Лекция 2
2 тема. Метод кристаллографического индицирования.
Закон целых чисел

Для описания кристаллических многогранников применяется метод кристаллографического индицирования, удобный для любой кристаллографической системы координат (косоугольной, прямоугольной). Познакомимся с этим методом.

Символы узлов

Если один из узлов решетки (сетки) выбрать за начало координат, то любой другой узел решетки определяется радиусом-вектором

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

где m, n, p – три числа, которые называются индексами данного узла и являются его координатами.

Совокупность чисел $m\ n\ p$, записанная в двойных квадратных скобках [[$m\ n\ p$]], называется *символом узла.* Числа пишутся подряд, без запятых, знак минус ставится над цифрой. Могут применяться и дробные индексы.

Например:

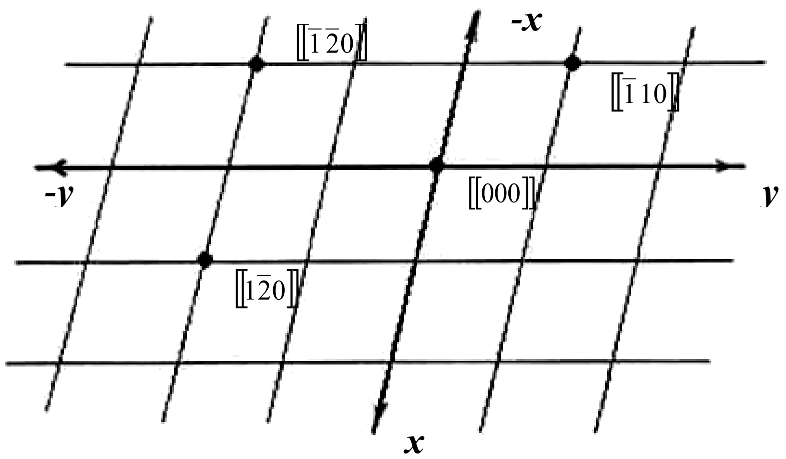


Рисунок 9 - ***Символы узлов в плоской сетке***

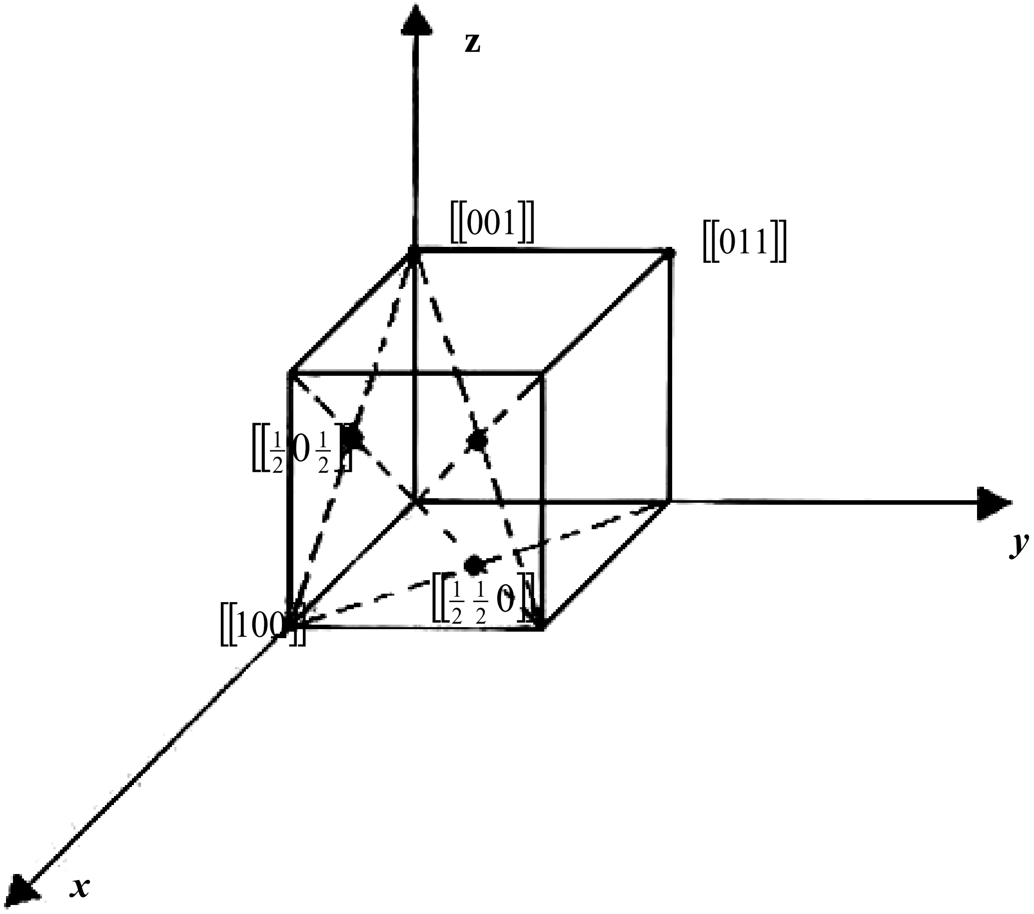


Рисунок 10 - ***Символы узлов в кубе***

Символы рядов (ребер)

