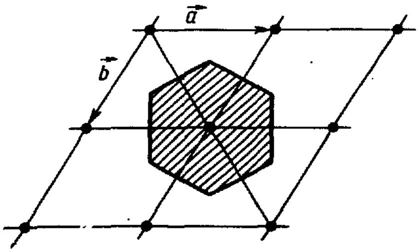

Рис. 1.10. Область Вороного - Дирихле (заштрихована), двумерный случай; $\vec{a}$ и $\vec{b}$ — единичные векторы трансляций ячейки Бравэ

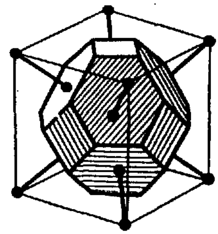

Рис. 1.11. Область Вороного - Дирихле для объемноцентрированной кубической решетки Бравэ. Усеченный октаэдр

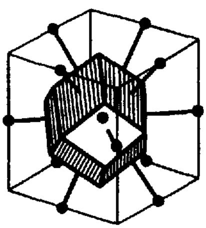

Рис. 1.12. Область Вороного-Дирихле для гранецентрированной кубической решетки Бравэ. Ромбический додекаэдр. При построении в качестве исходного выбран узел в центре грани

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, расположенных на одинаковом межплоскостном расстоянии d друг от друга, образует семейство плоскостей. Любая пространственная решетка может быть представлена семействами узловых плоскостей бесчисленным числом способов.

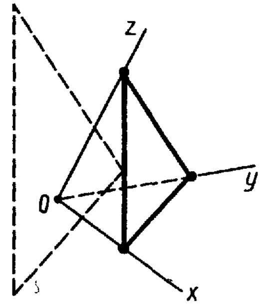

Рис. 1.13. К определению символов семейства узловых плоскостей

Для того, чтобы характеризовать положение семейства в пространстве, необходимо задать ориентацию какой-либо одной плоскости семейства относительно выбранных кристаллографических осей координат и указать межплоскостное расстояние. Это обстоятельство позволяет для определения положения плоскостей воспользоваться сокращенным языком кристаллографических символов.

Выберем в качестве общей системы координат ребра примитивной ячейки. Проведем в пространственной решетке какую-либо плоскость, проходящую через узлы, отмеченные на осях координат точками (рис. 1.13). В выбранной системе координат такая плоскость выражается уравнением первой степени:

$$A\,X+B\,Y+C\,Z+D=0. \qquad (1.2)$$

Через начало координат 0 проходит плоскость, параллельная исходной, которая является трансляционно ей идентичной. Уравнение этой плоскости имеет вид

$$A\,X+B\,Y+C\,Z=0. \qquad (1.3)$$

Возьмем на этой плоскости два узла с координатами
$X_1=x_1\,a$; $Y_1=y_1\,b$; $Z_1=z_1\,c$; $X_2=x_2\,a$; $Y_2=y_2\,b$; $Z_2=z_2\,c$,
где x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2 — целые числа, a, b, c — параметры элементарной ячейки. Очевидно, что координаты узлов должны удовлетворять уравнению (1.3):

$$A\,a\,x_1+B\,b\,y_1+C\,c\,z_1=0; \quad A\,a\,x_2+B\,b\,y_2+C\,c\,z_2=0.$$

Из теории линейных уравнений следует, что в этом случае $A\,a$, $B\,b$ и $C\,c$ должны определяться с точностью до общего множителя t:

$$A\,a:B\,b:C\,c= \begin{vmatrix} y_1 & z_1 \\ y_2 & z_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} z_1 & x_1 \\ z_2 & x_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{vmatrix} =h\,t:\kappa\,t:l\,t. \qquad (1.4)$$

Поскольку x, y, z — целые числа, то каждый из определителей также является целым числом, а следовательно, h, κ, l — три взаимно простых числа. Если теперь в уравнение (1.3) вместо коэффициентов A, B и C подставить их значения, вычисленные

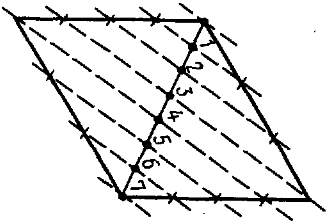

Рис. 1.14. Разбиение элементарного параллелограмма плоскостями (430) — пунктирные линии. Указаны номера межплоскостных расстояний от начала ячейки вдоль диагонали ($h+k=4+3=7$)

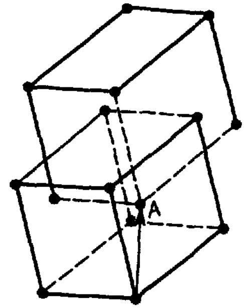

Рис. 1.15. Две примитивные ячейки, построенные на базе сложной объемно - центрированной ячейки

согласно (1.4), то уравнение плоскости, проходящей через начало, примет вид

$$hx+\kappa y+lz=0, \tag{1.5}$$

где $x=X/a$; $y=Y/b$; $z=Z/c$, т. е. единицы вдоль каждой оси разные и равны трансляциям — ребрам элементарной ячейки. Уравнение любой плоскости, параллельной плоскости, проходящей через начало, запишется так:

$$hx+\kappa y+lz=t. \tag{1.6}$$

где t всегда целое число. Для плоскости, проходящей через начало; $t=0$, а для ближайшей к началу — $t=1$.

