}$	По ребрам кристалла	$1(L_1), \bar{1}(C)$
		Моноклинная	Ось 2 или $m$	Ось оси 2 или перпендикулярна $m$	$2(L_2), m(P)$ $2/m(L_2PC)$
		Ромбическая	Три взаимно перпендикулярные оси 2 или плоскости $m$	Оси $X, Y, Z \parallel$ оси 2 или перпендикулярны $m$	$222(3L_2),$ $mmm(3L_23PC),$ $mm2(L_22PC)$
Одна ось высшего порядка		Тетрагональная	Одна ось 4 или $\bar{4}$	Главная ось вдоль $Z$ , остальные в плоскости $XY$	$4(L_2), 422(L_44L_2), 4mm$ $(L_44P), 4/m(L_4PC)$ $4/mmm$ $(L_44L_25PC), \bar{4} 2m(L_{i4}2L_22P),$ $\bar{4}(L_{i4})$
		Гексагональная	Одна ось 6 или $\bar{6}$		$6(L_6), 622(L_66L_2), 6mm(L_66P)$ $6/m(L_6PC), 6/mmm(L_66L_27PC)$ $\bar{6} m2(L_{i6}3L_23P), \bar{6}(L_{i6}=L_3P)$
		Ромбоэдрическая	Одна ось 3 или $\bar{3}$		$3(L_3), 32(L_33L_2), 3m(L_33P),$ $\bar{3}(L_{i3}), \bar{3} m(L_{i3}3L_23P=$ $L_33PC)$
Несколько осей высшего порядка		Кубическая	Четыре оси 3	Оси $X, Y, Z \parallel$ трем взаимно перпендикулярным осям 4, или $\bar{4}$ , или 2	$23(3L_24L_3), 3(3L_24L_33PC),$ $432(3L_44L_36L_2), m\bar{3}m$ $(3L_44L_36L_29PC),$ $\bar{4} 3m(3L_{i4}4L_36P)$

Обозначения в скобках представляют собой формулу симметрии — перечень всех элементов симметрии. Международный символ класса симметрии (без скобок) содержит обозначения лишь некоторых элементов симметрии, входящих в формулу симметрии. Эти элементы симметрии расположены в определенных кристаллографических направлениях.

В обозначении некоторых классов симметрии имеется черта (например,  $2/m$ ). Этот символ обозначает перпендикулярность плоскости симметрии и оси симметрии,

В триклинной сингонии могут быть только два класса симметрии. В классе 1 нет элементов симметрии, и формально обозначено наличие оси симметрии первого порядка  $L_1$ . В классе  $\bar{1}$  имеется центр симметрии

В моноклинной сингонии могут быть три класса симметрии. Они характеризуются наличием оси 2, или плоскости симметрии  $m$  ( $\bar{2}$ ), или взаимоперпендикулярных плоскости симметрии  $m$  и оси 2; При выборе элементарной ячейки ось  $Z$  совмещают с осью 2 и  $\bar{2}$ , оси  $X$  и  $Y$  с ребрами, расположенными в плоскости, перпендикулярной оси  $Z$ . Поэтому осевые углы элементарной ячейки  $\alpha=\gamma=90^\circ$ ,  $\beta \neq 90^\circ$ .

При наличии трех взаимоперпендикулярных осей 2 или  $\bar{2}$  (ромбическая сингония) координатные оси элементарной ячейки совмещают с осями симметрии. Отсюда следует равенство осевых углов  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ .

В кристаллах средней категории в качестве оси  $Z$  выбирают ось высшего порядка, оси  $X$  и  $Y$  — в плоскости, перпендикулярной оси  $Z$  (вдоль осей второго порядка, а если их нет, то параллельно ребрам кристалла) — в тетрагональной и гексагональной сингониях осевые углы  $\alpha=\beta=90^\circ$ .

Угол  $\gamma$  между осями  $X$  и  $Y$  определяет порядок главной оси:  $\gamma=90^\circ$  для оси четвертого порядка (тетрагональная сингония) и  $\gamma=120^\circ$  для оси третьего (ромбоэдрическая) и шестого порядка (гексагональная сингония). Отсюда также следует равенство осевых единиц вдоль осей  $X$  и  $Y$  ( $a = b$ ).

Международный символ класса симметрии средней категории обязательно на первом месте содержит обозначение оси высшего порядка (третьего, четвертого, шестого), совпадающего с осью  $Z$  элементарной ячейки. На втором месте в символе класса симметрии ставится обозначение элемента симметрии, совпадающего с осями  $X$  и  $Y$ , если он есть. На третьем месте указывается элемент симметрии (если он есть), расположенный вдоль биссектрисе угла между осями  $X$  и  $Y$ .

В кубической сингонии главным элементом симметрии являются четыре оси третьего порядка. Координатные оси  $X, Y, Z$  элементарной ячейки выбирают так, чтобы они были равно наклонены к осям третьего порядка. При этом оси третьего порядка оказываются пространственными диагоналями куба. Классы симметрии кубической сингонии в международном символе содержат обозначения следующих элементов симметрии: на первом месте ставится обозначение элемента симметрии совпадающего с координатными осями  $X, Y, Z$ , т.е. с направлениями типа  $\langle 100 \rangle$ , на втором месте с пространственными диагоналями куба, т.е. с направлениями  $\langle 111 \rangle$ , на третьем месте — с диагоналями граней ( $\langle 110 \rangle$ ).

Правила записи международного символа класса симметрии различных сингоний приведены в табл. 5.2.