Ряд или узловая прямая, а также ребро кристалла характеризуются наклоном в выбранной системе координат. Если ряд не проходит через начало координат, то мысленно сдвинем его так, чтобы он прошел через начало координат. Тогда направление ряда определяется двумя точками: началом координат и любым узлом ряда. Символ этого узла принимают за символ ряда и пишут в квадратных скобках [m n p] (только целые числа). Очевидно, что этот символ характеризует семейство параллельных рядов, а также параллельные ребра многогранника (рисунок 11). Ряд $[1\ \bar{1}\ 0]$ можно охарактеризовать и $[2\ \bar{2}\ 0]$ и $[3\ \bar{3}\ 0]$ и т.д., но для определения символа ряда принято выбирать узел, ближайший к началу координат.

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

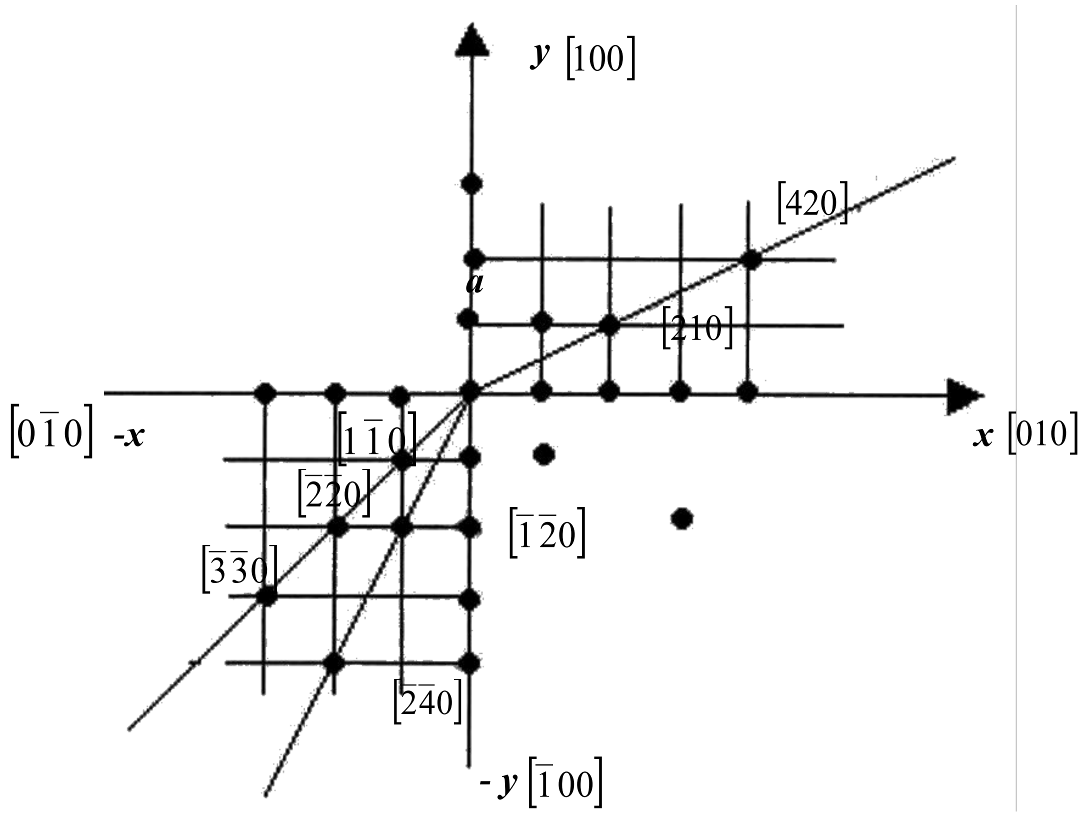


Рисунок 11 - ***Символы направлений***

Оси координат соответственно имеют направления (рисунок 12):

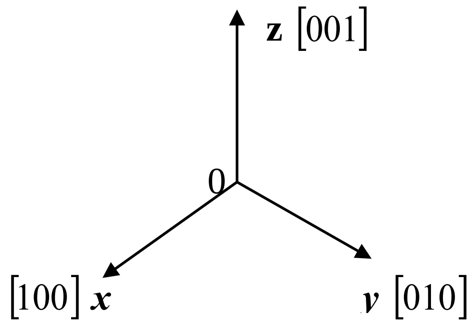


Рисунок 12 - ***Символы осей координат***

Здесь видно преимущество кристаллографического индицирования: символы осей не зависят от углов между осями координат и от осевых отрезков.

