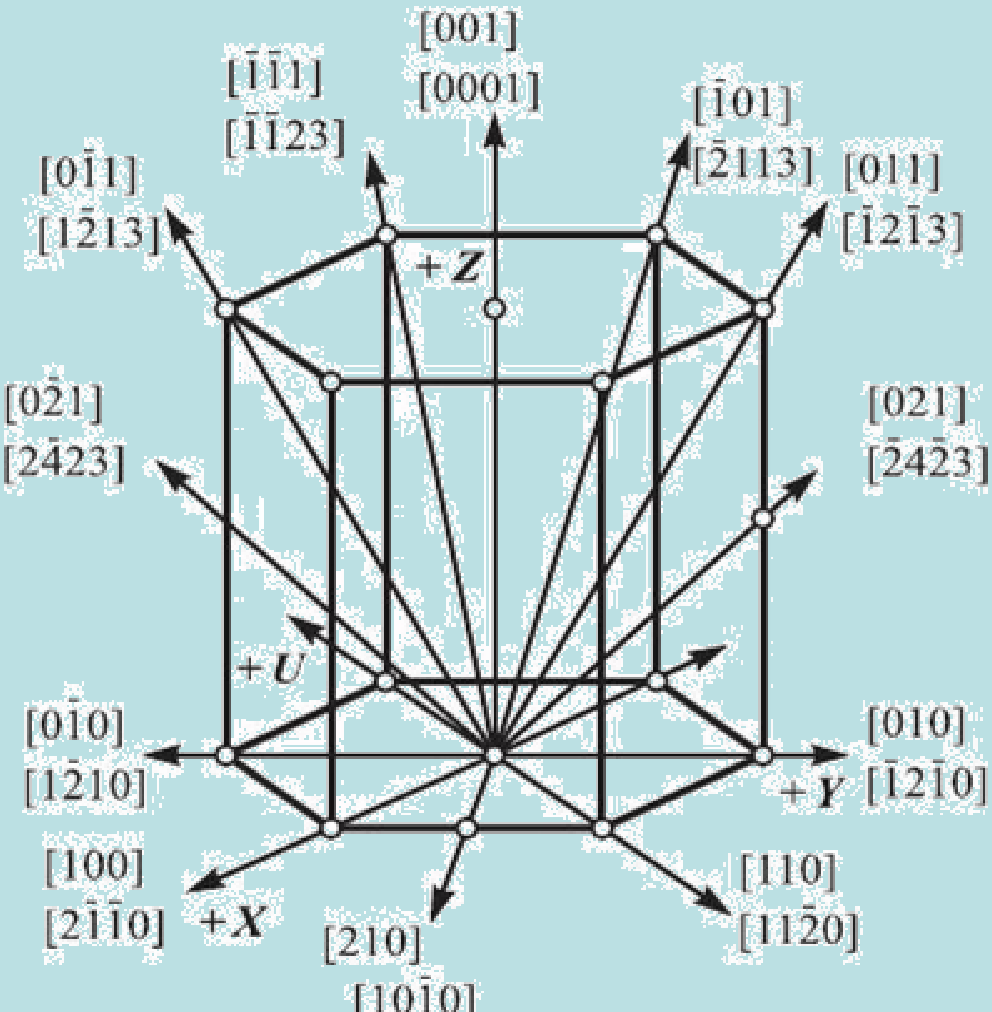
СИМВОЛЫ ГРАНЕЙ, (АТОМНЫХ ПЛОСКОСТЕЙ) И РЕБЕР (НАПРАВЛЕНИЙ) КРИСТАЛЛОВ

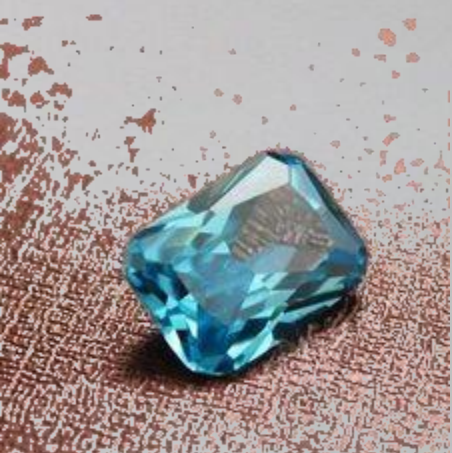


Индексы в кристаллографии появились задолго до того как открылось атомарное строение и доказана периодичность кристаллического пространства. На основании изучения только внешней формы кристаллов были сделаны фундаментальные выводы. Например о невозможности оси 5 порядка и выше 6-ого.

