Л.Л. Мейснер

Тема 2. Аналитическое описание пространственной решетки. *(Лекции 2, 3)*

Содержание

кафедра физики металлов, ФФ ТГУ,
специальность 01.04.07 –
«физика конденсированного состояния»

Томск - 2010

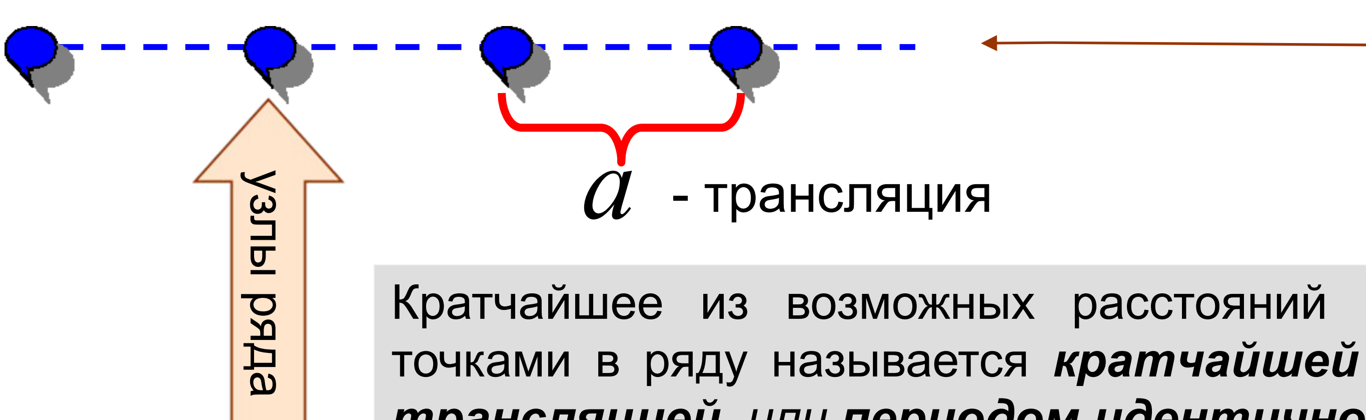
Тема 2
Аналитическое описание пространственной решетки

2.1. Способы описания кристаллических решеток

А. Понятие элементарной ячейки, основные трансляции

В реальных кристаллах закономерное чередование частиц всегда немного нарушено из-за их теплового движения, возбуждения и ряда других причин. Но вначале мы не будем учитывать дефекты и нарушения кристаллического строения, а будем рассматривать кристалл идеальный: в структуре этого кристалла нет нарушений, **все одинаковые частицы расположены одинаковыми параллельными рядами**. Такой **ряд всегда надо представлять себе бесконечным**.

Расстояния между частицами в большинстве кристаллических веществ составляют несколько ангстрем, поэтому даже на длине в 1 мм в кристалле располагается ~10^7 частиц, что практически можно считать бесконечным числом.



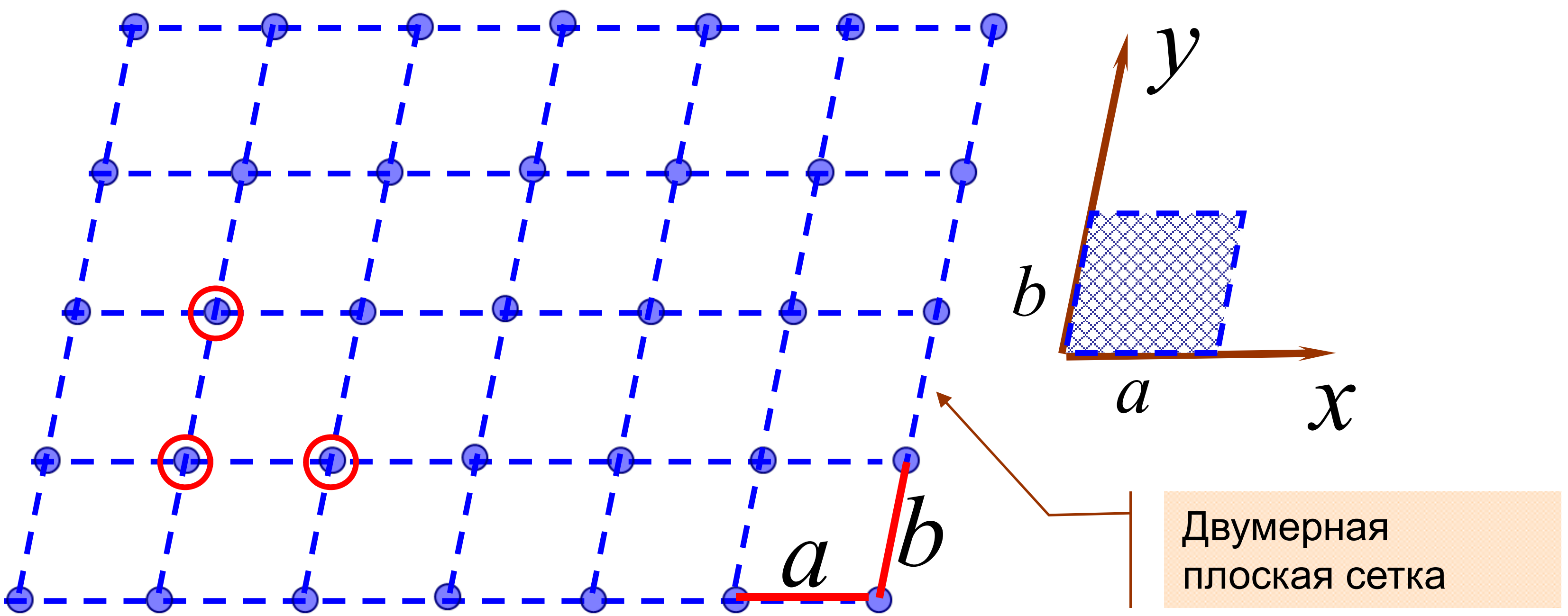
Симметричный бесконечный ряд с трансляцией

Кратчайшее из возможных расстояний между одинаковыми точками в ряду называется ***кратчайшей*** *или* ***элементарной трансляцией***, *или* ***периодом идентичности***.

Симметричное преобразование, с помощью которого точка повторяется в пространстве, называется преобразованием с помощью трансляции, или просто ***трансляцией***.

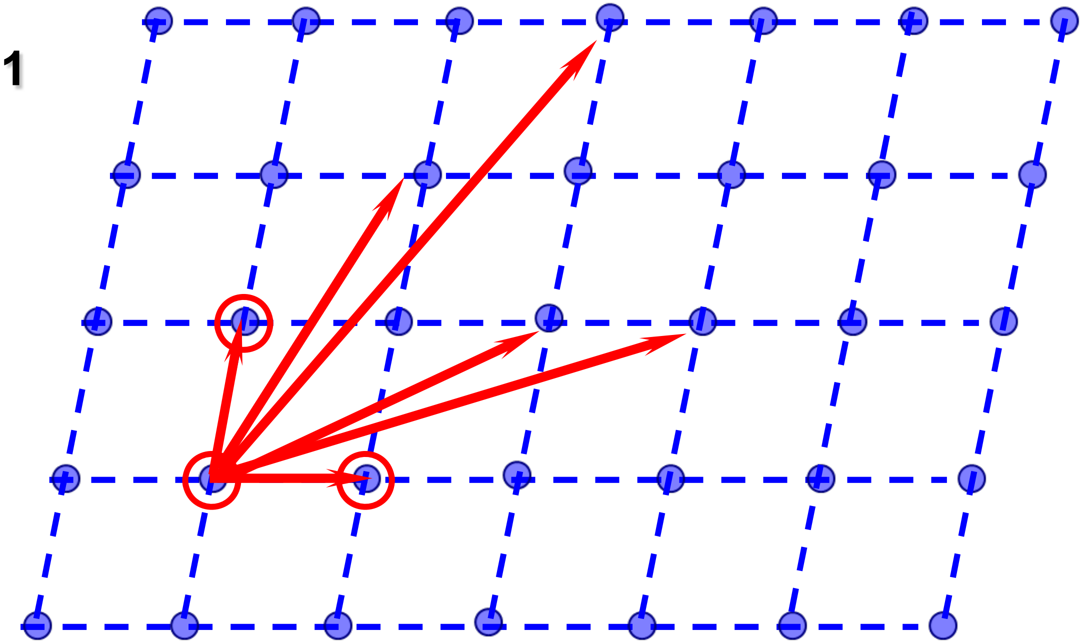
Одинаковые точки, связанные между собой трансляциями a в бесконечном ряду, называются ***узлами ряда.***

Плоскую сетку можно определить ***любой парой трансляций, не лежащих на одной прямой***



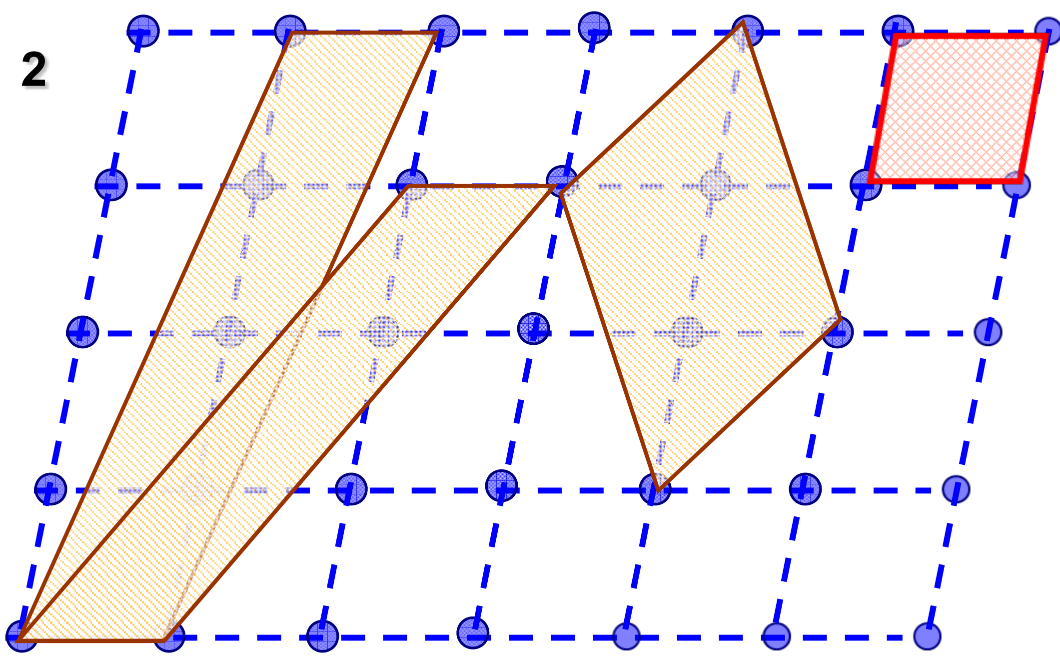
Параллелограммы, вершины которых являются узлами двумерной плоской сеткой, называются ***ячейками сетки.***

1



- принято *выбирать* ***кратчайшие трансляции*** и именно те, которые лучше всего ***отражают симметрию*** сетки

2



принято выбирать ***элементарную ячейку*** так, чтобы она:

- наилучшим образом отражала симметрию сетки;
- если можно, то имела бы прямые углы;
- обладала бы наименьшей площадью.

