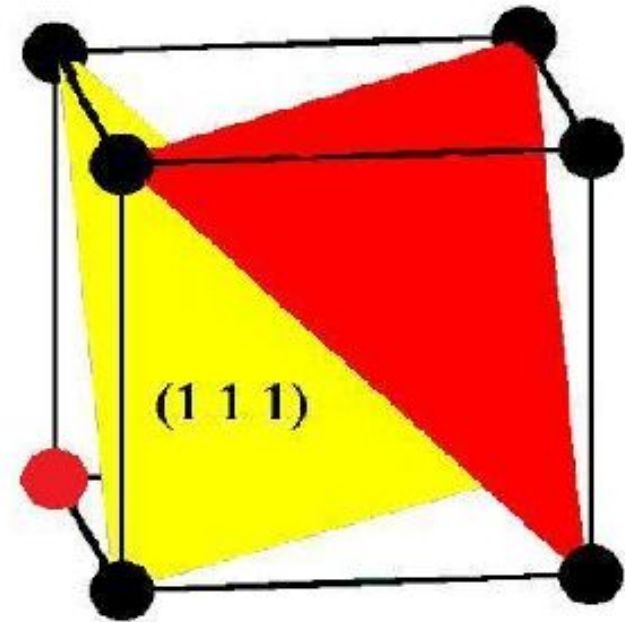
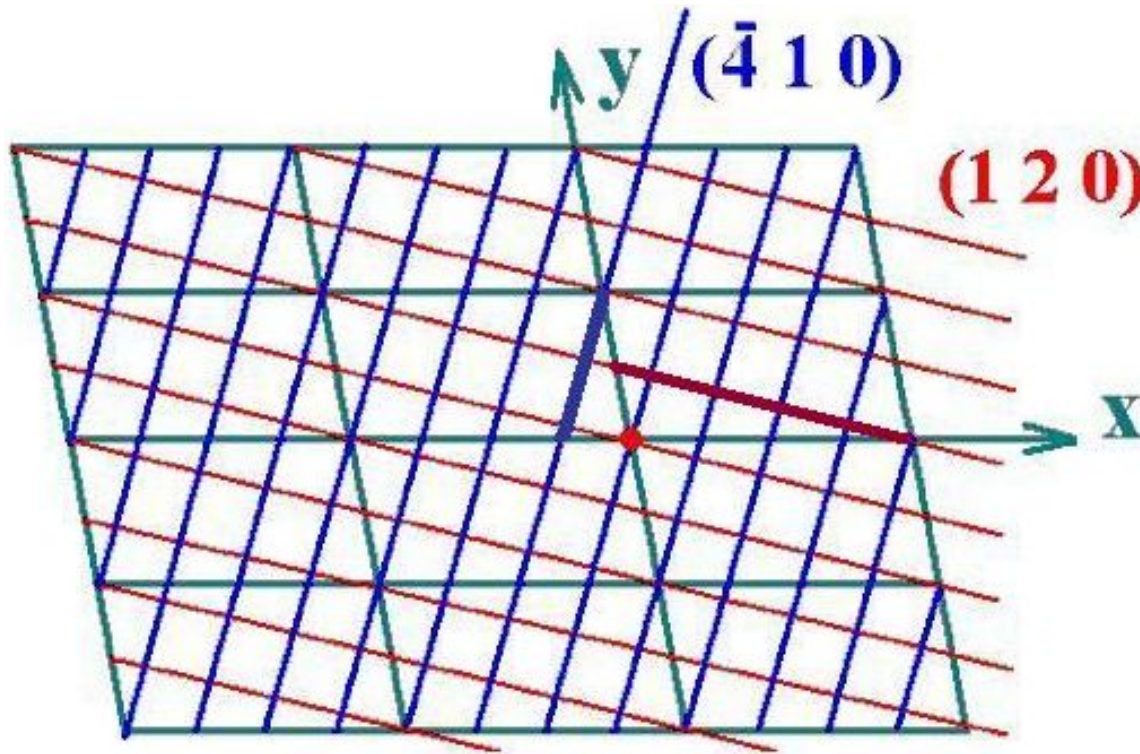


Кристаллографические индексы

(hkl) – индексы семейства узловых сеток или грани кристалла; целые числа, показывающие, на сколько частей данное семейство плоскостей нарезает соответствующую трансляцию. Нулевой индекс означает параллельность: нет пересечения (пересечение в бесконечности). Отрицательный индекс означает пересечение оси в отрицательном направлении. Отложите на осях x , y , z от начала координат соответствующие отрезки a/h , b/k , l/c . Три полученные точки определяют плоскость (hkl) , и она непременно пройдёт через узлы решётки. В примитивных решётках индексы h , k , l – взаимно простые числа.



hkl – индексы дифракционного максимума – отражения от этого семейства плоскостей; если они не взаимно простые – содержат общий сомножитель: **nh, nk, nl**, – это отражения n-ого порядка от семейства (hkl).