Таблица 5.2

**Правила составления международного символа класса симметрии.**

Сингония	Место символа		
	Первое	Второе	Третье
Триклинная	Только один символ, соответствующий любому направлению в кристалле		
Моноклинная	Единственная ось 2 или плоскость $m$ по оси $Y$		
Ромбическая	Ось 2 или плоскость $m$ вдоль $X$	ось 2 или плоскость $m$ вдоль $Y$	ось 2 или плоскость $m$ вдоль $Z$
Ромбоэдрическая, гексагональная, тетрагональная	Главная ось симметрии (вдоль $Z$ )	Оси 2 или $m$ вдоль $X, Y$	Диагональные оси 2 или плоскости $m$
Кубическая	Координатные элементы симметрии (вдоль $X, Y, Z$ )	Оси 3	Диагональные элементы симметрии

### 5.5. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

В заданных многогранниках:

- 1) указать все элементы симметрии;
- 2) записать формулу симметрии;
- 3) найти определяющий элемент симметрии;

- 4) определить сингонию;
- 5) записать класс симметрии;

### **Пример выполнения задания**

В качестве многогранника возьмем куб.

1. На рис. 5.5 показано расположение одной из осей третьего порядка. Действительно, пространственная диагональ  $B_1D$  является поворотной осью третьего порядка поворот фигуры на угол  $120^\circ$  вокруг этой оси в направлении, указанной стрелкой, совместит вершину  $A_1$  с вершиной  $B$ , вершина  $B$  займет положение вершины  $C_1$ , вершина  $C_1$  займет положение вершины  $A_1$ . Аналогично ребро  $A_1B_1$  займет положение ребра  $B_1B$ , ребро  $B_1B$  станет на место ребра  $B_1C_1$ , ребро  $D_1C_1$  - на место  $A_1B_1$  и т.д. Вершины  $B_1$  и  $D$ , через которые проходит ось симметрии, останутся на своих местах. Диагональ  $B_1D$  является осью симметрии третьего порядка, поскольку за один полный оборот вокруг  $B_1D$  куб трижды совместится со своим исходным положением.

Кроме  $B_1D$ , остальные три пространственные диагонали ( $AC_1$ ,  $A_1C$ ,  $BD_1$ ) также являются поворотными осями третьего порядка.

На рис. 5.6 показано расположение одной из осей четвертого порядка. Она проходит через середины двух параллельных граней куба. При повороте вокруг нее на угол  $90^\circ$  обмениваются местами вершины  $D$  и  $C$ ,  $C$  и  $B$  и т.д., ребра  $CD$  и  $BC$  и т.д. Осей симметрии четвертого порядка три, они проходят через середины параллельных граней куба.

Кроме осей третьего и четвертого порядка, в кубе можно указать оси второго порядка. Они соединяют середины противоположащих параллельных ребер (рис. 5.4). Действительно, при повороте вокруг такой оси на угол  $180^\circ$  обмениваются местами: вершины  $A$  и  $A_1$ ,  $C$  и  $C_1$ , ребра  $BB_1$  и  $DD_1$  и т.д. Осей симметрии второго порядка в кубе шесть.

В кубе имеются также плоскости симметрии. Три из них расположены параллельно граням куба, остальные шесть являются диагональными плоскостями  $\{110\}$  - (рис. 5.3). Центр симметрии куба



находится в  
его центре (рис. 5.2).

2. Учитывая все найденные элементы симметрии куба, получим его формулу симметрии  $4L_3 3L_4 6L_2 9PC$ .

3. Определяющим элементом симметрии следует считать четыре оси третьего порядка ( $4L_3$ ).

4. Наличие четырех осей третьего порядка определяет сингонию — кубическую.

5. Международный символ записи класса симметрии, соответствующий полученной формуле симметрии, —  $m\bar{3}m$ .

### 5.6. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ:

1. Какие элементы симметрии характерны для сплошной кристаллической среды?
2. Что такое "класс симметрии" ? Сколько их существует ?
3. Как выбирают расположение координатных осей элементарной ячейки различных сингоний с учетом симметрии ячейки ?
4. Какие элементы симметрии определяют различные сингонии:  
триклинную,  
моноклинную,  
ромбическую,  
тетрагональную,  
гексагональную и ромбоэдрическую,  
кубическую?
5. Как расшифровывается символ класса симметрии?

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 6 СИММЕТРИЯ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ (СИММЕТРИЯ ДИСКОНТИНУУМА)

### 6.1. ПОНЯТИЕ О СИММЕТРИИ ДИСКОНТИНУУМА И ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЕ

Наличие 32 классов симметрии кристаллических многогранников показывает, что все многообразие, вся красота внешних форм кристалла подчиняется простым и строгим законам симметрии. Симметрия внутренней структуры кристаллов, расположения частиц (атомов, ионов, молекул) внутри кристаллов должна быть сложнее и богаче. Ведь внешняя форма кристаллов ограничена, а кристаллическая решетка простирается бесконечно во все стороны пространства.

Законы расположения частиц в кристаллах были установлены великим русским кристаллографом Е. С. Федоровым в 1891 г. Им было найдено 230 способов расположения частиц в пространственной решетке, 230 способов сочетания элементов симметрии друг с другом в кристаллических структурах — 230 пространственных групп симметрии.

Хотя симметрия пространственной решетки многообразнее и богаче, но и здесь действуют строгие математические законы. Е. С. Федоров вывел все возможные геометрические законы сочетания элементов симметрии в пространственных решетках, то есть законы симметрии расположения частиц внутри кристаллов. Пространственная группа представляет собой сочетание элементов симметрии, описывающее расположение частиц в кристаллах.

## **6.2. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РЕШЕТОК**

Законы симметрии дисконтинуума имеют свои особенности. Помимо описанных выше элементов симметрии (центр симметрии, плоскость симметрии, поворотные и инверсионные оси), в дискретной среде возможны и другие элементы симметрии, связанные с бесконечностью пространственной решетки и периодической повторяемостью в расположении частиц. Имеется и другое отличие. Если в кристаллических многогранниках элементы симметрии пересекаются в одной точке, то в пространственной решетке элементы симметрии периодически повторяются, то есть имеются серии взаимно параллельных осей, плоскостей и т.д.

