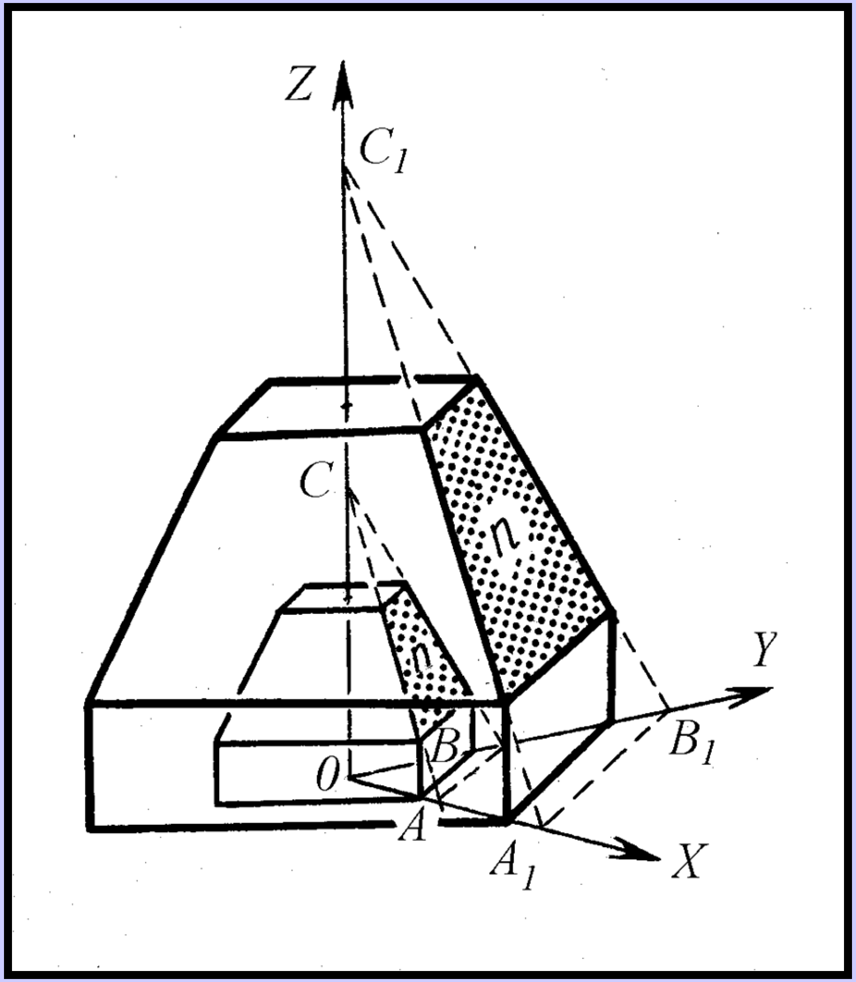
ЛЕКЦИЯ 5

СИМВОЛЫ ГРАНЕЙ И РЕБЕР КРИСТАЛЛОВ

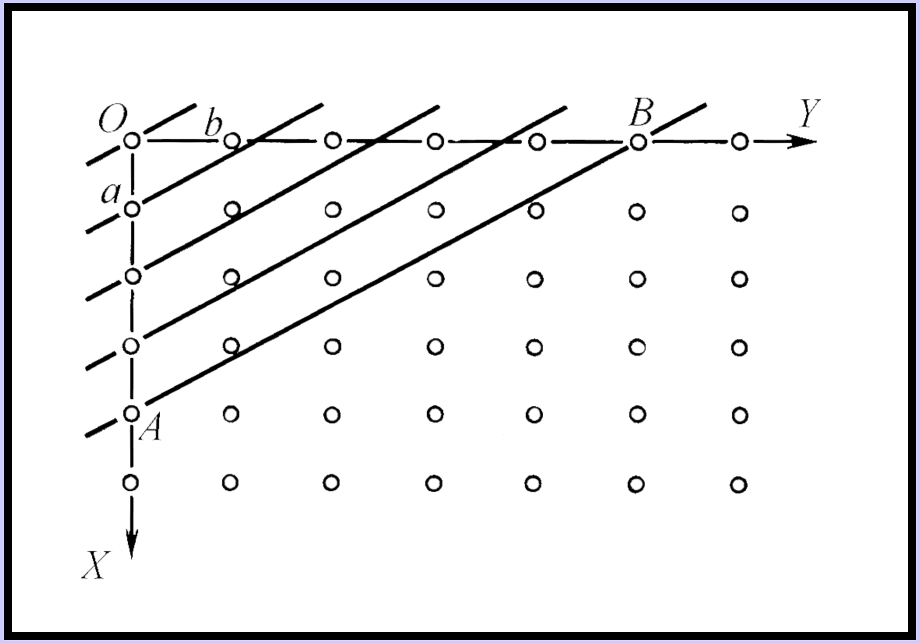
***ИНДИЦИРОВАНИЕ*– это присвоение каждой грани числового кристаллографического символа**

(112), (231)



- При росте грань кристалла (*n*), передвигаясь параллельно самой себе, отсекает на координатных осях *X*, *Y* и *Z* отрезки в одинаковом отношении:
- $OA : OB : OC =$
- $= OA_1 : OB_1 : OC_1 = \mathrm{const}$

Для того, чтобы зафиксировать положение грани, необходимо получить отношения ее параметров (отрезков, которые отсекает грань на координатных осях X, Y и Z), измеренных **в определенных масштабах**.

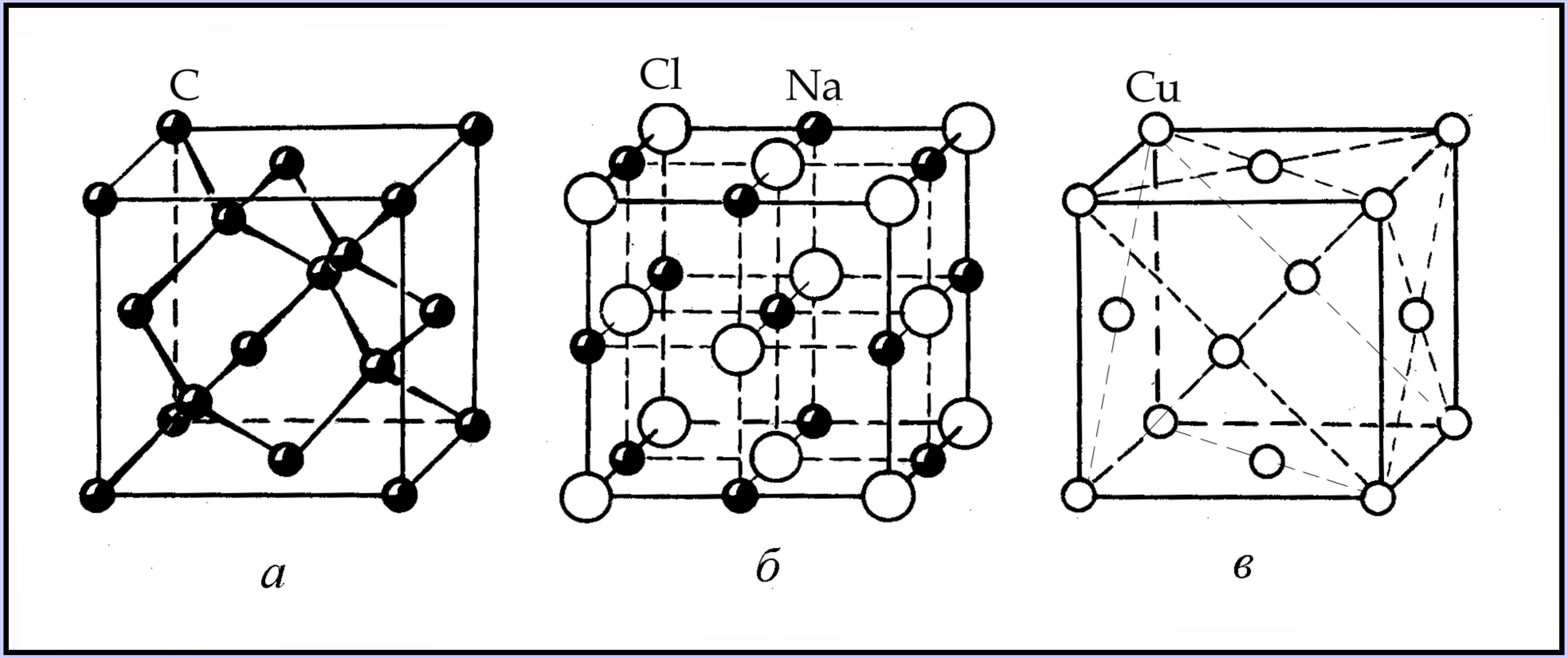


Ребра кристалла - это атомные (узловые) ряды.