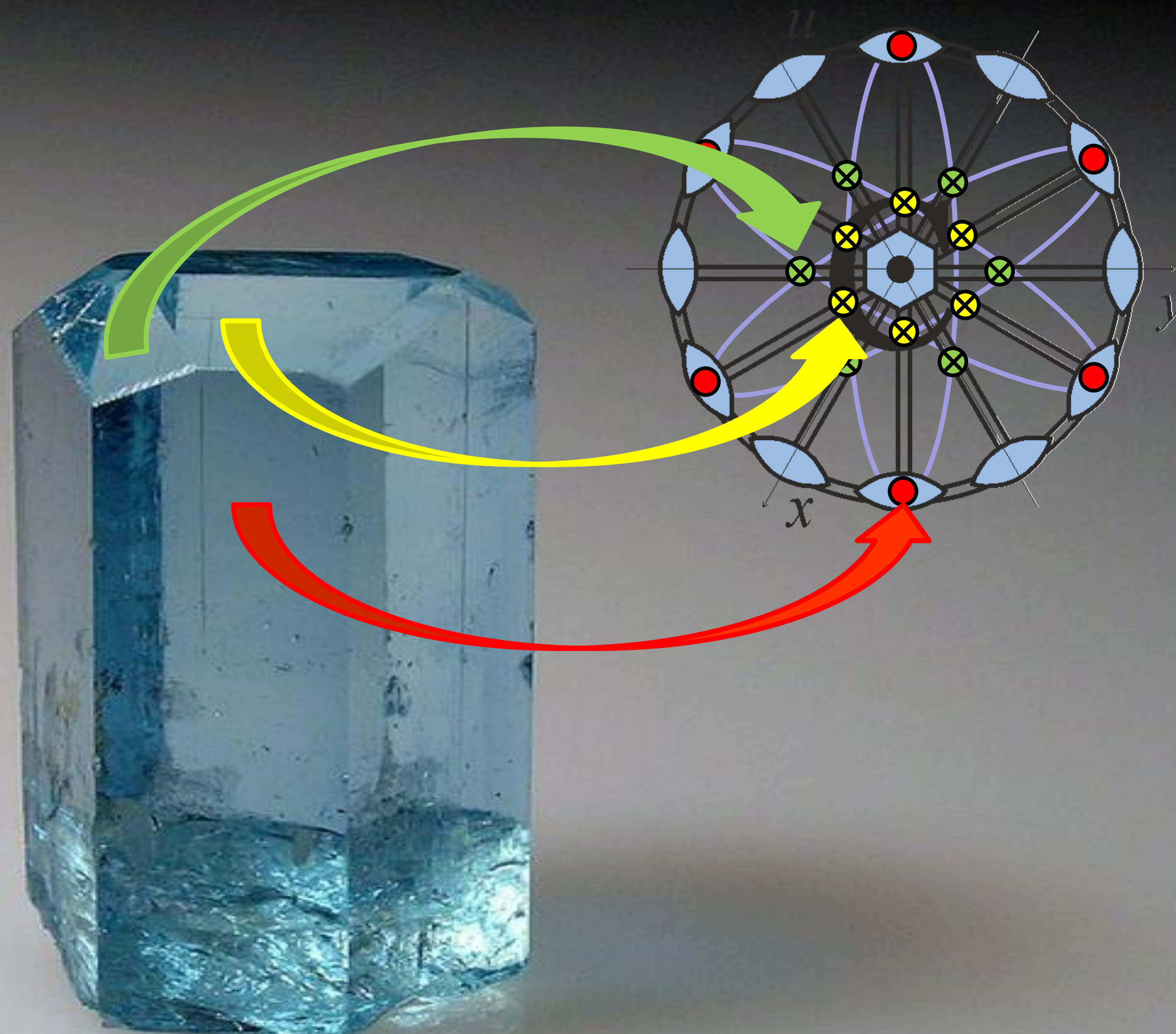
Огранка кристалла аквамарина представлена пинакоидом, гексагональной призмой и двумя гексагональными бипирамидами.