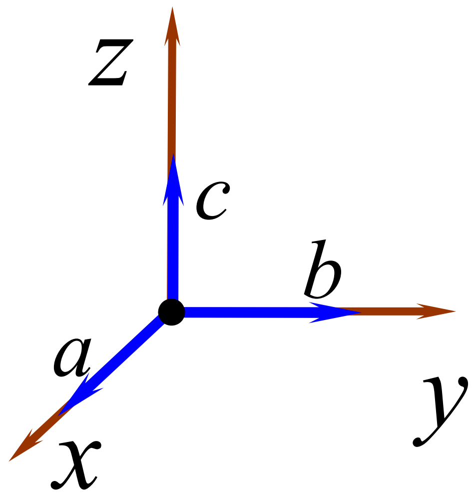
***Примитивной** элементарной **ячейкой** называется ячейка, внутри которой нет узлов* сетки.

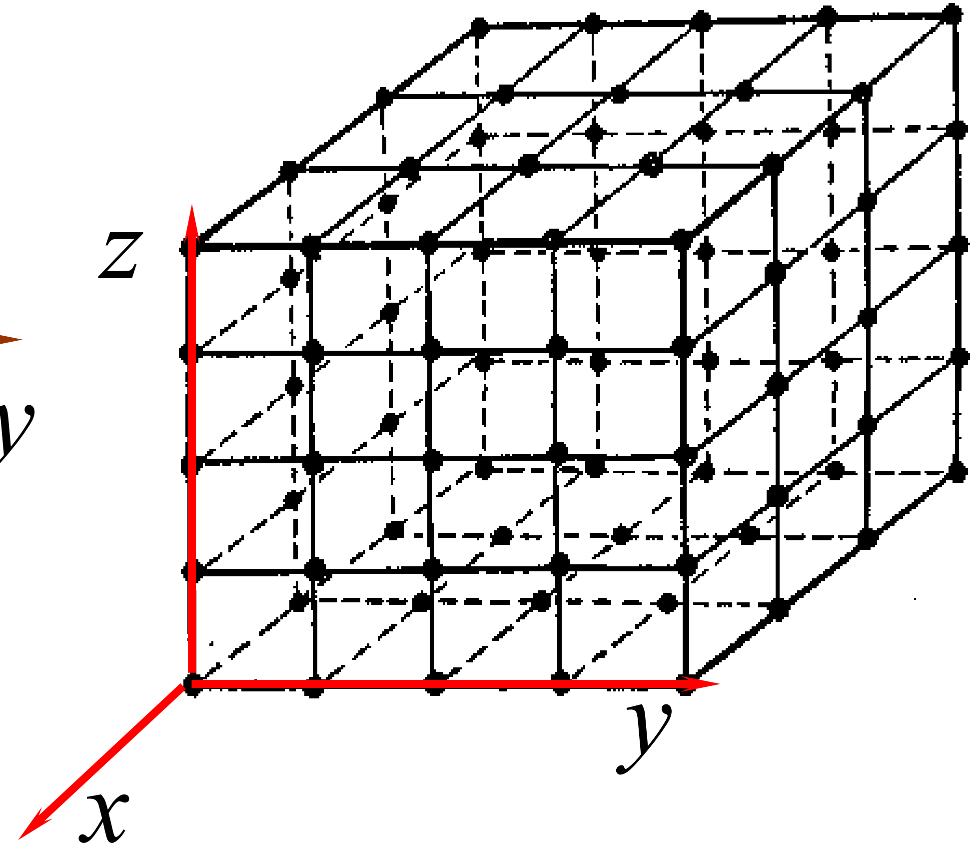
*Число узлов, приходящихся на единицу площади, называется **ретикулярной плотностью сетки**.*

Таким образом, **плоскую сетку** можно определить тремя способами:

- как ***пару*** элементарных ***неколлинеарных трансляций***, или
- как ***систему эквивалентных узлов***, которые могут быть получены один из другого с помощью параллельных переносов, или
- как ***систему одинаковых элементарных ячеек***, прилегающих друг к другу, заполняющих плоскость без промежутков и совмещающихся друг с другом с помощью параллельных переносов.

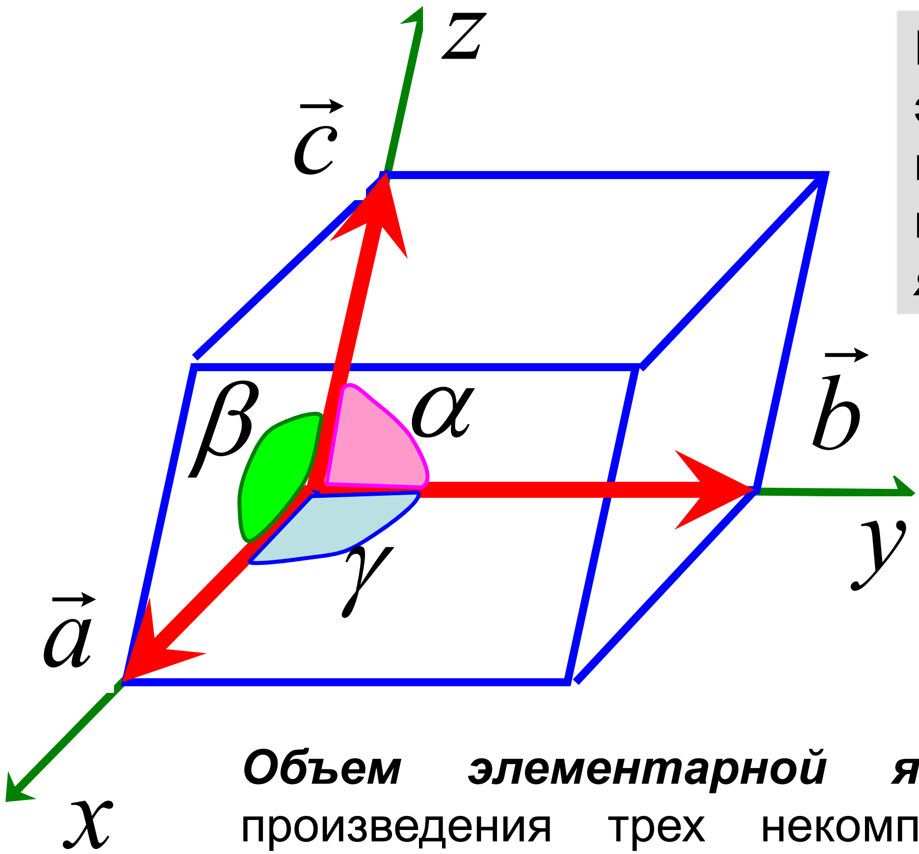
Б. Пространственная решетка





Пространственная решетка - *трехмерная система эквивалентных узлов*

Основную тройку трансляций или ***трансляционную группу*** *(или* группу переносов) для пространственной решетки принято выбирать из кратчайших трансляций, соответствующих симметрии решетки.



Параллелепипед, построенный на трех элементарных трансляциях *a, b, c,* называется элементарным параллелепипедом, или ***элементарной ячейкой***

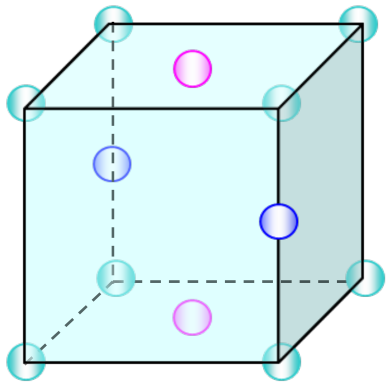
Объем элементарной ячейки определяется из векторного произведения трех некомпланарных векторов – элементарных трансляций по формуле:

$$V = |\mathbf{a}[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]|$$

$$V = abc\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$$

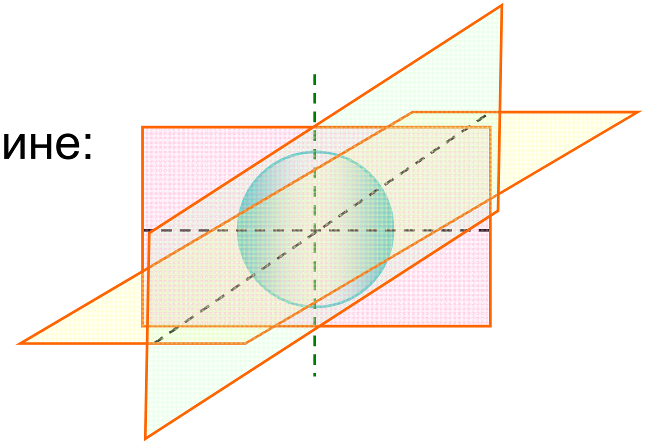
Трехмерная элементарная ячейка называется ***примитивной***, если внутри нее не имеется узлов.

Пример 1. Сколько узлов приходится на элементарную ячейку?



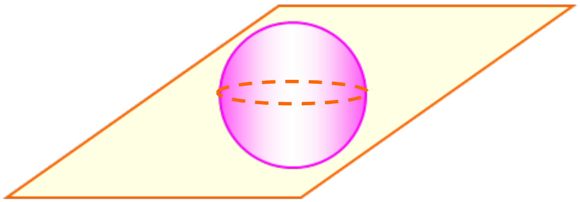
Ответы:

а) в вершине:



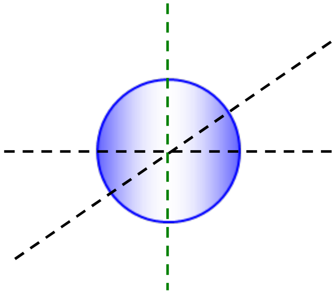
$$8 \cdot \frac{1}{8} = 1$$

б) на грани ячейки:



$$6 \cdot \frac{1}{2} = 3$$

в) на ребре:



$$12 \cdot \frac{1}{4} = 3$$

Объем ***примитивной элементарной ячейки*** не зависит от ее формы и является величиной постоянной для данной решетки; он равен объему, приходящемуся на один узел.

За ***ребра элементарной ячейки***, *т. е. за* ***элементарные трансляции***, принимают те направления в пространственной решетке, в которых величина трансляции наименьшая и которые наилучшим образом отражают симметрию решетки.

