

ется три координатных плоскости и шесть диагональных, индекс у буквы O будет h .

1.2. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ РЕШЕТКА КРИСТАЛЛОВ

С макроскопической точки зрения кристалл есть однородное анизотропное тело. Однородность означает, что любые физические и физико-химические свойства кристалла одинаковы во всех его точках. При этом, когда идет речь об измерении свойств, то подразумевается, что измерения проводятся над такими объемами по величине, когда не проявляется дискретное атомное строение, т. е. когда $V=L^3 \gg a^3$, где L — длина измеряемого образца, a — наибольший из периодов решетки. Практически, при всех измерениях макросвойств образцы имеют такие размеры, что $L \gg a$ всегда выполняется.

Понятие однородности чрезвычайно полезно, поскольку позволяет рассматривать кристалл как непрерывную среду, для которой справедливо феноменологическое описание физических свойств без использования представлений о дискретном атомном строении. Основная особенность кристаллического состояния заключается в трехмерной периодичности расположения материальных частиц.

С учетом дискретного атомного строения кристаллы — это вещества, в которых составляющие их частицы (атомы, молекулы) расположены строго периодически, образуя геометрически закономерную кристаллическую структуру. Каждое кристаллическое вещество отличается от других кристаллических веществ по его атомной структуре. Вследствие закономерности и симметрии структуры кристаллы однородны и анизотропны. В структурной кристаллографии в понятие однородности, учитывающее дискретное строение кристалла из частиц одного или разных сортов, вкладывается определенный смысл. Кристалл называется однородным, если для любой точки, взятой внутри него, найдется точка, совершенно идентичная по свойствам первой и отстоящая от нее на некотором конечном расстоянии. Для кристаллов неорганических веществ, как это следует из экспериментов, это расстояние составляет около нескольких нанометров. Подчеркнем, что исходной может быть любая, необязательно связанная с каким-либо атомом точка.

Исходя из определения однородности и учитывая атомную дискретную структуру, можно показать, что идентичные точки (в дальнейшем мы будем именовать их узлами), связанные с первоначальной, произвольно выбранной точкой тремя некопланарными векторами переноса, их трансляциями, образуют трехмерную периодическую решетку, охватывающую все пространство кристалла. Так решетку назвали потому, что идентичные точки кристалла можно соединить трехмерной сет-

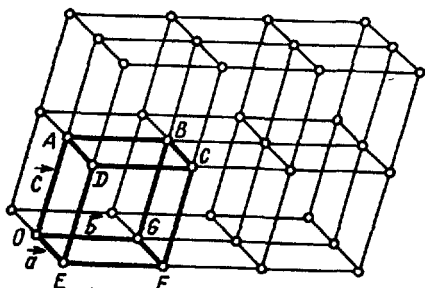


Рис. 1.2. Узловая решетка. Кружками обозначены «узлы» — идентичные точки.

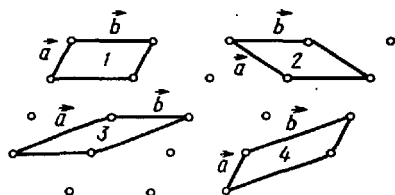


Рис. 1.3. Различные способы (1—4) выбора элементарной ячейки (двухмерный случай)

кой из прямых линий, как это показано на рис. 1.2. Следует различать понятия структура кристалла и пространственная решетка. Структура кристалла — это физическая реальность. Когда говорят о структуре кристалла, то имеют в виду конкретное расположение частиц (например, центров масс атомов) в кристаллическом пространстве. Пространственная же решетка, основная роль которой сводится к размножению идентичных точек, не обязательно материальных, является лишь геометрическим построением, помогающим выявить законы симметрии структуры кристалла.

Решетку можно описать с помощью периодически повторяющегося в пространстве элементарного параллелепипеда — элементарной ячейки (O, A, B, C, D, E, F, G на рис. 1.2), построенной на трех некопланарных векторах переноса, или единичных трансляциях $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, которые могут быть выбраны, вообще говоря, бесчисленным количеством способов (рис. 1.3). Трансляции действуют не на какую-нибудь одну точку решетки, а на всю решетку в целом. Началом трех векторов трансляций можно выбрать любую точку. Если какой-нибудь узел выбран

за начало отсчета, то радиус-вектор \vec{R} любого другого узла решетки может быть определен из формулы

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}, \quad (1.1)$$

где m, n, p — числа, которые обычно выражают в долях ребер ячейки и называют индексами данного узла. Совокупность трех индексов обычно записывают в двойных квадратных скобках $[[m\ n\ p]]$ и называют символом узла.