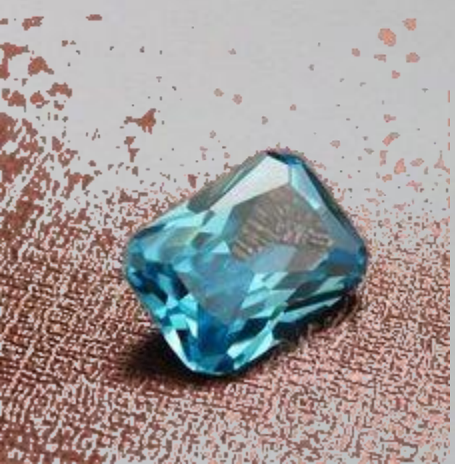
Естественная огранка

Две простые формы имеют одинаковое название. Как их различить?



Ювелирная огранка





Огранка кристалла аквамарина представлена пинакоидом, гексагональной призмой и двумя гексагональными бипирамидами

Каждой индивидуальной грани – свой собственный индекс!

Отдайте нашу посылку!

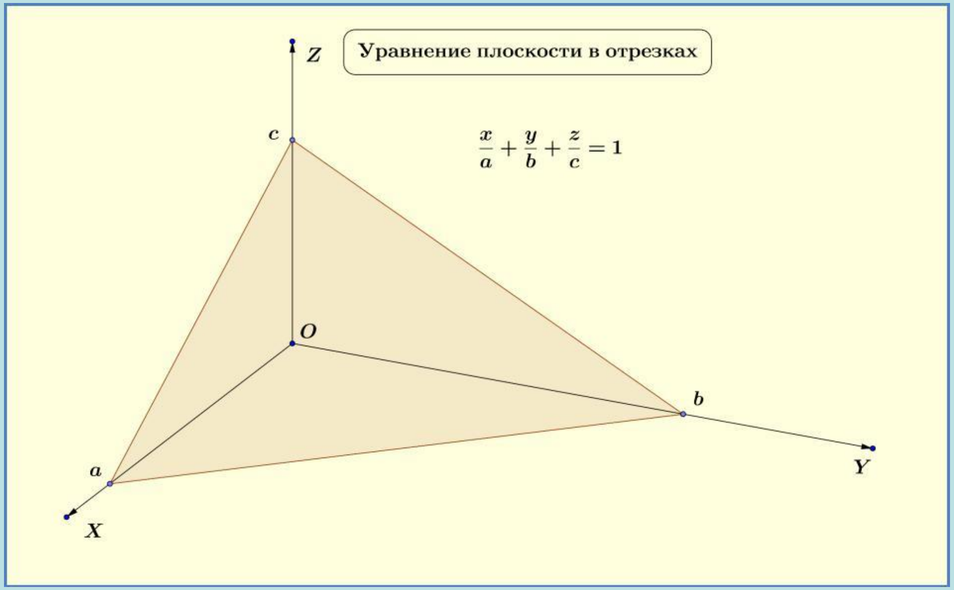
***h*, *k* , *i* и *l* – вот мои документы!**