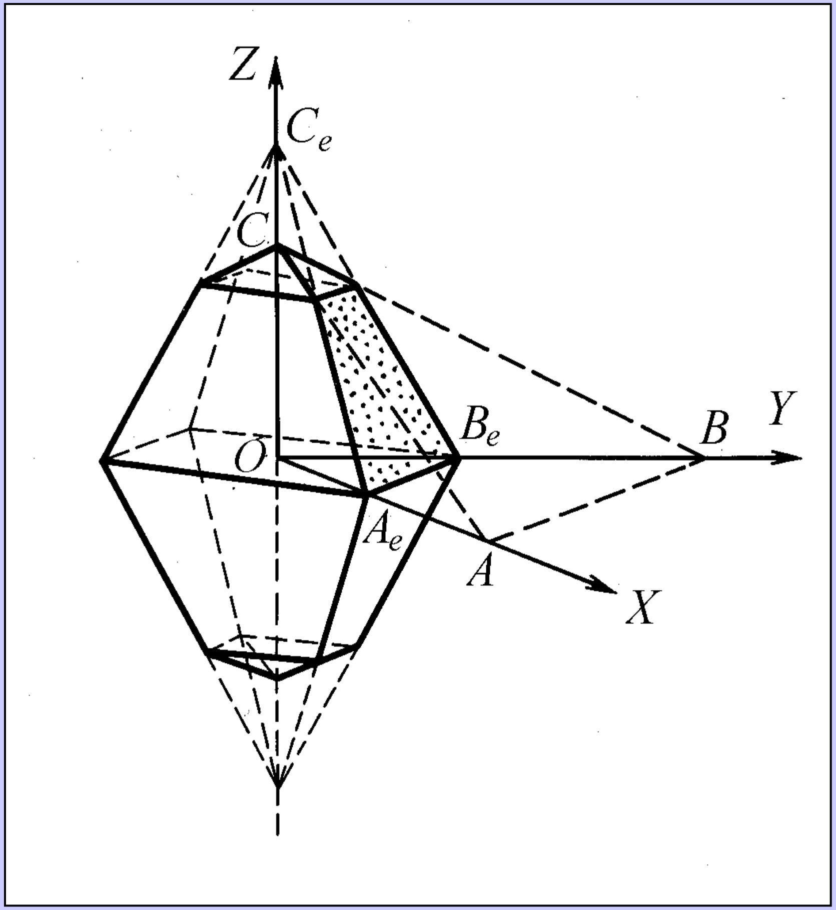
Грани кристалла - плоские атомные сетки.

Масштабы же заложены в самом кристалле – его структуре - это расстояния (трансляции) между узлами решетки вдоль координатных направлений.

Кристаллические структуры алмаза (*а*), галита NaCl (*б*), меди (*в*)



На практике за единицы масштабов по каждой оси принимают отрезки (параметры), которые некоторая грань кристалла отсекает на координатных осях.



Например:

$OA_e = a_e$ – масштаб по оси X,

$OB_e = b_e$ – масштаб по оси Y,

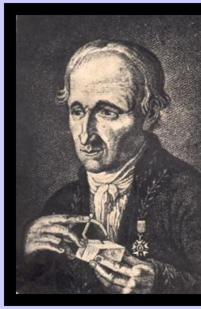
$OC_e = c_e$ - масштаб по оси Z.

Параметры искомой грани ABC:

$OA = a$, $OB = b$, $OC = c$ –

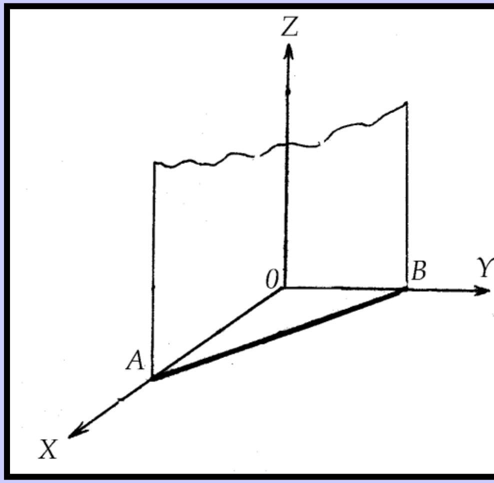
$$p : q : r = \frac{\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a_e}} : \frac{\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{b_e}} : \frac{\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{c_e}}$$

Закон Гаюи, ***закон целых чисел,*** *или* ***закон рациональности отношений параметров граней кристалла:***



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

$$p : q : r = \frac{a}{a_e} : \frac{b}{b_e} : \frac{c}{c_e},$$

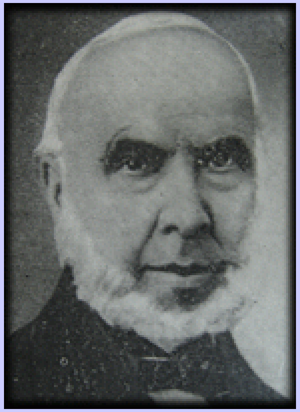


p, q, r – индексы Вейса

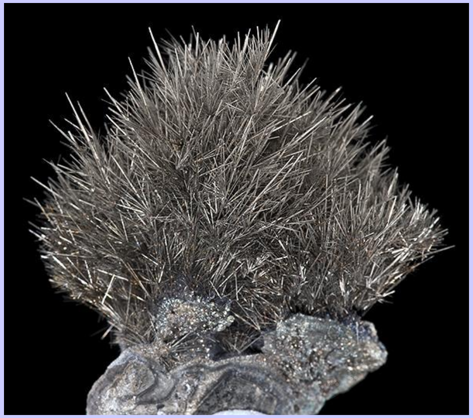
h, k, l – индексы Миллера

$$(hkl) = h : k : l = \frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{r} = \frac{a_e}{a} : \frac{b_e}{b} : \frac{c_e}{c}$$

Христиан Самуил Вейс (1780-1856)



Вильям Холлоуз Миллер (1801-1880)

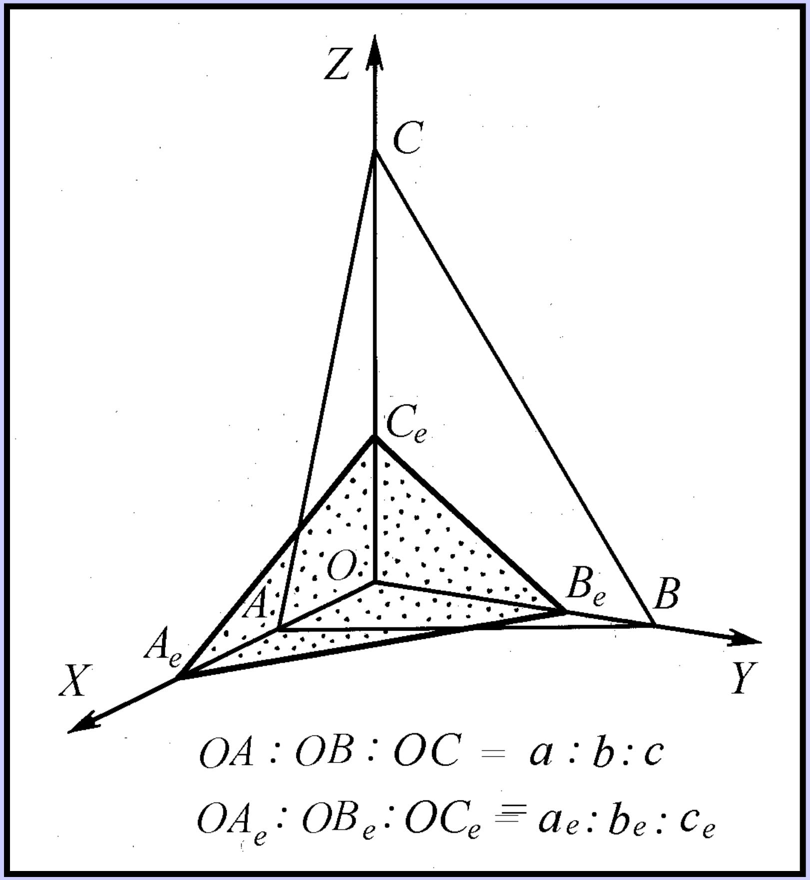


Минерал миллерит NiS

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

Символом грани, параметры которой приняты за единицы масштабов по координатным осям, т.е. грани $A_eB_eC_e$, задающей относительные масштабы $a_e : b_e : c_e$, будет (111),

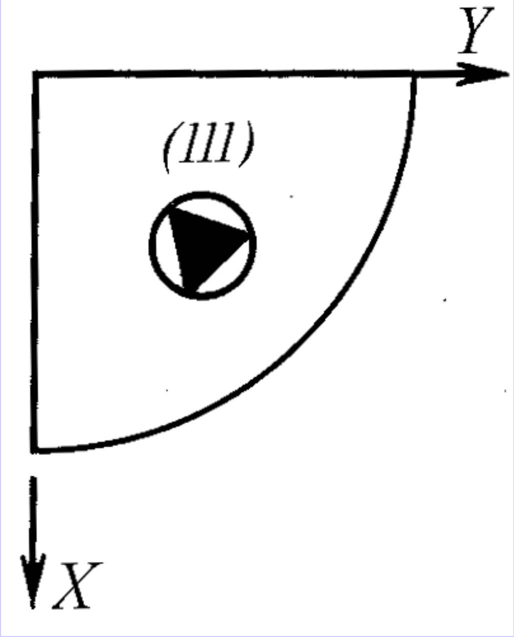
отсюда и ее название – ***единичная грань***



- В нашем примере:
- $\boldsymbol{p : q : r} = \frac{1}{2} : \frac{3}{2} : 3$ **= 1 : 3 : 6**
- $\boldsymbol{h : k : l} = \frac{2}{1} : \frac{2}{3} : \frac{1}{3}$ **= 6 : 2 : 1,**
- т.е**. (*hkl*) = (621)**
- (Читается: «шесть – два – один», но не «шестьсот двадцать один»!).

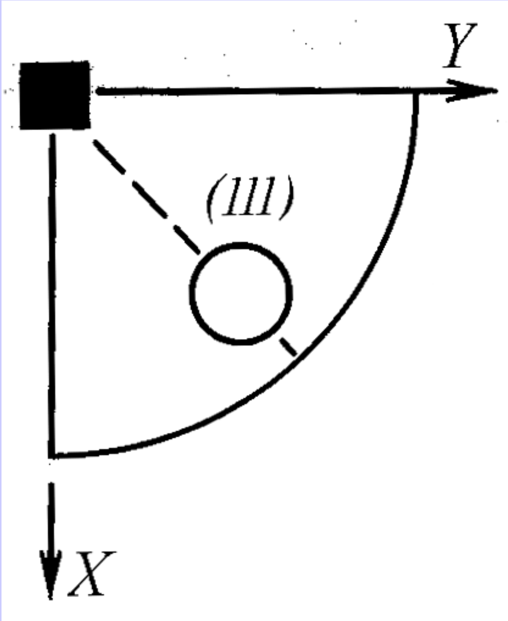
Положения единичных граней относительно координатных осей X, Y и Z на стереограммах кристаллов разных сингоний.