{hkl} – индексы совокупности симметрически эквивалентных семейств плоскостей или граней, т.е. **простой формы**;

[hkl] – индексы направления (узлового ряда); оно проходит через начало координат и узел с координатами **ha, kb, lc**.

<hkl> – индексы совокупности симметрически эквивалентных направлений.

Направление [hkl] обязательно пересекается с одноимённой плоскостью (hkl), но взаимно перпендикулярны они только в кубической сингонии, а в других сингониях это возможно лишь в частных случаях.

Упражнение. Запишите индексы направлений рёбер элементарной ячейки, диагоналей её граней и объёмных диагоналей, индексы граней ячейки и её диагональных сечений.

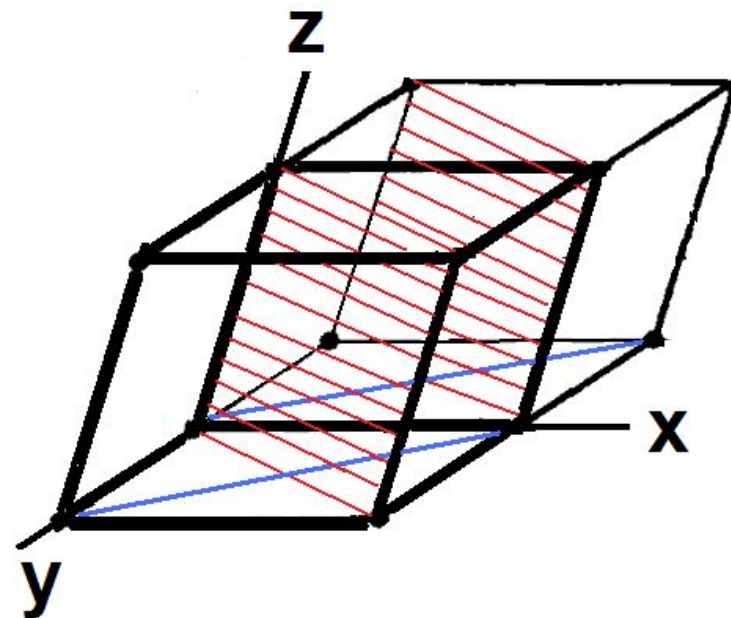
У параллелепипеда 12 рёбер, но разных направлений всего три: **[100], [010], [001]**

У параллелепипеда 6 граней, но разных семейств плоскостей всего три: **(100), (010), (001)**

В каждой из этих плоскостей 2 диагонали, а всего их 6: **[110], [1-10], [101], [-110], [011], [0-11]**

Столько же и диагональных сечений: **(110), (1-10), (101), (-110), (011), (0-11)**

Вершин у ячейки 8; соединяя попарно противоположные, получим 4 объёмных диагонали: **[111], [1-11], [11-1], [-111]**



