

***СИМВОЛЫ ГРАНЕЙ,  
(АТОМНЫХ ПЛОСКОСТЕЙ)  
И РЕБЕР (НАПРАВЛЕНИЙ)  
КРИСТАЛЛОВ***



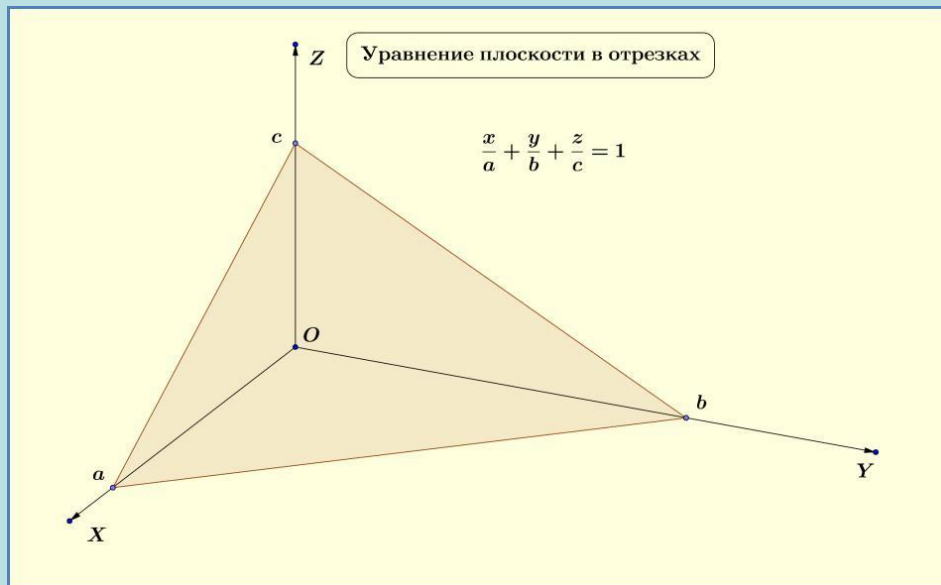
Индексы в кристаллографии появились задолго до того как открылось атомарное строение и доказана периодичность кристаллического пространства. На основании изучения только внешней формы кристаллов были сделаны фундаментальные выводы. Например о невозможности оси 5 порядка и выше 6-ого.

Из геометрии известно, что любую плоскость можно описать уравнением вида:

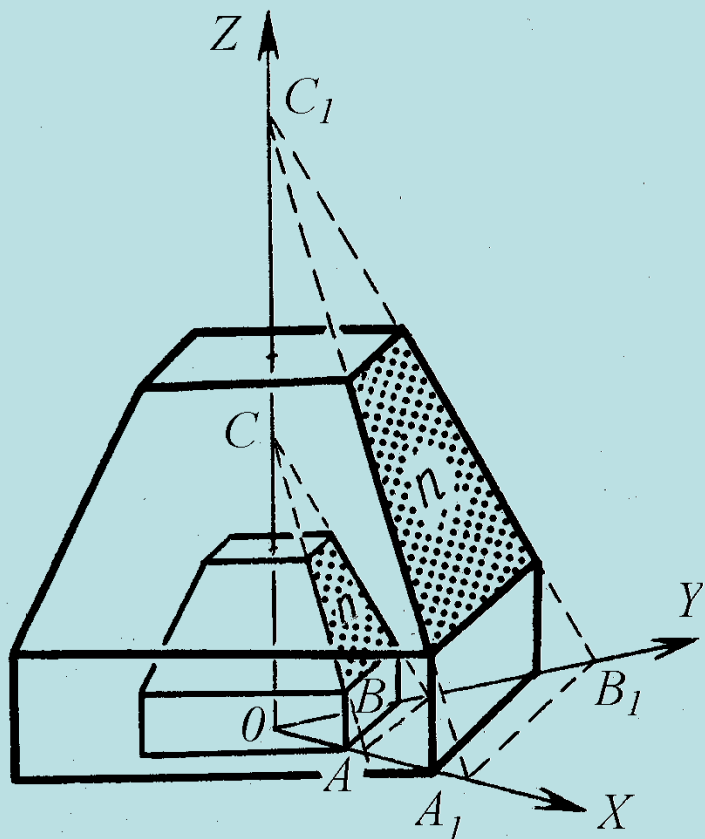
$$Ax + By + Cz = D,$$

где  $\{A; B; C\}$  – координаты вектора нормали.

Существует так же уравнение плоскости в отрезках:



$a, b, c$  – отрезки,  
отсекаемые плоскостью  
на соответствующих осях,  
называемые  
*параметрами плоскости*  
(*грани или атомной*  
*плоскости*).



- Сначала индексы были введены как цифровая характеристика граней
- При росте кристалла абсолютные значения  $a$ ,  $b$ ,  $c$  изменяются. Но благодаря тому, что грань ( $n$ ) перемещается параллельно самой себе, отношение параметров остается постоянным:
- $a : b : c = \text{const}$

Цифры (abc) или обратные им (ABC) есть

*символ плоскости,*

которые в математике могут быть абсолютно любыми

А для кристалла какие?

**Закон  
рациональности  
отношений  
параметров граней  
кристалла:**



Р.Ж.Гаюи

**Двойные отношения размерных  
параметров двух любых граней  
кристалла равны отношению целых  
небольших взаимно простых чисел.**



Открытие этого закона позволило другому кристаллографу, Х. Вейсу ввести понятие индексов как числовой характеристики любой грани кристалла:

$$p_1 : q_1 : r_1 = \frac{a_1}{a} : \frac{b_1}{b} : \frac{c_1}{c},$$

где  $a_1, b_1, c_1$  – параметры определяемой грани, а  $a, b, c$  – параметры другой грани того же самого кристалла.

Основной принцип *индицирования граней кристалла* заключается в том, параметры всех граней измеряются относительно параметров одной специально выбранной грани.