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

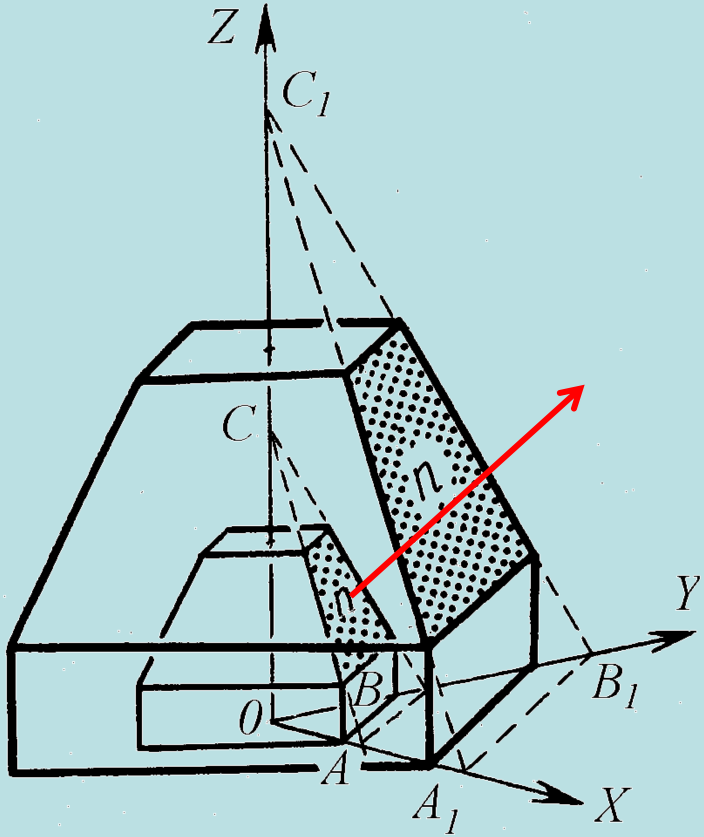
$$Ax + By + Cz = D,$$

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

Существует так же уравнение плоскости в отрезках:



а, в, с – отрезки, отсекаемые плоскостью на соответствующих осях, называемые ***параметрами плоскости (грани или атомной плоскости)***.



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 (авс) или обратные (АВС) есть могут быть однозначными точными характеристиками и

называются *символом плоскости*,

которые в математике могут быть абсолютно любыми

А для кристалла какие?

Р.Ж.Гаюи
1743-1822

Закон рациональности отношений параметров граней кристалла:

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

Открытие этого закона позволило другому кристаллографу, Х.С. Вейсу открыть еще один основных законов кристаллографии — **закон зон (поясов),** устанавливающий связь между положением граней и рёбер кристаллов и ввести понятие индексов как числовой характеристики любой грани или направления кристалла:

Христиан Самуэль Вейс
1780-1856

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

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

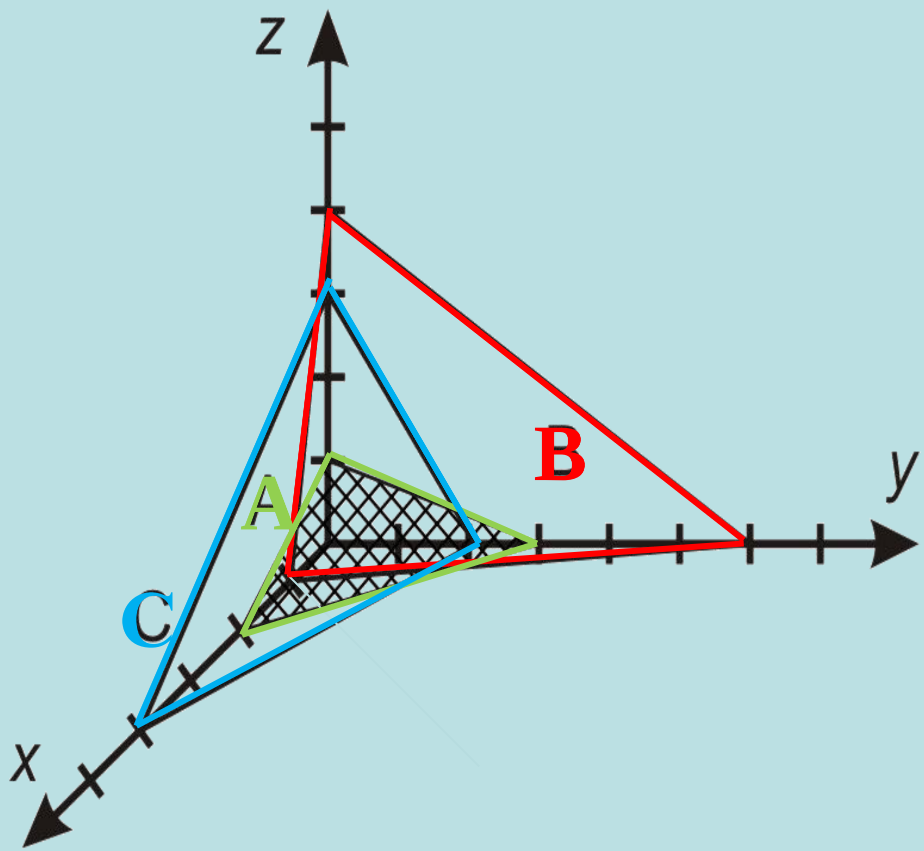
Основной принцип *индицирования граней кристалла* заключается в том, параметры всех граней измеряются относительно параметров одной специально выбранной грани. Параметры такой грани становятся масштабом, в котором измеряются параметры всех остальных граней.