Элементарная ячейка в общем случае представляет собой косоугольный параллелепипед с ребрами $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, и углами α ($=\widehat{b\ c}$), β ($=\widehat{c\ a}$) и γ ($=\widehat{a\ b}$) (рис. 1.4). Шесть указанных величин называют параметрами решетки. Параметры \vec{a}, \vec{b} и \vec{c} , оп-

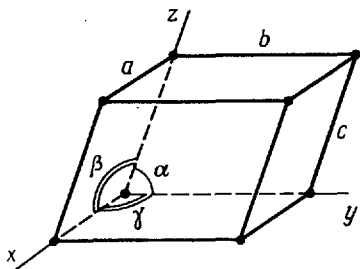


Рис. 1.4. Элементарная ячейка, с параметрами a , b , c , α , β , γ , характеризующими пространственную решетку в целом; x , y , z — кристаллографическая система координат

ределяющие размер элементарной ячейки, часто называют *постоянными решетки*.

Элементарный параллелепипед, построенный на кратчайших трансляциях a , b и c , является *основным параллелепипедом решетки*. Такой параллелепипед не имеет дополнительных узлов ни в какой точке внутри или на поверхности, кроме вершин, его называют *примитивным* или *примитивной элементарной ячейкой*. На объем основного примитивного элементарного параллелепипеда приходится один узел решетки. В самом деле, каждый

узел, находящийся в вершине параллелепипеда, принадлежит одновременно восьми параллелепипедам, значит, каждому параллелепипеду этот узел принадлежит на $1/8$. Поскольку вершин у параллелепипеда восемь, то полностью ему принадлежит $8 \times 1/8 = 1$ узел. Выше мы говорили, что возможны различные способы выбора элементарной ячейки (см. рис. 1.3), а это означает, что мы можем выбрать элементарную ячейку так, что ее объем равен объему основной (примитивной) элементарной ячейки, и на этот объем приходится один узел решетки, хотя трансляции в этом случае и не являются кратчайшими. Так, например, на рис. 1.3 ячейка 1 построена на кратчайших трансляциях \vec{a} и \vec{b} и является основной, а в ячейках 2, 3 и 4 — только одна кратчайшая трансляция \vec{b} , трансляция же \vec{a} уже не кратчайшая. Площади ячеек 2, 3, 4 одинаковы и равны площади основной ячейки 1 (высота всех параллелограммов одинакова и равна расстоянию между соседними узловыми рядами). Аналогичная ситуация, как легко показать, имеет место и при выборе элементарного параллелепипеда. Таким образом, свойство примитивности (наличие одного узла на объем элементарной ячейки) основная элементарная ячейка разделяет с бесчисленным множеством других. Принято примитивную ячейку обозначать буквой P .

Иногда целесообразно выбрать элементарную ячейку не примитивную, а большего объема. Это связано с тем, что примитивный параллелепипед может оказаться косоугольным, а расчеты, например, при определении структуры кристалла всегда удобнее производить не в косоугольной системе координат (ребра элементарной ячейки, как правило, принимают за оси координат), а в прямоугольной. Ясно, что выбранная в прямо-

угольной системе координат ячейка в отличие от примитивной помимо узлов в вершинах должна содержать дополнительные узлы, и объем такой ячейки больше объема примитивной. Сложная ячейка характеризуется координатами узлов. Совокупность координат узлов, приходящихся на элементарную ячейку, называют *базисом ячейки*. Обычно сложную элементарную ячейку выбирают так, чтобы дополнительные узлы находились либо в центрах граней, либо в центре объема. Ниже приводится перечень наиболее распространенных ячеек.

Объемно-центрированная ячейка (рис. 1.5). В такой ячейке дополнительный узел лежит на пересечении телесных диагоналей (узел *B*). На такую ячейку приходится два узла: узел *A* в вершине ячейки с координатами $[[000]]$ и другой, *B*, находящийся в центре ячейки, принадлежит полностью ячейке и имеет координаты $[[1/2 \ 1/2 \ 1/2]]$. Координаты даны в долях соответствующего периода ячейки — $1/2 a$, $1/2 b$, $1/2 c$.