В. Кристаллографические оси координат

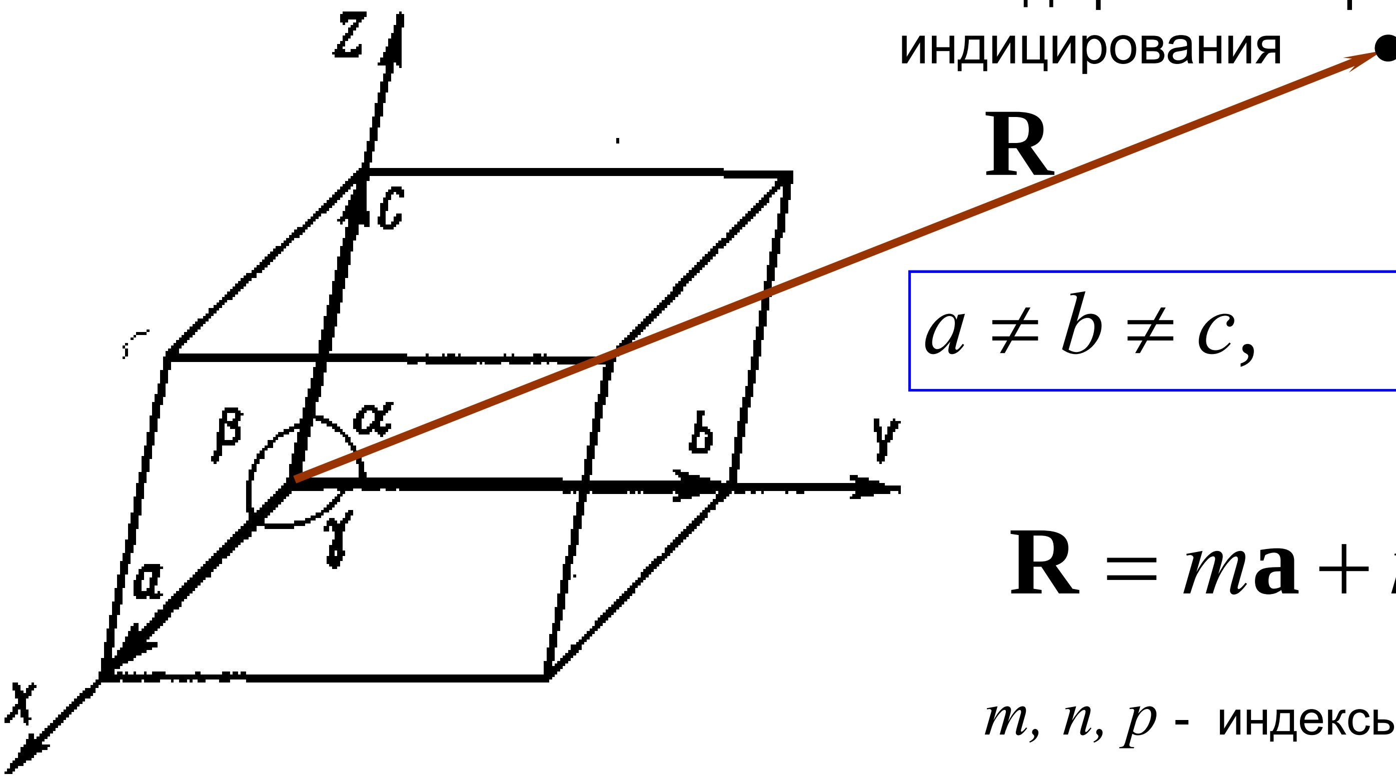
Кристаллы с *одинаковой* ***симметрией*** элементарных ячеек их структур и *одинаковой* ***кристаллографической системой осей координат*** объединяются в **сингонию**.

Направления ***кристаллографических осей координат*** соответствуют направлениям ребер элементарной ячейки кристалла, а масштабные отрезки по осям координат — длинам этих ребер, т. е. элементарным трансляциям.

ВАЖНО ЗАПОМНИТЬ:
Пространственная решетка — это бесконечное трехмерное периодическое образование, или, точнее, геометрическое построение, с помощью которого в кристаллическом пространстве выявляются одинаковые точки.
Кристаллическая структура — это физическая реальность, а пространственная решетка —геометрическое построение, помогающее выявить законы симметрии или наборы симметричных преобразований кристаллической структуры.

2.2. Индексы узлов решетки

А. Символы узлов решетки



Метод кристаллографического индицирования

$$a \neq b \neq c, \qquad \alpha \neq \beta \neq \gamma$$

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

$m,\ n,\ p$ - индексы данного узла

$[[mnp]]$ - символ узла

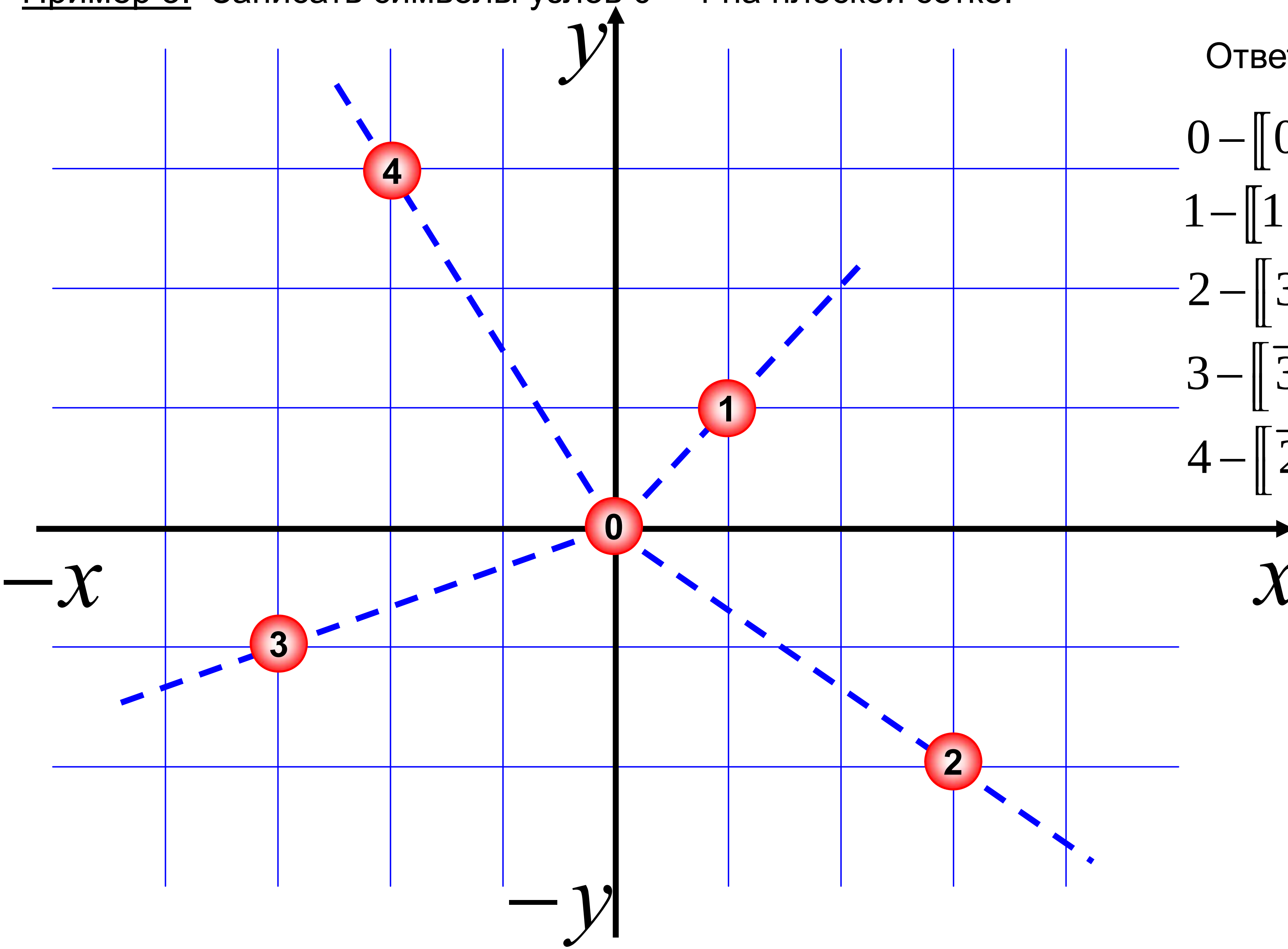
Пример 2 . Записать и назвать узлы решетки.

Ответы:

$[[130]]$ (один, три, ноль)

$[[1\bar{3}0]]$ (один, минус три, ноль)

Пример 3. Записать символы узлов 0 – 4 на плоской сетке.



Ответы:

$0 - \llbracket 000 \rrbracket$

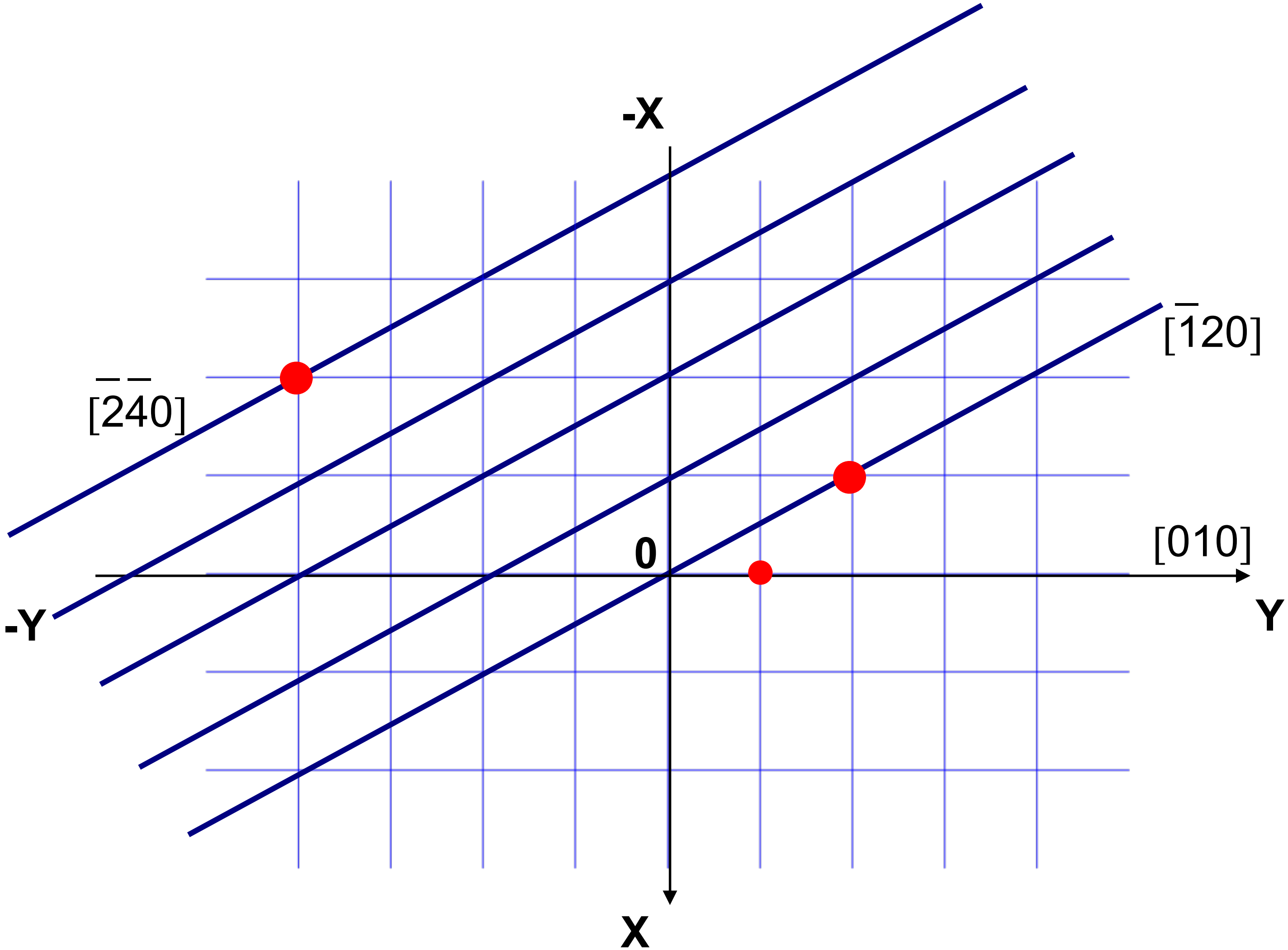
$1 - \llbracket 110 \rrbracket$

$2 - \llbracket 3\bar{2}0 \rrbracket$

$3 - \llbracket \bar{3}\,\bar{1}0 \rrbracket$

$4 - \llbracket \bar{2}30 \rrbracket$

Б. Символы рядов (ребер).



$\left[mnp\right]$

- ***символ ряда*** - характеризует семейство параллельных рядов и параллельные ребра кристаллического многогранника

1. Для определения ***символа ряда*** принято выбирать узел, ближайший к началу координат

2. Если индексы в символе ряда кратны, их можно сокращать на целое положительное число.

3. Оси координат имеют символы:

$$OX - [100]$$
$$OY - [010]$$
$$OZ - [001]$$

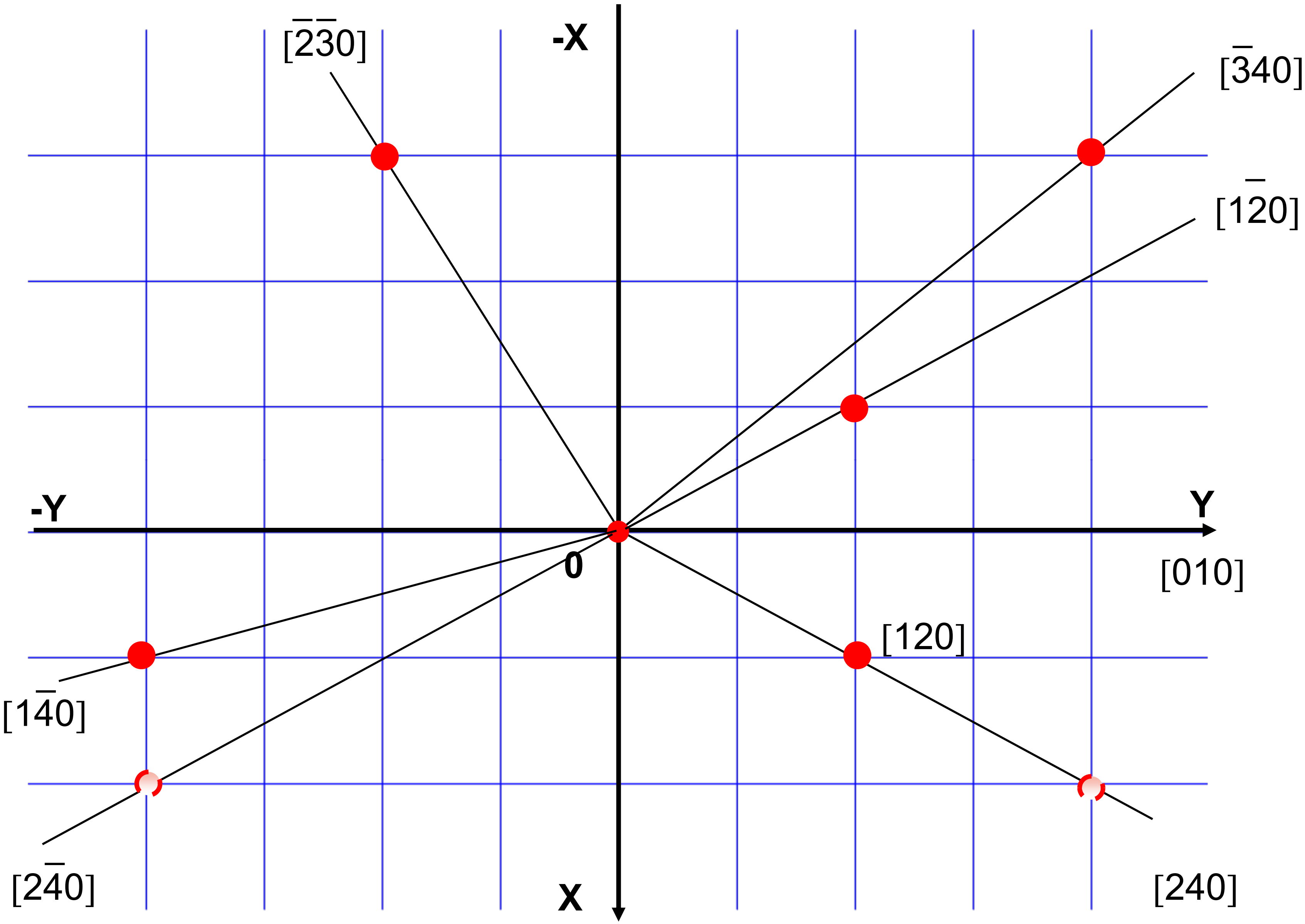
! **Символы кристаллографических осей координат не зависят от углов между осями координат и от осевых отрезков, они одинаковы в любой системе координат.**

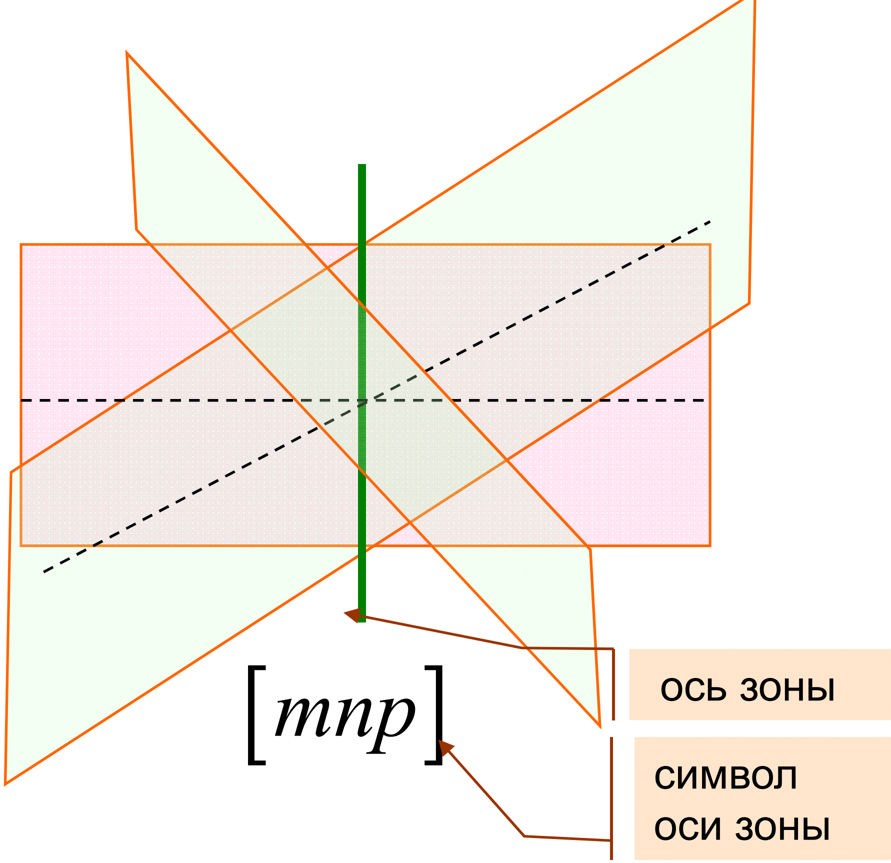
$\langle mnp \rangle$ - совокупность прямых, связанных элементами симметрии.

<u>Пример 4.</u>

$$\langle 100 \rangle : [100], [010], [001], [\bar{1}00], \ldots$$

Пример 5. Определить индексы кристаллографических направлений, проходящих через выделенные узлы.





Грани кристалла, пересекающиеся по параллельным ребрам, образуют ***пояс***, или ***зону***, а общее направление этих ребер называется осью зоны.

В. Символы плоскостей

Совокупность параллельных узловых плоскостей называют ***семейством плоскостей.***

Кратчайшее расстояние между соседними плоскостями называют ***межплоскостным расстоянием d.***

(hkl) - обозначение плоскостей кристаллографическими индексами из совокупности трех целых чисел, взятых в круглые скобки (***индексы Миллера***)

$\{hkl\}$ - обозначение совокупности плоскостей, связанных элементом симметрии и образующих многогранник

Пример 6.

$$\{111\}:(111),(\bar{1}11),(1\bar{1}1),\ldots 8\,\textit{вариантов}$$

$$\{100\}:(100),(\bar{1}00),(010),(0\bar{1}0),(00\bar{1}),(001)$$

Смысл кристаллографических индексов плоскости *(hkl):*

$$\frac{x}{m}+\frac{y}{n}+\frac{z}{p}=1$$

m, n, p - длины отрезков (в единицах элементарных трансляций), отсекаемые плоскостью на осях координат X,Y,Z – параметры Вейсса.