Рассмотрим новые виды симметрии, присущие только дисконтинууму. Их три: трансляция, плоскость скользящего отражения и винтовая ось. Трансляция — это перенос всех частиц по параллельным направлениям в одну и ту же сторону на одинаковую величину. На рис. 6.1 показан симметричный бесконечный ряд фигурок (это могут быть какие-то группы атомов), расположение которых характеризуется единственным

элементом симметрии — трансляцией, показанной стрелкой. Трансляция является простым элементом симметрии, присущим каждой пространственной решетке. Комбинация трансляции с плоскостью симметрии приводит к появлению плоскости скользящего отражения, сочетание трансляции с поворотной осью создает винтовую ось.

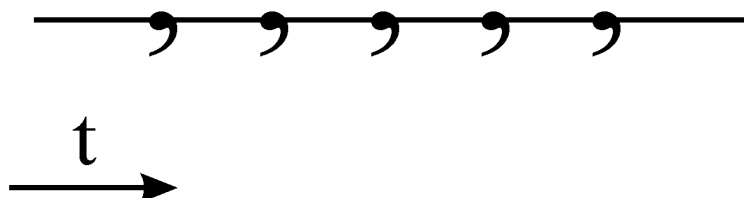


Рис. 6.1. Бесконечный ряд частиц с трансляцией  $t$

Плоскость скользящего отражения, или плоскость скольжения — это такая плоскость, при отражении в которой как в зеркале с последующей трансляцией вдоль направления, лежащего в данной плоскости, на величину, равную половине периода идентичности для данного направления, совмещаются все точки тела. Под периодом идентичности, как и ранее, будем понимать расстояние между точками вдоль какого-то направления (например, периоды  $a$ ,  $b$ ,  $c$  в элементарной ячейке — это периоды идентичности вдоль координатных осей  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ ). На рис. 6.2, а показано расположение частиц, симметричных относительно плоскости симметрии, а на рис. 6.2, б представлены частицы, расположенные симметрично относительно плоскости скольжения. На чертежах плоскость скольжения обозначается штриховой линией.

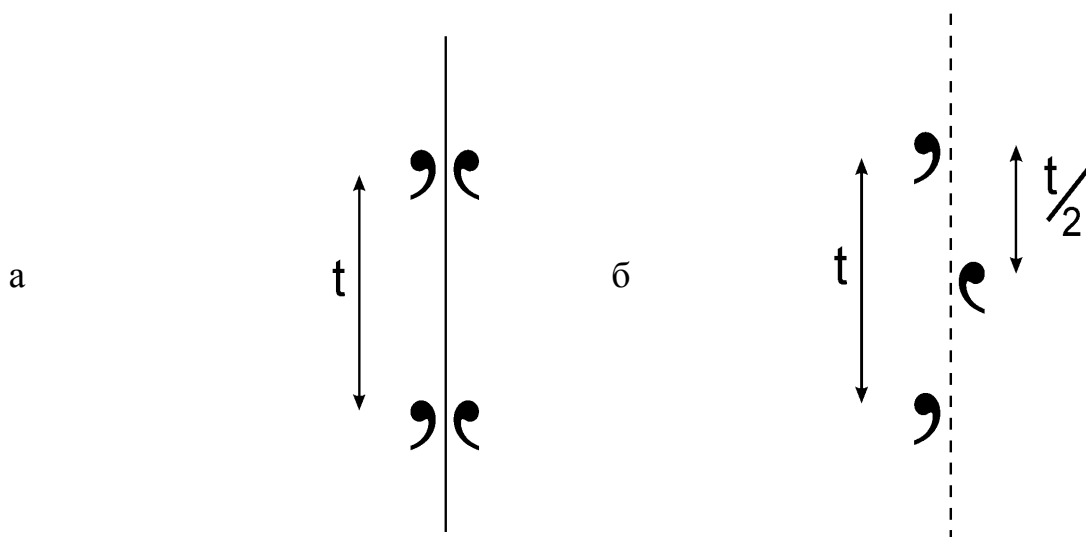


Рис. 6.2. Действие плоскости симметрии (а) и плоскости скольжения (б)

В зависимости от вида трансляции различают пять типов плоскостей скольжения (табл. 6.1).

Таблица 6.1.

Плоскости скользящего отражения

Обозначение плоскости скольжения	Направление трансляции	Величина трансляции
1	2	3
a	$\vec{a}$ (вдоль [100])	$\frac{a}{2}$
b	$\vec{b}$ (вдоль [010])	$\frac{b}{2}$
c	$\vec{c}$ (вдоль [001])	$\frac{c}{2}$
n	Диагональ нецентрированной грани (типа <110>)	$\frac{\bar{a} + \bar{b}}{2}$ , или $\frac{\bar{a} + \bar{c}}{2}$ , или $\frac{\bar{b} + \bar{c}}{2}$
d	Диагональ центрированной грани (типа <110>)	$\frac{\bar{a} + \bar{b}}{4}$ , или $\frac{\bar{a} + \bar{c}}{4}$ , или $\frac{\bar{b} + \bar{c}}{4}$

Винтовая ось — это прямая, поворот вокруг которой на некоторый угол, соответствующий порядку оси, с последующей трансляцией вдоль оси на величину, кратную периоду идентичности  $t$ , совмещает точки тела.

Обозначение винтовой оси в общем виде  $nS$ , где  $n$  характеризует порядок

поворотной оси ( $n = 1, 2, 3, 4, 6$ ), а  $\frac{S}{n}t$  — величину трансляции вдоль оси.

