Таблица 2

БАЗИС, КОЭФФИЦИЕНТ ЗАПОЛНЕНИЯ ОБЪЕМА И КООРДИНАЦИОННОЕ ЧИСЛО НЕКОТОРЫХ РАСПРОСТРАНЕННЫХ РЕШЕТОК МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Тип решетки	Число атомов на элементарную ячейку	Базис решетки	Координационное число	Коэффициент заполнения, %
Примитивная кубическая	1	[[000]]	6	52
О. ц. к.	2	$\left[\left[000; \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right]\right]$	8	68
Г. ц. к.	4	$\left[\left[000; \frac{1}{2}\frac{1}{2}0; \frac{1}{2}0\frac{1}{2}; 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right]\right]$	12	74
Алмаза	8	$\left[\left[000; \frac{1}{2}\frac{1}{2}0; \frac{1}{2}0\frac{1}{2}; 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}; \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}; \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}; \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}; \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}\right]\right]$	4	38
Гексагональная компактная	2	$\left[\left[000; \frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}\right]\right]$	12	74

нимаемого атомами, к объему элементарной ячейки) и *координационном числе* — к. ч. (т. е. числе частиц одного сорта, ближайших к рассматриваемой частице в решетке). Понятие о координационном числе применимо лишь к так называемым координационным структурам, где каждая частица «окружена» некоторым числом одинаковых других частиц.

Данные о типе решетки и размерах элементарных ячеек для наиболее распространенных простых веществ приведены в приложении 1.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ПЛОСКОСТЕЙ И НАПРАВЛЕНИЙ

Прямые и плоскости, проходящие через узлы пространственной решетки, называют соответственно узловыми прямыми и плоскостями. Все узловые прямые или плоскости, одинаково ориентированные в пространстве, составляют семейство прямых или плоскостей. Они кристаллографически идентичны и обладают одинаковыми периодами идентичности или соответственно межплоскостным расстоянием.

Индексы плоскостей

Ориентировка семейства направлений и плоскостей в решетке однозначно определяется кристаллографическими индексами.

Под кристаллографическими индексами плоскости понимают три взаимно простых целых числа h, k, l, обратно пропорциональных числу осевых единиц, отсекаемых любой плоскостью данного семейства на кристаллографических координатных осях x, y, z.

Совокупность индексов плоскости, взятая в круглые скобки (hkl), называется символом плоскости.

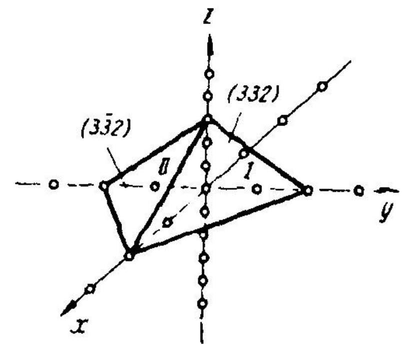

Рис. 182. Связь между количеством единичных отрезков, отсекаемых плоскостями I и II на координатных осях, и индексами плоскостей

Системы координатных осей выбирают различно для разных сингоний. Кристаллографические координатные оси выбирают так, чтобы они были параллельны основным трансляциям (ребрам элементарной ячейки), а масштаб по каждой оси был равен соответствующей осевой единице (периоду). Принято также направление координатных осей связывать с имеющимися элементами симметрии. Установка кристаллов разных систем приведена в приложении 60.

Для определения индексов плоскости необходимо вначале определить отрезки, отсекаемые данной плоскостью на координатных осях, затем взять величины, обратные этим отрезкам, и привести отношение этих обратных значений к отношению трех взаимно простых чисел.

Поясняющий пример приведен на рис. 182.

В случае, если плоскость пересекает кристаллографическую ось в отрицательном направлении, над соответствующим индексом следует ставить знак «минус». Так, символ плоскости II на рис. 182 обозначается (3$\bar{3}$2).

Для плоскостей, параллельных какой-либо координатной оси, соответствующий индекс равен нулю (отсекаемый отрезок равен ∞).

Плоскости, отсекающие на каждой оси по равному числу осевых единиц, обозначают символом (111). В кубической решетке их называют плоскостями октаэдра, так как система подобных плоскостей, равноотстоящих от начала координат, образует октаэдр.