Четырёхзначная система индексов в гексагональной

сингонии: $hkil$, где $i = -(h + k)$

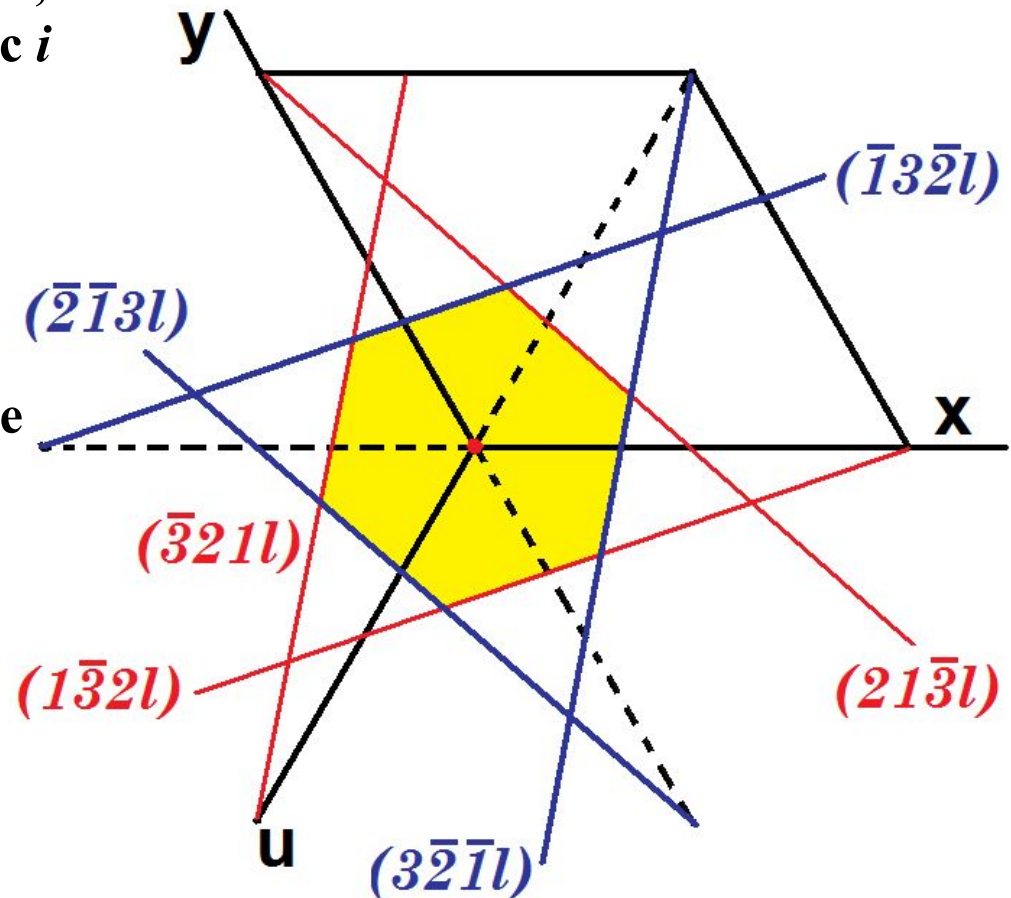
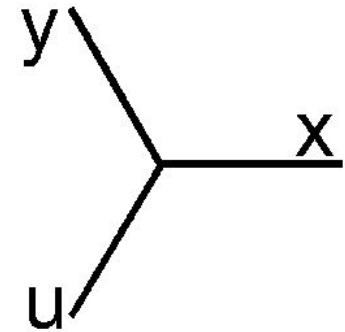
Действие оси 3: $x \rightarrow y$; $y \rightarrow u$; $u \rightarrow x$.

Действие оси 6: $x \rightarrow -u$; $y \rightarrow -x$; $u \rightarrow -y$.

Задание: написать индексы всех граней, в которые преобразуется грань $(21l)$ осями 3 и 6.

**$(21-3l)$ $(-13-2l)$ Разобравшись,
 $(-321l)$ $(-2-13l)$ можно индекс i
 $(1-32l)$ $(3-2-1l)$ отбросить.**

Все эти 6 семейств плоскостей имеют одинаковые межплоскостные расстояния, но строго эквивалентны лишь при наличии оси 6. А при оси 3 синие и красные сетки по-разному заселены атомами и имеют разные физико-химические свойства, дают разные интенсивности рентгеновских отражений. **Назовите простую форму $(21l)$!**
 $(21-l)$ – это та же самая форма?



Правила Бравэ для выбора элементарных ячеек

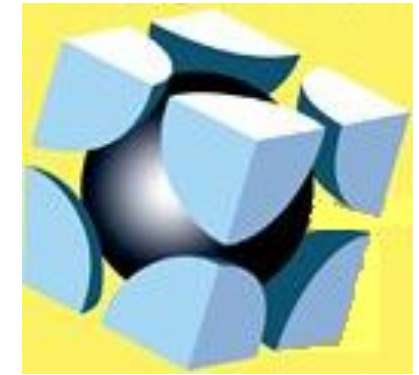


- 1) Симметрия ячейки должна соответствовать симметрии решётки (не занижать симметрию);
- 2) Число прямых углов должно быть максимально;
- 3) При соблюдении первых двух условий объём ячейки должен быть минимален - выбирайте по возможности примитивную ячейку, с узлами только в вершинах.

Вершина принадлежит восьми ячейкам, а в данной ячейке находится её $1/8$ часть, и всего получается $Z=8*1/8=1$ узел.

Если есть ещё узел внутри – то 2 узла.