Символы плоскостей (граней)

Плоские сетки в пространственной решетке и соответствующие им грани многогранника тоже характеризуются наклоном в заданной системе координат. Любая грань кристалла параллельна какой-либо плоской сетке, а значит, бесконечному числу параллельных ей плоских сеток.

Пусть некая плоскость решетки пересекает все оси координат, отсекая на них отрезки *ma, nb, pc*. Отношение чисел $m : n : p$ характеризует наклон плоскости к осям координат. Так, для семейства плоскостей на рисунке 13 имеем:

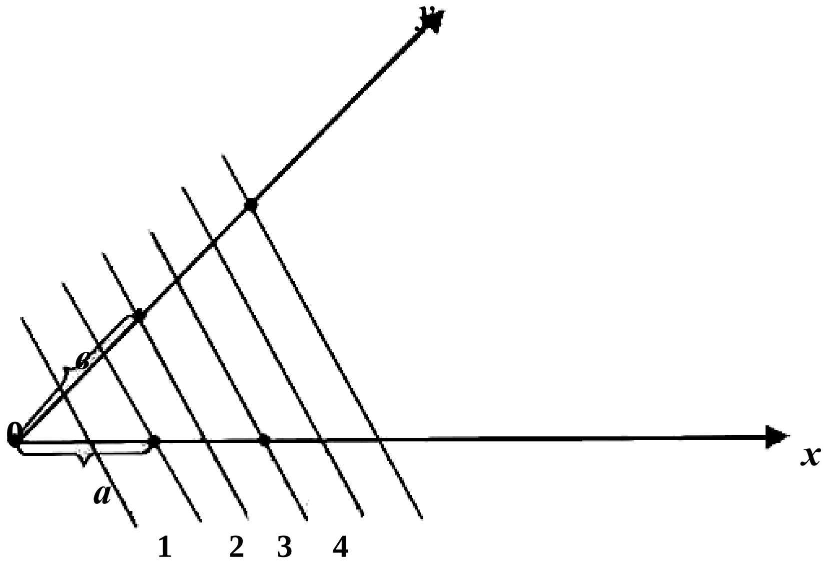


Рисунок 13 - ***Определение символов семейства параллельных плоскостей***

Номер плоскости	**Отрезки по осям**			**m : n : p**
	x	**y**	**z**	
1	a/2	b/3	∞	1/2: 1/3: ∞ = 3 : 2 : ∞
2	a	2/3 b	∞	1 : 2/3 : ∞ = 3 : 2: ∞
3	3/2 a	b	∞	3/2 : 1: ∞ = 3 : 2 : ∞
4	2a	4/3 b	∞	2 : 4/3 : ∞ = 3 : 2 : ∞

Серию отношений чисел $m : n : p$ для всех параллельных плоскостей можно представить как отношение целых взаимно простых чисел $p : q : r$ - *параметры Вейсса.* Так, для рассматриваемой плоскости:

1/2:1/3: ∞ = 1:2/3: ∞ = 3/2:1: ∞ = 2:4/3: ∞ = 3:2: ∞ = p : q : r.

В кристаллографии принято плоскости характеризовать не параметрами Вейсса, а так называемыми *индексами Миллера*. Индексы Миллера – это величины, обратные параметрам Вейсса, приведенные к целым числам; они обозначаются $h : k : l$ и определяются соотношением: 1/p : 1/q : 1/r = h : k : l.

Для приведенного примера (рисунок 13) имеем:

1/3 : 1/2 :1/∞ = 2 : 3 : 0.

Числа h, k, l называются *индексами плоскости*. Индексы, записанные подряд в круглых скобках, называют *символом плоскости* (h k l).

Для рассмотренного примера (2 3 0).

Символом (h k l) характеризуется вся совокупность параллельных плоскостей. Этот символ означает, что система параллельных плоскостей рассекает отрезок a на h частей, b – на k частей, c – на l частей, то есть отсекает на осях координат отрезки a/h; b/k; c/l.

Рассмотрим некоторые символы плоскостей в кубической структуре (рисунок 14).