Например, пусть в кристалле присутствуют грани **A**, **B** и **C**, отсекающие на координатных осях следующие отрезки:

a_A=2 см b_A=3 см c_A=1 см

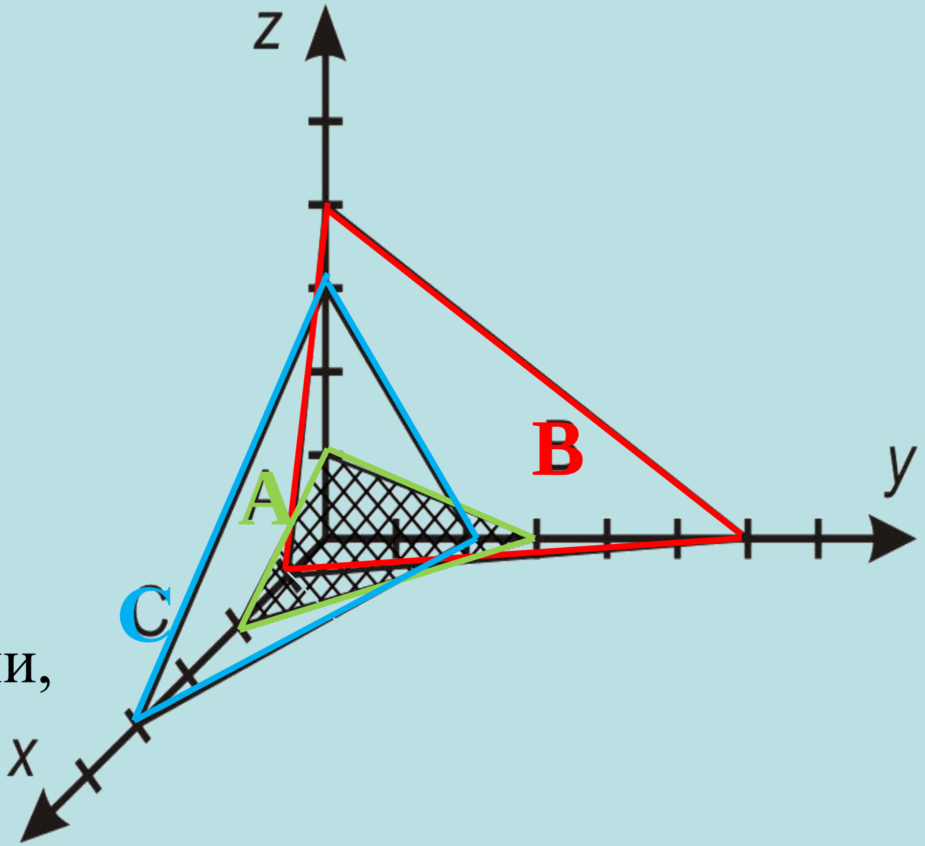
a_B=1 см b_B=6 см c_B=4 см

a_C=4 см b_C=2 см c_C=3 см



Как это работает?

a_A=2 см b_A=3 см c_A=1 см
a_B=1 см b_B=6 см c_B=4 см
a_C=4 см b_C=2 см c_C=3 см



Вычисление индекса каждой грани, принимая грань А за единичную:

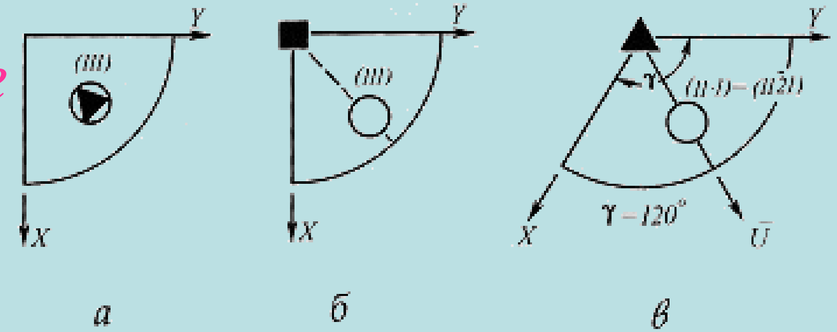
$$(p_A q_A r_A) = p_A : q_A : r_A = \frac{a_A}{a_A} : \frac{b_A}{b_A} : \frac{c_A}{c_A} = \frac{2}{2} : \frac{3}{3} : \frac{1}{1} = 1 : 1 : 1 = (111)$$