При этом  $S < n$ ,  $S$  — целое число, оно может принимать следующие значения  $S = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ . Итак, для винтовой оси второго порядка

трансляция составляет  $\frac{t}{2}$ , для винтовой оси третьего порядка

наименьший перенос  $\frac{t}{3}$

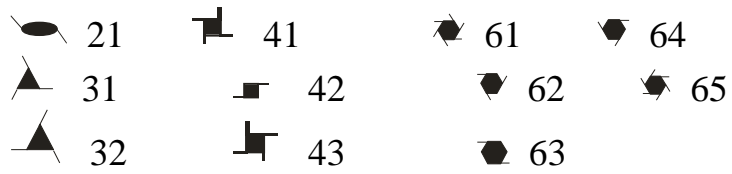
Обозначение винтовой оси второго порядка будет  $21$ . Совмещение частиц произойдет после поворота вокруг оси на  $180^\circ$  с последующей

трансляцией вдоль направления, параллельного оси, на  $\frac{t}{2}$ . Наименьший

перенос для винтовой оси третьего порядка равен  $\frac{t}{3}$  — ось  $31$ . Однако возможны оси с переносом, кратным наименьшему. Поэтому возможна

винтовая ось  $32$  с трансляцией  $\frac{2}{3}t$ . Оси  $31$  и  $32$  означают поворот вокруг оси на  $120^\circ$  по часовой стрелке с последующим переносом. Эти винтовые оси называются правыми. Если же поворот производить против часовой стрелки, то центовые оси симметрии называются левыми. При этом действие оси  $31$  правой тождественно действию оси  $32$  левой и  $32$  правой —  $31$  левой. Так же могут рассматриваться винтовые оси симметрии четвертого и шестого порядков: оси  $41$  и  $43$  оси  $61$  и  $65$ ,  $62$  и  $64$ . могут

быть правым и левыми. Действие осей 21, 42 и 63 не зависит от выбора направления вращения вокруг оси. Поэтому они являются нейтральными. Условные обозначения винтовых осей симметрии:



На рис. 6.3 показано действие поворотной оси симметрии 3 и винтовой 31.

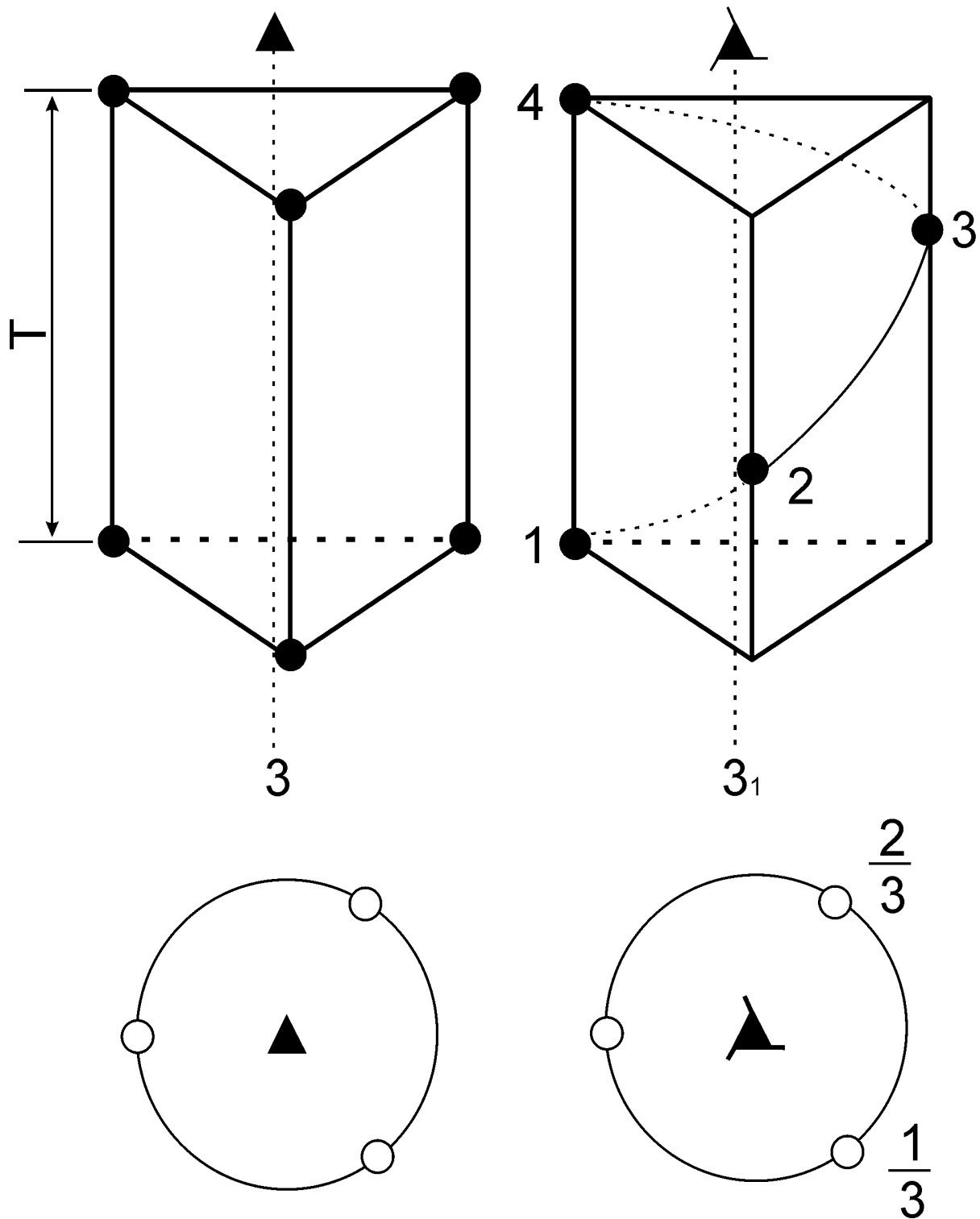


Рис. 6.3. Действие поворотной оси 3 (а) и винтовой 3<sub>1</sub> (б)

### 6.3. ОБОЗНАЧЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

Символ пространственной группы содержит полную информацию о симметрии кристаллической структуры. На первом-месте в символе

пространственной группы ставится буква, характеризующая тип решетки Браве, то есть трансляционную симметрию:

$P$  — примитивная,

$C$  — базоцентрированная,

$I$  — объемноцентрированная,

$F$  — гранецентрированная.