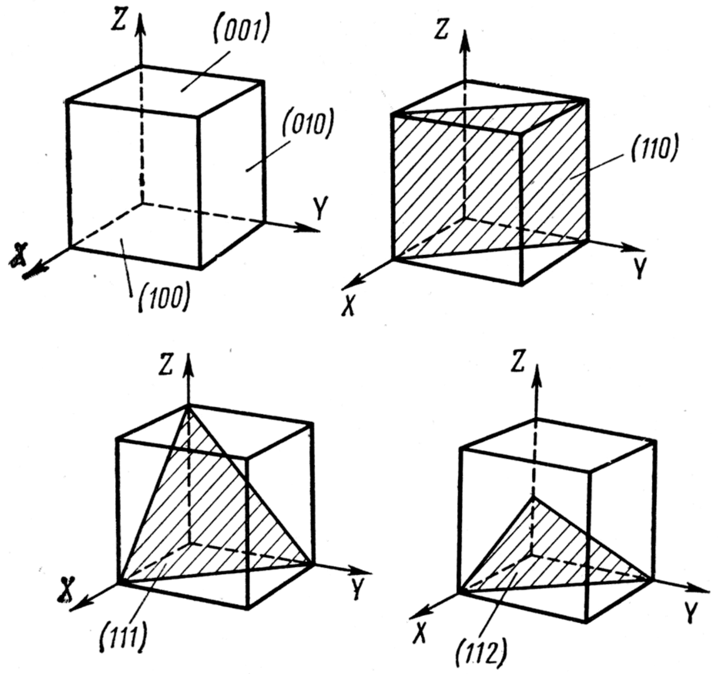


Рисунок 14 - ***Символы некоторых плоскостей в кубической ячейке***

На рисунке видно, что если плоскость параллельна оси координат, то есть пересекается в бесконечности, то индекс плоскости по этой оси будет $1/\infty = 0$.

Следовательно, символы координатных плоскостей независимо от углов между осями всегда будут:

XOY = (001);
YOZ = (100);
XOZ = (010).

Метод кристаллографического индицирования был установлен задолго до того, как была доказана решетчатая структура кристалла (М. Лауэ – 1912г.). Он основывался на замечательном эмпирическом законе кристаллографии – законе целых чисел.

Закон целых чисел

Этот закон хорошо иллюстрируется на рисунке 15.

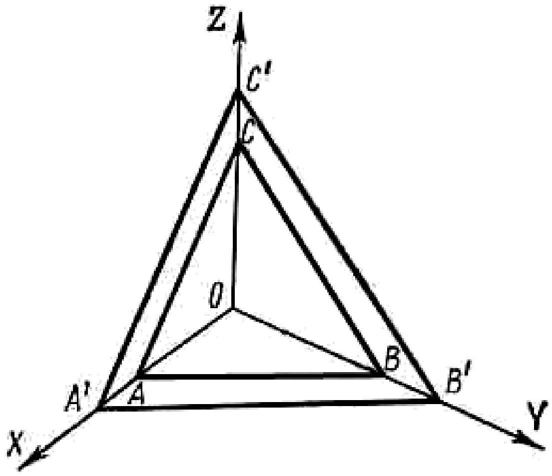


Рисунок 15 – *К пояснению закона Гаюи*

За оси координат выберем направление трех непараллельных ребер многогранника. Какая-либо грань кристалла – «единичная» - отсекает на осях координат отрезки ОА, ОВ, ОС.

Закон целых чисел, установленный Гаюи (1819 г.), гласит: для любых двух граней реального кристалла двойные отношения параметров равны отношению малых целых чисел, то есть

ОА\`/ОА : ОВ\`/ОВ : ОС\`/ОС = p : q : r, где

p : q : r – простые, целые и для реальных кристаллов – маленькие числа.

Плоскость А\`В\`С\` может быть гранью кристалла, только если выполняется указанное соотношение. Именно поэтому на растущем кристалле появляются грани только определенного наклона, характерного для данного вещества.

Грани, для которых отношения p : q : r – иррациональны – невозможны. Как правило, p , q , r – это числа, не превышающие 5.

Таким образом, согласно закону Гаюи, наклон всякой грани кристалла можно определить тремя целыми числами, если за оси координат выбрать направление трех ребер кристалла, а за параметры – отрезки, отсекаемые на этих осях одной из граней.

Итак, любую плоскость или грань кристалла можно определить тремя целыми числами – индексами Миллера (h k l), которые представляют собой величины, пропорциональные обратным отношениям осевых отрезков согласно закону целых чисел.

Чтобы найти индексы Миллера, надо:

- выразить отрезки, отсекаемые плоскостью по осям через a : b : c ;
- найти обратные значения этих величин;
- привести их к виду наименьших возможных рациональных дробей, имеющих общий знаменатель;
- отбросить общий знаменатель и полученные целые числа заключить в круглые скобки.

Чтобы построить плоскость (h k l), надо:

- нанести на оси координат отрезки a/h; b/k; c/l;
- через полученные точки проходит плоскость семейства (h k l),

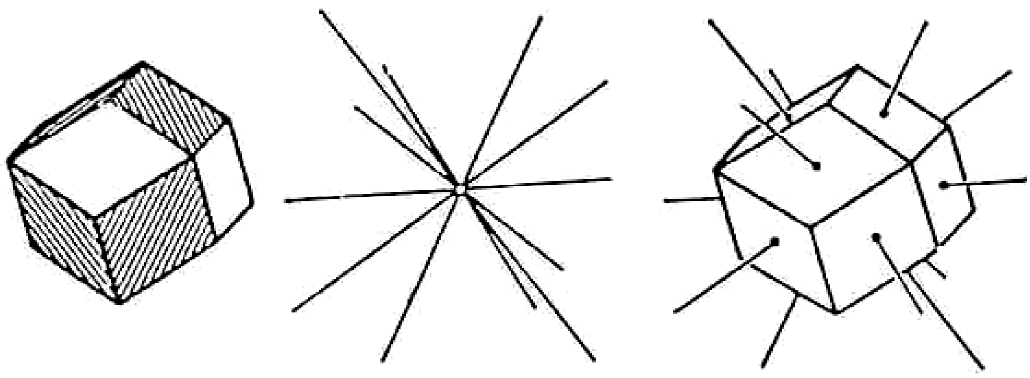
ближайшая к началу координат.