Другой вариант подсчёта. Координаты восьми вершин : 000, 001, 010, 100, 110, 101, 011 и 111. Все точки, где хоть одна из координат равна единице или больше, уже относятся не к данной ячейке, а к соседним.



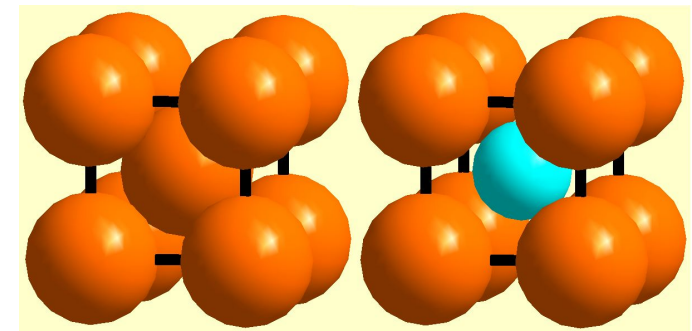
Остаётся только 000.

Объёмноцентрированная (I) ячейка имеет дополнительную трансляцию $[1/2 \ 1/2 \ 1/2]$

С-центрированная (C) – трансляцию $[1/2 \ 1/2 \ 0]$, в обоих случаях $Z=2$.

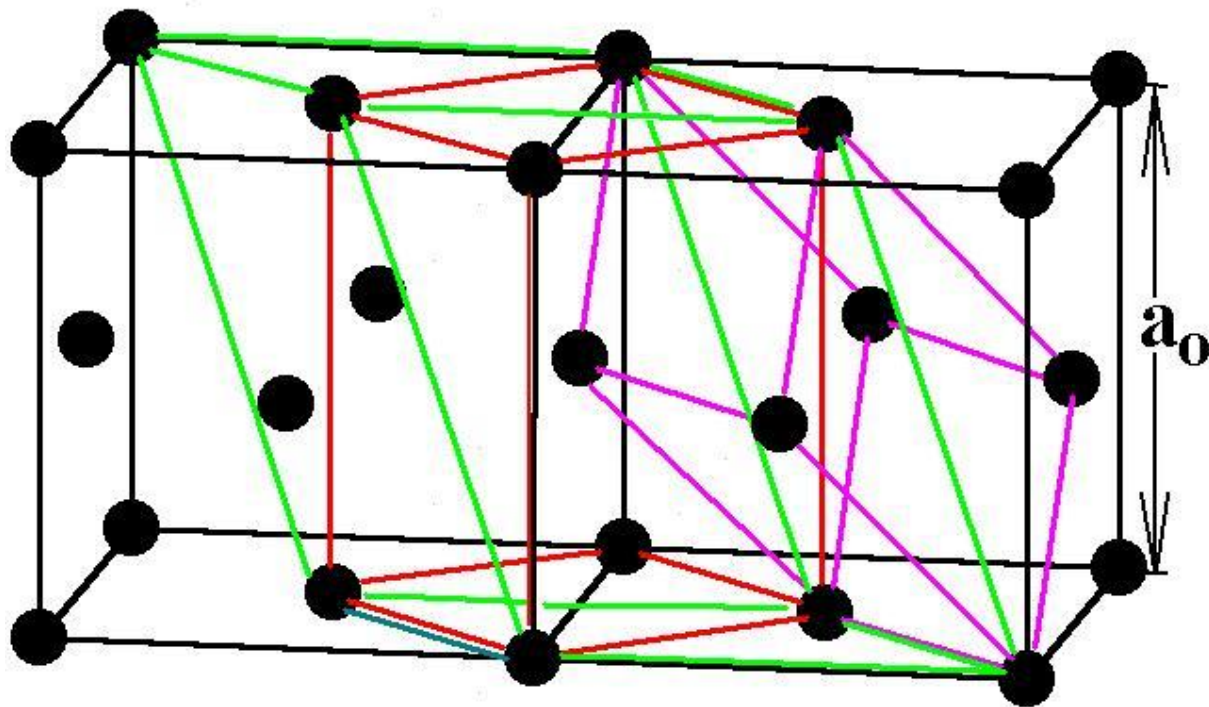
(Всесторонне) гранецентрированная имеет трансляции $[1/2 \ 1/2 \ 0]$, $[1/2 \ 0 \ 1/2]$ и $[0 \ 1/2 \ 1/2]$, $Z=4$.

Центрировка означает не то, что в центре есть какой-то атом, а то, что вершина и центр связаны трансляцией



Fe
I-ячейка: есть
трансляция
 $[1/2 \ 1/2 \ 1/2]$

CsCl
P-ячейка:
нет такой
трансляции



Чёрная – ГЦК с параметром a_0 , $Z=4$.