В ромбоэдрической сингонии на первом месте ставят букву  $R$ .

Далее следуют одно, два или три числа или буквы, указывающие элементы симметрии в главных направлениях, аналогично тому, как это делается при составлении обозначения класса симметрии.

Если в структуре в каком-нибудь из главных направлений одновременно располагаются и плоскости симметрии и оси симметрии, предпочтение отдается плоскостям симметрии, и в символ пространственной группы записываются плоскости симметрии. При наличии нескольких осей предпочтение отдается простым осям — поворотным и инверсионным, поскольку их симметрия является более высокой, чем симметрия винтовых осей.

Имея символ пространственной группы, легко можно определить тип решетки Браве, сингонию ячейки, элементы симметрии в главных направлениях. Так, пространственная группа  $P4_2 / mnm$  характеризует примитивную ячейку Браве в тетрагональной сингонии (винтовая ось четвертого порядка  $4_2$  определяет тетрагональную сингонию). В главных направлениях расположены следующие элементы симметрии. С направлением  $[001]$  — оси  $Z$  совпадает винтовая ось  $4_2$ , которая перпендикулярна симметрии  $m$ . В направлениях  $[100]$  и  $[010]$  (оси  $X$  и  $Y$ ) расположена плоскость скользящего отражения типа  $n$ , в направлении  $[110]$  проходит плоскость симметрии  $m$ .

#### 6.4. ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ

**Задача.** У модели кристаллической структуры железа:

- 1) найти элементы симметрии ;
- 2) выделить элементы симметрии в главных направлениях;
- 3) записать символ пространственной группы симметрии.

**Решение.**

1) Элементарная ячейка железа (рис. 6.4) представляет собой объемноцентрированный куб, то есть ячейка Браве *I* типа. В ней имеются характерные для куба элементы симметрии, описываемые формулой симметрии  $4L_33L_46L_29PC$ , а также трансляции  $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ ,  $\frac{\bar{a}+\bar{b}+\bar{c}}{2}$  плоскости скользящего отражения и винтовые оси.

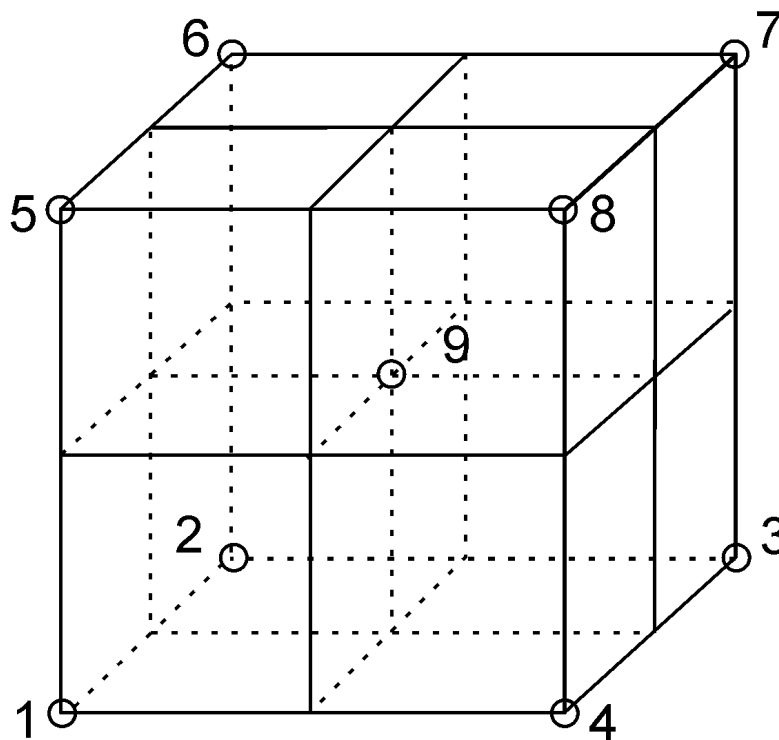


Рис. 6.4. Схема элементарной ячейки железа

На рис. 6.5 показана одна из плоскостей скользящего отражения типа *n*. Действительно, после отражения атома 4 относительно данной плоскости с последующей трансляцией вдоль направления диагонали грани на величину, равную ее половине, мы попадем в центр ячейки (атом 9). На рис. 6.6 изображена плоскость типа *C*. Отразив относительно нее атом 6 и перенеся его параллельно оси 2 на величину, равную половине периода идентичности *C*, мы совместим его с атомом 9. На рис. 6.7 представлена проекция структуры железа на грань (001), указано расстояние всех



атомов ячейки от плоскости проекций в осевых единицах и штрихами изображены плоскости скользящего отражения  $n$  и  $s$ , перпендикулярные этой грани.

В структуре железа имеются также плоскости скольжения типа  $a$  и  $b$ , в чем нетрудно убедиться, взяв проекцию ячейки на грани  $(100)$  и  $(010)$ .

В структуре железа легко найти винтовые оси  $4_2$  и  $2_1$ . На рис. 6.8. изображены оси  $4_2$  и  $2_1$ , параллельные координатной оси. На рис. 6.9 показана проекция структуры на плоскость грани  $(001)$ . Нетрудно убедиться, что указанные направления действительно являются винтовыми осями  $4_2$  и  $2_1$ . Повернув атом 4 (рис. 6.8) на  $180^\circ$  вокруг оси  $2_1$  и смещая его параллельно оси  $Z$  на величину  $\frac{c}{2}$ , попадем на место атома 9. Аналогичным образом, произведя поворот атома 1 вокруг оси  $4_2$  на угол  $90^\circ$  с последующей трансляцией на  $\frac{c}{2}$ , попадем на место атома 9. В структуре железа имеются также оси  $4_2$  и  $2_1$ , расположенные параллельно координатным осям  $X$  и  $Y$ .