Символы плоскостей и направлений определяют по рентгенограммам; однако, это удобно делать и с помощью кристаллографических проекций.

3 Кристаллографические проекции

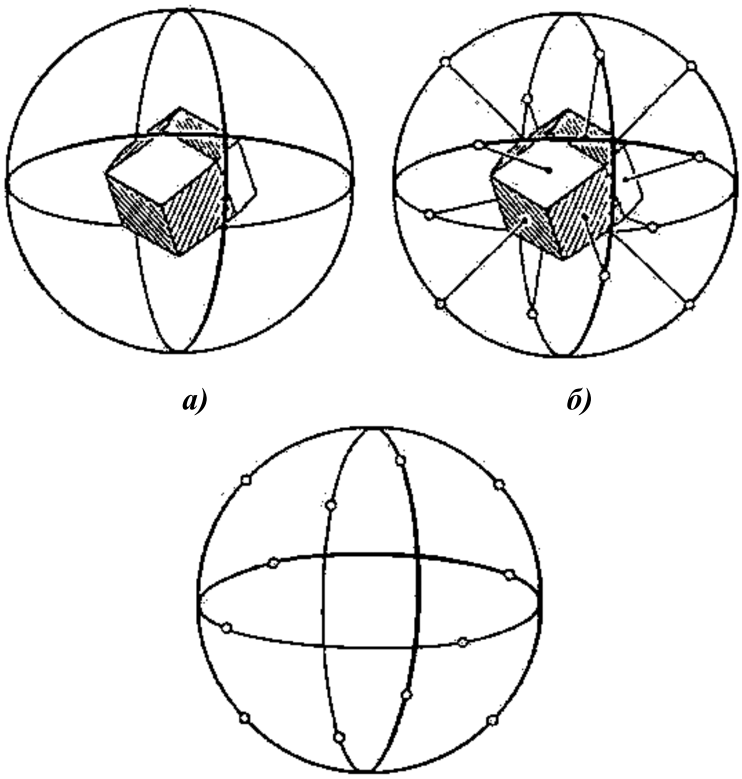
Согласно закону постоянства углов, характерными параметрами любого кристаллического вещества являются углы между гранями кристалла. Поэтому форму кристаллического многогранника, расположение его элементов симметрии можно характеризовать набором углов между гранями.

В кристаллографии чаще пользуются углами между нормалями к граням, именно эти углы определяются по рентгенограммам и гониометром. Зная углы между нормалями к граням, можно заменить кристаллический многогранник его *полярным комплексом*, то есть совокупностью прямых, перпендикулярных граням кристалла и проходящим через одну точку в центре комплекса (рисунок 16 и рисунок 17).



а) *б)* *в)*

Рисунок 16 – ***Кристаллический многогранник:***
а – ромбический додекаэдр; б – его полярный комплекс; в – нормали к его граням.



а) *б)*

в)

Рисунок 17 – ***Построение сферы проекций (а) и сферической проекции (б); полная сферическая проекция ромбического додекаэдра (в)***

Сферическая проекция

Из точки пересечения прямых (на рисунке 16 б) опишем сферу (рисунок 17 а). Пересечение нормалей к граням кристалла с поверхностью сферы представляет собой сферическую проекцию этих нормалей (рисунок 17 б). Каждая нормаль проецируется на поверхность сферы проекций в виде точки. Каждая из точек проекций соответствует одной из граней кристалла (рисунок 17 в). Положение любой точки на поверхности сферы проекций характеризуется двумя координатами: ρ - полярное расстояние, отсчитываемое по любому направлению от нуля (северный полюс); φ - долгота, отсчитываемая по экватору от меридиана, принятого за ноль (рисунок 18).

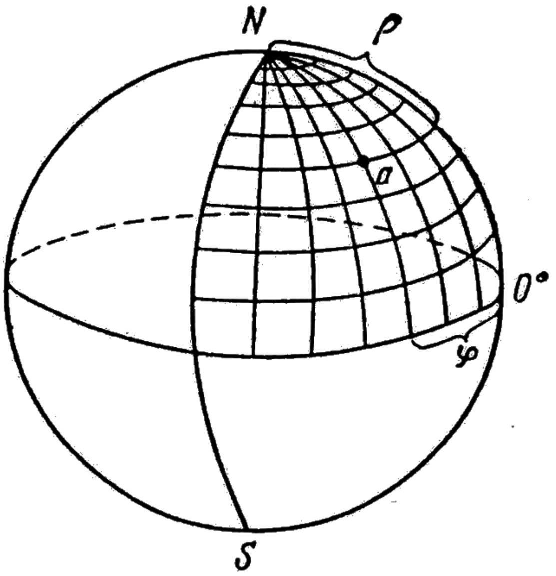


Рисунок 18 – ***Сферические координаты на поверхности сферы проекций***

Сферическая проекция кристалла наглядна, но в практическом отношении не очень удобна. Ее следует спроецировать на плоскость, так появляются другие виды проекций.

