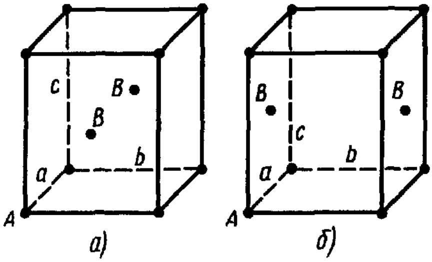

Рис. 1.7. Бокоцентрированная ячейка: а) A-ячейка, б) B-ячейка

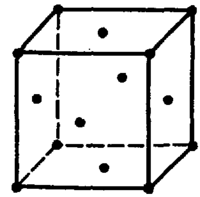

Рис. 1.8. Гранецентрированная ячейка, или F-ячейка

лярная оси b (дополнительные узлы лежат в центрах соответствующих граней). Снова на такую ячейку приходится два узла, координаты которых такие: узел A — [[000]] и узел B — [[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, α, β, γ (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-

Таблица 1.1 Распределение классов по сингониям и правила кристаллографической установки

Сингония и параметры основного параллелепипеда	Классы симметрии, их обозначение		Принятые правила расположения осей
	по Шенфлису	международные	
Триклинная $a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	1. C_1 2. $C_i = S_2$	1 $\bar{1}$	По ребрам кристалла $c < a < b$
Моноклинная $a \neq b \neq c$; $\alpha = \gamma = = 90° \neq \beta$	3. C_2 4. $C_{1h} = C_s$ 5. C_{2h}	2 m $2/m$	Ось y вдоль оси 2 или вдоль нормали к плоскости m
Ромбическая $a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	6. $D_2 = V$ 7. C_{2v} 8. $D_{2h} = V_h$	222 $mm2$ mmm	Оси x, y, z вдоль трех взаимно перпендикулярных осей 2 или вдоль нормалей к плоскостям
Тетрагональная $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	9. C_4 10. S_4 11. D_{4v} 12. C_4 13. C_{4h} 14. $D_{2d} = V_d$ 15. D_{4h}	4 $\bar{4}$ 422 $4mm$ $4/m$ $\bar{4}2m$ $4/mmm$	Ось 4 или $\bar{4}$ — ось z. Остальные — в плоскости xy
Гексагональная $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$	16. C_3 17. $C_{3i} = S_6$ 18. D_3 19. C_{3v} 20. D_{3d} 21. C_6 22. C_{3h} 23. D_6 24. C_{6v} 25. C_{6h} 26. D_{3h} 27. D_{6h}	3 $\bar{3}$ 32 $3m$ $\bar{3}m$ 6 $\bar{6}$ 622 $6mm$ $6/m$ $\bar{6}m2$ $6/mmm$	Ось 6 или $\bar{6}$ (ось 3 или $\bar{3}$ в тригональной сингонии) — ось z, остальные — в плоскости xy
Кубическая $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	28. T 29. O 30. T_x 31. T_h 32. O_h	23 432 $\bar{4}3m$ $m3$ $m3m$	Оси x, y, z параллельны трем взаимно перпендикулярным осям 4 или $\bar{4}$ или 2

ными особыми (одиночными для данного кристалла, например, для шестигранной призмы таким одиночным направлением является ось шестого порядка) направлениями решетки и были равны кратчайшим трансляциям в этих направлениях. Особыми направлениями являются оси симметрии или нормали к плоскостям симметрии. Если особых направлений нет, то ребра

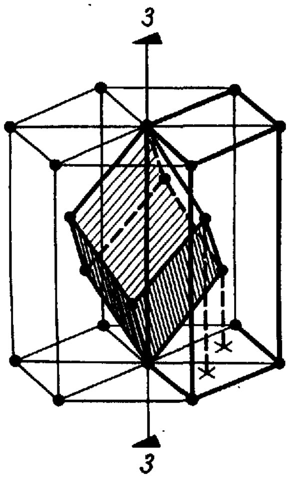

Рис. 1.9. Элементарная ячейка, дважды центрированная по объему гексагональная, решетка (жирные линии) и соответствующая ей ромбоэдрическая ячейка. Базис гексагональной ячейки: [[000]]; [[2/3, 1/3, 1/3]]; [[1/3, 2/3, 2/3]]

ячейки выбирают по рядам кристаллической решетки или по ребрам кристаллического многогранника.

При таком выборе элементарных ячеек все кристаллы можно объединить в шесть кристаллографических систем координат или сингоний (табл. 1.1). В каждой сингонии объединяются те кристаллы, для которых одинакова симметрия элементарных ячеек их структур и одинакова система осей координат.

Во многих учебниках по кристаллографии седьмой сингонией считают тригональную, которой соответствует ромбоэдрическая примитивная ячейка. Однако легко видеть (рис. 1.9), что эта ячейка не удовлетворяет правилам выбора осей координат — в ней нет ни ребра, параллельного главному особому (одиночному) направлению, а именно тройной оси, ни ребер, параллельных особым направлениям. Выделение из гексагональной сингонии тригональной связано с тем обстоятельством, что гексагональные и ромбоэдрические кристаллы имеют, как мы увидим ниже, различные примитивные решетки Бравэ (табл. 1.2).