Плоскости, отсекающие на двух осях по равному числу осевых единиц и параллельные третьей оси (например оси z), обозначают (110). В кубической сингонии их называют плоскостями ромбического додекаэдра, так как система подобных плоскостей образует двенадцатигранник, каждая грань которого — ромб.

Плоскости, пересекающие одну ось и параллельные двум другим (например, осям y и z), обозначают (100) и называют в кубической решетке плоскостями куба. так как система подобных плоскостей образует куб.

На рис. 183 показаны важнейшие плоскости в кубической решетке и их индексы.

В гексагональной сингонии принято пользоваться системой координат из одной вертикальной оси z и трех горизонтальных осей x, y и t, параллельных ребрам основания и составляющих друг с другом углы в 120°. При таком выборе осей кристаллографически идентичные семейства плоскостей описываются индексами одного и того же числового значения, стоящими в зависимости от положения плоскостей в пространстве в разном порядке или под разными знаками. Из четырех индексов плоскости $(hkil)$, стоящих как обычно в круглых скобках, третий i, соответствующий горизонтальной оси t, определяется первыми двумя: $i = -(h+k)$. Часто им пренебрегают, так как этот индекс не является независимым. Тогда вместо него в индексе плоскости ставят точку $(hk.l)$. Важнейшие плоскости в гексагональной решетке и их индексы показаны на рис. 184.

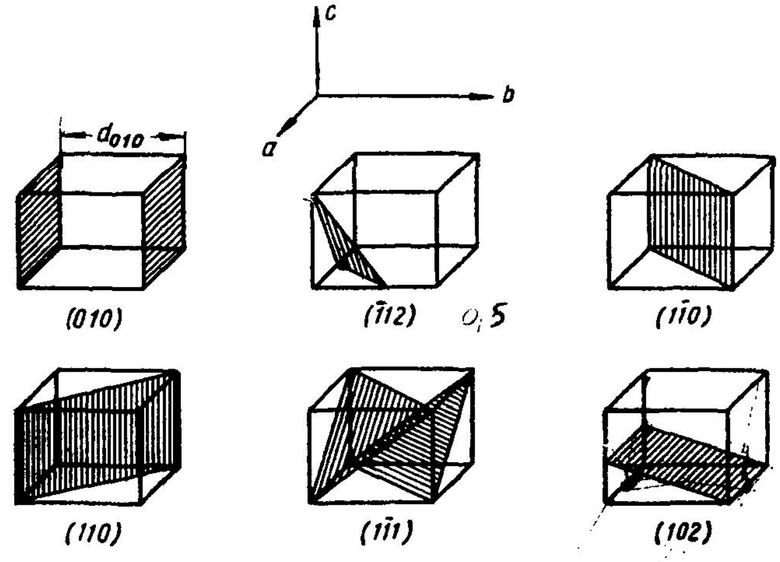

Рис. 183. Важнейшие плоскости кубической решетки и их индексы

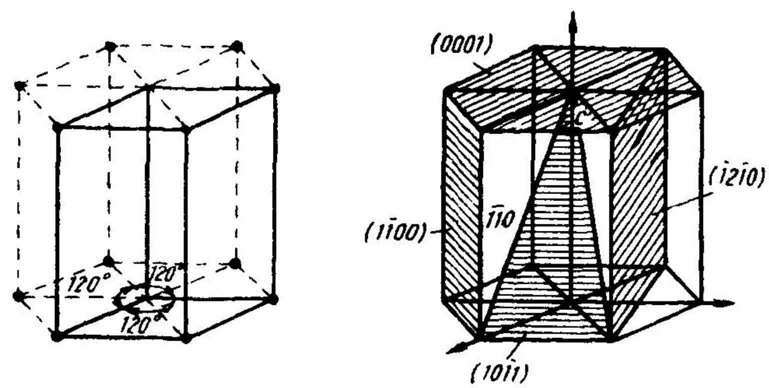

Рис. 184. Важнейшие плоскости гексагональной решетки и их индексы

Индексы направлений

Под кристаллографическими индексами направления понимают три целых взаимно простых числа, пропорциональных координатам любого атома, расположенного на данном направлении, измеренным в осевых единицах.