Красная – ОЦ тетрагональная, $a = a_0/\sqrt{2}$, $c = a_0$, $Z=2$.

Малиновая – ромбоэдрическая, $a = a_0/\sqrt{2}$, $\alpha = 60^\circ$, $Z=1$.

**Зелёная – ОЦ триклинная, $a = a_0$, $b = a_0/\sqrt{2}$, $c = a_0\sqrt{5}/2$,
 $\alpha = 54,74^\circ$, $\beta = 114,09^\circ$, $\gamma = 135^\circ$, $Z=2$.**

Стандартная ячейка в данном случае – кубическая, но при растяжении или сжатии вдоль оси 4 стандартной становится тетрагональная, а при растяжении вдоль оси 3 – гексагональная (не показана).

Сингония Ячейки Бравэ

Триклинная	P
Моноклинная	P, C
Ромбическая	P, C, I, F
Тетрагональная	P, I
Гексагональная	P, R
Кубическая	P, I, F

Почему дополнительные узлы – только в центрах граней или объёма или на 1/3 диагонали, а не в произвольных точках?

Почему в моноклинной сингонии нет A, B, I – ячеек?

Почему в тетрагональной сингонии нет A, B, C, F – ячеек?

Соотношение между R- и H-ячейками

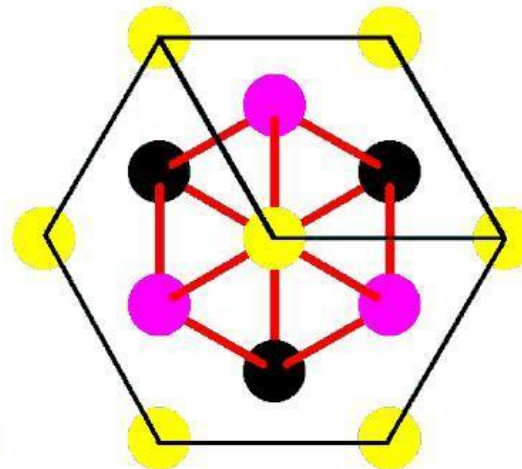
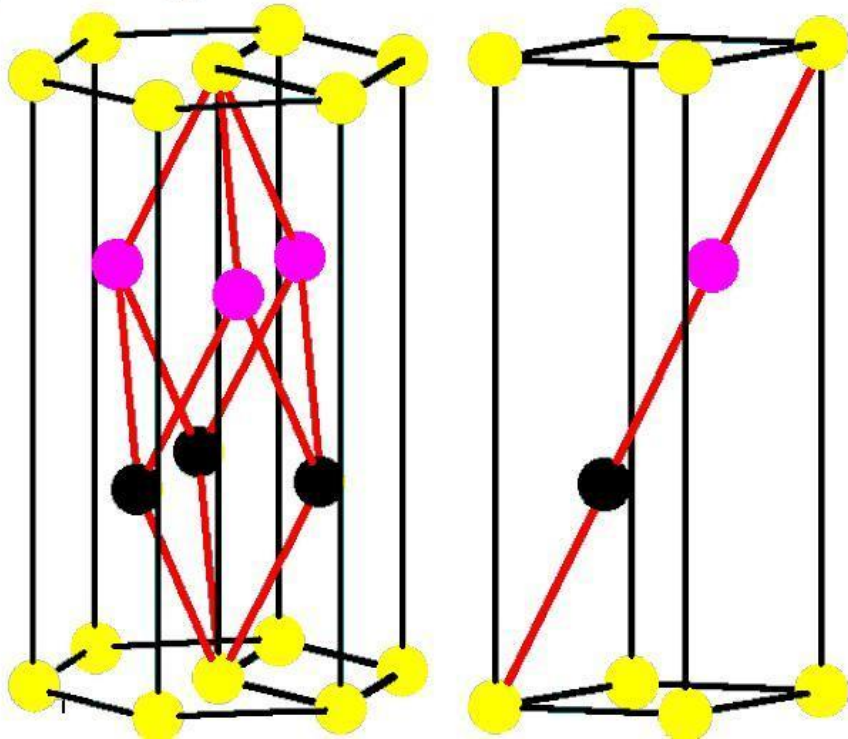
Все узлы идентичны, а разные цвета – только чтобы различать узлы на разных уровнях