Стереографическая проекция

За плоскость стереографической проекции Q выбирается экваториальная плоскость, на которую сфера проецируется в виде круга проекций (рисунок 19). В одном из полюсов этой сферы помещается точка зрения S.

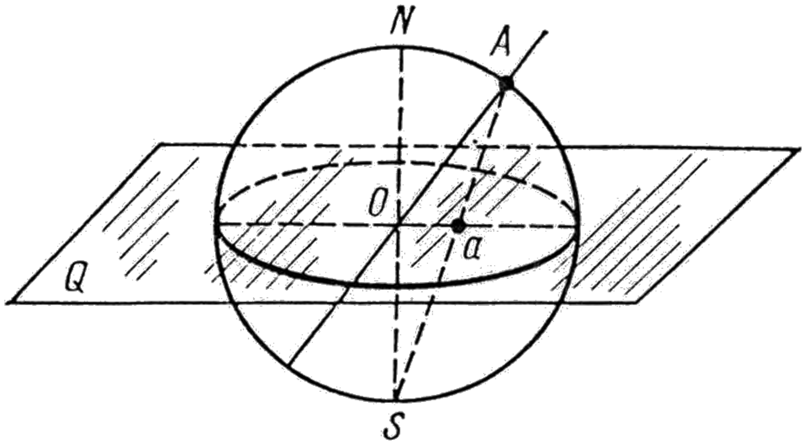
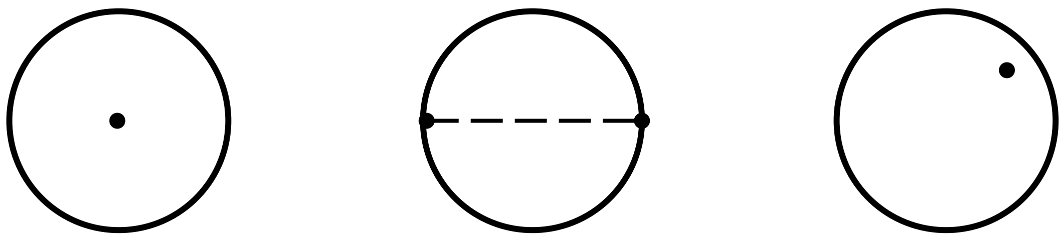


Рисунок 19 - ***Построение стереографической проекции***

Чтобы спроецировать направление OA, проводим линию AS от полюсной точки A этого направления до точки зрения S. Точка *a* пересечения линии AS с плоскостью проекций есть стереографическая проекция направления OA.

Стереографические проекции направлений изображаются *точками* внутри круга проекций. Очевидно, что вертикальное направление изображается точкой в центре круга (рисунок 20 а), горизонтальное – как две точки на экваторе. Плоскость, проходящая через точку О и пересекающая сферу, проецируется в виде дуги.



а) *б)* *в)*

Рисунок 21 - ***Стереографическая проекция направлений:***
а) перпендикулярное; б) в самой плоскости; в) под углом

Для построения стереографической проекции важны два ее свойства:
1) любая окружность, проведенная на сфере, на проекции также изображается окружностью;
2) на стереографической проекции не искажаются угловые соотношения.

Стереографические проекции используются, в основном, для изображения элементов симметрии кристалла (рассмотрим позже), для представления анизотропии физических свойств и изучения пластической деформации и дефектов структуры.

Гномостереографическая проекция

Эта проекция чаще применяется для изображения формы кристалла. При этом проецируется не многогранник, а его полярный комплекс, то есть не грань кристалла, а его нормаль к ней.

Плоскостью гномостереографической проекции служит экваториальная плоскость сферы проекций. *Гномостереографическая проекция* представляет собой совокупность стереографических проекций нормалей к граням кристалла.

Чтобы получить гномостереографическую проекцию плоскости, проводят нормаль к этой плоскости до пересечения со сферой проекции и далее линию, соединяющую полученную точку с точкой зрения S.

Чтобы построить гномостереографические проекции нормалей, пересекающих шар в нижней полусфере, точку зрения переносят в северный полюс N. Проекции граней, расположенных выше плоскости проекции, обозначают О, а ниже – Х (или о – верхняя грань, • – нижняя грань).