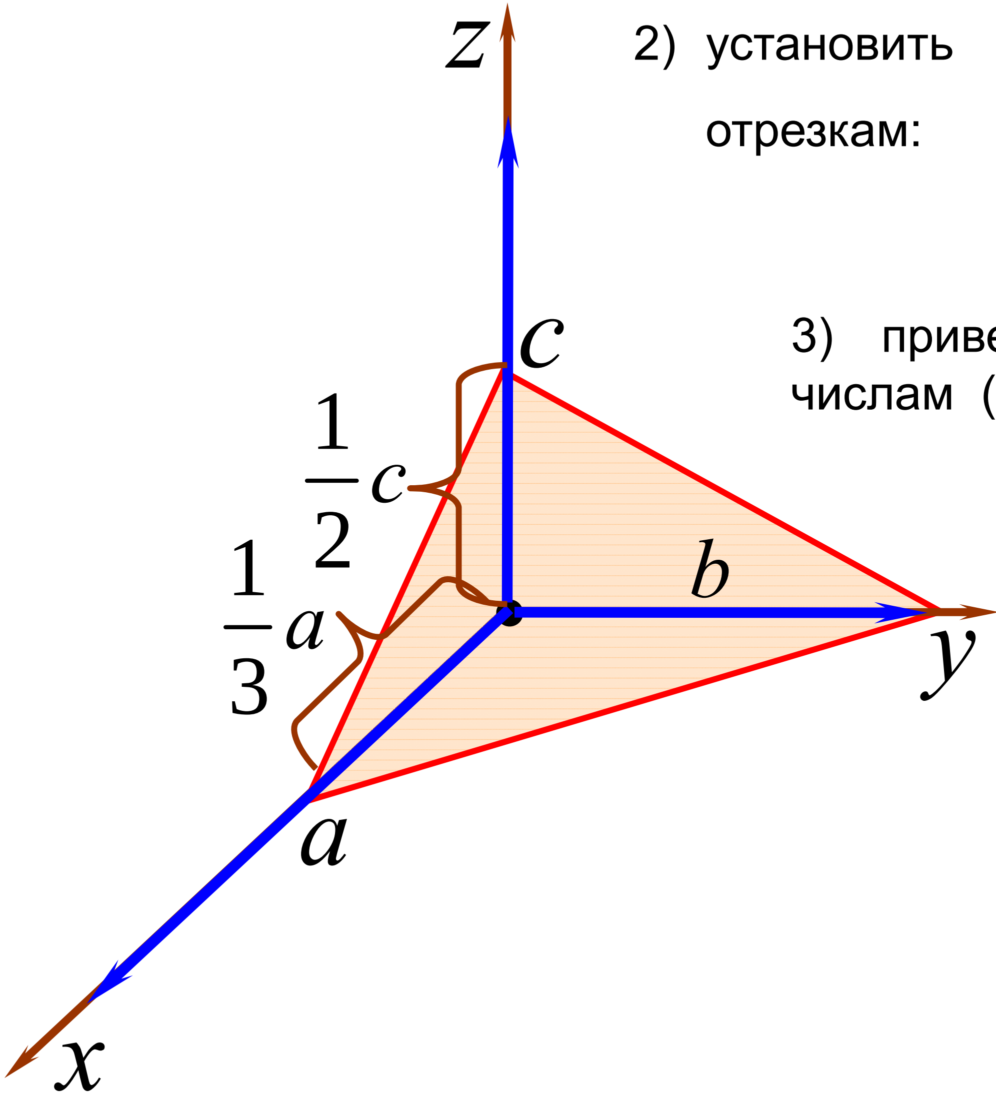
$$\frac{x}{1/h}+\frac{y}{1/k}+\frac{z}{1/l}=1$$

$$hx+ky+lz=1$$

h, k, l - величины, обратные параметрам Вейсса, приведенные к целым числам.

Правила определения кристаллографических индексов плоскостей.

1) Найти отрезки, отсекаемые данной гранью на координатных осях и определить их в осевых единицах m, n, p;



2) установить величины, обратные найденным отрезкам:

$$h:k:l = \frac{1}{m}:\frac{1}{n}:\frac{1}{p}$$

3) привести полученные числа к целым числам (см. рисунок):

$$h:k:l = \frac{3}{1}:1:\frac{2}{1}$$

$$(hkl) = (312)$$

- кристаллографические индексы плоскости

Пример 7. Найти кристаллографические индексы плоскости, описываемой уравнением:

$$3x + z = 1$$

Решение:

$$\frac{x}{1/3} + \frac{y}{1/0} + \frac{z}{1/1} = 1$$

$$h:k:l = \frac{1}{m}:\frac{1}{n}:\frac{1}{p}$$

$$m = 1/3$$

$$n = \infty$$

$$p = 1$$

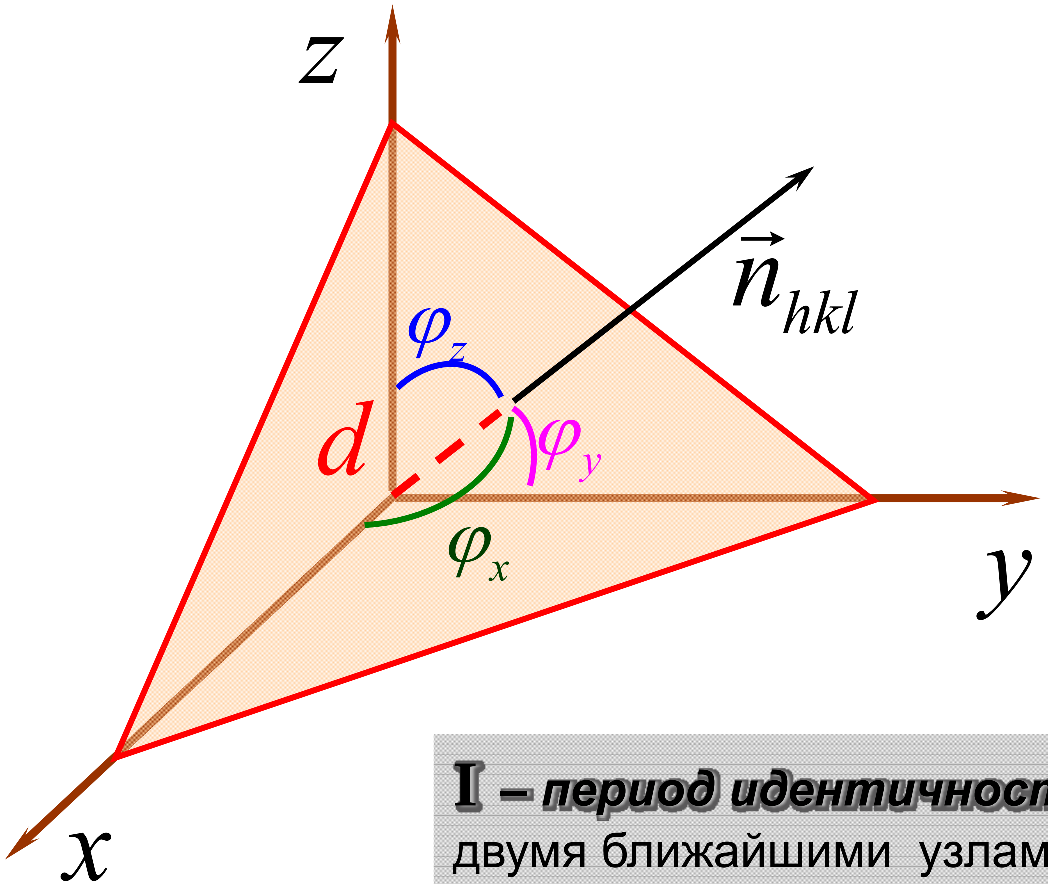
$$h:k:l = 3:0:1$$

$$(hkl) = (301)$$

Ответт: $(hkl) = (301)$

2.3. Межплоскостное расстояние, период идентичности

d – межплоскостное расстояние – расстояние от начала координат до первой из семейства плоскостей (hkl).



$$\cos\varphi_x = d : a\Big/ h = \frac{dh}{a}$$

$$\cos\varphi_y = d : b\Big/ k = \frac{dk}{b}$$

$$\cos\varphi_z = d : c\Big/ l = \frac{dl}{c}$$

$$\mathbf{I} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

I *– период идентичности* – определяет расстояние между двумя ближайшими узлами вдоль выбранного направления.

$$\sqrt{\left|\mathbf{I}^2\right|} = \sqrt{(\mathbf{II})} = \sqrt{u^2a^2 + v^2b^2 + w^2c^2 + 2uvab\cos\gamma + 2uwac\cos\beta + 2wvbc\cos\alpha}$$

2.4. Системы координатных осей

Общие правила:

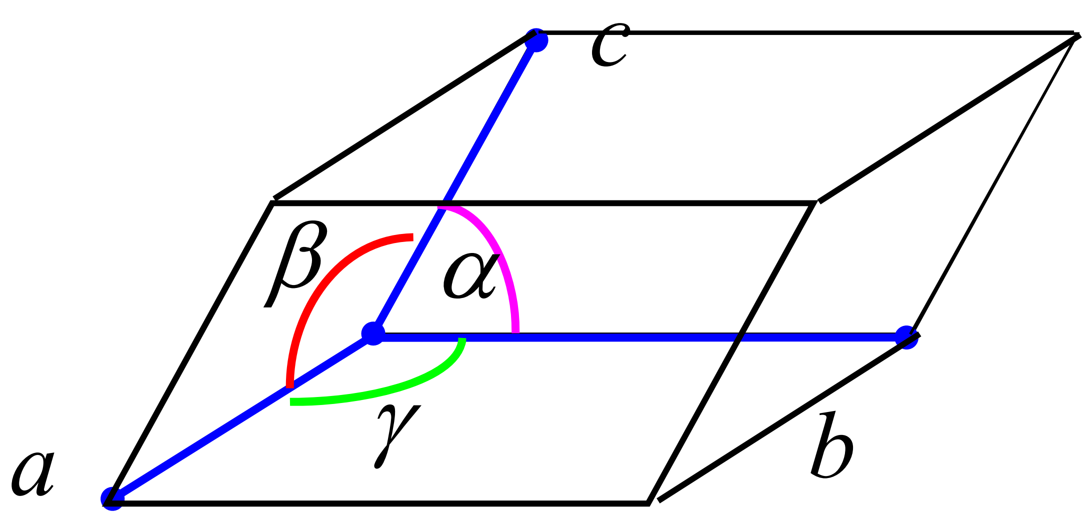
В кристаллографии всегда пользуются ***правой системой координат***.

Оси координат выбираются

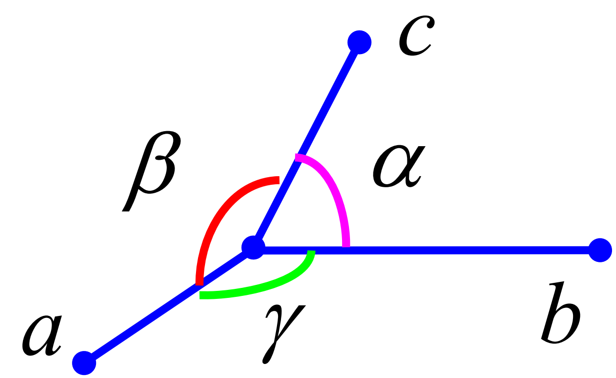
•***по осям симметрии*** или

•***по нормалям к плоскостям симметрии*** или (если нет тех и других)

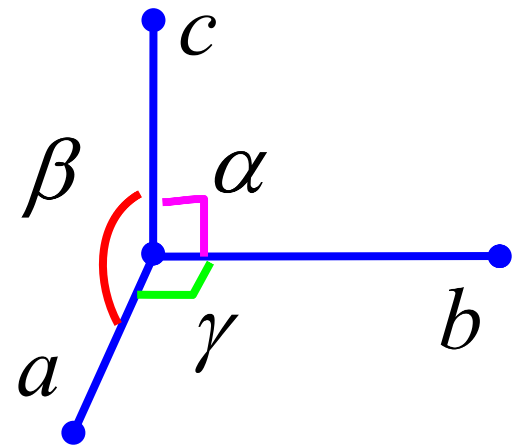
•***по ребрам*** кристаллического многогранника.