$$a_A = 2 \text{ см}, b_A = 3 \text{ см}, c_A = 1 \text{ см};$$

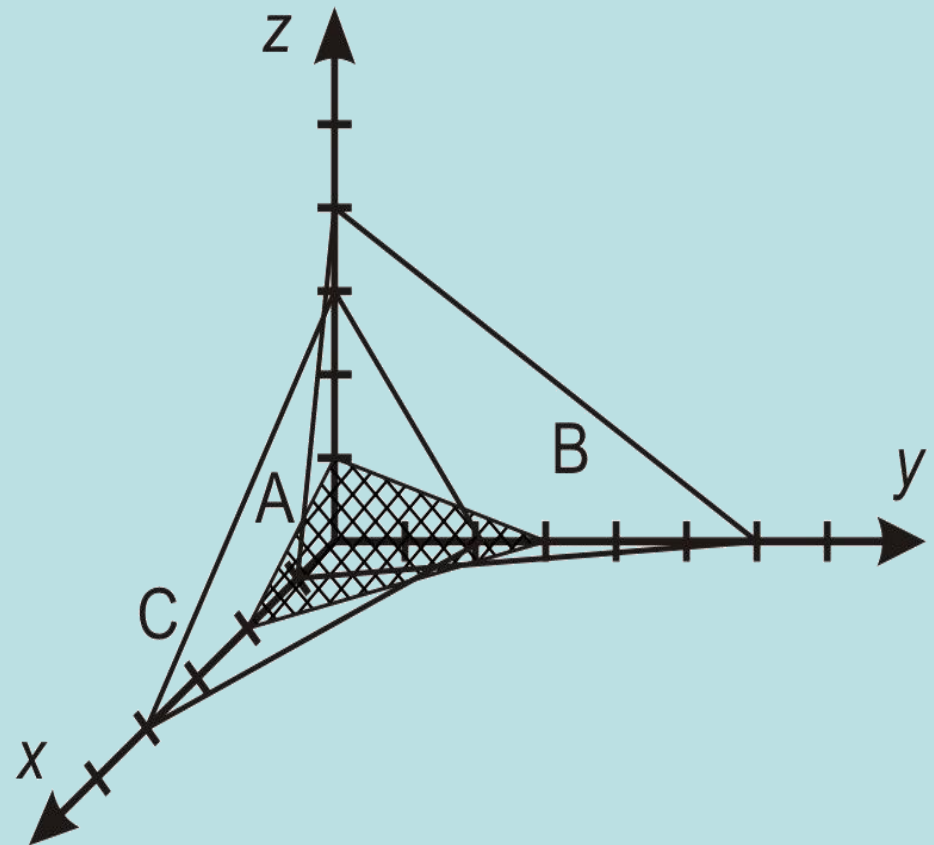
$$a_B = 1 \text{ см}, b_B = 6 \text{ см}, c_B = 4 \text{ см};$$

$$a_C = 4 \text{ см}, b_C = 2 \text{ см}, c_C = 3 \text{ см}.$$

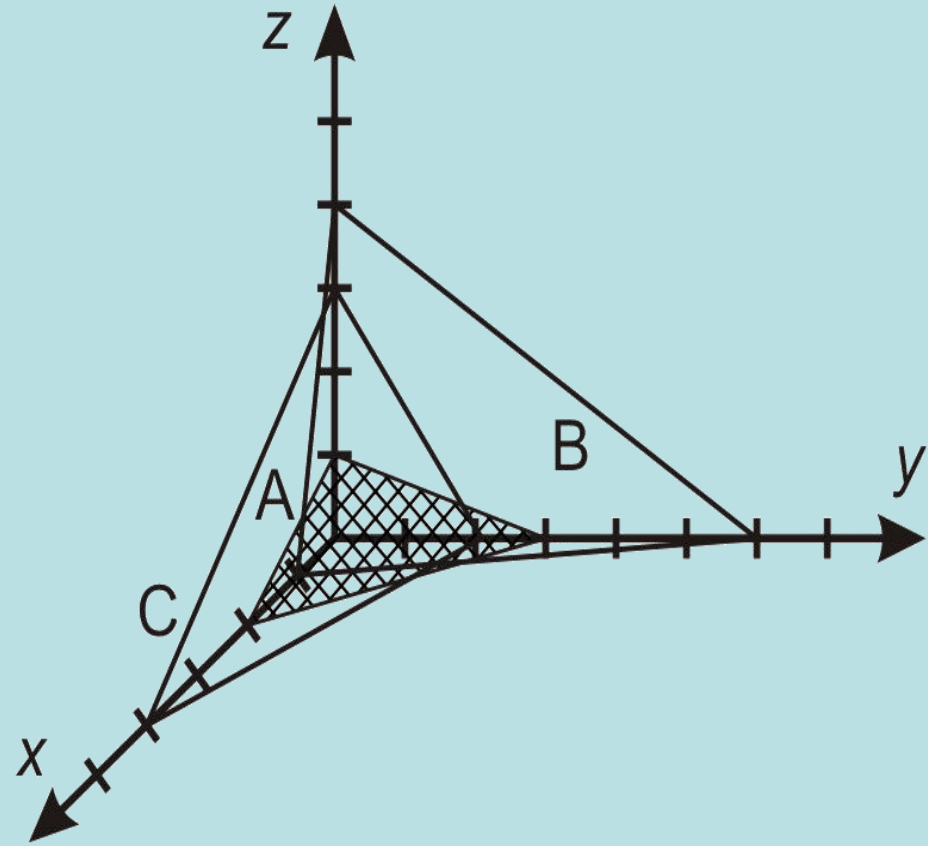
$$(p_A q_A r_A) = p_A : q_A : r_A = \frac{a_A}{a_A} : \frac{b_A}{b_A} : \frac{c_A}{c_A}$$

$$(p_B q_B r_B) = p_B : q_B : r_B = \frac{a_B}{a_A} : \frac{b_B}{b_A} : \frac{c_B}{c_A}$$

$$(p_C q_C r_C) = p_C : q_C : r_C = \frac{a_C}{a_A} : \frac{b_C}{b_A} : \frac{c_C}{c_A}$$



$a_A=2$  cm,  $b_A=3$  cm,  $c_A=1$  cm;  
 $a_B=1$  cm,  $b_B=6$  cm,  $c_B=4$  cm;  
 $a_C=4$  cm,  $b_C=2$  cm,  $c_C=3$  cm.

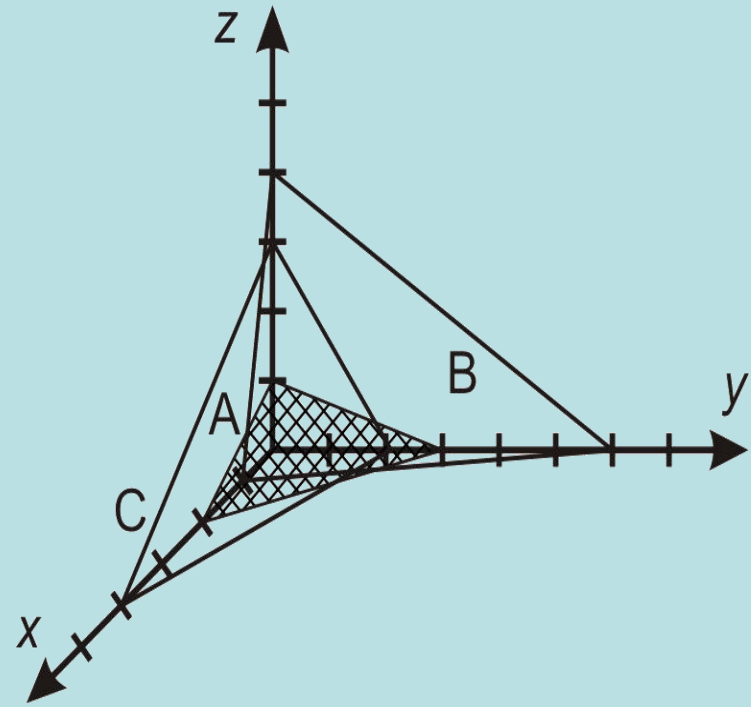


$$(p_A q_A r_A) = p_A : q_A : r_A = \frac{a_A}{a_A} : \frac{b_A}{b_A} : \frac{c_A}{c_A} = \frac{2}{2} : \frac{3}{3} : \frac{1}{1} = 1 : 1 : 1 = (111)$$

$$(p_B q_B r_B) = p_B : q_B : r_B = \frac{a_B}{a_A} : \frac{b_B}{b_A} : \frac{c_B}{c_A} = \frac{1}{2} : \frac{6}{3} : \frac{4}{1} = 1 : 4 : 8 = (148)$$

$$(p_C q_C r_C) = p_C : q_C : r_C = \frac{a_C}{a_A} : \frac{b_C}{b_A} : \frac{c_C}{c_A} = \frac{4}{2} : \frac{2}{3} : \frac{3}{1} = 6 : 2 : 9 = (629).$$

Увеличение параметра (индекса) сопровождается уменьшением угла между гранью и данной координатной осью. Если грань параллельна оси, соответствующий индекс - равен бесконечности  $\infty$ , что неудобно при расчетах.