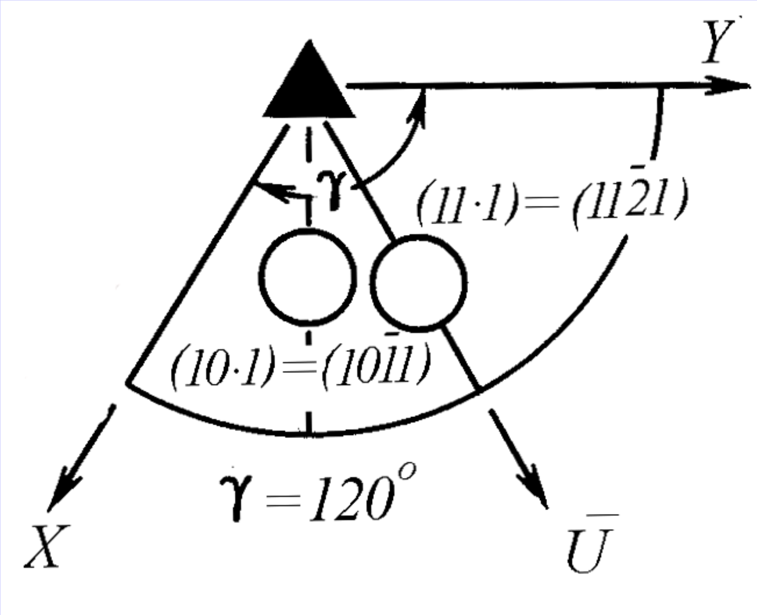
При выборе единичной грани учитывается эквивалентность координатных направлений.



Поскольку $a_e = b_e = c_e$, символ грани **кубического кристалла**

$$hkl = \frac{a_e}{a} : \frac{b_e}{b} : \frac{c_e}{c} = \frac{1}{a} : \frac{1}{b} : \frac{1}{c}$$

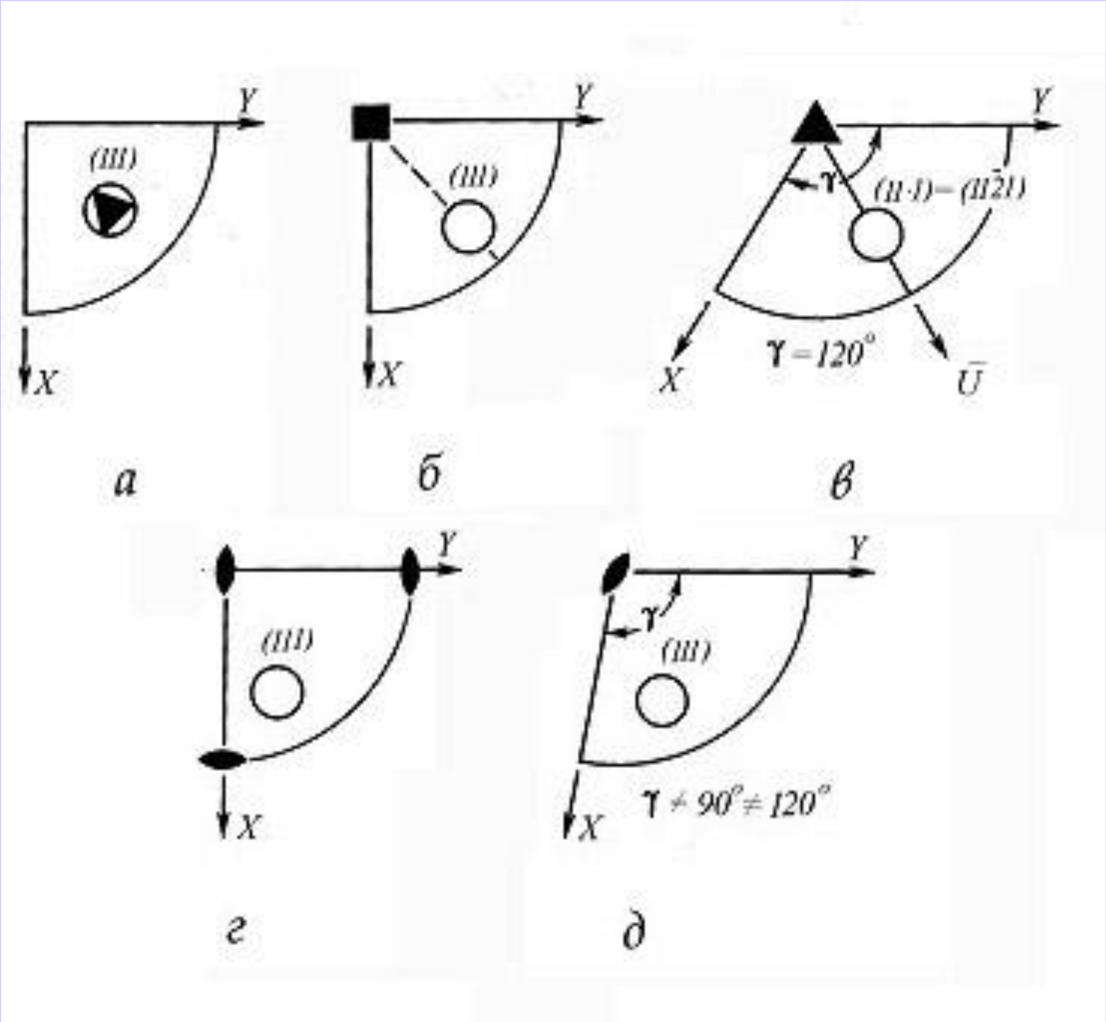




Для кристаллов **средней категории**, так как $\boldsymbol{a_e = b_e \# \; c_e}$, то

$$(\boldsymbol{hkl}) = \frac{a_e}{a} : \frac{a_e}{b} : \frac{c_e}{c}$$ – грань (111) на биссектрисе угла γ.

Так как в кристаллах ***гексагональной сингонии*** четырехосная координатная система – *XYUZ*, то в символе появляется дополнительный четвертый индекс ***i***, соответствующий новой оси *U*, из-за чего символ становится четырехчленным – **(*hkil*)**.

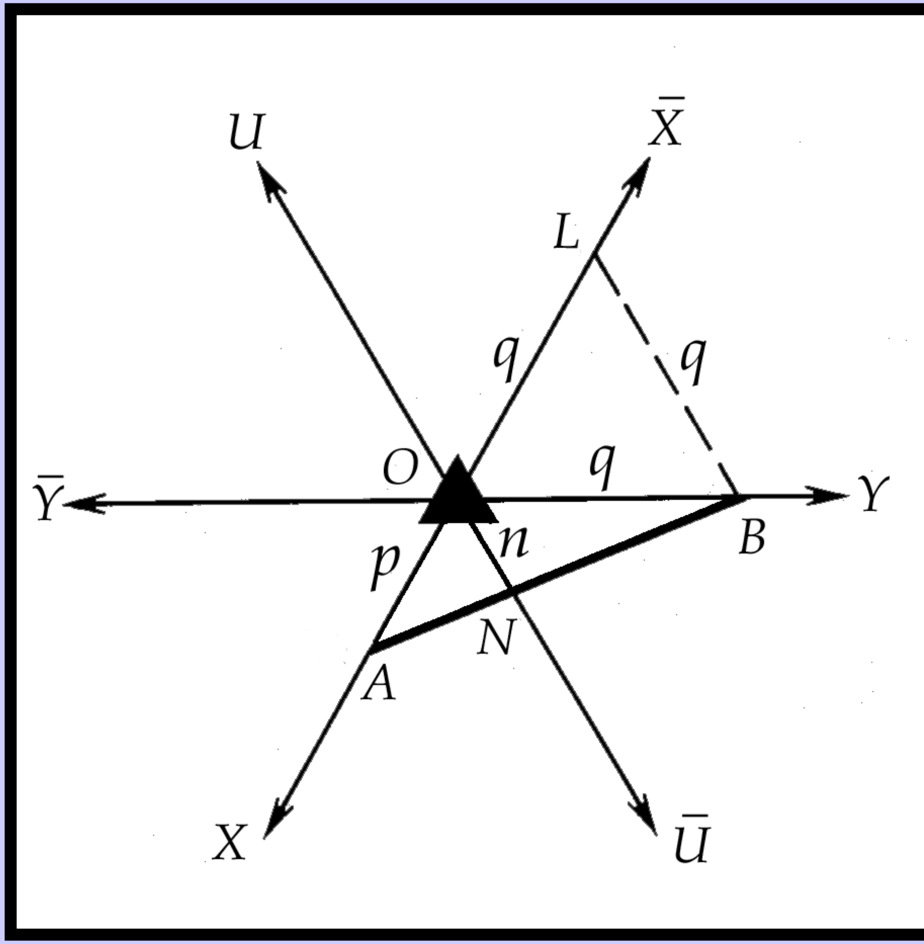


Положения единичных граней относительно координатных осей X, Y и Z на стереограммах кристаллов разных сингоний;
а − кубической, *б* − тетрагональной, *в* − гексагональной,
г − ромбической, *д* − моноклинной

К теореме: $\boldsymbol{h + k = \ ?i}$

Линия AB – след пересечения грани, имеющей символ (*hkil*), с плоскостью осей X, Y, U.