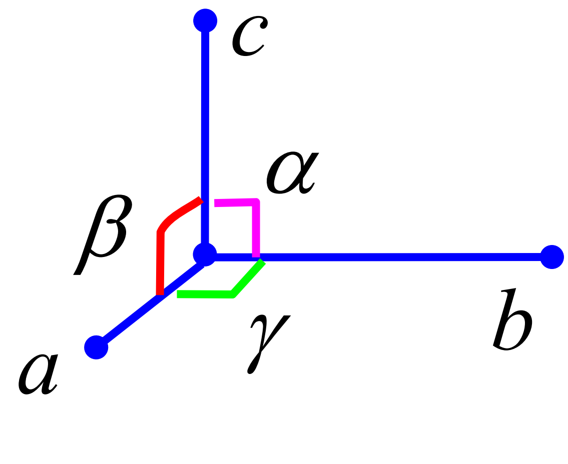
- Триклинная система: $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$



- Моноклинная система: $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90° \neq \beta$

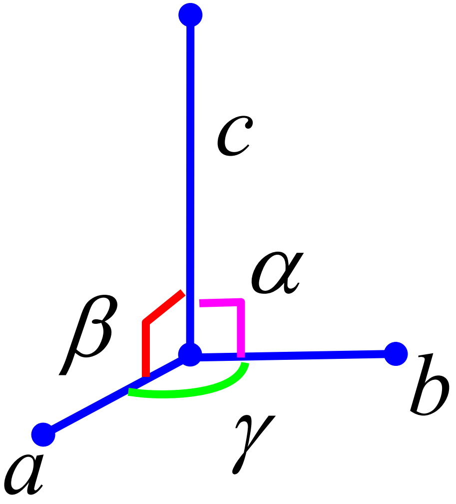


- Ромбическая система: $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90°$



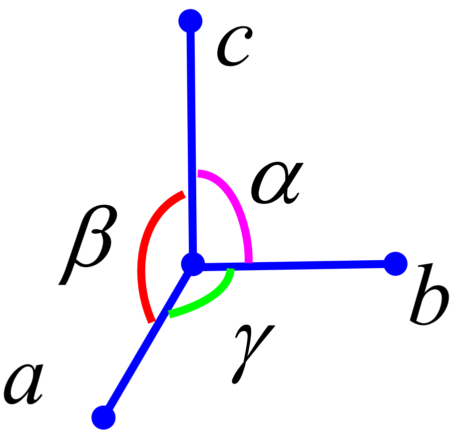
- Гексагональная система:

$$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$$

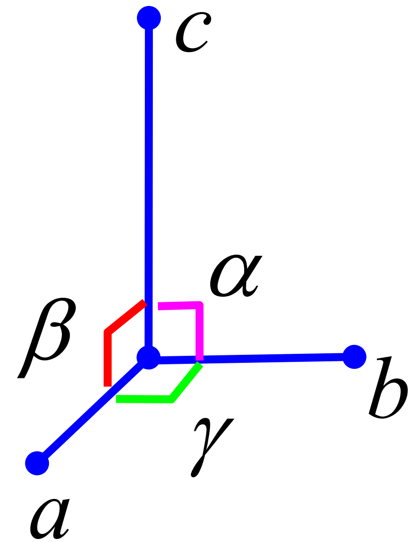


- Ромбоэдрическая (тригональная) система:

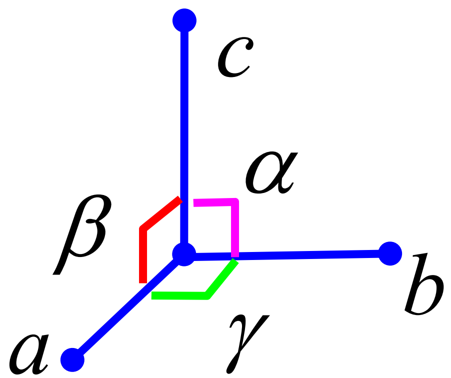
$$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90°$$



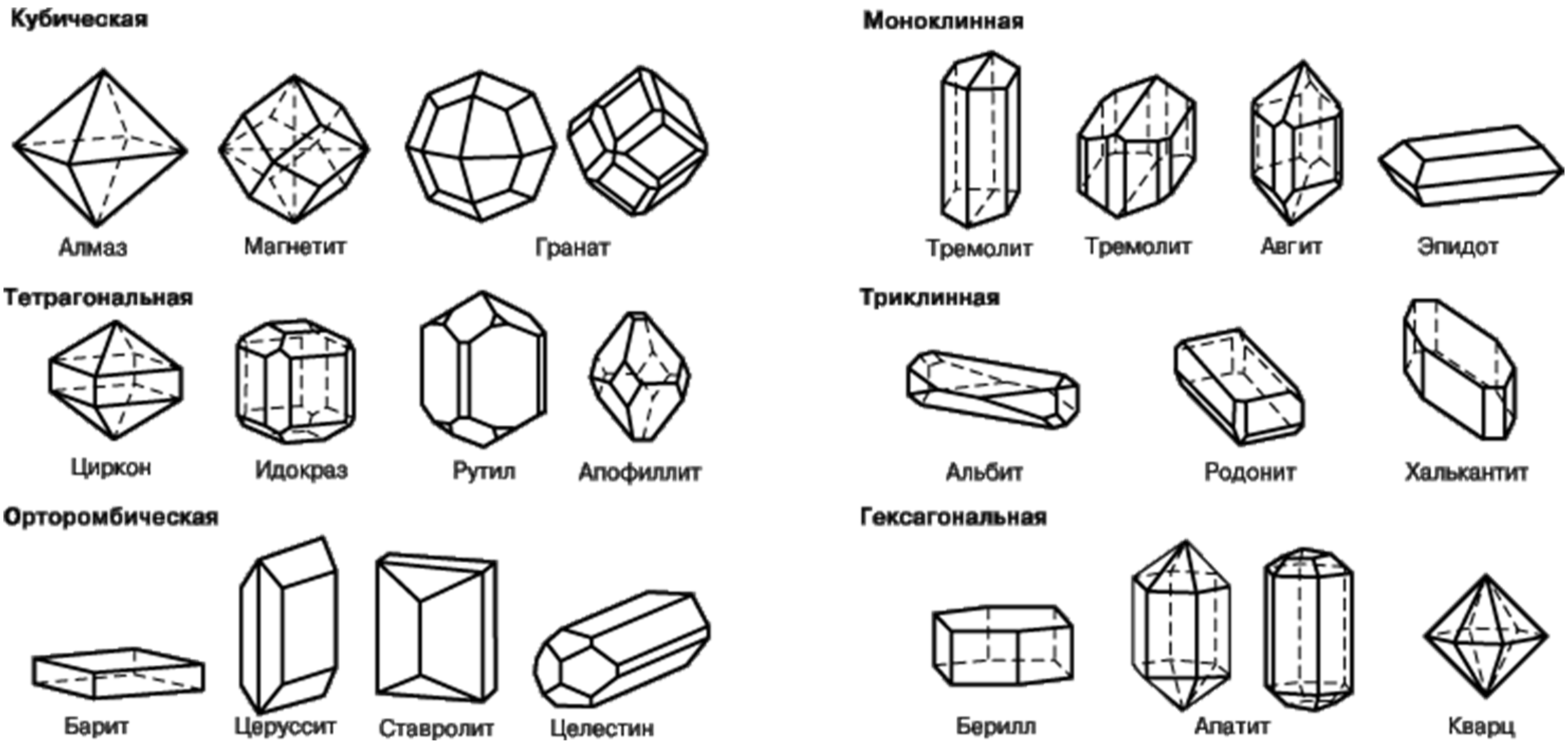
- Тетрагональная система: $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90°$



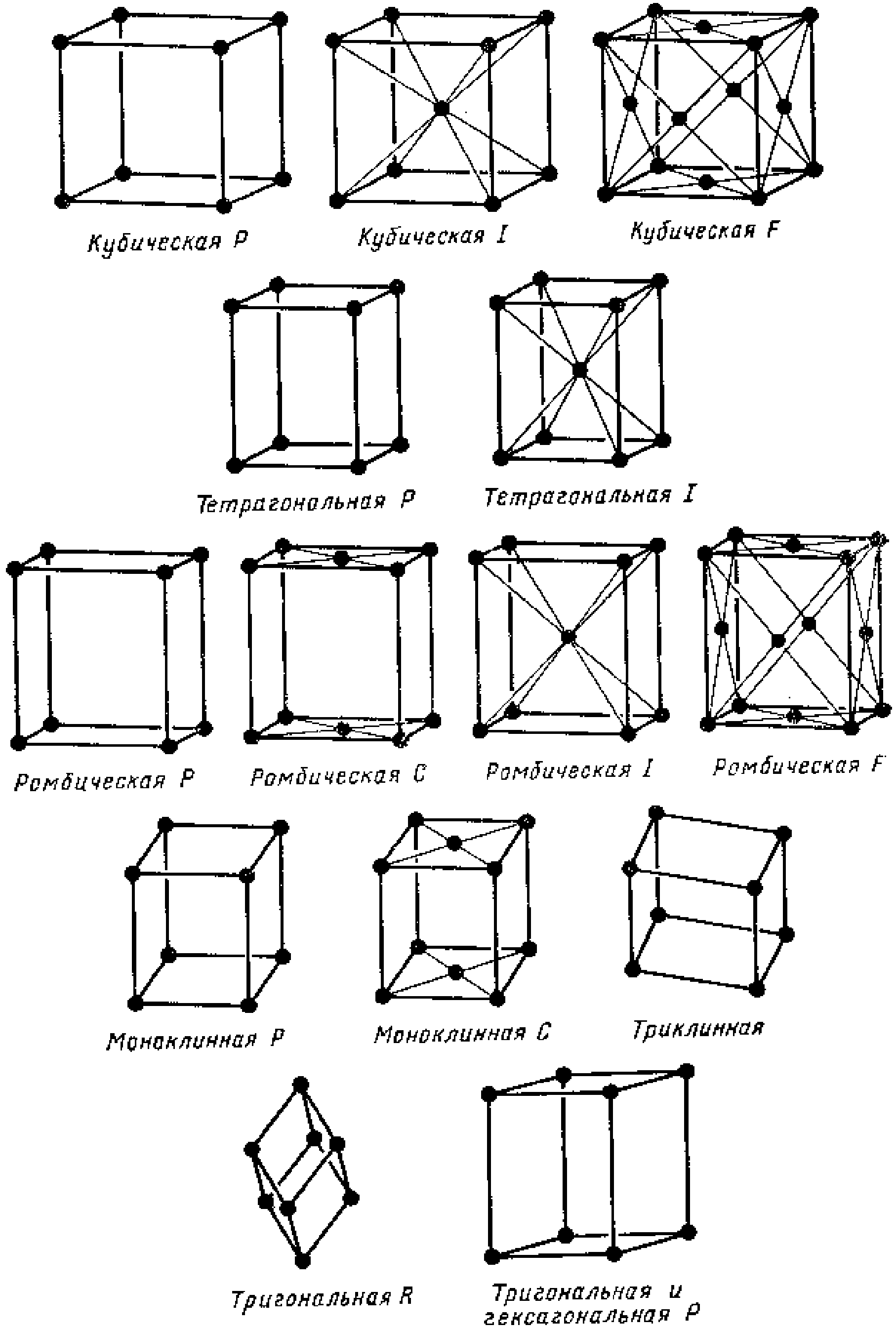
- Кубическая система: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90°$



Формы кристаллов разных минералов, относящихся к разным кристаллографическим системам.