Каждую кристаллическую структуру можно охарактеризовать определенным набором элементарных трансляций. В зависимости от отношения значений и взаимной ориентации основных трансляций a, b, c получаются решетки, отличающиеся друг от друга по своей симметрии. Симметрия кристаллического пространства ограничивает число возможных решеток.

В 1848 г. О. Бравэ математическим путем удалось доказать, что существует всего 14 типов трансляционных решеток, отличающихся по своей симметрии. Бравэ были сформулированы три условия, последовательное выполнение которых позволяет из бесчисленного множества элементарных ячеек выбрать одну определенную, характеризующую всю решетку в целом. Эти условия следующие:

1) сингония выбранной ячейки дложна быть такой же, как и сингония всей решетки, т. е. ее симметрия должна соответствовать симметрии всей решетки (симметрия ячейки должна максимально совпадать с точечной симметрией кристалла);

2) число прямых углов и равных сторон должно быть максимальным;

Таблица 1.2. **Трансляционные решетки Бравэ**

Сингония	Решетка				
	Примитивная P	Базоцентрированная C	Объемноцентрированная J	Гранецентрированная F	Ромбоэдрическая R
Триклинная					
Моноклинная					
Ромбическая					
Тетрагональная					
Гексагональная					
Кубическая					

3) при соблюдении первых двух условий объем ячейки должен быть минимальным.

Таким образом, при стандартном выборе элементарной ячейки в соответствии с внешней симметрией кристалла (правила установки см. в табл. 1.1) и соблюдении трех выше приведенных условий любая кристаллическая структура может быть представлена с помощью одной из 14 топологических различных решеток Бравэ (табл. 1.2). Среди этих 14 решеток только шесть (с учетом примитивной ромбоэдрической ячейки — семь) являются примитивными, по которым и различают кристаллографические сингонии. Оставшиеся восемь решеток имеют дополнительные узлы, т. е. такие решетки являются центрированными. Таких «дополнительных» узлов может быть только один, два, три, и они располагаются либо в объеме решетки, либо в гранях.

Ранее было показано, что свойство примитивности (наличие одного узла на объем элементарной ячейки) основная элементарная ячейка разделяет с бесчисленным множеством других. Поэтому всегда можно выбрать такую примитивную ячейку, которая обладала бы полной симметрией решетки Бравэ. Дирихле был предложен один из приемов построения таких ячеек. При построении ячейки произвольно выбранный узел решетки Бравэ (рис. 1.10—1.12) соединяют прямыми линиями с ближай-

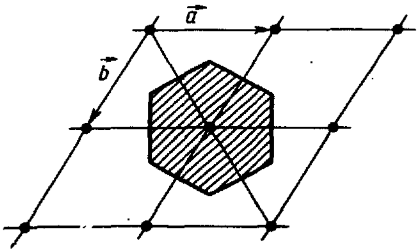

Рис. 1.10. Область Вороного - Дирихле (заштрихована), двумерный случай; $\vec{a}$ и $\vec{b}$ — единичные векторы трансляций ячейки Бравэ

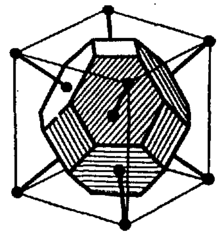

Рис. 1.11. Область Вороного - Дирихле для объемноцентрированной кубической решетки Бравэ. Усеченный октаэдр

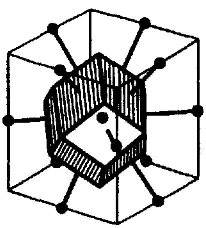

Рис. 1.12. Область Вороного-Дирихле для гранецентрированной кубической решетки Бравэ. Ромбический додекаэдр. При построении в качестве исходного выбран узел в центре грани

шими эквивалентными узлами; затем проводят плоскости, перпендикулярные этим прямым и проходящие через их середину. В результате получают замкнутую область пространства с центром в выбранном узле, все точки которой лежат ближе к нему, чем к любому другому узлу решетки. Объем ячейки Дирихле равен объему основной примитивной ячейки, построенной на кратчайших трансляциях решетки. Такую область в реальном пространстве называют областью Вороного—Дирихле, а в обратном пространстве — ячейкой Вигнера—Зейтца. Такие ячейки используются для описания энергетических зон в кристаллах.

1.4. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИМВОЛЫ УЗЛОВЫХ ПЛОСКОСТЕЙ И ПРЯМЫХ

В кристаллографии принято плоскости и прямые проводить через узлы пространственной решетки, отсюда и название «узловые плоскости» и «узловые прямые». В дальнейшем нас будут интересовать только такие плоскости и прямые.

Узловые плоскости. Всякая плоскость, которая проходит через три узла решетки, не лежащие на одной прямой, содержит целую сетку узлов. Система параллельных узловых плоскостей,