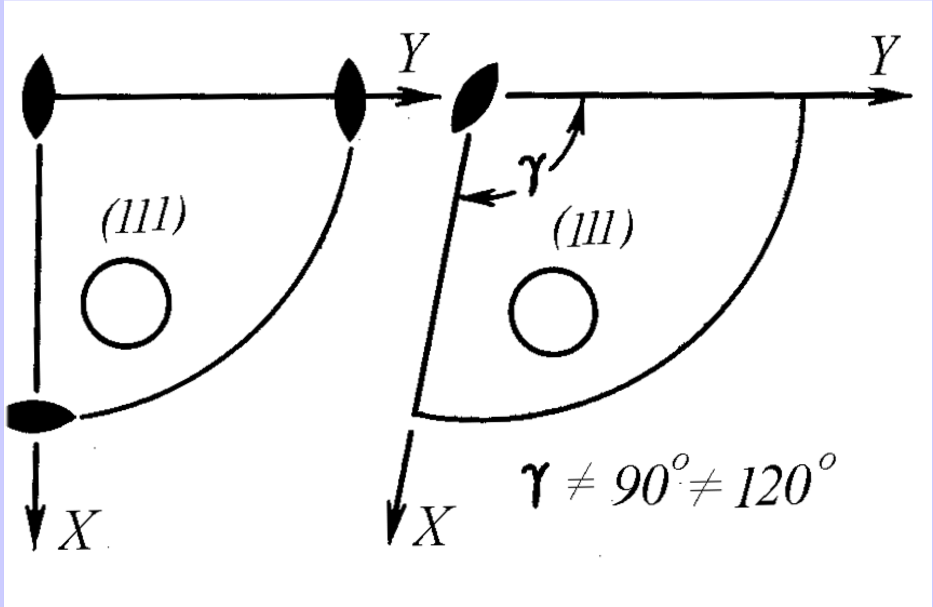
- Линия BL | | ON
- Δ ABL подобен Δ ANO.



$$\frac{p+q}{p} = \frac{q}{n}; \qquad \frac{p+q}{pq} = \frac{q}{nq};$$

$$\frac{1}{q} + \frac{1}{p} = \frac{1}{n} \qquad \frac{1}{\vec{p}} + \frac{1}{\vec{q}} = -\frac{1}{\vec{n}}$$

$\boldsymbol{h + k = -i}$



Для кристаллов **низшей категории,**

так как a_e # b_e # c_e, то

(*hkl*) = $\dfrac{a_e}{a} : \dfrac{b_e}{b} : \dfrac{c_e}{c}$ **– единичной гранью** (111)

может служить любая грань общего положения

Определение символов граней
при отсутствии в кристалле единичной грани

В **кубических** кристаллах единичная грань не нужна вследствие равномасштабности всех координатных осей: т.е. $\boldsymbol{a_e = b_e = c_e}$

$$hkl = \frac{a_e}{a} : \frac{b_e}{b} : \frac{c_e}{c} = \frac{1}{a} : \frac{1}{b} : \frac{1}{c}$$

В кристаллах **средней** категории можно воспользоваться ***двуединичной гранью***, пересекающей две разномасштабные грани, т.к. $\boldsymbol{a_e = b_e \# c_e}$

Грань (101) пересекает оси X и Z, грань (011)- оси Y и Z

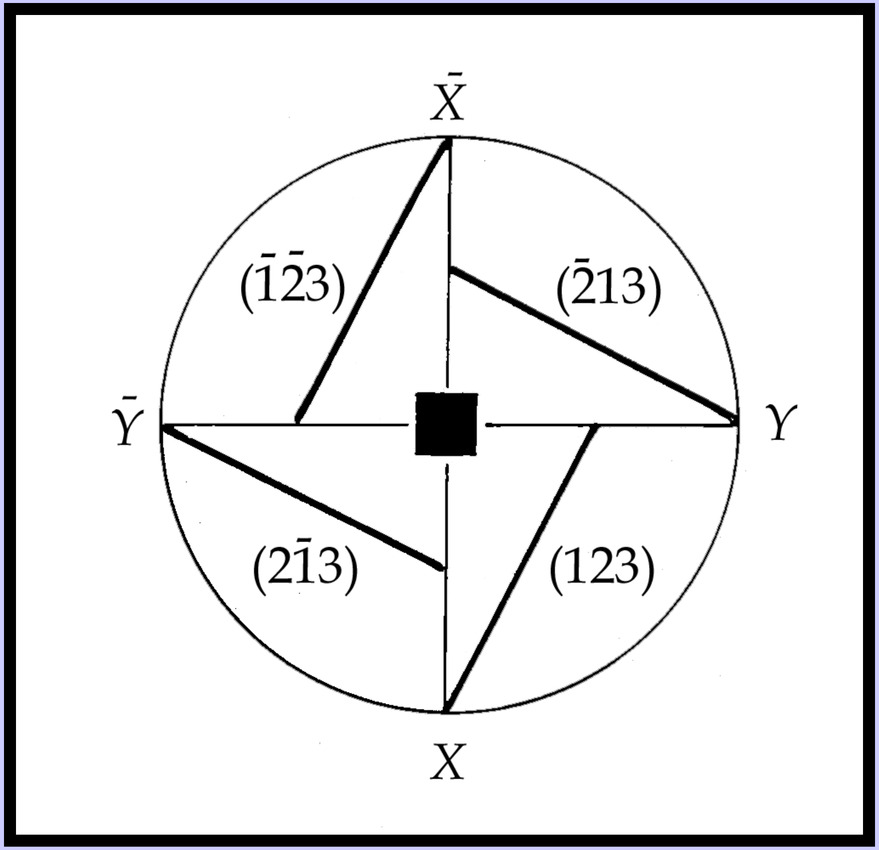
Символ грани, пересекающей равномасштабные оси X и Y, -

$$\boldsymbol{(hk0)} = \frac{\boldsymbol{a_e}}{\boldsymbol{a}} : \frac{\boldsymbol{b_e (= a_e)}}{\boldsymbol{b}} : \boldsymbol{0} = \frac{1}{a} : \frac{1}{b} : 0 = \boldsymbol{b : a} : 0 = \boldsymbol{(ba0)}$$

Резюме: в относительном масштабе нуждаются только те грани, которые пересекают разномасштабные (неэквивалентные)оси.

- Если грань пересекает только одну координатную ось, то в ее символе пишется единица на соответствующей этой оси позиции.
- Например: (001) – грань пересекает только ось Z,
- (100) – только ось X,
- (010) – только ось Y.

Символы граней, принадлежащих одной простой форме кристалла



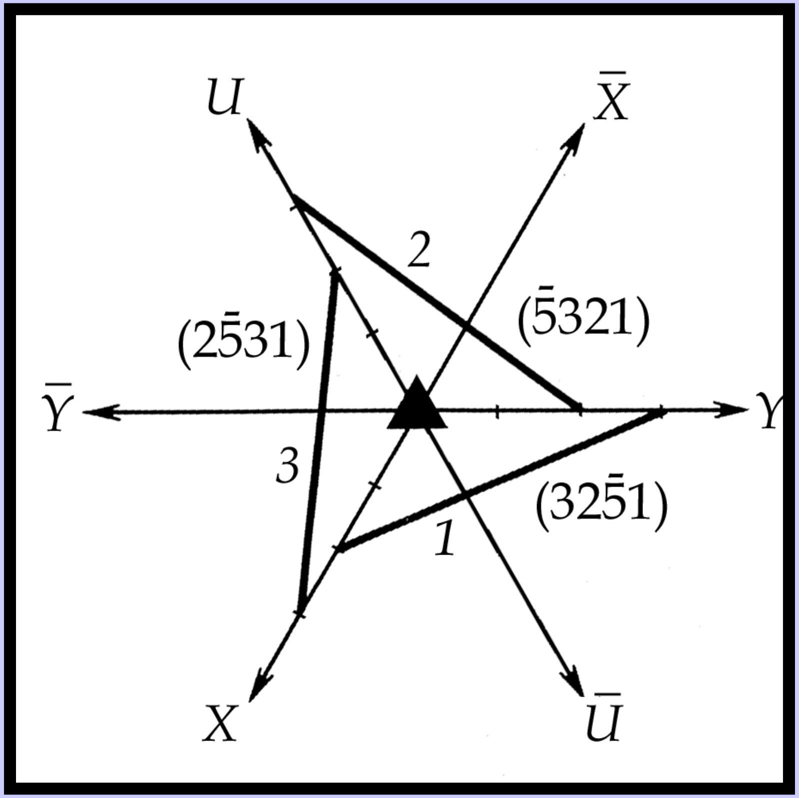
Изменение символов граней тетрагонального кристалла при повороте вокруг вертикальной оси 4-го порядка

Грани одной простой формы расположены по отношению к координатным осям под одними и теми же углами и, поэтому отсекают на этих осях одинаковые отрезки. Отсюда символы таких граней будут составлены из **одинаковых индексов**. И отличие символов будет заключаться лишь **в перестановке и знаках** составляющих индексов.