Три несократимых взаимно простых числа h, к, l характеризуют целое семейство параллельных узловых плоскостей. Их называют миллеровскими индексами плоскости. Если индексы написаны подряд и заключены в круглые скобки — $(h\kappa l)$, то их называют символом плоскости. Если символ записан в виде $(h\bar{\kappa}l)$ или $(\bar{h}\kappa l)$, то это означает, что соответствующий индекс необходимо взять со знаком минус.

Величины h, κ, l обратно пропорциональны отрезкам, отсекаемым выбранной плоскостью, на осях координат.

Если уравнение (1.6) для случая $t=1$ написано как уравнение плоскости в отрезках:

$$\frac{X}{(a/h)}+\frac{Y}{(b/\kappa)}+\frac{Z}{(c/l)}=1, \tag{1.7}$$

то, как видно из (1.7), плоскость $(h\kappa l)$, ближайшая к началу координат, отсекает по осям X, Y, Z отрезки, соответственно равные a/h, b/κ и c/l, а это означает, что система параллельных плоскостей рассекает стороны a, b и c элементарной ячейки соответственно на h, κ и l частей. Более того, в случае примитивной элементарной ячейки система параллельных плоскостей $(h\kappa l)$ рассекает диагонали граней ячейки (ab), (bc) и (ca) на $h+\kappa$, $\kappa+l$ и $l+h$ частей соответственно, а телесную диагональ — на $h+\kappa+l$ частей. На рис. 1.14 приведен пример такого рассечения двухмерной ячейки системой параллельных плоскостей типа (430).

В случае сложных решеток, т. е. решеток с базисом, дело обстоит несколько иначе.

Сложную решетку можно рассматривать как решетку, составленную из нескольких одинаковых и взаимно параллельных примитивных решеток, вставленных одна в другую. Число этих примитивных решеток равно числу узлов, приходящихся на непримитивную ячейку (т. е. равно числу узлов, определяющих базис сложной решетки), а их начальные узлы находятся в узлах непримитивной решетки. Так, элементарную ячейку, центрированную по объему, можно рассматривать как состоящую из двух одинаковых и взаимно параллельных примитивных ячеек, вставленных одна в другую со смещением, равным половине телесной диагонали (рис. 1.15).

Если ячейка центрирована по объему, то ее телесная диагональ при четной сумме $h+\kappa+l=2n$, где n — целое число, рассечена последовательными узловыми плоскостями семейства $(h\kappa l)$ на $h+\kappa+l$ частей, если же сумма $h+\kappa+l=2n+1$ нечетна, диагональ рассекается на $2(h+\kappa+l)$ частей или межплоскостных расстояний, а оси элементарной ячейки при нечетной сумме $h+\kappa+l$ — на отрезки $a/2h$, $b/2\kappa$, $c/2l$. Для других случаев центрированности ситуация аналогична и задачу о числе рассечений необходимо решать в каждом конкретном случае отдельно. Вопрос о числе рассечений осей элементарной ячейки последовательными узловыми плоскостями семейства $\{h\kappa l\}$ является важным при решении многих задач физики твердого тела, например, при рассмотрении распространения волн в твердом теле.

Семейство параллельных плоскостей, как мы говорили выше, обозначают символом $(h\kappa l)$. В научной литературе существует также обозначение, указывающее не только одно семейство плоскостей, но и все другие семейства, которые эквивалентны в силу симметрии. Так, например, в кубическом крис-

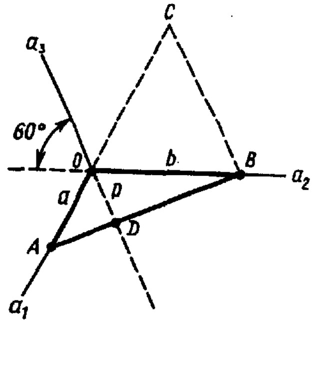

Рис. 1.16. К выводу связи четвертого индекса i с индексами h и k

талле плоскости (110), (101), (011) эквивалентны. Совокупность таких эквивалентных плоскостей обозначают символом $\{110\}$ или в общем случае $\{h\kappa l\}$.