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

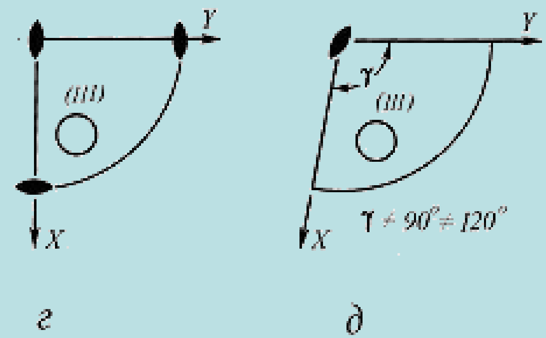
$$(p_C q_C r_C) = p_C : q_C : r_C = \frac{a_C}{a_A} : \frac{b_C}{b_A} : \frac{c_C}{c_A} = \frac{4}{2} : \frac{2}{3} : \frac{3}{1} = 6 : 2 : 9 = (629).$$

Выбор единичной грани – очень ответственное решение! От него зависит «судьба» всех остальных граней кристалла

Правила выбора единичной грани



1. Грань должна пересекать *все координатные оси* в соответствии с категорией

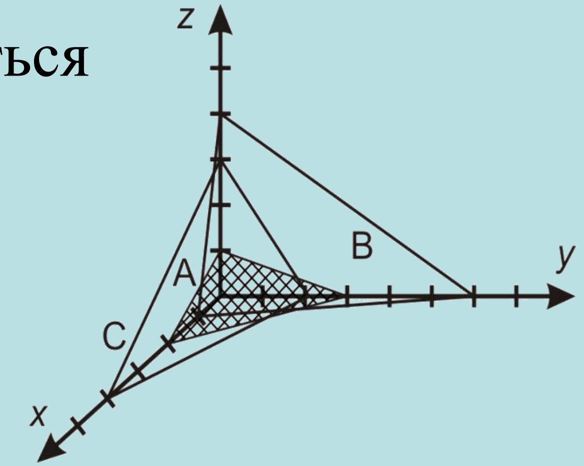


а – кубическая, *б* – тетрагональная,
в – гексагональная, *г* – ромбическая,
д – моноклинная

2. Грань должна быть максимально развита

3. Грань должна находится на пересечении как можно большего количества зон.

В случае неправильного выбора единичной грани, индексы граней могут оказаться неоправданно усложненными



Расчет индексов Миллера для граней в вышеприведенном примере

Если за единичную принять грань А:

$$(h_A k_A l_A) = h_A : k_A : l_A = \frac{a_e}{a_A} : \frac{b_e}{b_A} : \frac{c_e}{c_A} = \frac{2}{2} : \frac{3}{3} : \frac{1}{1} = 1 : 1 : 1 = (111)$$

$$(h_B k_B l_B) = h_B : k_B : l_B = \frac{a_e}{a_B} : \frac{b_e}{b_B} : \frac{c_e}{c_B} = \frac{2}{1} : \frac{3}{6} : \frac{1}{4} = 8 : 2 : 1 = (821)$$

$$(h_C k_C l_C) = h_C : k_C : lr_C = \frac{a_e}{a_C} : \frac{b_e}{b_C} : \frac{c_e}{c_C} = \frac{2}{4} : \frac{3}{2} : \frac{1}{3} = 3 : 9 : 2 = (392).$$

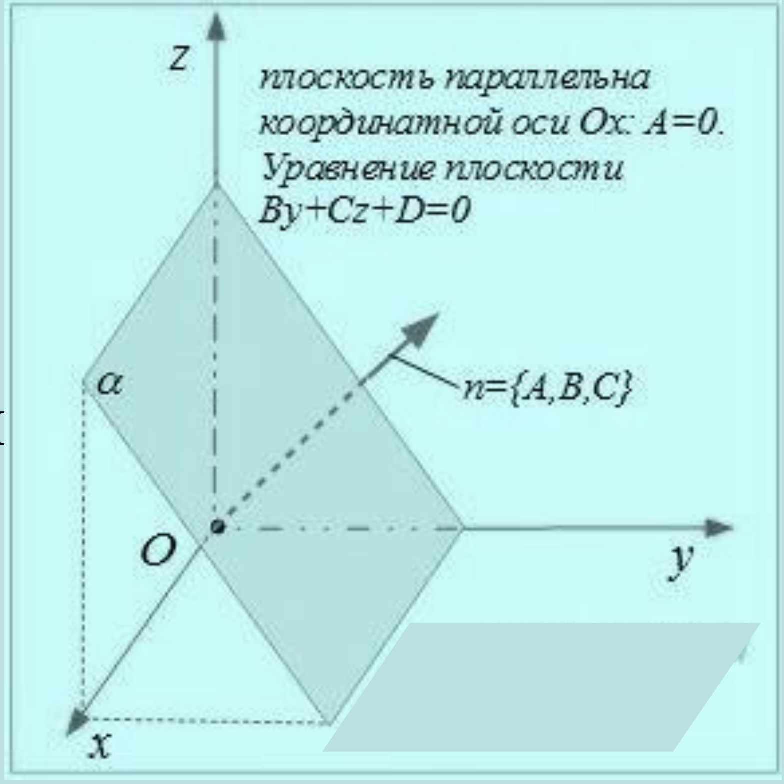
Если за единичную принять грань В:

$$(h_A k_A l_A) = h_A : k_A : l_A = \frac{a_e}{a_A} : \frac{b_e}{b_A} : \frac{c_e}{c_A} = \frac{1}{2} : \frac{6}{3} : \frac{4}{1} = 1 : 4 : 8 = (148)$$

$$(h_B k_B l_B) = h_B : k_B : l_B = \frac{a_e}{a_B} : \frac{b_e}{b_B} : \frac{c_e}{c_B} = \frac{1}{1} : \frac{6}{6} : \frac{4}{4} = 1 : 1 : 1 = (111)$$

$$(h_C k_C l_C) = h_C : k_C : lr_C = \frac{a_e}{a_C} : \frac{b_e}{b_C} : \frac{c_e}{c_C} = \frac{1}{4} : \frac{6}{2} : \frac{4}{3} = 3 : 36 : 16 = (3\,36\,16)$$

Увеличение параметра (индекса) сопровождается уменьшением угла между гранью и данной координатной осью. Если грань параллельна оси, соответствующий индекс - равен бесконечности ∞, а параметр равен 0 что неудобно при расчетах.



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

Вильям Холлоуз Миллер (1801-1880)

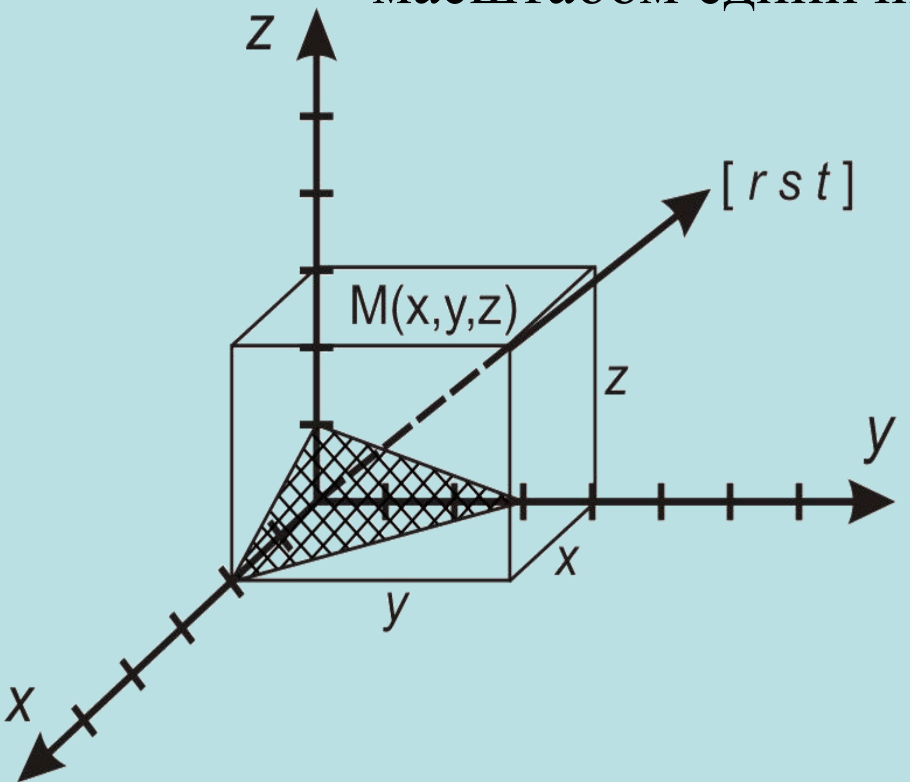
$$(hkl) = h{:}k{:}l = \frac{a_e}{a} : \frac{b_e}{b} : \frac{c_e}{c}$$