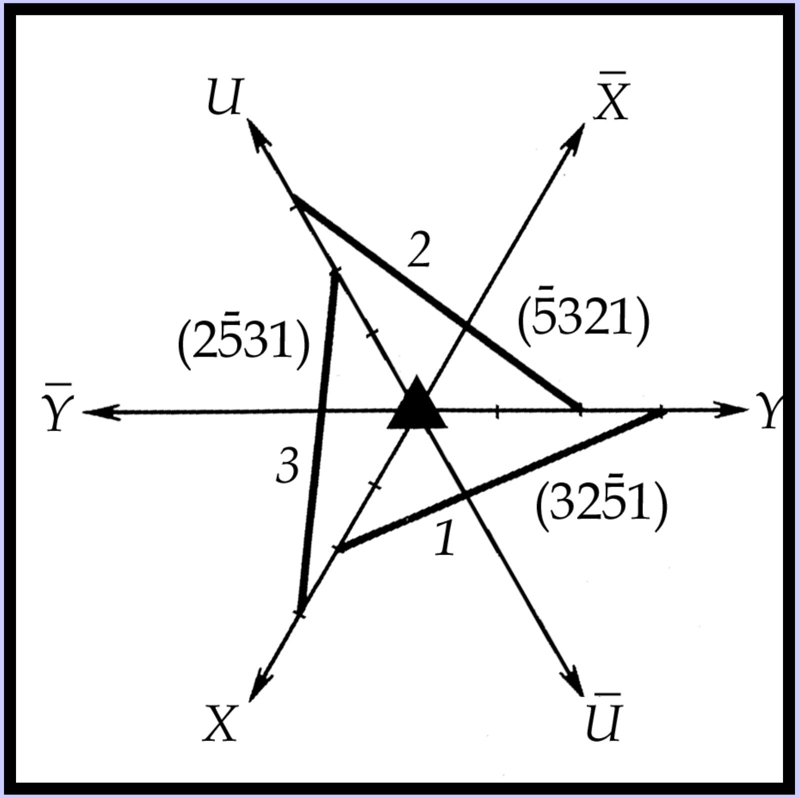
ЗАЧЕМ же нужна ось U?

В **гексагональном кристалле** благодаря повороту первой грани с символом ($hkil$) вокруг вертикальной оси 3-го порядка легко определить символы остальных граней ***круговой перестановкой*** первых трех индексов:

hki, kih, ihk.



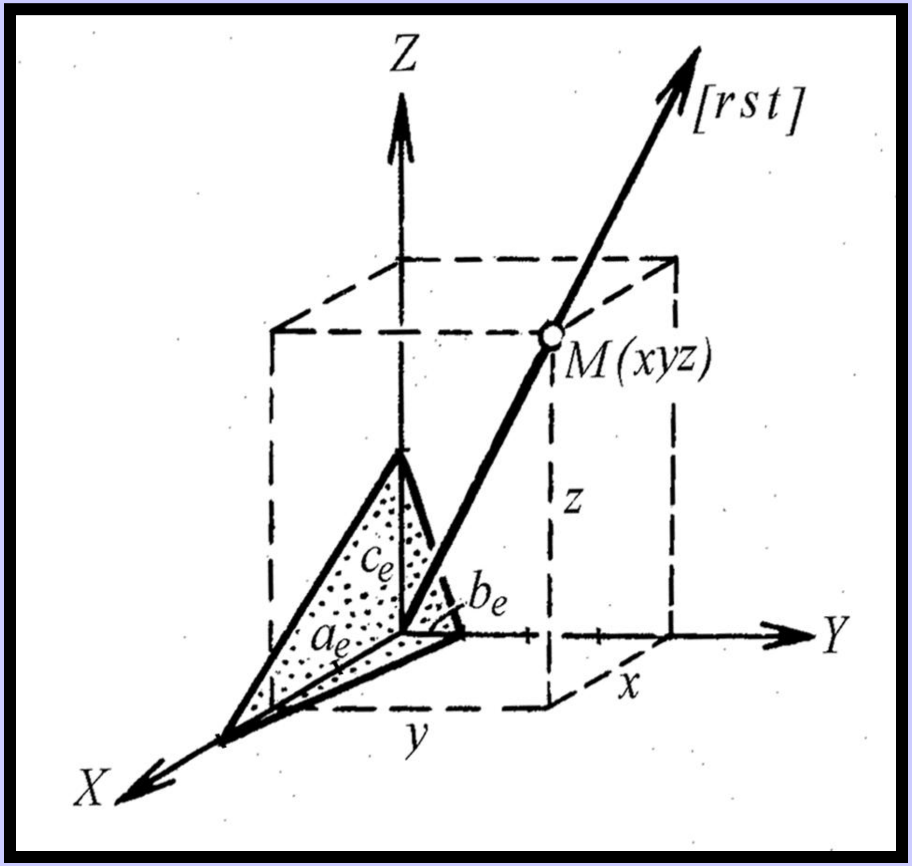
Четвертый индекс i в символах граней гексагональных кристаллов оказывается удобен, поскольку после его изъятия получим трехиндексовые гексагональные символы, по которым достаточно сложно определить принадлежность граней к одной простой форме.



Определяя символы граней кристаллов гексагональной сингонии, рекомендуется сначала не обращать внимание на «лишнюю» ось U, тем более что она мешает при аналитических расчетах. Однако, в окончательный ответ следует вставлять недостающий индекс по этой оси или точку: $(hk \cdot l)$

Символы ребер кристаллов –

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

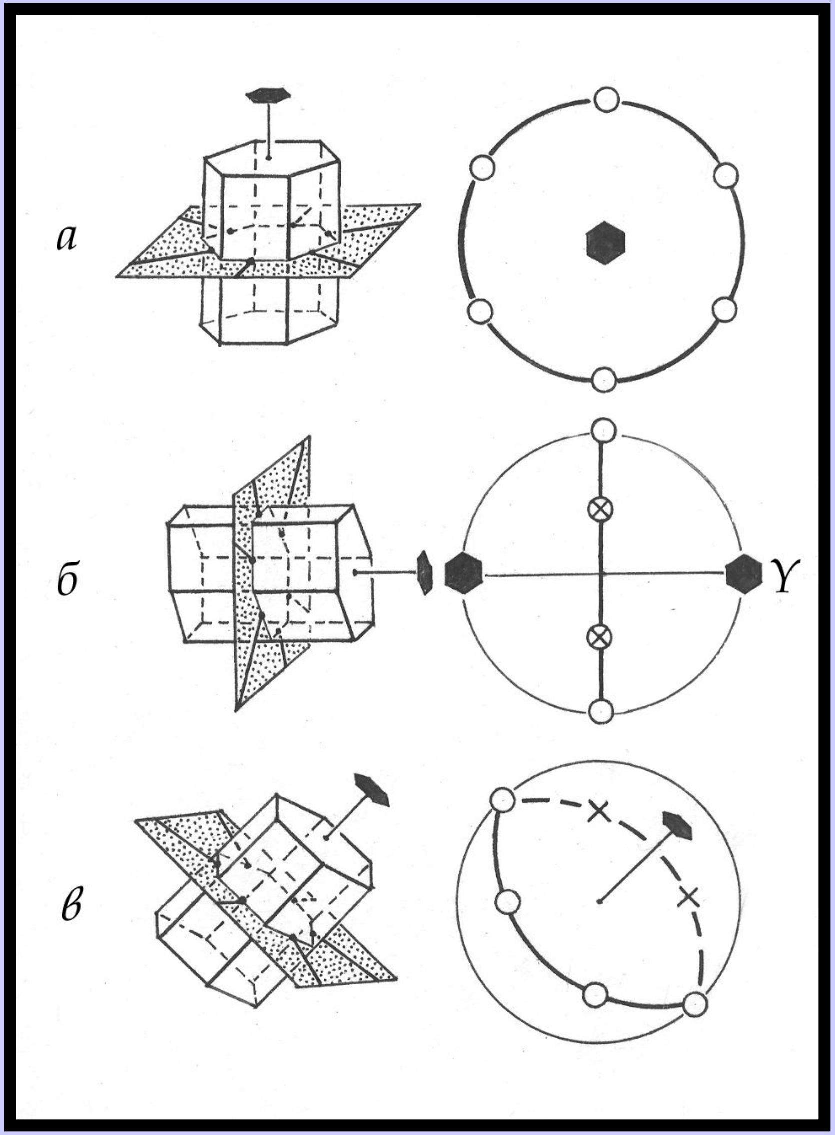


Из рисунка видно, что координаты точки *M* –
$x = 2/3\ a_e,\ y = 4b_e,\ z = c_e$.

Отсюда **[*rst*] = 2/3 : 4 : 2 = = 1 : 6 : 3 = [163].**

Символ ребра (например, параллельного оси X) будет:
$(x/a_e) : 0/b_e : 0/c_e$ = [100].

Закон зон (поясов) – закон Вейса



Проекция таутозональных граней, связанных осью 6-го порядка, являющейся осью зоны.

Зоной (поясом) кристалла называют совокупность граней (***таутозональных граней)***, пересекающихся по параллельным ребрам.

Зная символы пересекающихся граней, можно рассчитать символ ребра, по которому они пересекаются, т.е. определить **символ зоны.**

Связь между символами граней и ребер кристалла

Уравнение плоскости - $Ax + By + Cz = D$,

x, y, z – текущие координаты точки на плоскости;
A, B, C – коэффициенты; D – свободный член.

Уравнение плоскости в отрезках: $$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 0,$$

a, b, c – отрезки, отсекаемые гранью на осях X, Y и Z.

$$A : B : C = \frac{1}{a} : \frac{1}{b} : \frac{1}{c} = h : k : l; \qquad \boldsymbol{hx + ky + lz = 0.}$$

Вывод**:** ***не всякая плоскость может реализоваться в виде грани кристалла, а лишь такая, в уравнении которой коэффициенты при текущих координатах рациональны, т.е. их отношение может быть сведено к отношению целых взаимно простых чисел.***

Поскольку $x : y : z = r : s : t$, то $\boldsymbol{hr + ks + lt = 0}$

Это фундаментальное уравнение выведено Вейсом.

Вывод из уравнения Вейсса : зная символы двух граней $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$, можно определить символ ребра $[rst]$, по которому они пересекаются.