Элементарные ячейки, соответствующие разным кристаллографическим осям (решеткам Бравэ).



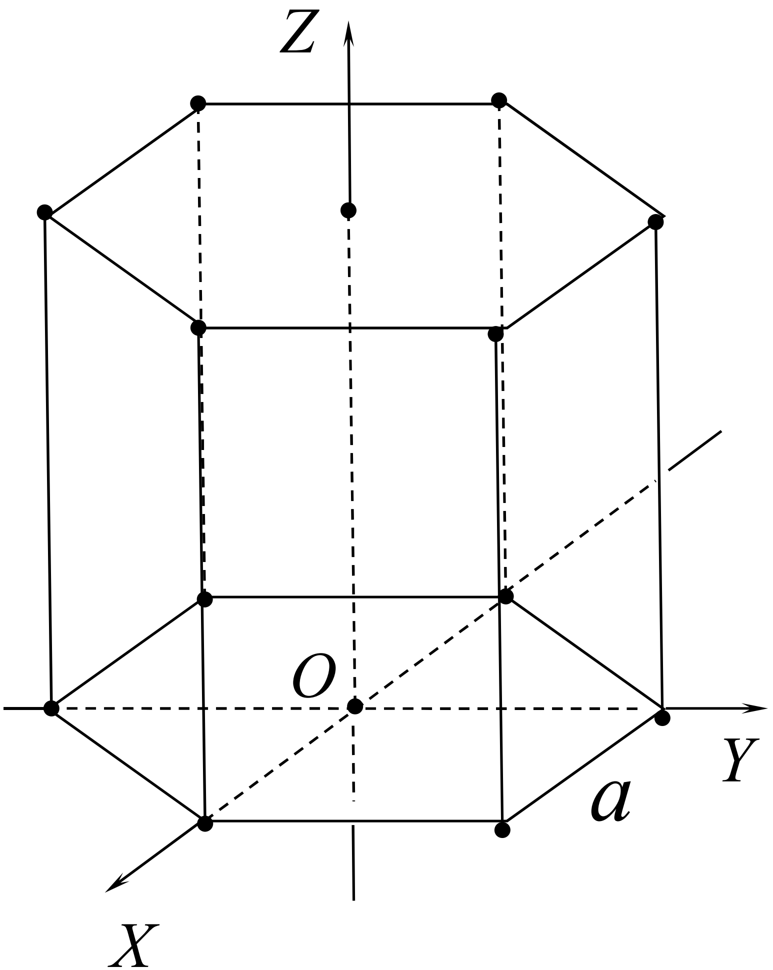
Форма элементарной ячейки (соотношение между длинами векторов трансляций и углы между ними) определяет ***сингонию кристаллов***. Различают следующие типы сингоний

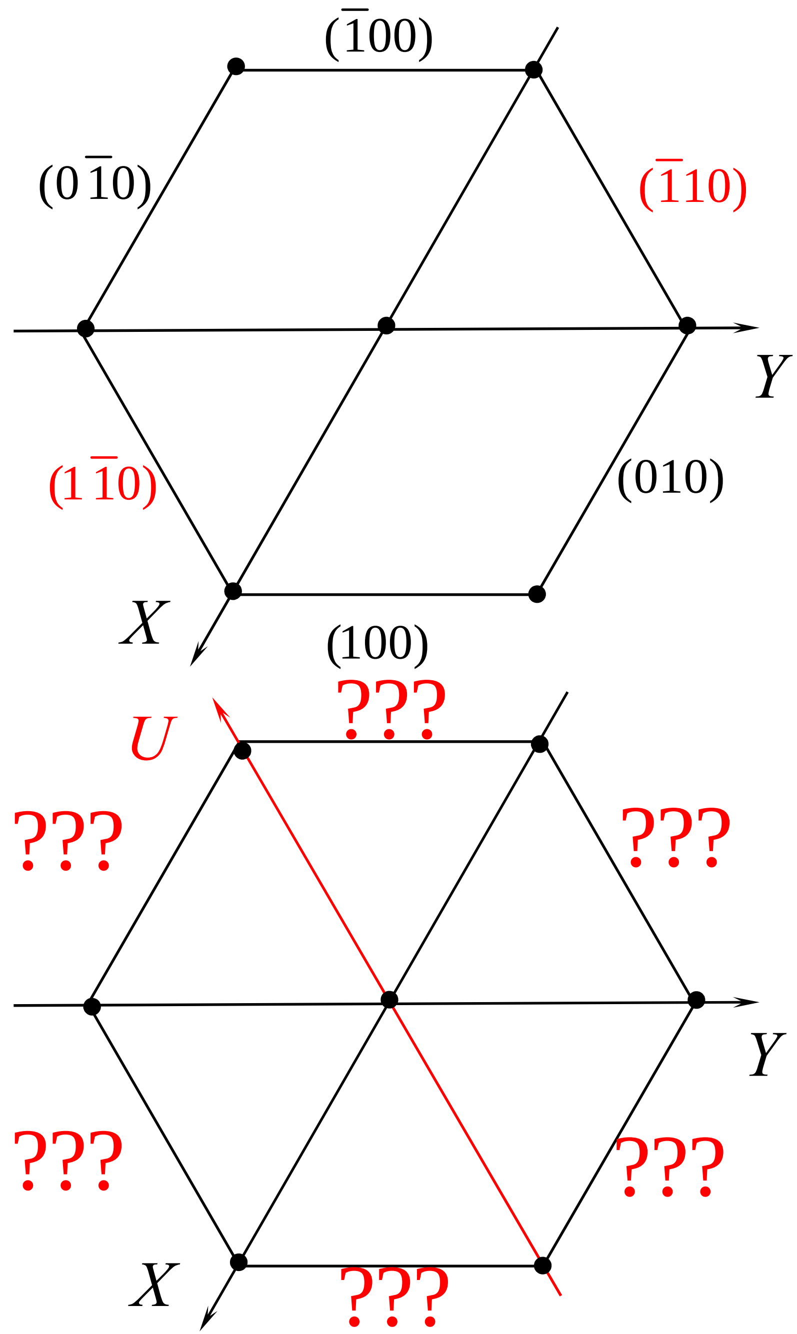
Кубическая		
Тетрагональная		
Ромбическая		
Гексагональная		
Моноклинная		
Триклинная		

Заполнить самостоятельно

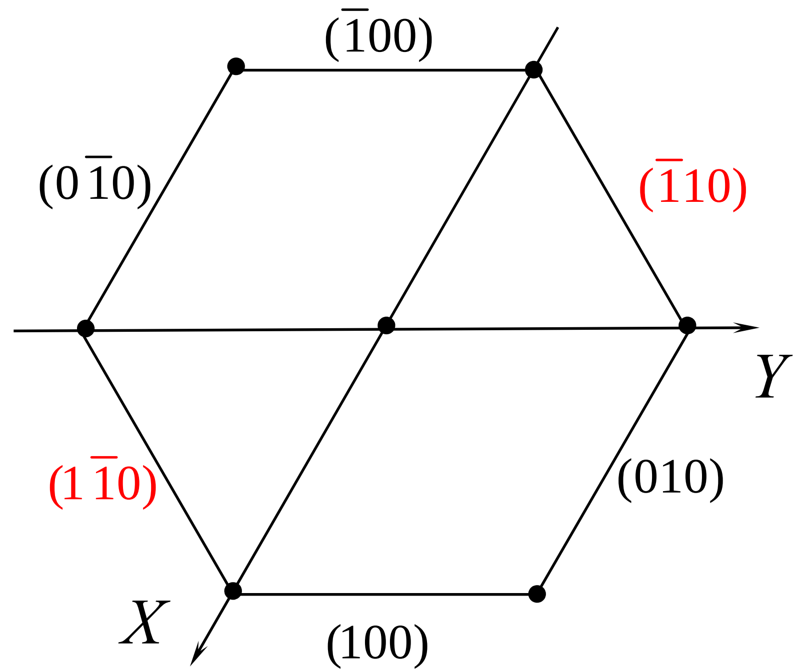
Гексагональную сингонию нередко подразделяют на *гексагональную* и *тригональную*, поскольку в ряде случаев элементарная ячейка может быть выбрана в виде ромбоэдра с $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} = \boldsymbol{c}$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