$$a_R = a_H [1/3 + (c_H/3a_H)^2]^{1/2}$$

$$\alpha = 2 \arcsin \{ 0,5 [1/3 + (c_H/3a_H)^2]^{-1/2} \}$$

$$a_H = 2a_R \sin(\alpha/2)$$

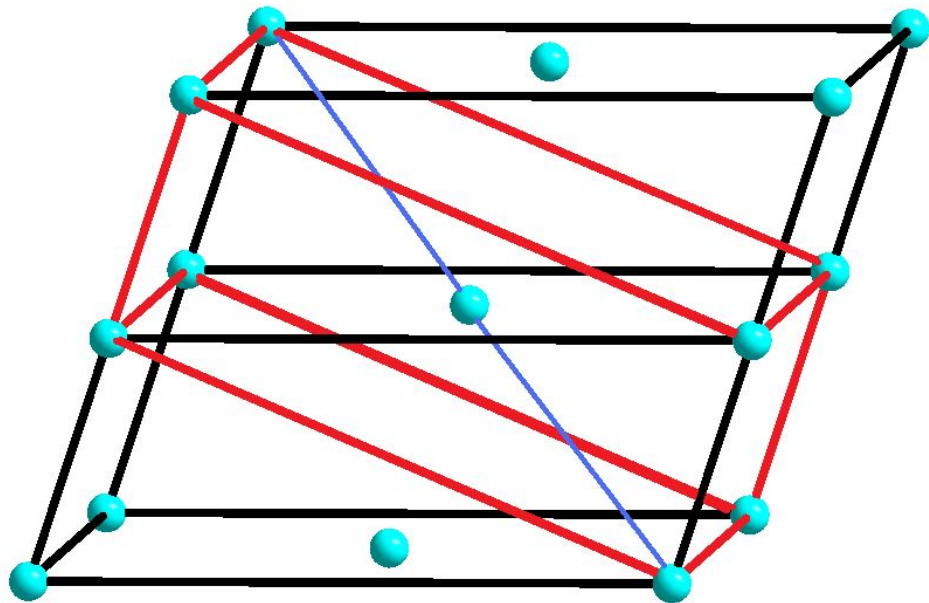
$$c_H = a_R [3(1 + 2\cos\alpha)]^{1/2}$$