Для 1-й грани – $h_1r + k_1s + l_1t = 0$

Для 2-й грани – $h_2r + k_2s + l_2t = 0$

Такие системы удобно решать способом перекрестного умножения:

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

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

Пример :

Грань 1	
h1	1
k1	1
l1	1

Грань 2	
h2	0
k2	0
l2	1

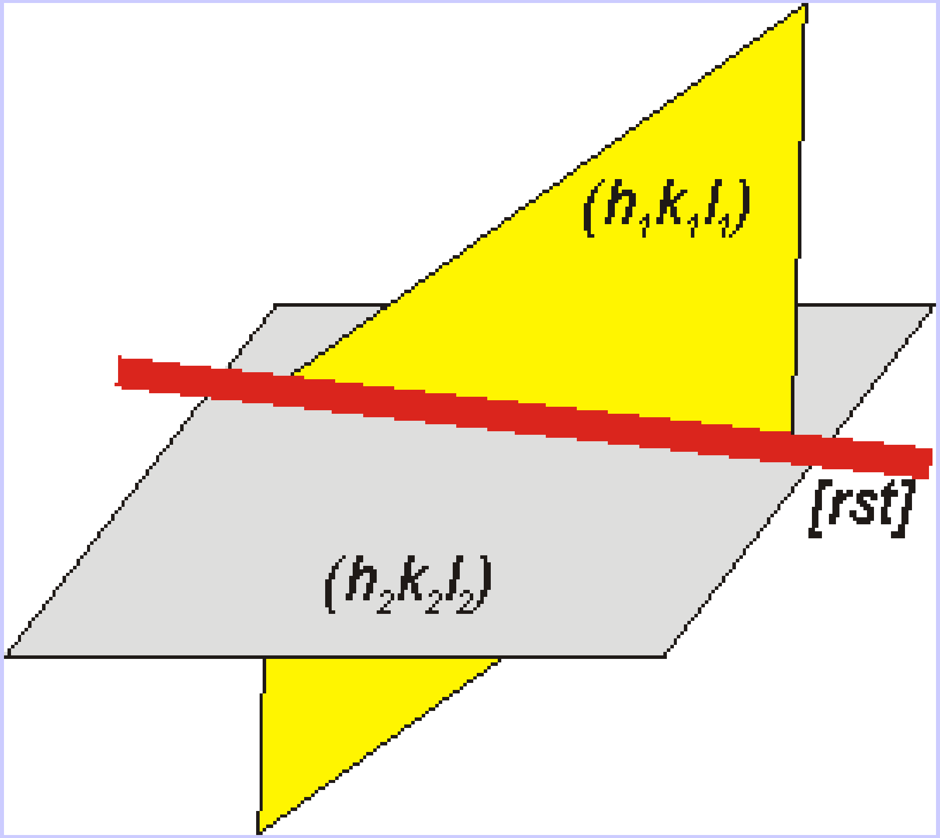
$$\begin{array}{c|cccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \end{array}$$

$$r : s : t = (k_1 l_2 - k_2 l_1) : (h_2 l_1 - h_1 l_2) : (h_1 k_2 - h_2 k_1).$$

h1	*k1*	*l1*	*h1*	*k1*	*l1*
1	1	1	1	1	1
0	0	1	0	0	1
h2	*k2*	*l2*	*h2*	*k2*	*l2*

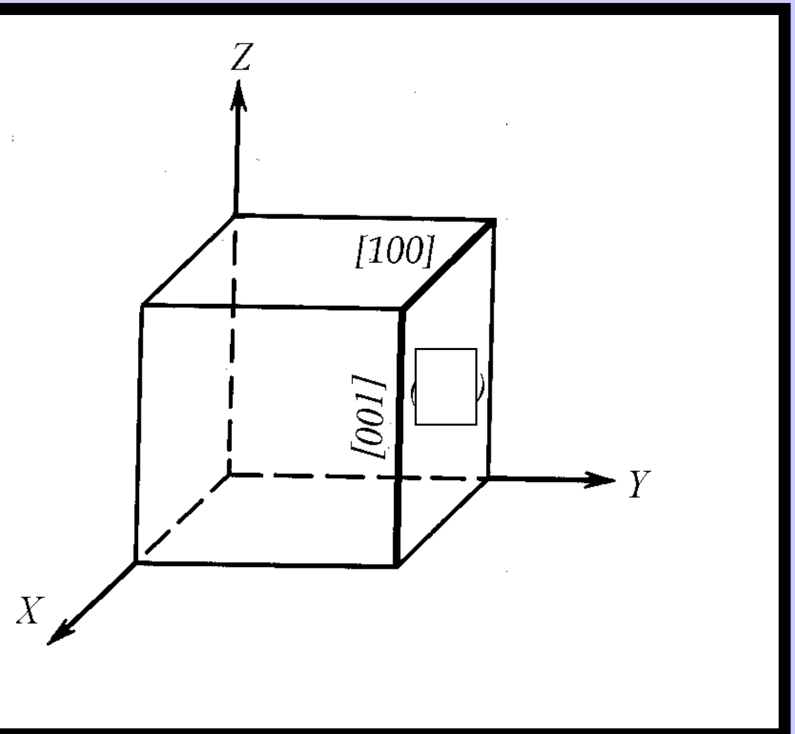
r	
:	
s	
:	
t	

Две грани определяют ребро (ось зоны)



Таким же образом можно вычислить и символ грани (hkl), в плоскости которой лежат два пересекающихся ребра $[r_1 s_1 t_1]$ и $[r_2 s_2 t_2]$:

$$hr_1 + ks_1 + lt_1 = 0$$
$$hr_2 + ks_2 + lt_2 = 0.$$

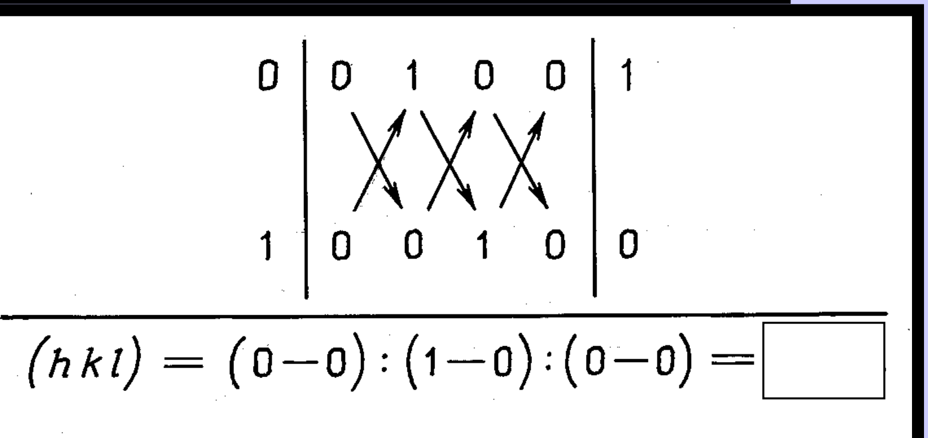


Например, зная символы двух пересекающихся ребер куба, т.е. двух координатных осей кристалла: [100] – оси *X* и [001] – оси *Z*, можно рассчитать символ грани (hkl), в плоскости которой они располагаются.