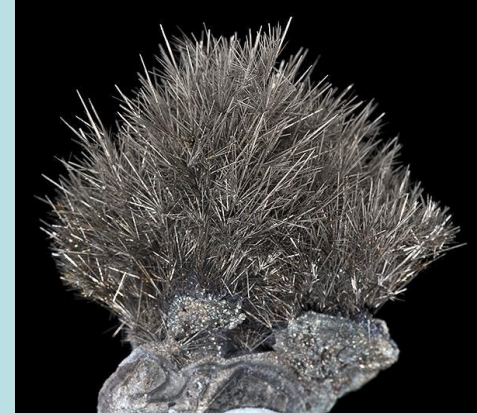


Поэтому английский минералог В. Миллер предложил использовать в качестве индексов граней обратные величины:



Вильям  
Холлоуз Миллер  
(1801-1880)

$$(hkl) = h:k:l = \frac{a_e}{a} : \frac{b_e}{b} : \frac{c_e}{c}$$



Минерал  
миллерит NiS

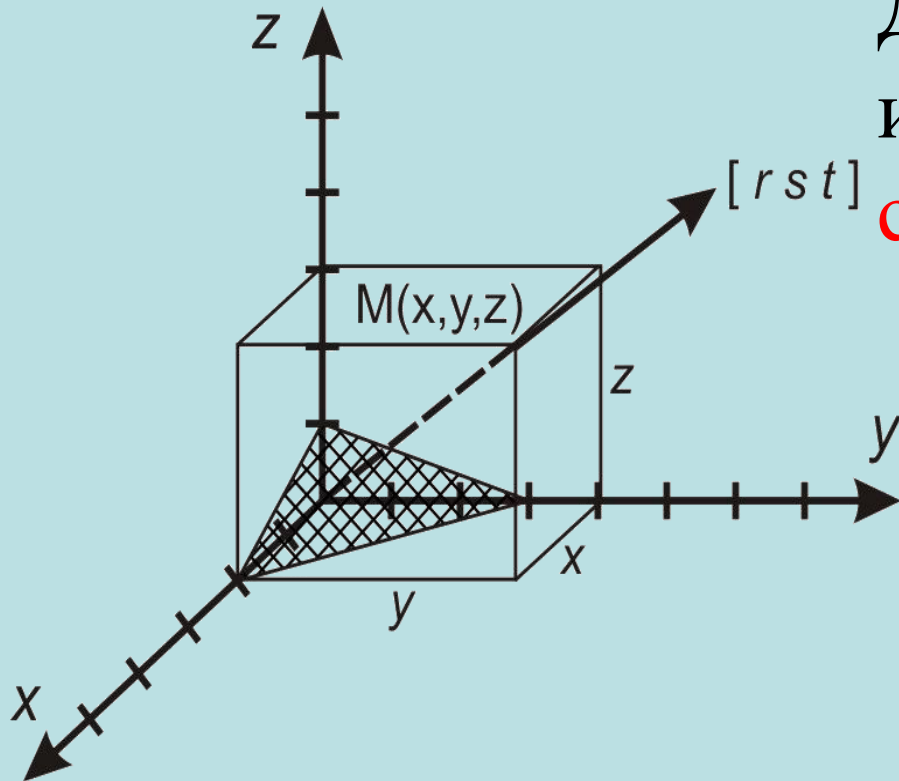
Индексы Миллера  $h$ ,  $k$ ,  $l$ , заключенные в круглые скобки  $(hkl)$  без знаков отношения (которые подразумеваются!), составляют *символ грани кристалла*.

По аналогии с индексами граней, индекс направления:

$$[rst] = r:s:t = \frac{x}{a_e} : \frac{y}{b_e} : \frac{z}{c_e},$$

Применительно к атомным плоскостям  $a_e, b_e, c_e$  есть параметры элементарной ячейки

Для индексов направлений  
используются  
символы Вейса



$$\begin{aligned} [rst] = r:s:t &= \frac{x}{a_e} : \frac{y}{a_e} : \frac{z}{a_e} \\ &= \frac{2}{2} : \frac{4}{3} : \frac{3}{1} = 3:4:9 \\ &= [349]. \end{aligned}$$

Если величины  $a/a_e$ ,  $b/b_e$ ,  $c/c_e$  считать параметрами грани, измеренными в кристаллографических единицах, уравнение плоскости в отрезках через индексы Миллера можно записать в следующем виде:

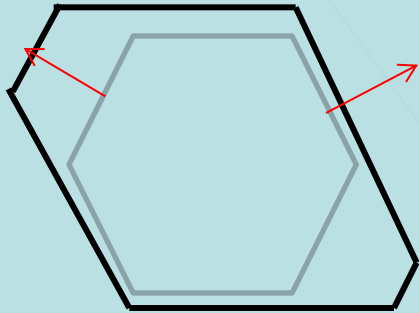
$$hx + ky + lz = 1.$$

*Кристаллографическое прочтение уравнения плоскости:*

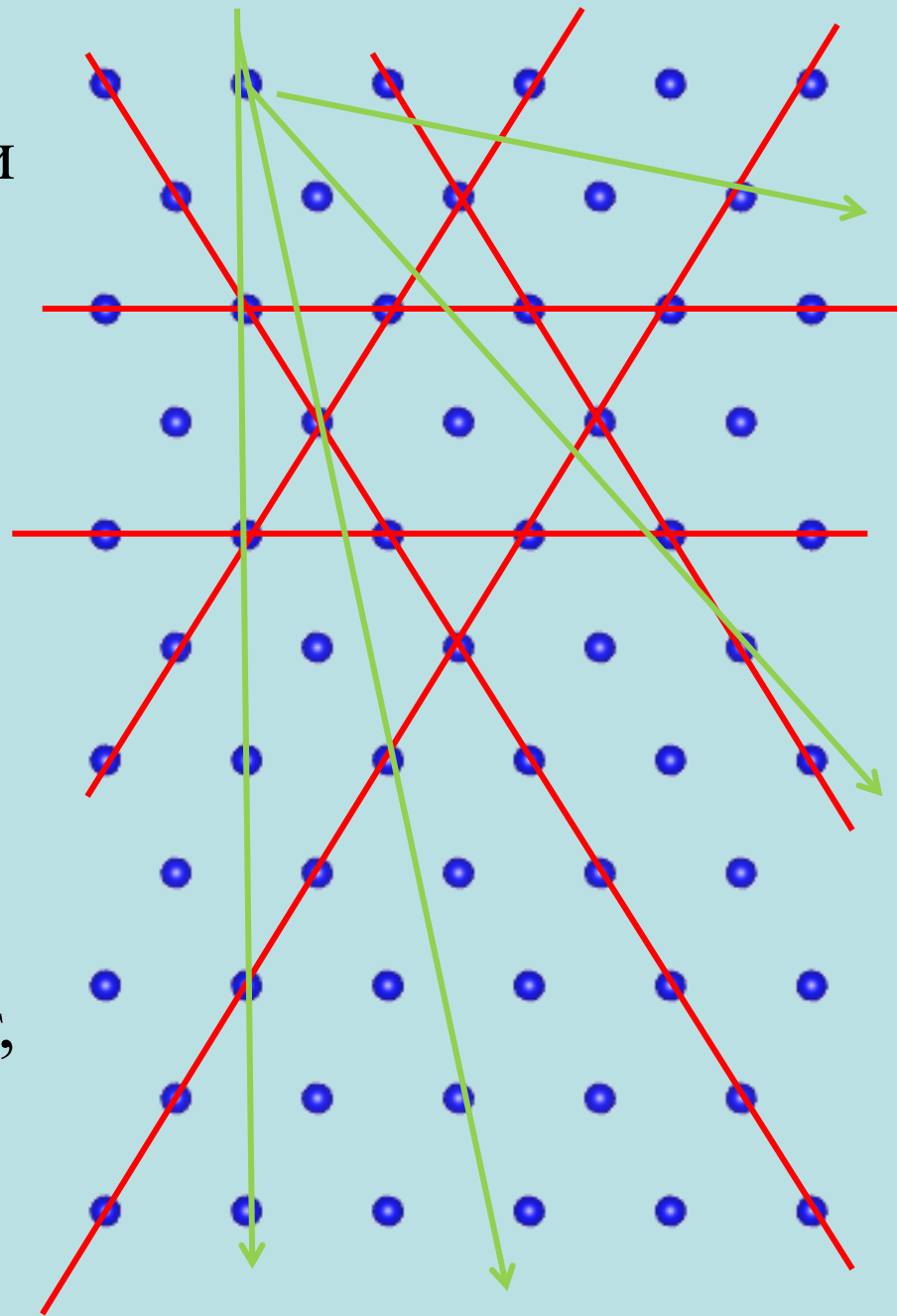
*в виде грани кристалла может реализоваться только такая плоскость, коэффициенты при текущих координатах которой представлены рациональными, взаимно простыми, сравнительно небольшими числами.*

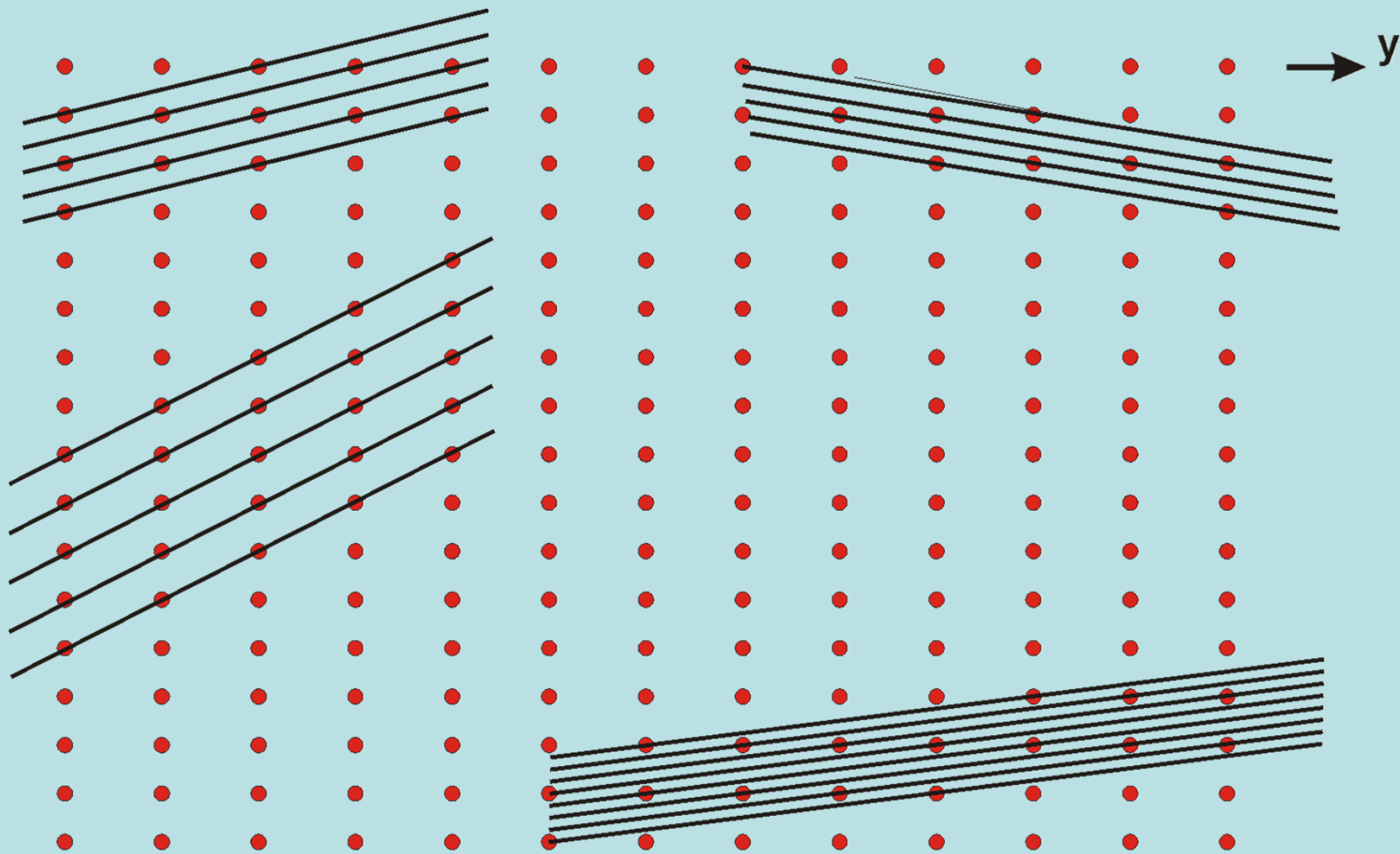
- Математически это означает, что символ грани – это координаты вектора нормали (или обратное отношение параметров), измеренные в ***кристаллографическом масштабе***.
- В чистом виде они применимы только для кубической сингонии

Грани кристалла – самые  
плотнупакованные плоскости  
(плоскости с высокой  
ретикулярной плотностью)