При установлении кристаллографических индексов данного направления его необходимо перенести параллельно самому себе в начало координат.

Кристаллографические индексы направлений заключают в квадратные скобки и обозначают буквенно $[uvw]$.

Индексы важнейших направлений в кубической решетке приведены на рис. 185.

Индексы направлений в гексагональной решетке показаны на рис. 186.

Для кубической сингонии индексы направления $[uvw]$, перпендикулярного к плоскостям (hkl), численно равны индексам этой плоскости.

Так, индексы оси x равны [100], а индексы плоскости, перпендикулярной оси x, равны (100).

Индексы направления, связывающего две частицы в решетке, равны разности координат этих узлов, приведенных к целому виду.

Индексы направления $[uvw]$, по которому пересекаются две плоскости, связаны с индексами этих плоскостей $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$ следующей системой уравнений:

$$u = k_1 l_2 - k_2 l_1,$$
$$v = l_1 h_2 - l_2 h_1,$$
$$w = h_1 k_2 - h_2 k_1.$$

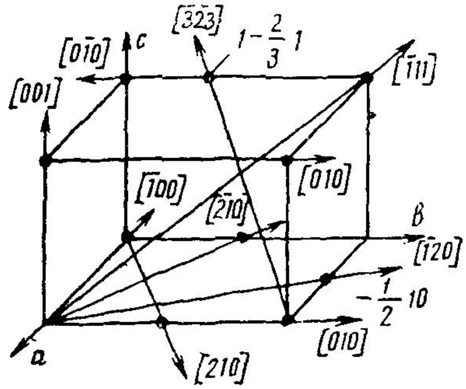

Рис. 185. Важнейшие направления кубической решетки и их индексы

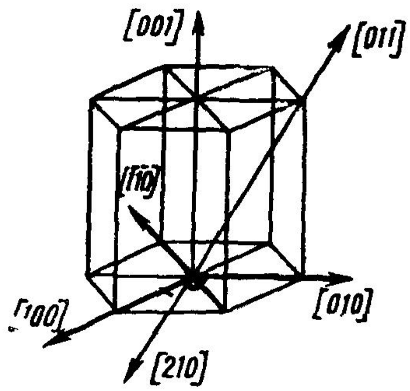

Рис. 186. Важнейшие направления гексагональной решетки и их индексы

Аналогично индексы плоскости (hkl), в которой лежат два направления $[u_1v_1w_1]$ и $[u_2v_2w_2]$, определяются из симметричной системы:

$$h = v_1 w_2 - v_2 w_1,$$
$$k = w_1 u_2 - w_2 u_1,$$
$$l = u_1 v_2 - u_2 v_1.$$

Описанные уравнения позволяют определить индексы плоскости, проходящей через три узла с известным базисом. Определение начинают с установления индексов двух направлений (одну из точек принимают за начало координат, по отношению к которому записывают направления) и заканчивают определением плоскости по направлениям.

Угол между двумя направлениями в кубической сингонии с индексами $[u_1v_1w_1]$ и $[u_2v_2w_2]$ может быть найден из уравнения

$$\cos\varphi = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2}\,\sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}}. \qquad (1)$$

Угол между двумя плоскостями находят из аналогичного симметричного уравнения.

Соответствующие формулы для других сингоний приведены в приложении 2.

Серия семейств плоскостей, параллельных одному направлению $[uvw]$ в решетке, называется *кристаллографической зоной* (рис. 187), а само направление — *осью зоны.*

Между индексами оси зоны $[uvw]$ и индексами (hkl) плоскостей, входящих в данную зону, существует *следующая зависимость:*

$$hu + kv + lw = 0. \qquad (2)$$

Уравнение (2) определяет, таким образом, условие зональности.

Каждое семейство плоскостей с индексами (hkl) *характеризуется* также своим межплоскостным расстоянием d, т. е. расстоянием между двумя соседними параллельными плоскостями.