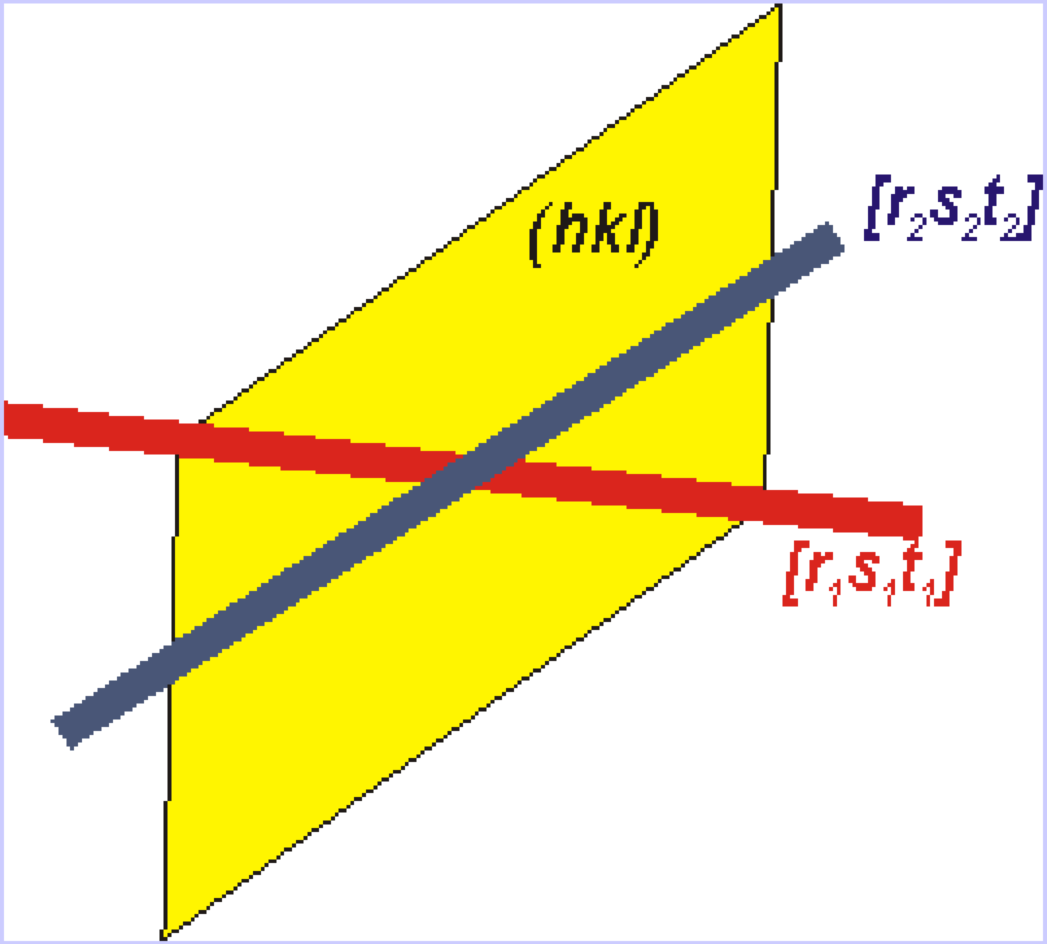
Для этого, составляем систему уравнений

$$h\cdot 1 + k\cdot 0 + l\cdot 0 = 0$$
$$h\cdot 0 + k\cdot 0 + l\cdot 1 = 0$$

И решаем его методом перекрестного умножения

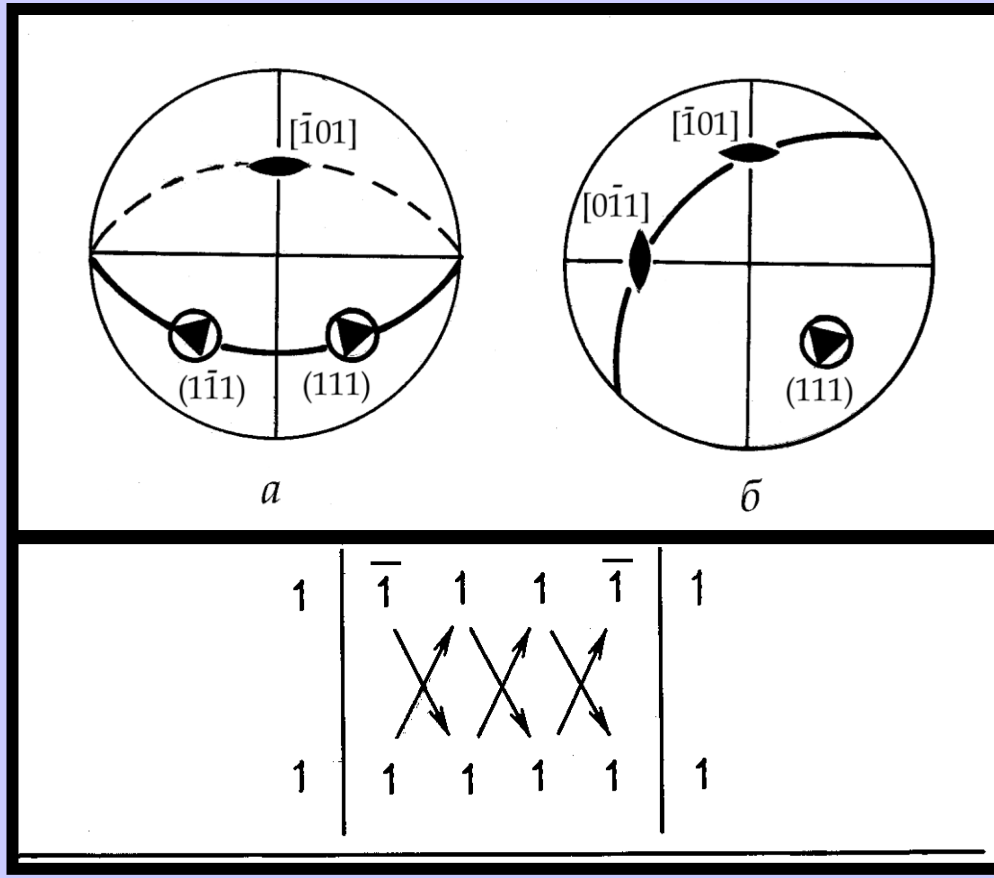


Два ребра (две зоны) определяют грань кристалла



Графический метод определения символов граней и ребер кристаллов

Графически дуга большого круга, проходящая через гномостереографические проекции граней (**111**) и ($\mathbf{1\bar{1}1}$) кубического кристалла, представляет собой гномостереографическую проекцию ребра, по которому пересекаются эти грани.



$$[rst] = [\bar{1}01]$$

Две грани определяют ребро (ось зоны), два ребра (две зоны) – грань кристалла

Сущность закона Вейсса -
- закона поясов (зон):

всякая плоскость, параллельная двум пересекающимся ребрам кристалла (принадлежащая двум его зонам), представляет собой возможную грань кристалла, а всякое направление, параллельное линии пересечения двух граней кристалла, - его возможное ребро.

Метод графического получения возможных граней и ребер кристалла называется ***методом развития зон (поясов), или методом Вейса.***

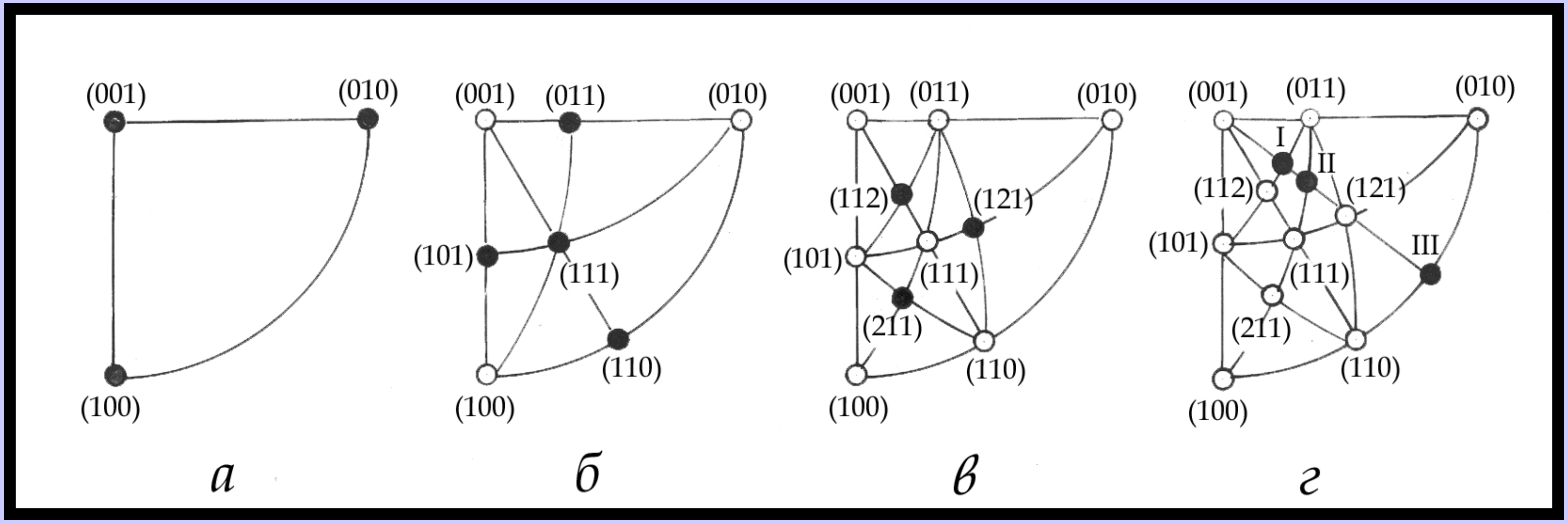
Следствия из соотношения **$hr + ks + lt = 0$:**

1. В символе любой параллельной координатной оси грани, индекс, соответствующий этой оси, равен нулю. Например, в символах граней, параллельных оси X, $h = 0$. Действительно, символ оси X – [100], следовательно, $h \cdot 1 + k \cdot 0 + l \cdot 0 = 0$, откуда $h = 0$.

2. Для всех граней, принадлежащих любой из проходящей через грань (001) зон, кроме самой грани (001), постоянно отношение $h : k = const$.

3. Для символов таутозональных граней (hkl), $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ существует следующая зависимость: грань, ***символ которой получен простым почленным сложением индексов двух других граней, принадлежит этой же зоне.***
   Например, $(h_1 + h_2)r : (k_1 + k_2)s : (l_1 + l_2)t = (hkl)$,