2) Найдем элементы симметрии в главных направлениях  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  (рис. 6.10). Вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$  проходят поворотные оси четвертого порядка  $4$ , которым перпендикулярны плоскости симметрии. Последние вносятся в символ пространственной группы на втором месте. Вдоль направлений  $\langle 111 \rangle$  проходят поворотные оси третьего порядка  $3$ , которые запишутся на третьем месте в символе пространственной группы. Вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  проходят поворотные оси второго порядка, им перпендикулярны плоскости симметрии  $m$  и плоскости скольжения типа  $a$ ,  $b$ ,  $s$ . В символ пространственной группы на третьем месте запишутся только плоскости  $m$  поскольку из всех элементов симметрии отдается предпочтение плоскостям симметрии.

3) Символ пространственной группы железа  $Im\bar{3}m$ .

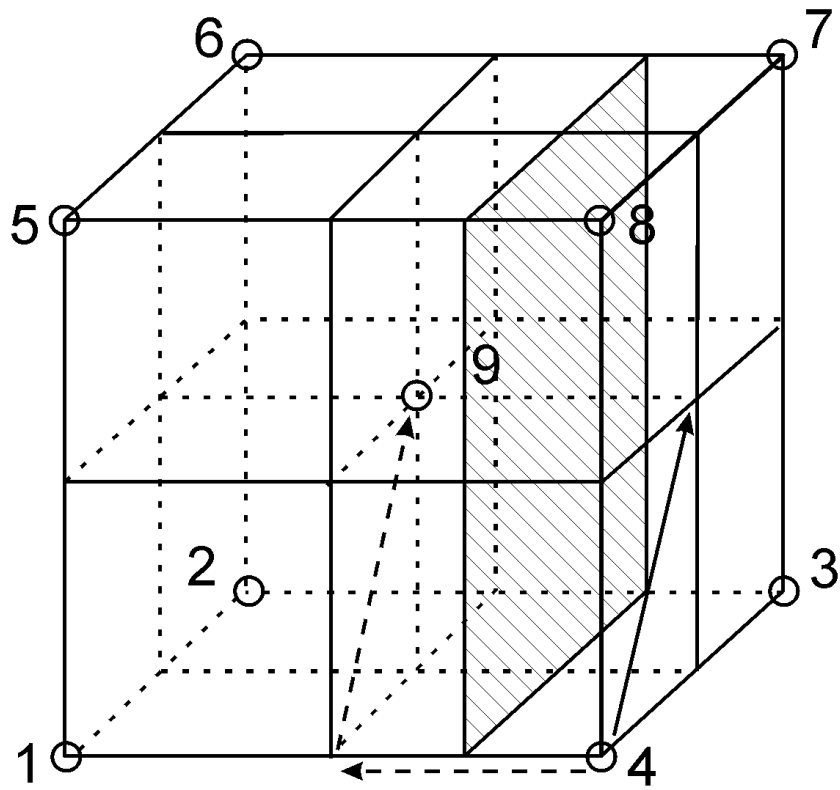


Рис. 6.5. Плоскость скользящего отражения типа  $n$  в решетке железа

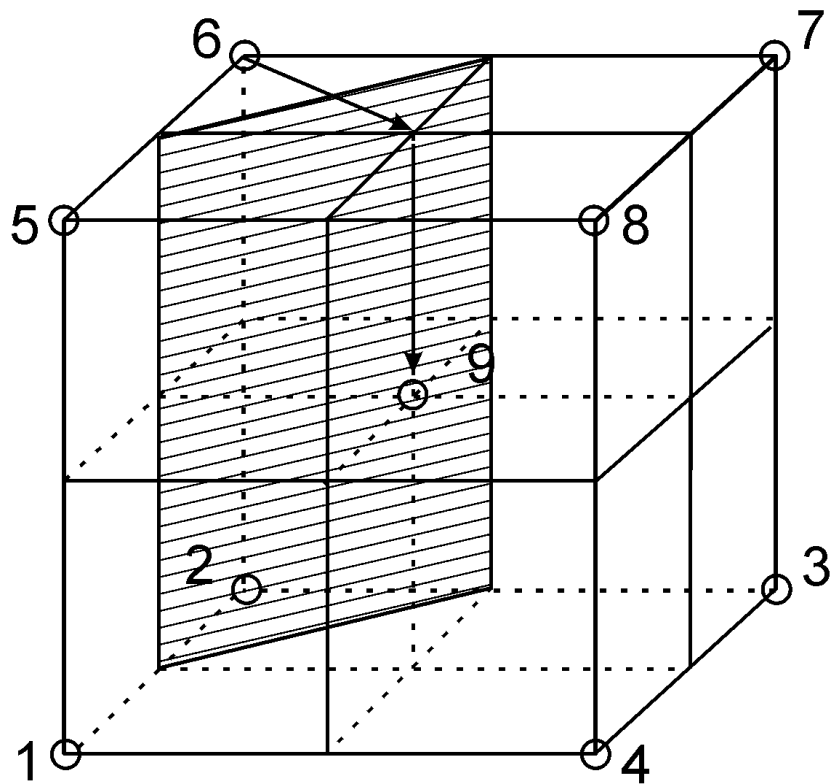


Рис. 6.6. Плоскость скользящего отражения типа  $C$  в решетке железа

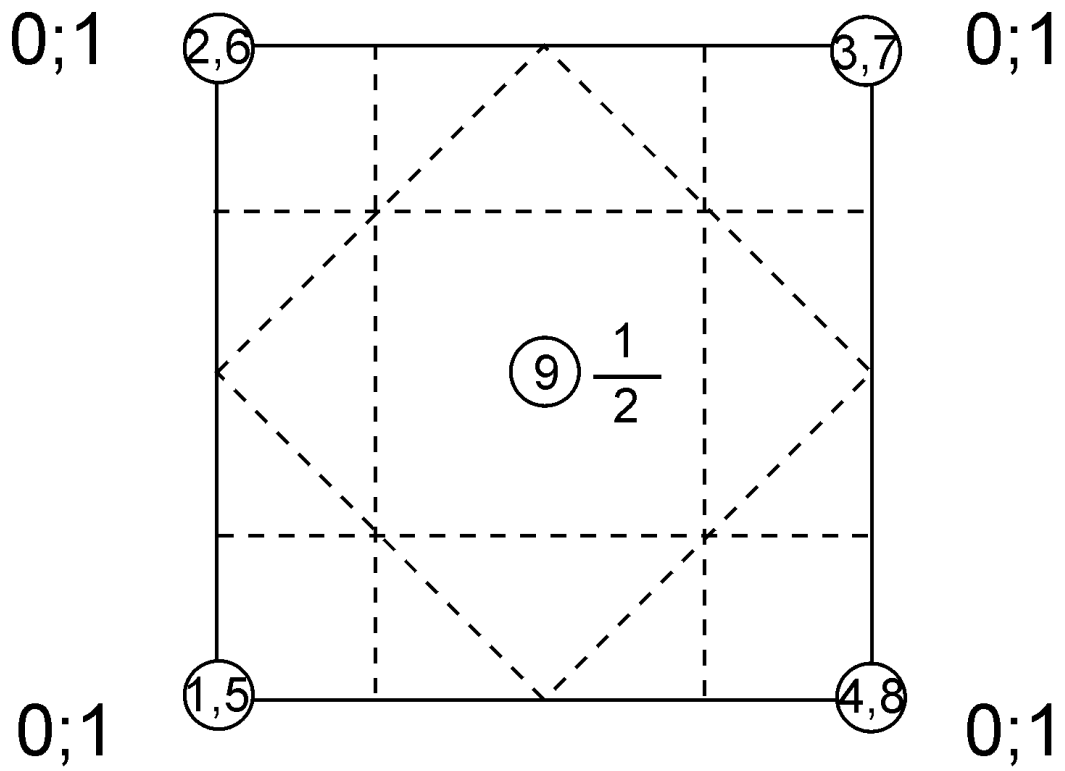


Рис. 6.7. Плоскость скользящего отражения типа  $C$  в решетке железа (проекция)

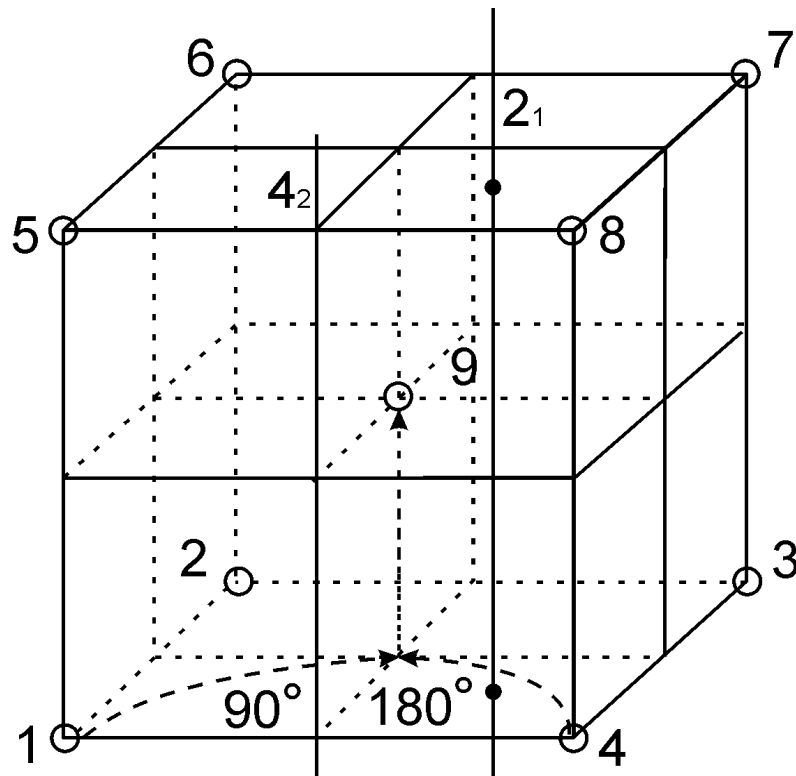


Рис. 6.8. Винтовые оси  $2_1$  и  $4_2$  в решетке железа

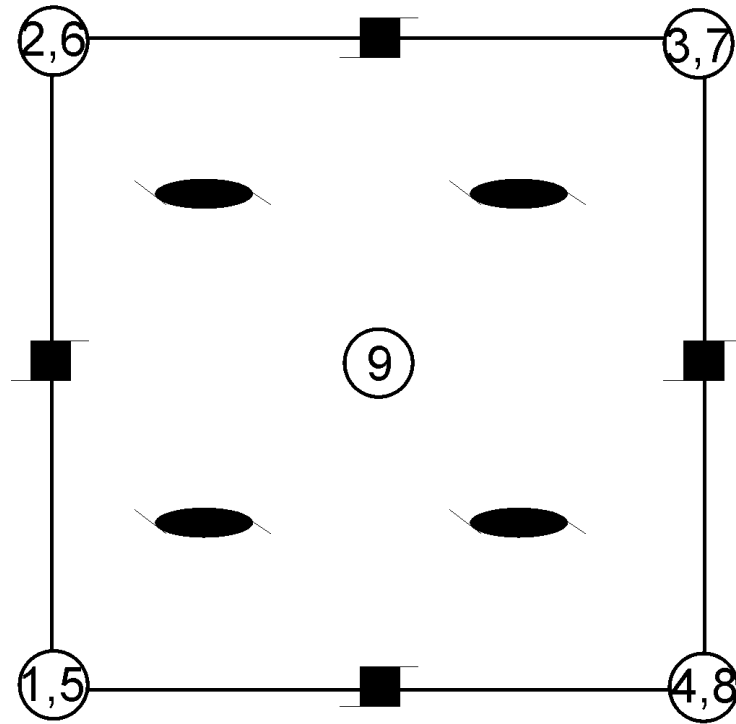


Рис. 6.9. Расположение винтовых осей в решетке железа (проекция)