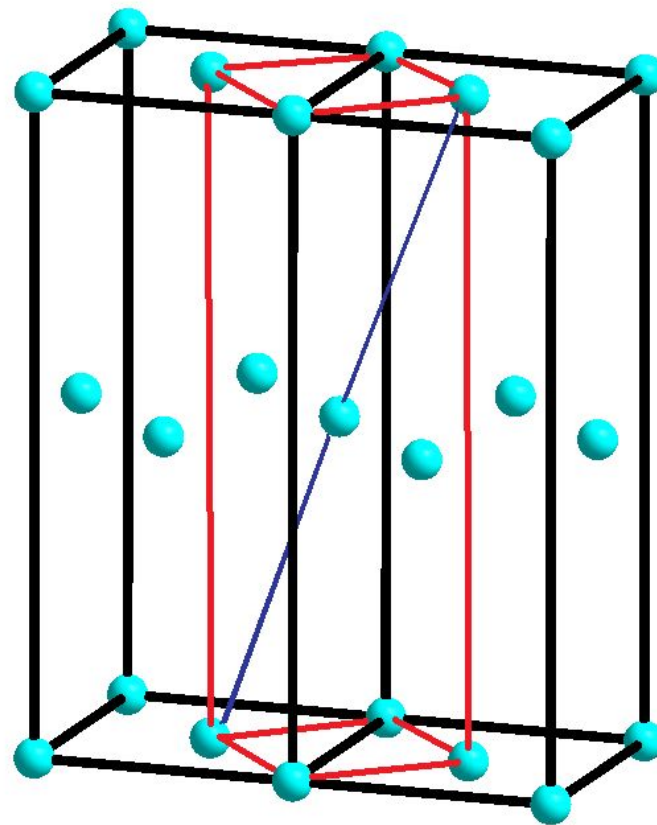
Внутренние узлы

1/3 2/3 1/3 и

2/3 1/3 2/3



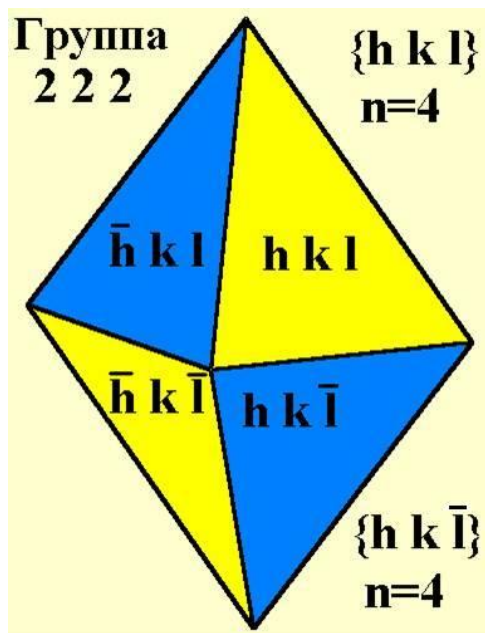
Чёрная – моноклинная С-ячейка.
Красная – моноклинная I-ячейка.
 У них одинаковый объём, обе удовлетворяют всем правилам Бравэ, но первая считается стандартной, а вторая (в данном случае) имеет то преимущество, что угол β ближе к прямому. Поэтому используются обе.



Чёрная – нестандартная тетрагональная F-ячейка.
Красная – тетрагональная I-ячейка вдвое меньшего объёма.
 F-ячейку используют только там, где она – результат искажения кубической.

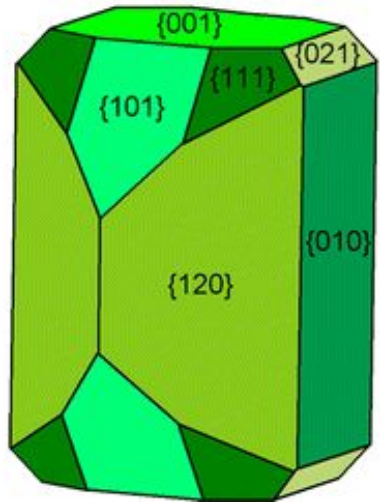
Простые формы и множители повторяемости

Общая форма – такая, грань которой размножается всеми элементами симметрии. Если же, например, грань перпендикулярна оси или плоскости симметрии, то она ими не размножается и является **частной**. **Закрытые формы**, в отличие от **открытых**, образуют замкнутый многогранник. Огранка кристалла может быть представлена одной закрытой формой (например, дипирамидой) или **комбинацией** открытых и закрытых форм. **Множитель повторяемости n** – число граней простой формы. Для дифракционных методов важно другое: это число идентичных отражений при разных ориентациях монокристалла, а в методе порошка – число ориентаций кристалла, участвующих в данном отражении, что влияет на интенсивность. Более подробно – в любом учебнике кристаллографии.



В точечной группе **mmm** общая форма $\{hkl\}$ – ромбическая дипирамида, $n=2^3=8$: (hkl) , $(-hkl)$, $(h-k-l)$, $(hk-l)$, $(-h-k-l)$, $(h-k-l)$, $(-hk-l)$, $(-h-kl)$, жёлтые и синие грани эквивалентны. В точечной группе **mm2** нет плоскости, перпендикулярной оси z , поэтому (hkl) и $(hk-l)$ не эквивалентны, дипирамида распадается на две независимые ромбические пирамиды: верхнюю и нижнюю, $n=2^2=4$ у каждой. В точечной группе **222** ромбическая дипирамида тоже распадается на две формы с $n=4$, но по-другому. Каждая четвёрка (синяя и жёлтая) образует ромбический тетраэдр, они отличаются скоростями роста, и одна из форм может вовсе исчезнуть.

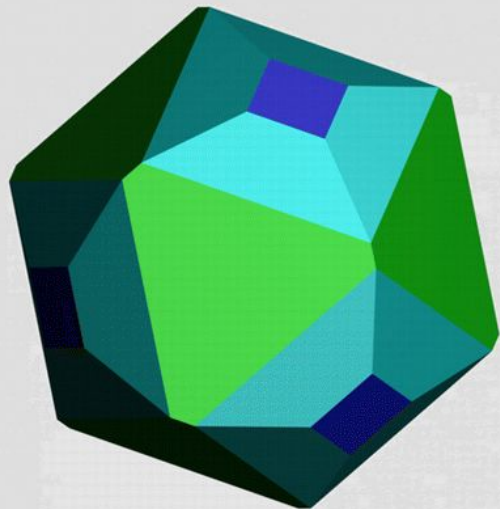
Mg_2SiO_4 mmm



Оливин

$\{hkl\}$	n	название	открытая или закрытая
$\{001\}$		пинакоид	
$\{021\}$		ромбическая призма	
$\{111\}$		ромбическая дипирамида	
$\{101\}$			
$\{010\}$			
$\{120\}$			