В гексагональных кристаллах для определения положения плоскостей, а также выявления симметрично эквивалентных семейств плоскостей пользуются системой не трех, а четырех осей координат и каждой плоскости приписывают четвертый индекс i, который пишут на третьем месте, тогда символ семейства записывают в виде $(h\kappa i l)$. Четвертую вспомогательную ось a_3 размещают в плоскости, перпендикулярной оси c, как показано на рис. 1.16. Прямая AB — след плоскости $(h\kappa l)$, $OD=$ $=p$ — отрезок, отсекаемый плоскостью $(h\kappa l)$ на оси a_3; $OC=$ $=BC=b$. Из подобия ΔABC и ΔADO следует:

$$-\frac{1}{p}=\frac{a+b}{ab}; \quad -\frac{1}{p}=\frac{1}{a}+\frac{1}{b}; \quad \frac{1}{p}=-i; \quad \frac{1}{a}=h; \tag{1.8}$$

$$\frac{1}{b}=\kappa; \quad h+\kappa+i=0.$$

Способ четырех индексов удобен тем, что он сразу позволяет определить в гексагональном кристалле равнозначные (эквивалентные) плоскости, что затруднительно при системе из трех индексов.

Рассмотрим пример. Допустим, нам нужно выявить все равнозначные плоскости типа (213). Запишем плоскость (213) в системе четырех индексов $i=-(2+1)=3$, тогда $(213)-(2133)$. Далее, используя циклическую перестановку (см. рис. 1.17), легко выписать все остальные плоскости:

$$\begin{vmatrix} h\kappa i l \\ \kappa i h l \\ i h \kappa l \end{vmatrix} \longrightarrow \begin{vmatrix} 2 & 1 & \bar{3} & 3 \\ 1 & \bar{3} & 2 & 3 \\ \bar{3} & 2 & 1 & 3 \end{vmatrix}$$

Вычеркнув третий столбец, мы сразу переходим к представлению равнозначных плоскостей в системе трех индексов.

В гексагональных кристаллах плоскость, перпендикулярная оси c, — плоскость базиса — является основанием гексагональной призмы(рис. 1.18) и имеет индексы (0001). Плоскости, параллельные боковым граням призмы, имеют индексы: $(10\bar{1}0)$, $(0\bar{1}10)$, $(\bar{1}100)$, $(\bar{1}010)$, $(01\bar{1}0)$, $(1\bar{1}00)$.

Узловые прямые. Построим в пространственной решетке кристаллографическую систему координат XYZ и через начало координат проведем узловую прямую (рис. 1.19). Вдоль этой прямой на расстояниях, равных периоду d, лежат идентич-

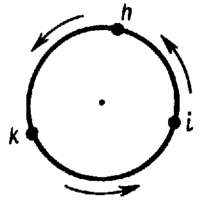

Рис. 1.17. К определению равнозначных плоскостей путем циклической перестановки

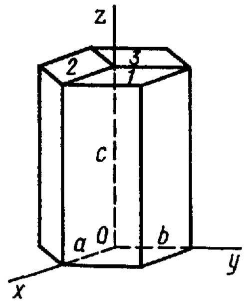

Рис. 1.18. Три гексагональные элементарные ячейки образуют гексагональную призму. Индексы плоскости основания (0001)

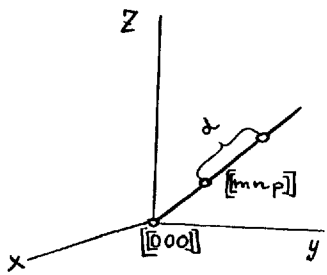

Рис. 1.19. Узловая прямая (mnp), характеризующая семейство параллельных узловых прямых

ные узлы. Пусть [[$m\,n\,p$]] — символ узла, ближайшего к началу. Видно, что узел [[$m\,n\,p$]] вместе с узлом [[000]] определяет направление прямой, проходящей через начало координат.

Символ узла [[$m\,n\,p$]] принимают за символ прямой и пишут в квадратных скобках [$m\,n\,p$], где целые числа m, n, p являются индексами прямой. Символ [$m\,n\,p$] характеризует целое семейство параллельных узловых прямых, поскольку в кристаллах все такие направления идентичны. Снова, для того, чтобы подчеркнуть, что мы имеем дело с совокупностью симметрично эквивалентных узловых прямых, вводят обозначение в виде символа $<m\,n\,p>$. Например, направления координатных осей в кубических кристаллах [100], [010], $[\bar{1}00]$, [001], $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$ в силу симметрии эквивалентны, поэтому такую совокупность обозначают одним символом $<100>$. Совокупность направлений нормалей к эквивалентным плоскостям семейства {111} в кубических кристаллах [111], $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ обозначают символом $<111>$, указывающим, что все направления такого типа будут симметрично эквивалентны.

1.5. ТРАНСЛЯЦИОННЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ

Исследование внешней симметрии кристаллов привело к установлению 32 классов (групп) симметрии. Эта симметрия находится в прямой зависимости от внутренней структуры и определяется расположением дискретных частиц в пространственной решетке. В пространственной решетке к рассмотренным выше элементам — зеркальная плоскость симметрии, простые поворотные оси симметрии, центр симметрии — добавляется но-