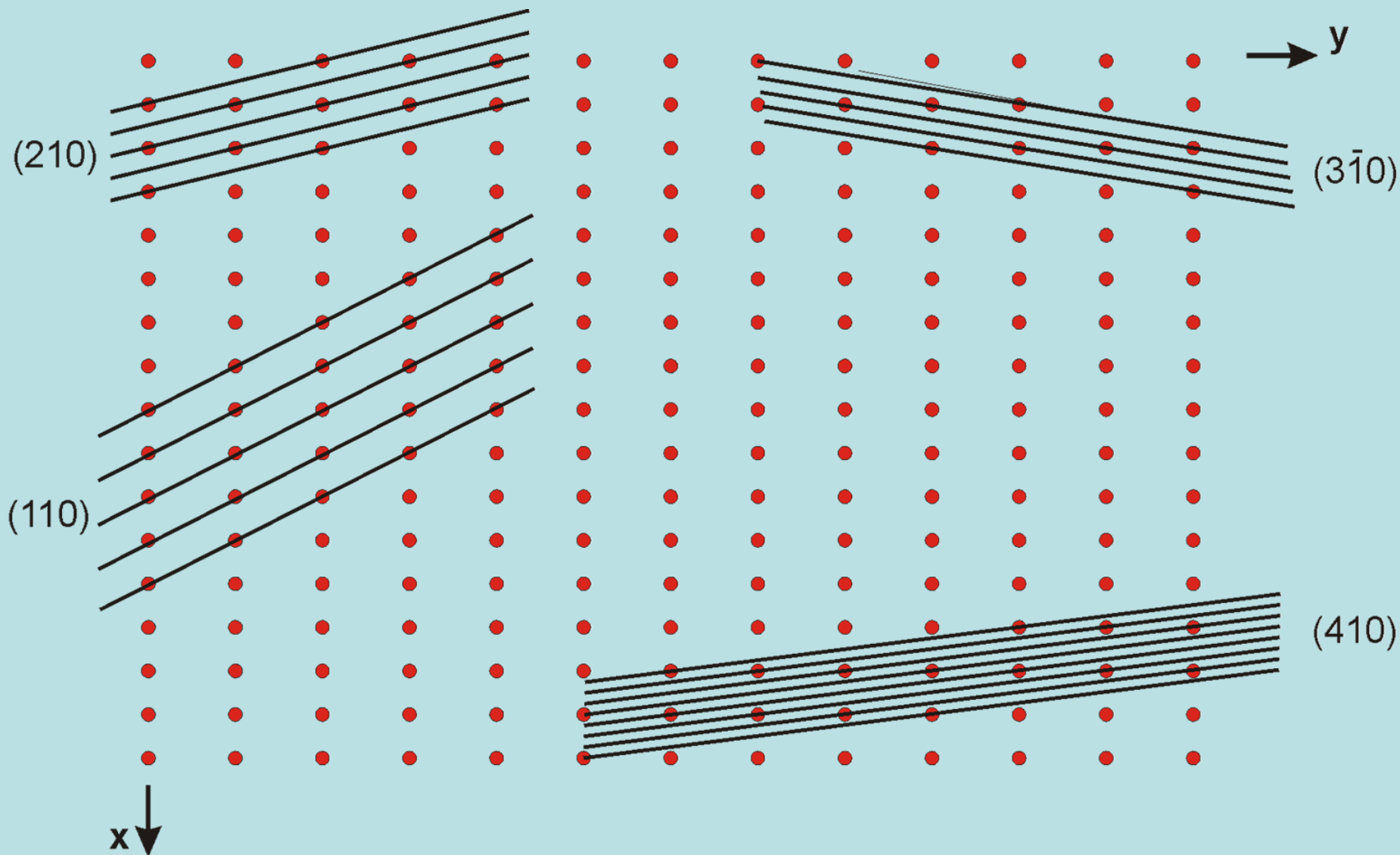


На микроуровне это означает,  
что каждая плоскость имеет  
свой индекс.