Si $m\bar{3}m$



Цвет $\{hkl\}$ n название

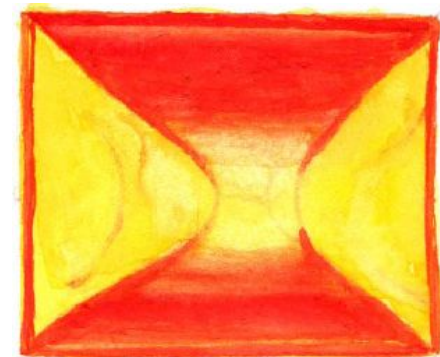
Синий

Зелёный

Голубой

тетрагонтриоктаэдр

Фталевая кислота (2/m),
 выращенная в присутствии
 индикатора метилрота. На
 гранях $\{101\}$ он протонирован
 – красный, на $\{021\}$ – жёлтый



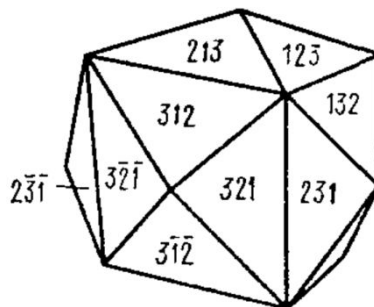
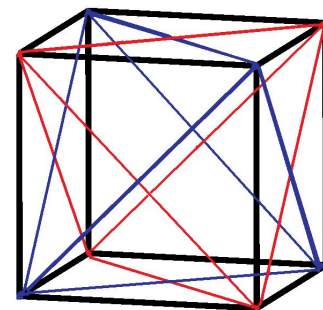
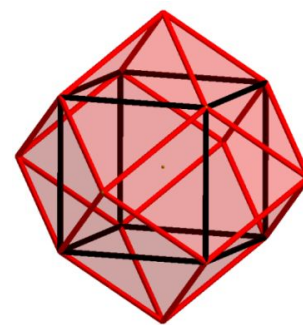
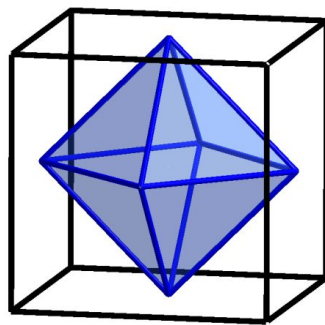
(B. Kahr, L. Vasquez, CrystEngComm, 2002, 4, 514)

Ещё примеры подсчёта множителей повторяемости

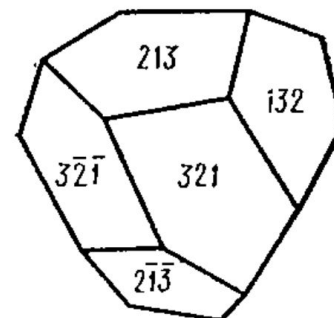
(У Миркина в такой таблице (с. 392) есть ошибки. Найдите!)

Оси 3 в кубической сингонии дают циклическую перестановку осей: $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$; ось 4, идущая вдоль z , переставляет направления: $x \rightarrow y, y \rightarrow -x$. Действие осей 3 и 6 в гексагональной сингонии, действие координатной плоскости и центра инверсии уже разобрано. Координатная ось 2 меняет знаки двух других координат. Диагональная плоскость симметрии переставляет местами две оси, а диагональная ось 2 одновременно с этим ещё меняет знак третьей координаты. **Порядок точечной группы – это число граней формы общего вида, а у частных форм он может быть меньше.**

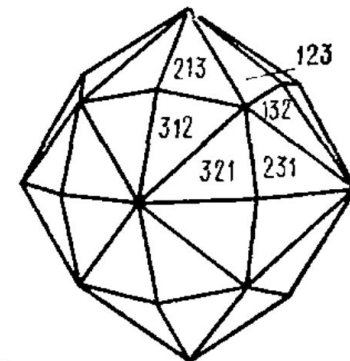
{hkl}	$m\bar{3}m$	$m\bar{3}$	$-43m$	432	23
{h00}	6	6	6	6	6
{hhh}	8	8	4	8	4
{hh0}	12	12	12	12	12
{hhl}	24	24	12	24	12
{hk0}	24	12	24	24	12
{hkl}	48	24	24	24	12



Гексатетраэдр



Пентагонтритетраэдр



Гексоктаэдр