2.5. Особенности индицирования гексагональных кристаллов

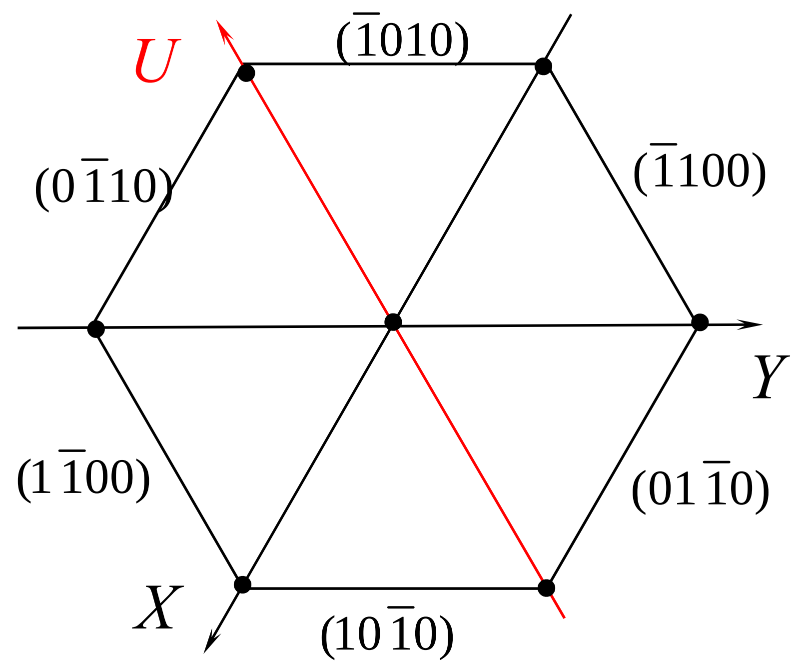




$$\boxed{\frac{a}{A} = h \quad \Rightarrow \quad i = -\frac{d}{I}}$$

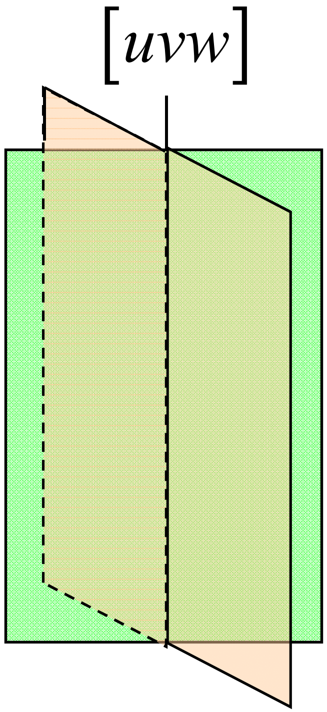


(1) $$\boxed{\begin{gathered}(hkl) \Rightarrow (hkil) \\ i = -(h+k)\end{gathered}}$$



(2) $$\{hkil\} \Leftrightarrow \{1100\}$$

2.6. Кристаллографическая зона.



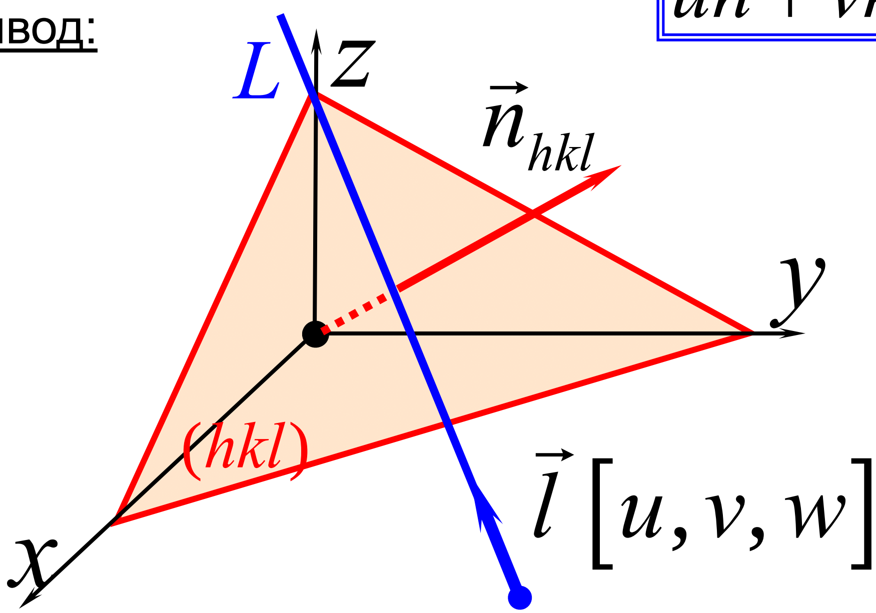
Кристаллографической зоной называется совокупность плоскостей кристалла, параллельных одному кристаллографическому направлению.

Узловая прямая, по которой пересекаются все плоскости зоны, называется ***осью зоны***.

Уравнение, определяющее условие параллельности прямой и плоскости, называется ***уравнением зоны*** или ***условием зональности:***

$$\boxed{uh + vk + wl = 0} \quad \textbf{(3)}$$

<u>Вывод:</u>



$$(hkl) \parallel L$$

$$\Updownarrow$$

$$\vec{l} \perp \vec{n}_{hkl}$$

$$(\vec{l} \bullet \vec{n}_{hkl}) = 0$$

$$uh + vk + wl = 0$$

Таким образом:

используя уравнение зоны (3) можно определить:

•индексы оси зоны [***uvw***], если известны индексы 2-х плоскостей, принадлежащих этой зоне;

•индексы плоскости, принадлежащей 2-м зонам, если известны оси этих зон;

•др. варианты…

Пример 1: Найти индексы (hkl) плоскости, принадлежащей одновременно 2-м зонам $[u_1v_1w_1]$ и $[u_2v_2w_2]$.

Решение сводится к нахождению вектора $\vec{n}_{hkl}$, перпендикулярного двум векторам $\boldsymbol{l_1}$ и $\boldsymbol{l_2}$:

$$\vec{n}_{hkl} \perp \begin{cases} \vec{l}_1\left[u_1, v_1, w_1\right] \\ \vec{l}_2\left[u_2, v_2, w_2\right] \end{cases} \qquad \textbf{(4)}$$

Определим вектор $\vec{n}_{hkl}$, воспользовавшись понятием векторного произведения:

$$\vec{c} = \left[\vec{a} \times \vec{b} \right]$$

(5)
$$\vec{n} = \left[\vec{l}_1 \times \vec{l}_2 \right] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix} =$$

$$\vec{i}\underbrace{(v_1 w_2 - w_1 v_2)}_{h} - \vec{j}\underbrace{(u_1 w_2 - w_1 u_2)}_{k} + \vec{k}\underbrace{(u_1 v_2 - v_1 u_2)}_{l}$$

Задача решена, индексы плоскости найдены.

Практически, в кристаллографии используют прием:

(6)

$$\begin{array}{c|ccccc|c} u_1 & v_1 & w_1 & u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 & u_2 & v_2 & w_2 \end{array} \qquad \searrow + \quad - \nearrow$$

$$h:k:l=(v_1w_2-w_1v_2):(w_1u_2-u_1w_2):(u_1v_2-v_1u_2)$$

<u>Пример 2</u>: Найти индексы (hkl) плоскости, принадлежащей одновременно 2-м зонам [100] и [110] .

<u>Решение:</u>

$$\begin{array}{c|cccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

$$h:k:l=0:0:1 \qquad (hkl)=(001)$$

<u>Пример 3</u>: Найти индексы прямой пересечения 2-х плоскостей ($h_1k_1l_1$) и ($h_2k_2l_2$), то есть найти индексы оси зоны, содержащей эти плоскости.

$$(h_1k_1l_1),\quad (h_2k_2l_2)$$

$$\vec{l}\,[uvw]-?$$

<u>Решение:</u>

$$\left.\begin{aligned} &\vec{n}_1\,[h_1k_1l_1]\perp(h_1k_1l_1)\\ &\vec{n}_2\,[h_2k_2l_2]\perp(h_2k_2l_2)\end{aligned}\right\}\rightarrow\left\{\begin{aligned} &\vec{n}_1\perp\vec{l}\\ &\vec{n}_2\perp\vec{l}\end{aligned}\right.$$

$$\begin{aligned} &(\vec{n}_1,\vec{l}\,)=0\\ &(\vec{n}_2,\vec{l}\,)=0\end{aligned}\quad\left\{\begin{aligned} &h_1u+k_1v+l_1w=0\\ &h_2u+k_2v+l_2w=0\end{aligned}\right.\Longrightarrow\begin{vmatrix}\vec{i} & \vec{j} & \vec{k}\\ h_1 & k_1 & l_1\\ h_2 & k_2 & l_2\end{vmatrix}$$

(7)

$$\begin{array}{c|cccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1\\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2\end{array}$$

$$u:v:w=(k_1l_2-l_1k_2):(l_1h_2-h_1l_2):(h_1k_2-k_1h_2)$$

Пример 4: Найти индексы прямой пересечения 2-х плоскостей (130) и (111).

$$\vec{l}\,[uvw]-?$$

Решение:

$$\begin{array}{c|cccc|c} 1 & 3 & 0 & 1 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}$$

$$u:v:w=3:\bar{1}:\bar{2}$$

$$\vec{l}=\left[3\,\overline{1}\overline{2}\right]$$

Пример 5: Найти индексы прямой пересечения 2-х плоскостей (100) и (211).

$$\vec{l}\,[uvw]-?$$

Решение:

$$\begin{array}{c|cccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 2 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}$$

$$u:v:w=0:\bar{1}:1$$

$$\vec{l}=\left[0\,\bar{1}1\right]$$

Свойство плоскостей и осей, принадлежащих одной кристаллографической зоне (Вейсс, 1804).

Если индексы плоскости (hkl) являются линейной комбинацией индексов двух плоскостей ($h_1k_1l_1$) и ($h_2k_2l_2$) , принадлежащих одной зоне, то плоскость (hkl) принадлежит этой же зоне.

Доказательство:

Пусть

$$(h_1k_1l_1) \in [uvw] \qquad (h_2k_2l_2) \in [uvw] \Longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} h_1u + k_1v + l_1w = 0 \\ h_2u + k_2v + l_2w = 0 \end{array} \right. \Bigg| +$$

$$(h_1 + h_2)u + (k_1 + k_2)v + (l_1 + l_2)w = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\left((h_1 + h_2)(k_1 + k_2)(l_1 + l_2)\right) \in [uvw]}$$

ч. т.д.

Пример 6: Показать, что плоскости (130) и (111), а также плоскость (241) принадлежат одной зоне.

Решение: 1) Найдем индексы оси зоны $\vec{l}\,[uvw]$

$$\begin{array}{c|cccc|c} 1 & 3 & 0 & 1 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}$$

$$u:v:w = 3:\bar{1}:\bar{2}$$

$$\vec{l} = \left[3\,\overline{1}\overline{2}\right]$$

2) Покажем, что плоскость (241) принадлежат этой зоне

(3) $$\boxed{uh + vk + wl = 0}$$

$$uh + vk + wl = 3\cdot 2 - 1\cdot 4 - 1\cdot 2 = 0$$

$$\boxed{(241) \in [uvw]}$$

ч. т.д.

Контрольные вопросы и задания по Теме 2.

1. Что такое элементарная трансляция, элементарная ячейка?
2. Правило выбора кристаллографических осей координат.
3. Понятие и определение индексов узлов решетки.
4. Индексы узлов решетки, рядов (ребер), плоскостей, их обозначение.
5. Правила определения кристаллографических индексов плоскостей.
6. Дайте определение межплоскостного расстояния, периода идентичности.
7. Что называют кристаллографической зоной?
8. В чем заключается правило перекрестного умножения?
9. Сформулируйте основное свойство плоскостей и осей, принадлежащих одной кристаллографической зоне.
10. Показать, что индекс i в четырехосной системе координат, описывающей гексагональную решетку, связан с индексами (hkl) в трехосной системе координат соотношением:

$$i=-(h+k).$$