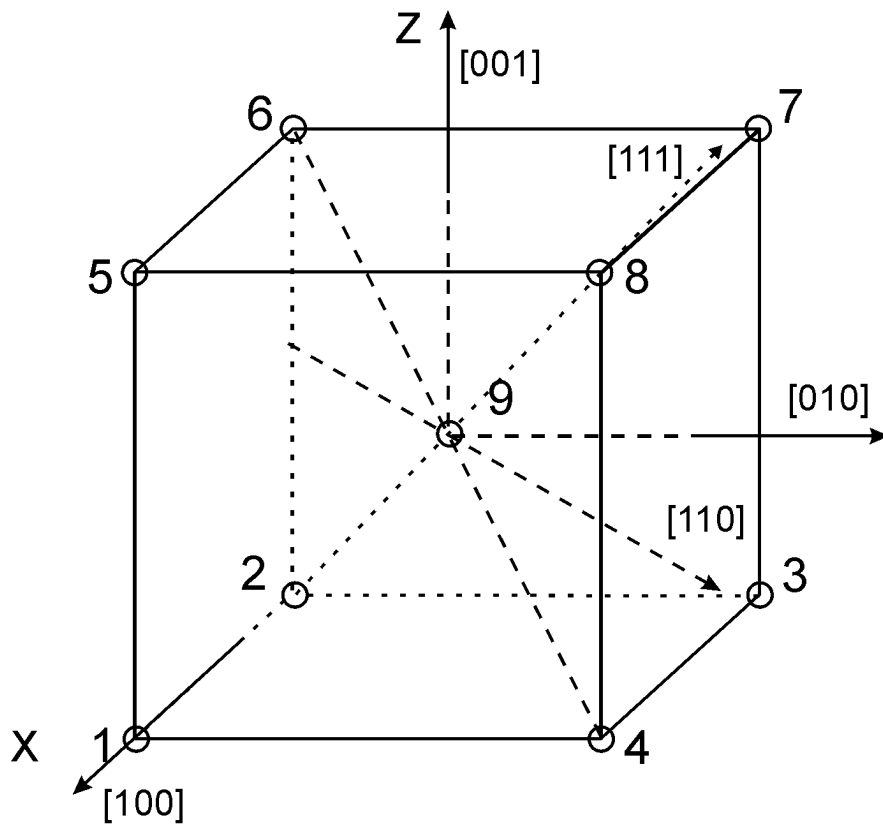


Рис. 6.10. Главные направления для кубической решетки железа

## 6.5. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

1. Определить элементы симметрии дисконтинуума.
2. Проанализировать символ заданной пространственной группы.
3. Определить тип ячейки Браве.
4. Указать сингонию.
5. Определить элементы симметрии в главных направлениях.

Символы пространственных групп для самостоятельной работы приведены в табл. 6.2.

Таблица 6.2

### Варианты заданий для самостоятельной работы

1	2	3	4	5	6	7
$P2_1$	$Pm3m$	$C2/m$	$Pna2_1$	$P6_3/m$	$Ia3d$	$P2_1/m$
8	9	10	11	12	13	14
$Pnma$	$P6_3mc$	$P4_2/mmc$	$P2_12_12_1$	$F\bar{4}3m$	$Fd3m$	$Ia3$
15	16	17	18	19	20	21
$P\bar{6}m2$	$I4/mcm$	$I4_1/a$	$I\bar{4}2d$	$P2_1/c$	$Pa3$	$Pca2_1$
22	23	24	25			
$P6_3/mmc$	$I4_1/amd$	$F222$	$Ibca$			

## 6.6. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие элементы симметрии характерны в дискретной кристаллической среде ?
2. Что такое плоскость скользящего отражения ?
3. Какого типа бывают плоскости скользящего отражения ? Чем они отличаются друг от друга?
4. Что такое винтовая ось ? Как обозначаются винтовые оси?
5. Что характеризует пространственная группа ?

6. Как составляется символ пространственной группы ?

## Список литературы

1. Попов, Г. М. Кристаллография/Г. М. Попов, И. И. Шафрановский. — М.: Высшая школа, 1972 — 352 с.
2. Бокий, Г. Б. Кристаллохимия/Г. Б. Бокий. — М.: Наука, 1971. — 400 с.
3. Келли, А. Кристаллография и дефекты в кристаллах: Пер. с англ./А. Келли, Г. Гровс. — М.: Мир, 1974. — 496 с.
4. Шаскольская, М. П. Кристаллография / М. П. Шаскольская. — М.: Высшая школа, 1982. — 375 с.
5. Васильев, Д. М. Физическая кристаллография/Д. М. Васильев.— М.: Металлургия, 1981.— 248 с.
6. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я. С. Уманский, Ю. А. Скаков, А. Н. Иванов, Л. Н. Расторгуев — М.: Металлургия, 1982 — 631 с.
7. Современная кристаллография / Под ред. акад. Б. К. Вайнштейна. — М.: Наука. Т. 1.— 1979.—383 с.; т. 2.— 1979—359 с.; т. 3.— 1980.— 407 с.; т. 4.—1981.—488 с.
8. Горелик, С. С. Рентгенографический и электроннооптический анализ / С. С. Горелик, Л. Н. Расторгуев, Ю. А. Скаков. — М.: Металлургия, 1970. — 368 с.
10. Кушта, Г. П. Введение в кристаллографию/Г. П. Кушта. — Львов: Вища школа, 1976. — 238 с.
11. Розин, К. М. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии / К. М. Розин, З. Б. Гусев. — М.: Металлургия, 1982. — 168 с.