Горизонтальные грани проецируются в центре круга проекций, вертикальные – на самом круге, а косые грани – внутри него (рисунок 22). Чем круче

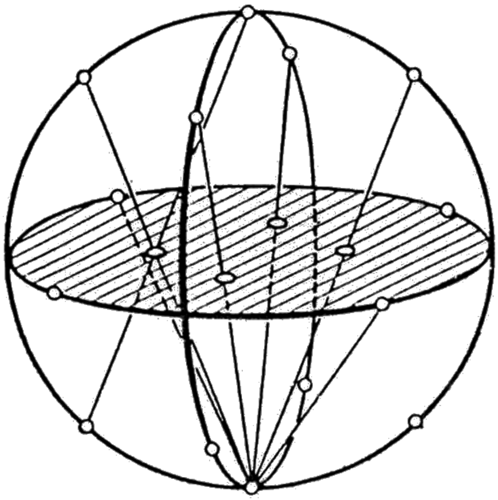


Рисунок 22 - ***Построение гномостереографической проекции***

наклон косой грани, тем дальше от центра располагается соответствующая точка. На рисунке 23 приведена гномостереографическая проекция додекаэдра с рисунка 16.

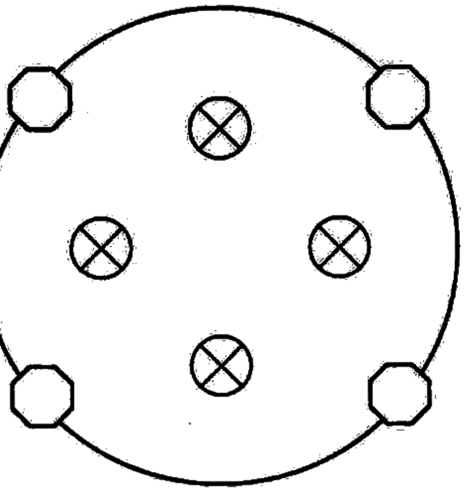


Рисунок 23 - ***Гномостереографическая проекция додекаэдра***

Гномоническая проекция

Этот вид проекций широко применяется в рентгеноструктурном анализе.

Плоскость гномонической проекции параллельна плоскости стереографической и гномостереографической проекции, но она не экваториальная, а касательная к северному полюсу сферы проекций. Нормаль к грани кристалла, проведенная из центра сферы проекций, продолжается до пересечения с плоскостью проекций.

Гномоническая проекция плоскости представляет собой точку, а проекция направления – прямую.

Недостатком гномонической проекции является то, что в ней не сохраняются угловые соотношения. Большим преимуществом этой проекции является то, что координаты точек прямо пропорциональны индексам Миллера. Докажем это с помощью рисунка 24.

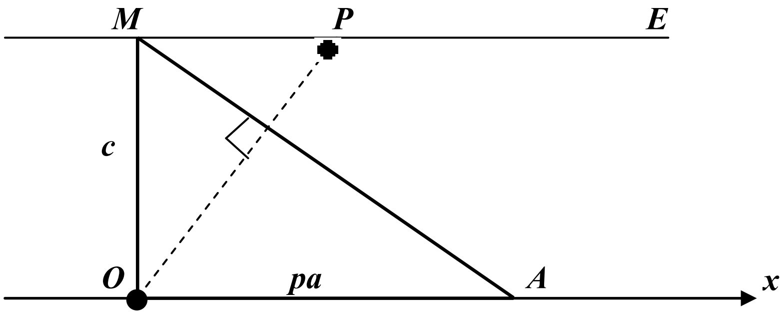


Рисунок 24 - ***К определению индексов Миллера по гномонической проекции***

ME - след плоскости гномонической проекции на плоскости чертежа;

MA - след грани кристалла, отсекающей на осях координат отрезки *pa* и *c* (где *p* - целое число);

MP = d – расстояние точки *p* на гномонической проекции от центральной точки проекции *M*.

Пусть $c \perp a$, то есть $OP \perp MA$ и $MP \parallel OA$. Следовательно,

$< OMA = < AOP = < MPO$, то есть

$\Delta\ MOA \sim \Delta\ PMO$. Обозначая $OM = c$, имеем:

$d/c = c/pa = hc/a$, где

h – целое число, определяемое соотношением

$1/p : 1/q : 1/r = h : k : l$.

Последнее равенство показывает, что координата точки, изображающей грань кристалла на гномонической проекции, прямо пропорциональна миллеровским индексам этой грани. Это позволяет непосредственно определять символы граней на гномонической проекции. Принцип построения гномонической проекции показан на рисунке 25.