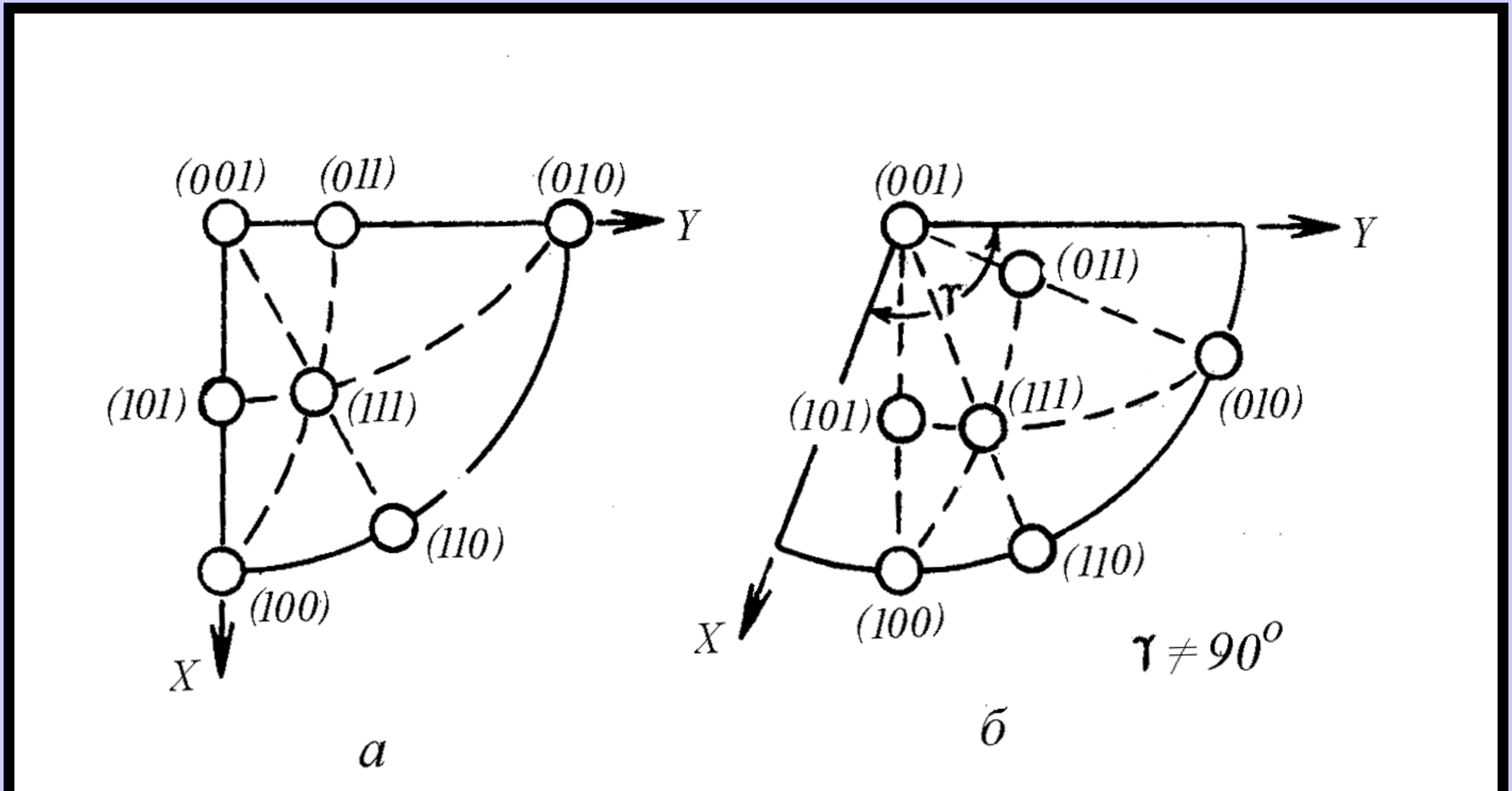
Графический вывод возможных граней и ребер кристалла *методом развития зон* можно упростить, если взять в качестве исходных три координатные грани с известными символами (100), (010), (001) и предварительно выбранную единичную – (111) и использовать приведенные выше следствия из уравнения $\boldsymbol{hr + ks + lt = 0}$.



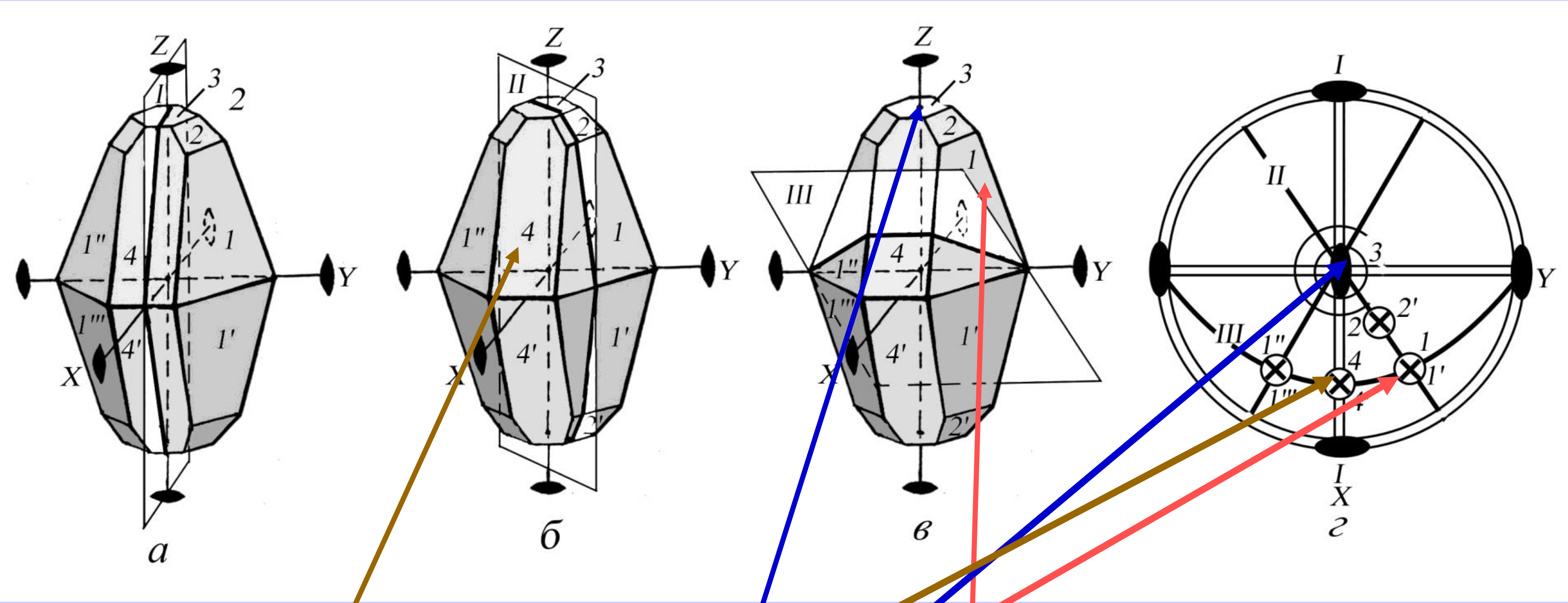
Зоны рекомендуется проводить в следующей последовательности:

1. через координатные грани – получим зоны координатных осей;
2. через единичную и координатные грани – получим двуединичные грани (011), (101), (110);
3. через двуединичные грани – получим грани с символами (112) = (111) + (001), (121) = (111) + (010), (211) = (111) + (100) и т.д .

Позиции основных граней в кристаллах с прямоугольной (*а*) и косоугольной (*б*) системами координат



Задача на метод развития зон

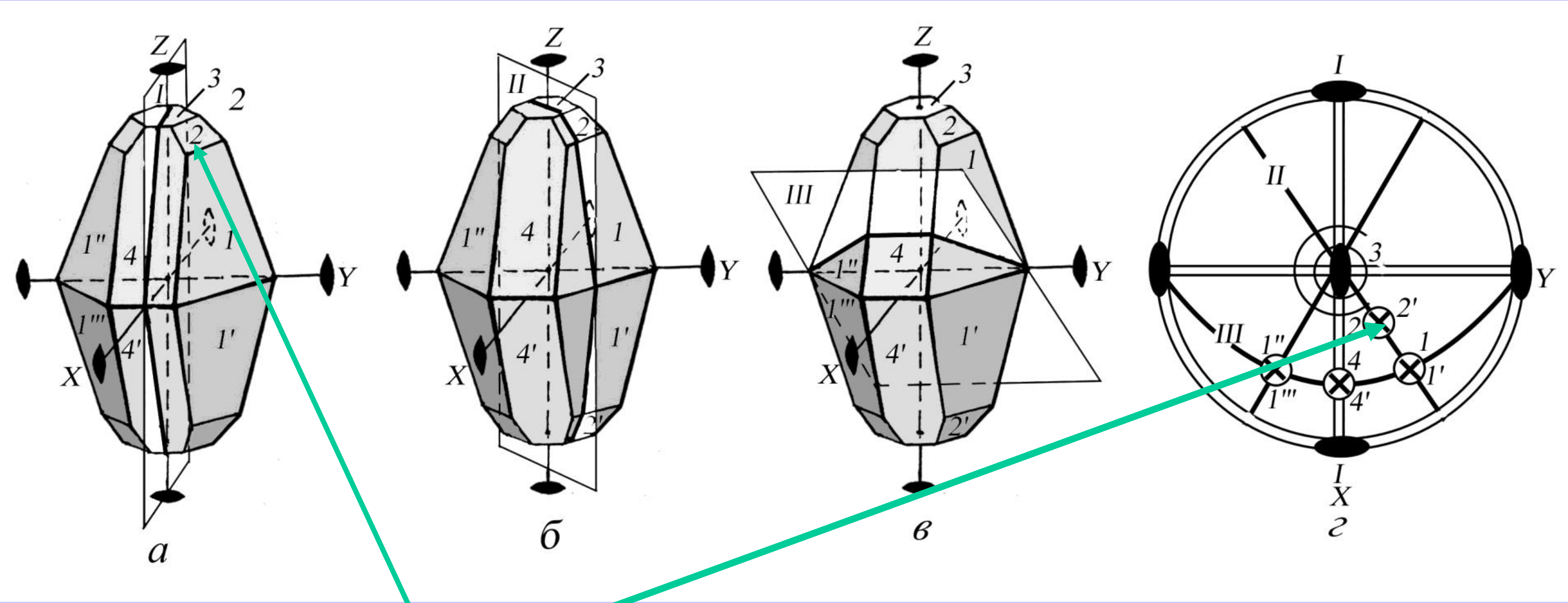


• В качестве единичной грани **(111)** удобно выбрать грань 1 общего положения, поскольку она принадлежит двум зонам, что облегчает определение символов остальных граней, принадлежащих этим же зонам.

• символ грани 3 однозначен – **(001),** поскольку она пересекает лишь одну координатную ось Z и параллельна двум другим – X и Y.

• Грань 4 лежит на пересечении зоны I (*k*=0), и зоны III, проходящей через выход оси Y, где могла располагаться возможная грань (010), и единичную грань 1 **(111).** Эта зона задает отношение *h* : *l* = 1 : 1. Таким образом, грань 4 = **(101).**

Задача на метод развития зон



• Символ грани 2, принадлежащей одной зоне II с гранями (001) и (111) и находящейся между ними, легко определяется как сумма индексов этих граней: (001) + (111) = (112).

• Однако истинное положение этой грани можно определить лишь с помощью сетки Вульфа методом развития зон при условии, что известны сферические координаты φ° и ρ° единичной грани.