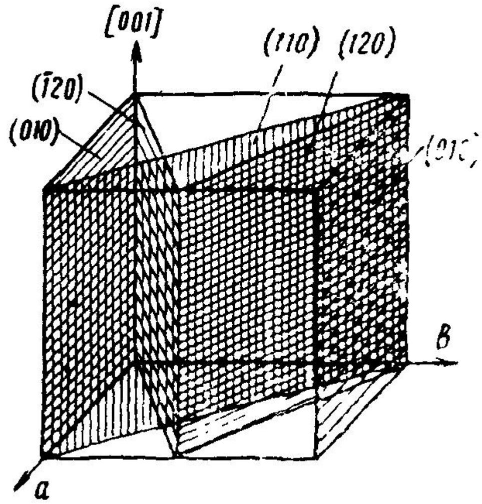

Рис. 187. Зона [001]

В случае сложной решетки, состоящей как бы из нескольких про-

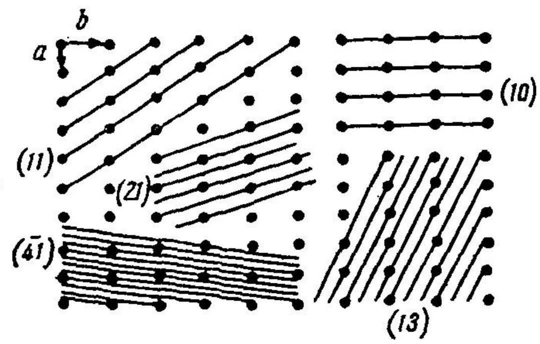

Рис. 188. Семейства плоскостей с разными индексами, указанными в скобках

стых, межплоскостное расстояние равно расстоянию между соседними параллельными кристаллографически идентичными плоскостями, принадлежащими одной простой решетке. Так, в случае о. ц. к. решетки межплоскостное расстояние для плоскостей (100) равно периоду a, но не $\frac{a}{2}$. Чем больше индексы плоскости, тем меньше межплоскостное расстояние этого семейства плоскостей (рис. 188). Чем больше межплоскостное расстояние, тем плотнее заполнена элементами структуры соответствующая плоскость.

Между индексами (hkl), величиной d и периодами решетки a, b, c существует математическая зависимость, различная для каждой сингонии. Ниже приведены те, которыми часто пользуются в рентгеноструктурном анализе поликристаллов (см. также приложение 2).

Формулы для межплоскостного расстояния имеют следующий вид: *кубическая сингония*

$$d^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}, \qquad (3)$$

тетрагональная сингония

$$d^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2 \cdot \frac{a^2}{c^2}}, \qquad (4)$$

гексагональная сингония

$$d^2 = \frac{a^2}{4\,3\,(h^2 + k^2 + hk) + l^2 \cdot \frac{a^2}{c^2}}. \qquad (5)$$

Все кристаллографически идентичные семейства плоскостей, т. е. семейства плоскостей с одинаковым межплоскостным расстоянием, образуют *совокупность плоскостей*, обозначаемую фигурными скобками $\{hkl\}$.

Так, в кубической сингонии совокупность плоскостей куба $\{100\}$ содержит шесть кристаллографически идентичных семейств плоскостей: (100), $(\bar{1}00)$, (010), $(0\bar{1}0)$, (001) и $(00\bar{1})$. Если, например, с помощью различных операций симметрии повернуть решетку так, что на месте плоскостей (100) разместятся плоскости (001) или любые из остальных четырех семейств плоскостей, то новое положение решетки совпадает с начальным. В этом и заключается кристаллографическая идентичность.

Важнейшим признаком кристаллографически идентичных плоскостей является то, что они обладают одинаковым межплоскостным расстоянием.

Поэтому количество кристаллографически идентичных плоскостей (семейств плоскостей) для любой совокупности равно числу возможных перестановок местами и знаками индексов, входящих в данную совокупность, не изменяющих величины межплоскостного расстояния с учетом симметрии кристалла.

В качестве примера рассмотрим те же шесть плоскостей.

В случае кубической сингонии, согласно формуле (3), для всех шести семейств плоскостей куба $d=a$ и они входят в одну совокупность.