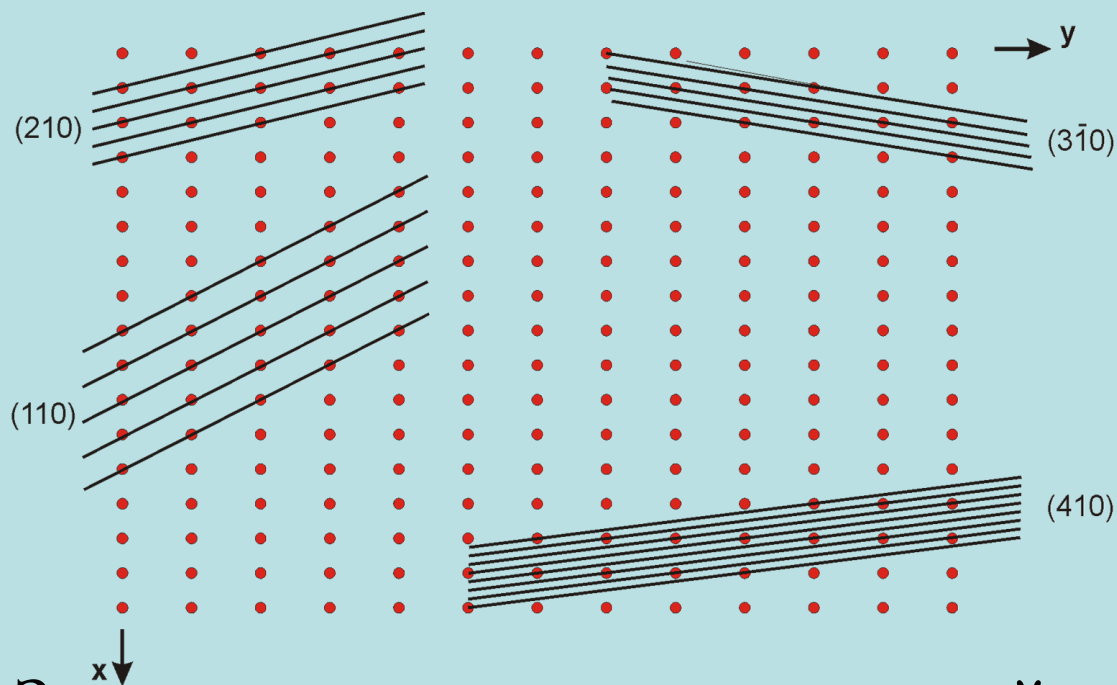




Закон рациональных отношений носит фундаментальный характер

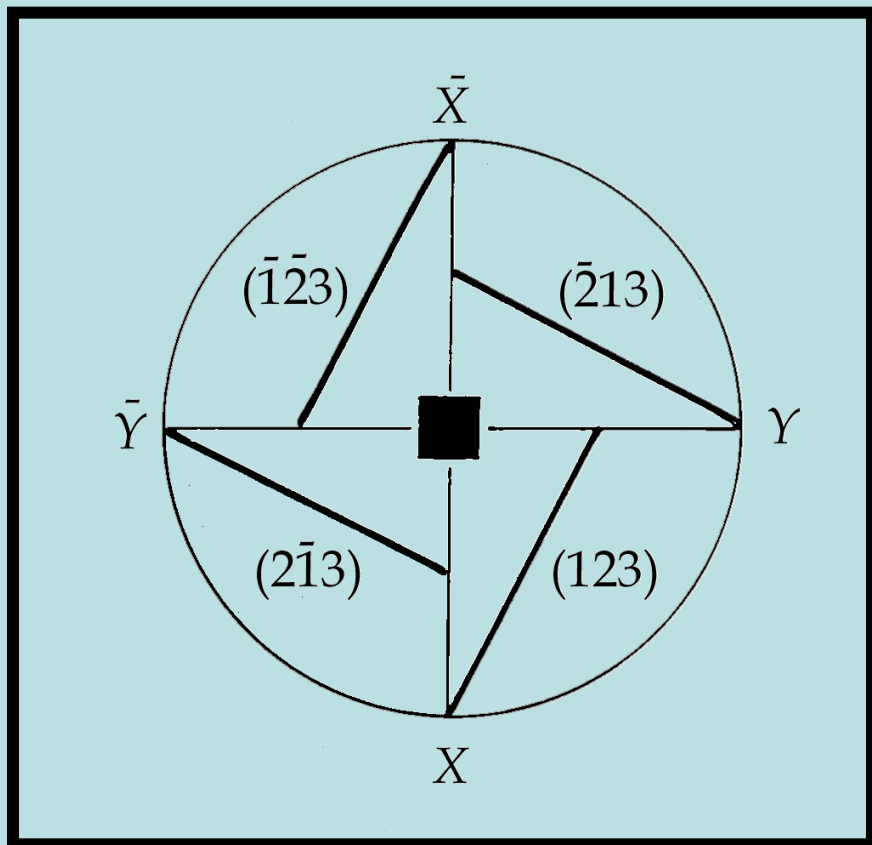


Закон рациональных отношений носит  
 фундаментальный характер



Закон рациональных отношений носит фундаментальный характер:

1. Символы атомных плоскостей кристалла - сравнительно небольшие числа
2. Символы атомных плоскостей кристалла – целые числа
3. Символы атомных плоскостей кристалла – взаимно простые числа



Индексы эквивалентных  
плоскостей однотипны

Изменение символов  
плоскости  $\{123\}$   
тетрагонального  
Кристалла при  
повороте  
вокруг вертикальной  
оси 4-го порядка.

# Связь между индексом плоскости и индексом лежащего в ней узлового ряда

Поскольку индекс направления может быть координатой точки, принадлежащей ему, выражение

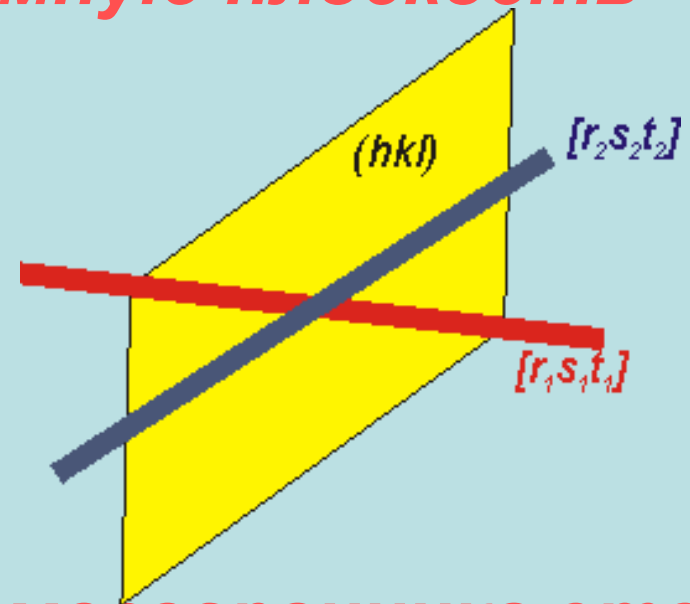
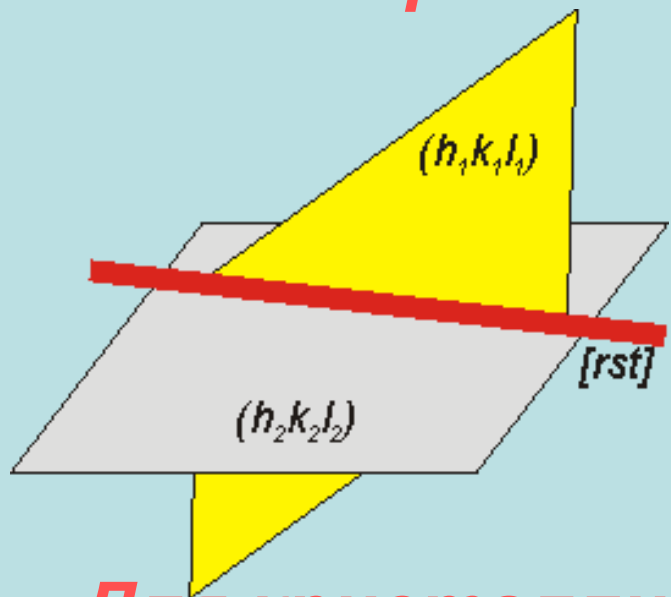
$hx + ky + lz = 0$  можно записать как

$$hr + ks + lt = 1$$

Это **фундаментальное уравнение** геометрической кристаллографии было выведено Вейсом.

# Вывод из уравнения Вейса

**Две непараллельные плоскости определяют направление в кристалле, а два неколлинеарных направления определяют атомную плоскость**



**Для кристаллического многогранника это означает, что две грани определяют реальное или возможное ребро кристалла. Два ребра определяют реальную или возможную грань кристалла**

По символам двух плоскостей  $(h_1k_1l_1)$  и  $(h_2k_2l_2)$ , можно определить символ узлового ряда  $[rst]$ , по которому они пересекаются.

Математически это означает векторное произведение векторов  $(h_1k_1l_1)$  и  $(h_2k_2l_2)$

$$\text{Для 1-й грани} - h_1r + k_1s + l_1t = 1$$

$$\text{Для 2-й грани} - h_2r + k_2s + l_2t = 1$$

Такие системы удобно решать с помощью мнемонического правила перекрестного умножения:

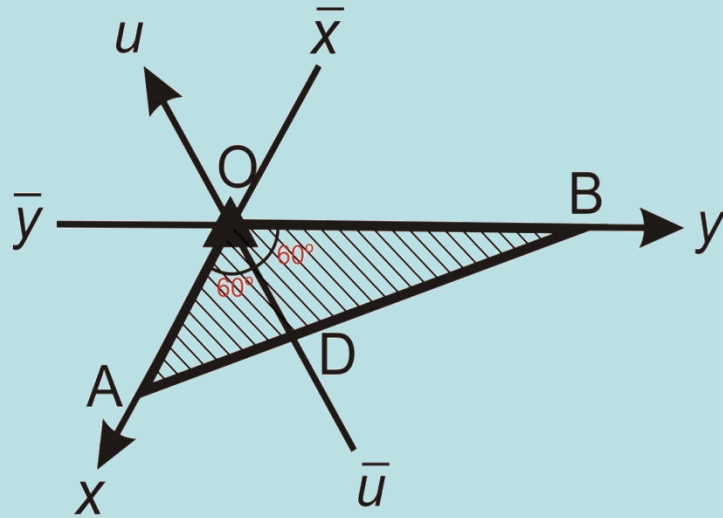
$$\begin{array}{c|ccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & | & l_1 \\ & \swarrow & \nearrow & \swarrow & \nearrow & & \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & | & l_2 \end{array}$$