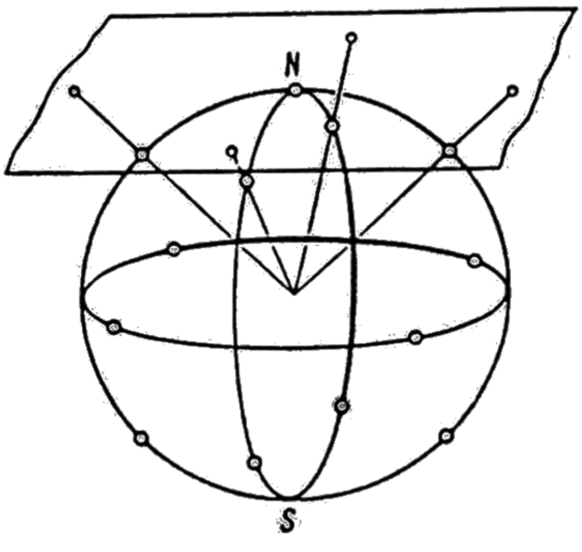


Рисунок 25 - ***Построение гномонической проекции***

Соотношения между сферической, стереографической,

гномостереографической и гномонической проекциями

Принцип построения стереографической и гномостереографической проекций одинаков; различие заключается в том, что стереографическая проекция строится по комплексу граней, а гномостереографическая – по полярному комплексу.

Соотношения между всеми видами проекций сведены в табл. 1 и на рисунке 26.

Таблица 1

Соотношения между различными видами проекций

Тип проекции	Изображение	
	Плоскости	**Направлении**
Стереографическая	Дуга	Точка
Гномостереографи-ческая	Точка	Дуга
Гномическая	Точка	Прямая

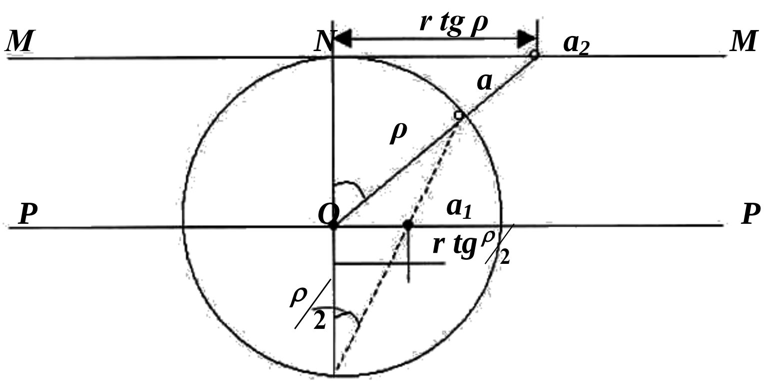


Рисунок 26 - ***Соотношение между различными видами проекций***

Проекция направления *Oa* на сферической проекции дает точку *a*, на гномонической проекции (плоскость *MM*) – точку a_2, а на стереографической (плоскость *PP*) – точку a_1 .

Сетка Вульфа

Для решения количественных задач с помощью стереографических и гномостереографических проекций пользуются специальными градусными сетками. Наиболее распространенная – сетка Вульфа.

Сетка Вульфа – это стереографическая проекция всей системы меридианов и параллелей, нанесенных на поверхность сферы (рисунок 27). Плоскостью проекций является плоскость одного из меридианов. Положение любой точки определяется ее сферическими координатами φ и ρ. Сетка чертится на круге ∅20 см, линии параллелей и меридианов проводят через 2°. Расстояние между ними на глаз делится еще на четыре части, следовательно, точность до 0,5°.

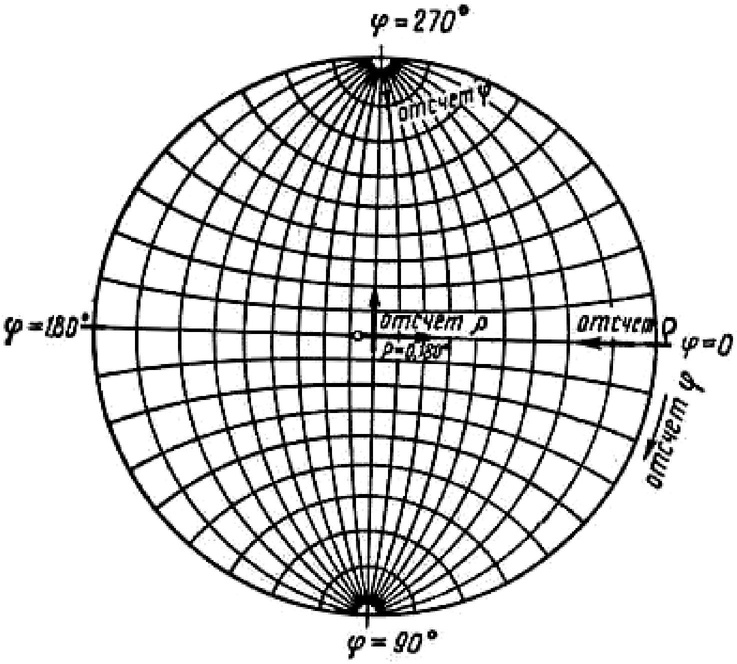


Рисунок 27 – ***Схема сетки Вульфа и отсчет углов по ней***