В случае тетрагональной сингонии [см. формулу (4)] эти шесть плоскостей разбиваются на две совокупности. В одну из них $\{100\}$ входят четыре плоскости (100), $(\bar{1}00)$, (010) и $(0\bar{1}0)$. Для них $d=a$.

Во вторую совокупность $\{100\}$ входят две плоскости (001) и $(00\bar{1})$. Для них $d=c$.

Количество кристаллографически идентичных плоскостей p для совокупностей с разными индексами для тех кристаллов кубической сингонии, которые имеют центр инверсии, приведено в табл. 3.

Таблица 3

ЧИСЛО СЕМЕЙСТВ ПЛОСКОСТЕЙ, ОБРАЗУЮЩИХ СОВОКУПНОСТИ В КРИСТАЛЛАХ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

Индексы	$\{100\}$	$\{110\}$	$\{111\}$	$\{hko\}$	$\{hkk\}$	$\{hkl\}$
p	6	12	8	24	24	48

Более подробные данные для всех сингоний приведены в приложении 24.

Примерное задание

1. Изобразить элементарную ячейку одной из сингоний и показать трансляции a, b, c (масштабные осевые векторы и углы между ними α, β и γ).

2. Определить коэффициент заполнения η одной из решеток (примитивной кубической, о.ц.к., г.ц.к., г.к., алмаза). Показать графически расположение атомов, из которого определяли связь между атомным радиусом и периодом ячейки.

3. Найти координационное число, указать решетку Бравэ и написать базис элементарной ячейки (W, Cu, Mg, NaCl, CsCl, TiO_2, Sn, Si).

4. Найти индексы плоскости, отсекающей на координатных осях отрезки:

1; 2; 3. 2; 1; 4. 1; ∞ ; 2. 3; —1; 5. —2; 1; 3....

5. Показать плоскости с индексами (110), (101), (010), (111), $(1\bar{1}1)$, (211), (121), (210), (013), ...

Кординатные оси выбрать одной из следующих сингоний: ромбической, тетрагональной, кубической, гексагональной.

6. Определить (в буквенной форме) межплоскостное расстояние для плоскостей (001), (110), (101), (111), (210), (211), ... в решетке следующих сингоний: кубической, тетрагональной, гексагональной, ромбической.

7. Изобразить в кубической сингонии плоскость с произвольно взятыми индексами и направление с индексами, численно равными индексам данной плоскости.

8. Найти две-три плоскости, входящие в данную зону, если дана одна из следующих осей зон: [001], [110], [101], [111]...

9. Выписать индексы всех плоскостей, входящих в кубической сингонии в одну из совокупностей: {100}, {110}, {111}, {210}, {211}, {310}, {123}.

Определить число этих плоскостей p.

Определить, на сколько совокупностей разобьется данная совокупность в случае тетрагональной, ромбической или гексагональной сингоний. Каковы индексы плоскостей, входящих в каждую из этих совокупностей, и каково их число.

10. Найти индексы плоскости (hkl), в которой находятся направления [113] и [....].

11. Найти индексы направления, проходящего через узлы [[...]] и [[...]].

12. Найти индексы направления, по которому пересекаются плоскости (...) и (...).

13. Найти индексы плоскости, в которой расположены узлы [[....]] [[...]] и [[...]].

14. Какова плотность заполнения в простой гексагональной и простой ромбоэдрической упаковке?

15. Показать, какие направления в решетках средних систем останутся перпендикулярными плоскостям с численно равными индексами.

15. Показать графически, что в ромбической системе возможны решетки C и F, но невозможны решетки, центрированные одновременно по двум парам граней.

Отчет по работе должен содержать ответы на вопросы, поставленные в задании, с необходимыми зарисовками и расчетами.

РАБОТА 46

СТЕРЕОГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЕКЦИИ

Для решения ряда задач кристаллографии и структурного анализа необходимо наглядное изображение симметрии кристалла и его ориентировки. Способ изображения должен передавать угловые соотношения между узловыми плоскостями и направлениями в решетке кристалла, а также давать возможность проводить количественные расчеты этих соотношений.

Такое наглядное изображение достигается с помощью различного рода проекций, общий принцип построения которых заключается в том,