---

$$r : s : t = (k_1l_2 - k_2l_1) : (h_2l_1 - h_1l_2) : (h_1k_2 - h_2k_1).$$

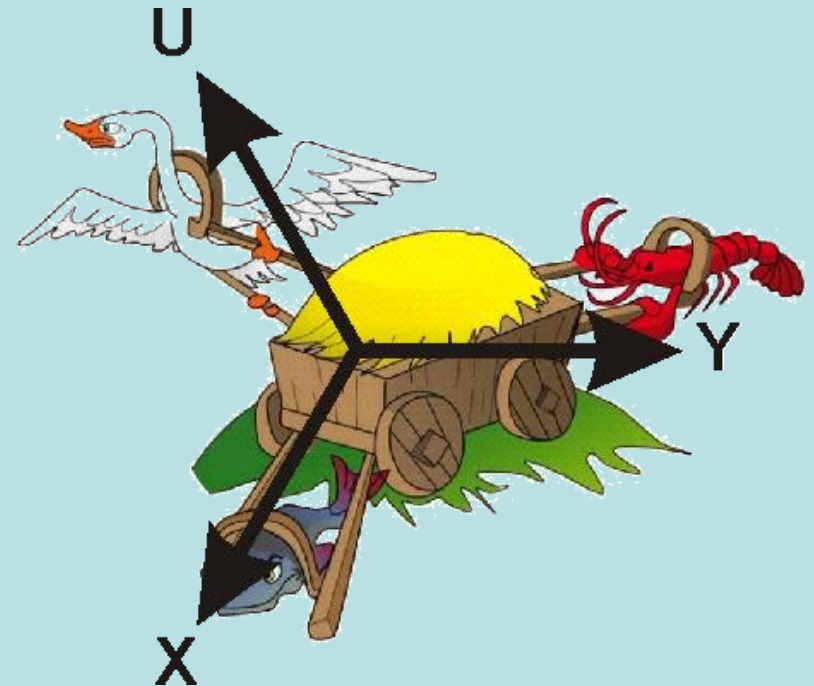
# Индицирование гексагональных кристаллов

Особенности индицирования гексагональных кристаллов обусловлены принятой для описания гексагональных кристаллов четырехосной системой координат. Обязательное присутствие оси третьего или шестого порядков в этой сингонии ведет к появлению еще одной горизонтальной оси. «Лишняя» ось  $U$  полностью эквивалентна осям  $X$  и  $Y$ .



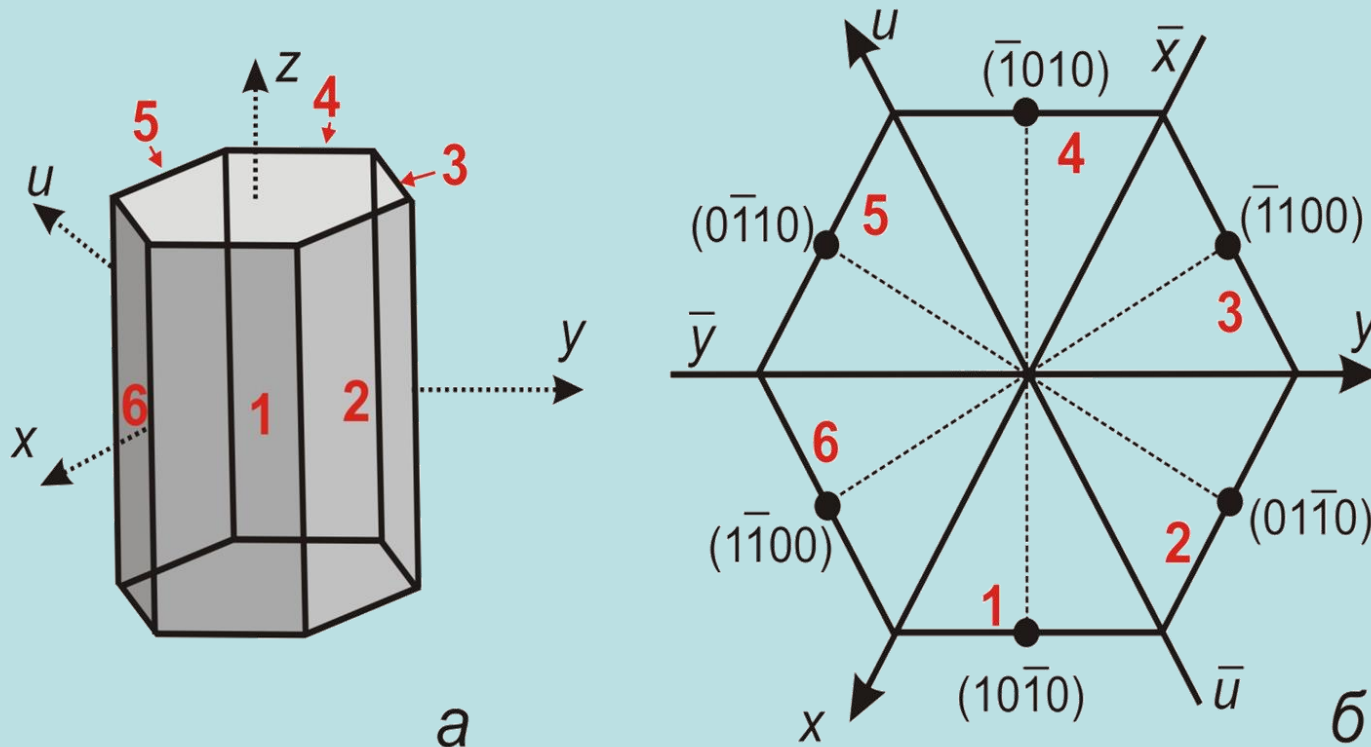
Наличие трех осей в одной плоскости, другими словами в двумерном пространстве, делает параметр по третьей оси зависимым от двух остальных:  $h + k + i = 0$