Базис ячейки: $[[000]]$; $[[1/2 \ 1/2 \ 1/2]]$.

Для того чтобы подчеркнуть, что ячейка является центрированной по объему, условились такую ячейку называть *I*-ячейкой.

Базоцентрированная ячейка — это⁶ ячейка, у которой центрировано основание (рис. 1.6). Такую ячейку еще называют *C*-ячейкой для того, чтобы указать на то, что центрирована грань, перпендикулярная оси *c*. На базоцентрированную ячейку приходится два узла: *A* — в вершине с координатами $[[000]]$ и узел *B* в грани *C* с координатами $[[1/2 \ 1/2 \ 0]]$. Легко видеть, что узел *B* принадлежит грани только наполовину, поскольку вторая половина принадлежит соседней ячейке. Но так как граней в ячейке две, то ячейке принадлежит $2 \times 1/2 = 1$ узел, находящийся в грани.

Базис ячейки: $[[000]]$; $[[1/2 \ 1/2 \ 0]]$.

Боцоцентрированная ячейка (рис. 1.7). Таких ячеек может быть две: *A* — ячейка, когда центрирована грань, перпендикулярная оси *a*; и *B*-ячейка — центрирована грань, перпендикулярная оси *b*.

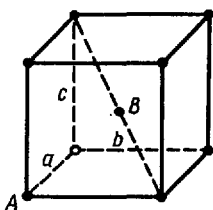


Рис. 1.5. Объемно-центрированная ячейка, или *I*-ячейка

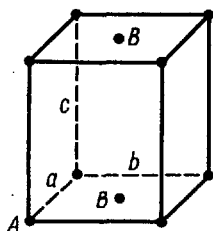


Рис. 1.6. Базоцентрированная ячейка, или *C*-ячейка (центрирована грань, перпендикулярная оси *c*)

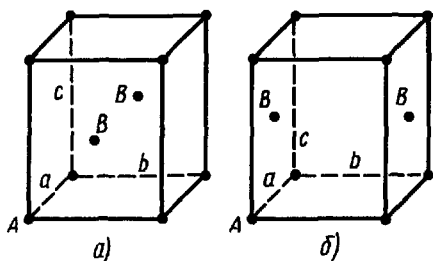


Рис. 1.7. Бокоцентрированная ячейка: а) А-ячейка, б) В-ячейка

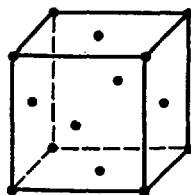


Рис. 1.8. Гранецентрированная ячейка, или F-ячейка

лярная ось b (дополнительные узлы лежат в центрах соответствующих граней). Снова на такую ячейку приходится два узла, координаты которых такие: узел А — $[[000]]$ и узел В — $[[1/2 0 1/2]]$ либо $[[0 1/2 1/2]]$.

Гранецентрированная, или F-ячейка (рис. 1.8). Дополнительные узлы находятся в центрах граней. На ячейку приходится четыре узла. Базис ячейки: $[[000]]$; $[[0 1/2 1/2]]$; $[[1/2 0 1/2]]$; $[[1/2 1/2 0]]$.

1.3. ТРАНСЛЯЦИОННАЯ СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ КООРДИНАТ. 14 ТРАНСЛЯЦИОННЫХ РЕШЕТОК БРАВЭ

В кристаллографии для аналитического описания кристаллов пользуются трехмерной системой координат, которую выбирают в соответствии с симметрией кристалла. Декартова система координат в кристаллографии неудобна, поскольку она, являясь прямоугольной и с одинаковыми масштабами по осям, не позволяет достаточно полно и наглядно отразить основные особенности кристаллов — симметрию и анизотропию. Оси координат, как правило, совпадают с ребрами элементарной ячейки, характеризуемой шестью параметрами $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ (см. рис. 1.4 и табл. 1.1).

При выборе кристаллографических осей необходимо придерживаться правил (см. табл. 1.1), принятых в кристаллографии и обязательных для всех исследователей. Выполнение этих правил сводит к минимуму возможный в этом случае произвол. Следует всегда помнить, что от расположения осей координат зависят кристаллографические индексы, определяющие положение узловых плоскостей и направлений в кристалле.

Оси — ребра элементарной ячейки — выбирают таким образом, чтобы они совпадали с особыми и прежде всего с глав-