А 3 горизонтальные координаты точки становятся неоднозначными

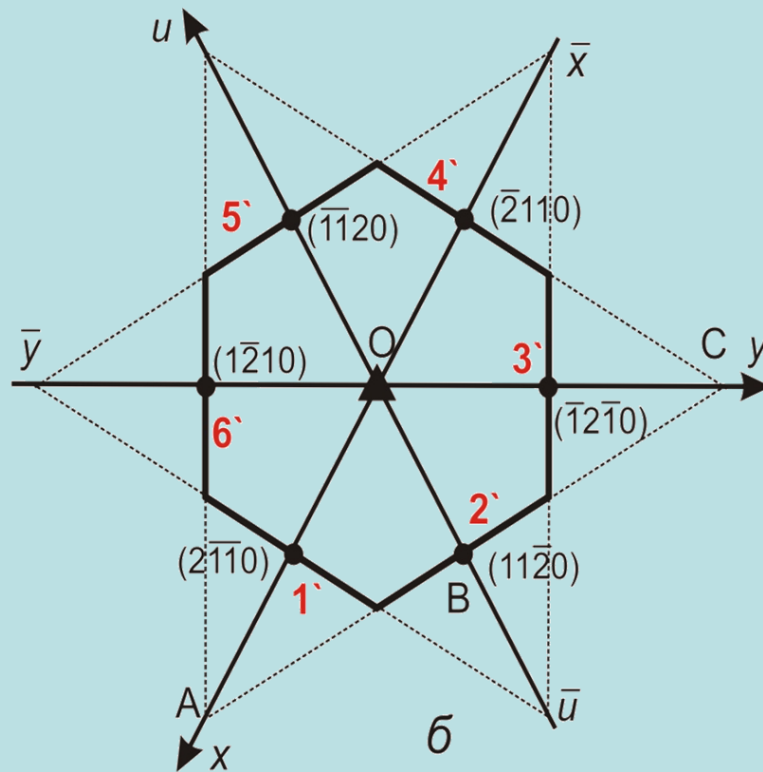
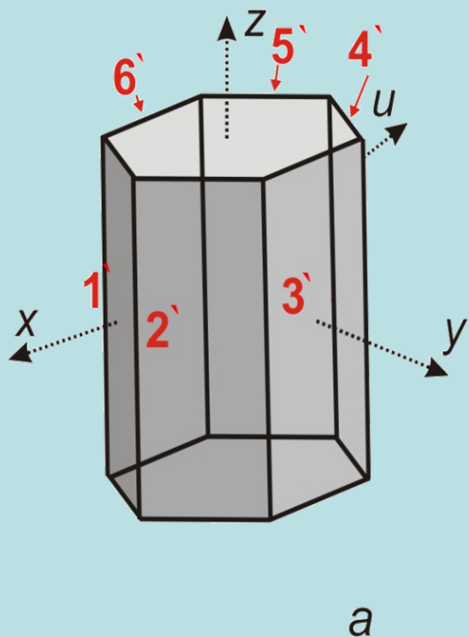




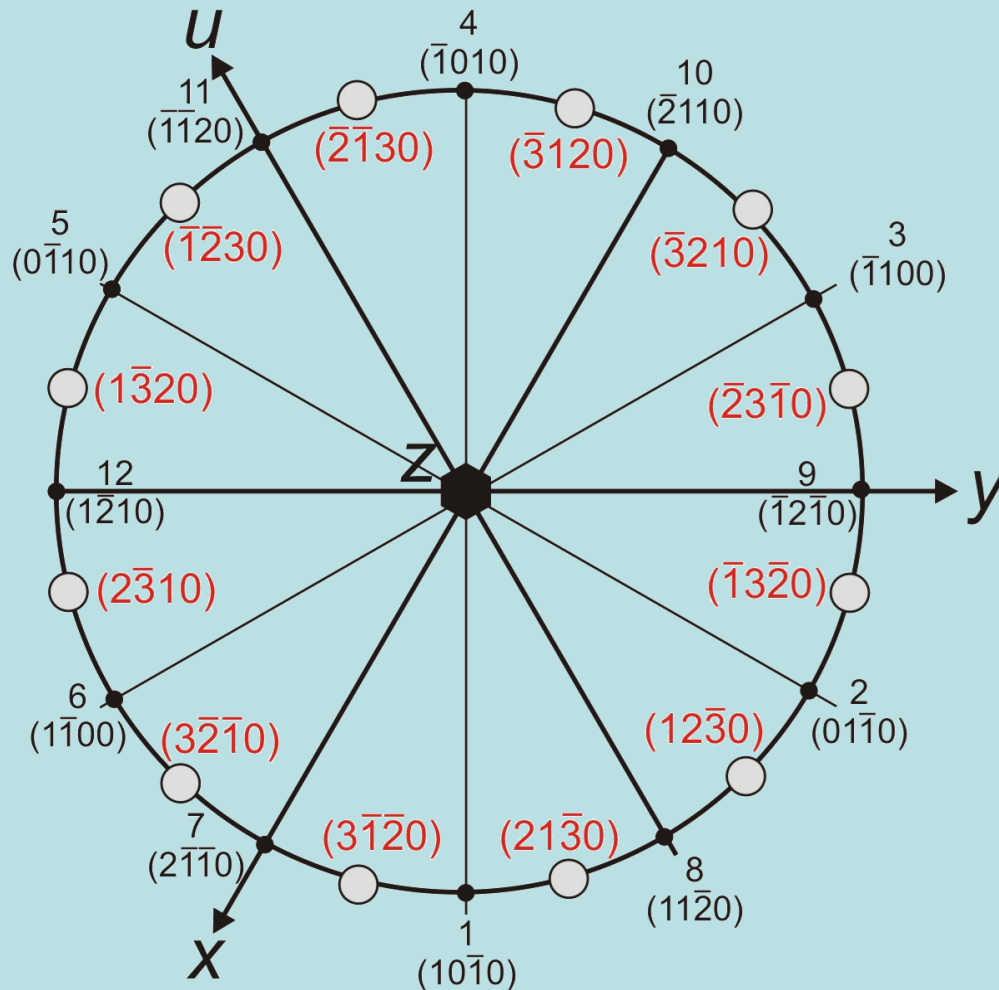
# Индицирование граней гексагональной призмы $\{10\bar{1}0\}$ .



# Индицирование граней гексагональной призмы $\{2\bar{1}\bar{1}0\}$ .



# Индексирование граней дигексагональной призмы $\{21\bar{3}0\}$ .



В кристаллографии используются следующие обозначения:

✓ Индексы, заключенные в круглые скобки  $(hkl)$  – индексы Миллера конкретной плоскости

✓ Индексы, заключенные в фигурные скобки  $\{hkl\}$  – индексы Миллера совокупности эквивалентных плоскостей

✓ Индексы, заключенные в квадратные скобки  $[rst]$  – индексы Вейса для конкретного направления

✓ Индексы, заключенные в угловые скобки  $\langle rst \rangle$  – индексы Вейса для всех эквивалентных направлений

Символы направлений и граней, несмотря на свою внешнюю простоту обладают множеством поразительных достоинств:

1. Позволяют определить с математической точностью пространственное расположение как относительно координатных осей, так и относительно других элементов кристалла (граней, ребер и т. д.).

2. Отличать по внешнему виду наиболее плотноупакованные грани кристалла, соответствующие узловым плоскостям с наибольшей ретикулярной плотностью.

3. Выделять эквивалентные атомные ряды или плоскости, обладающие одинаковой структурой и физическими свойствами.

4. Характеризовать анизотропию кристалла и его симметрию.

5. Рассчитывать углы между гранями и ребрами кристалла.

Уникальное достоинство этих весьма простых и компактных кристаллографических символов благодаря учету закономерностей периодического атомного строения и соблюдению четких правил индицирования граней кристалла, заключается в поразительном сочетании математической точности и кристаллографической ёмкости.

Широкое распространение символов в кристаллографии не ограничивается индицированием в морфологическом аспекте. Система индексов плоскостей и направлений оказалась широко востребованной в микрокристаллографии в качестве основного геометрического инструмента рентгеноструктурного анализа и других методов расшифровки структур.