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

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

По аналогии с индексами грани вводится индекс направления:

Для индексов направлений используются символы Вейса, которые представляют собой отношения координат любой точки, принадлежащей этому направлению, нормированные масштабом единичной грани



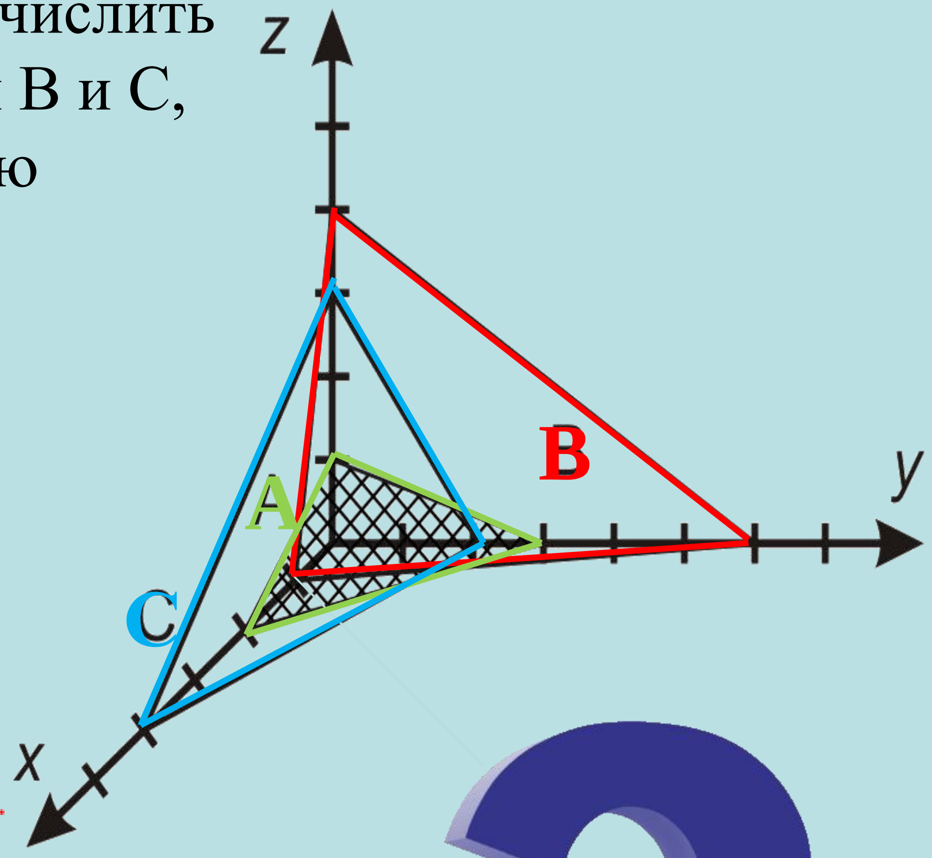
$$[rst] = r:s:t = \frac{x}{a_e} : \frac{y}{b_e} : \frac{z}{c_e} =$$

$$= \frac{2}{2} : \frac{4}{3} : \frac{3}{1} = 3:4:9 = [349]$$

Попробуйте самостоятельно вычислить символы Миллера (hkl) граней В и С, принимая грань А за единичную

a_A=2 см b_A=3 см c_A=1 см
a_B=1 см b_B=6 см c_B=4 см
a_C=4 см b_C=2 см c_C=3 см

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



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:

$$hx + ky + lz = 1$$

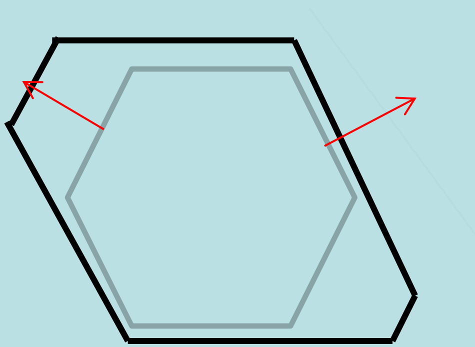
Кристаллографическое прочтение уравнения плоскости:

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

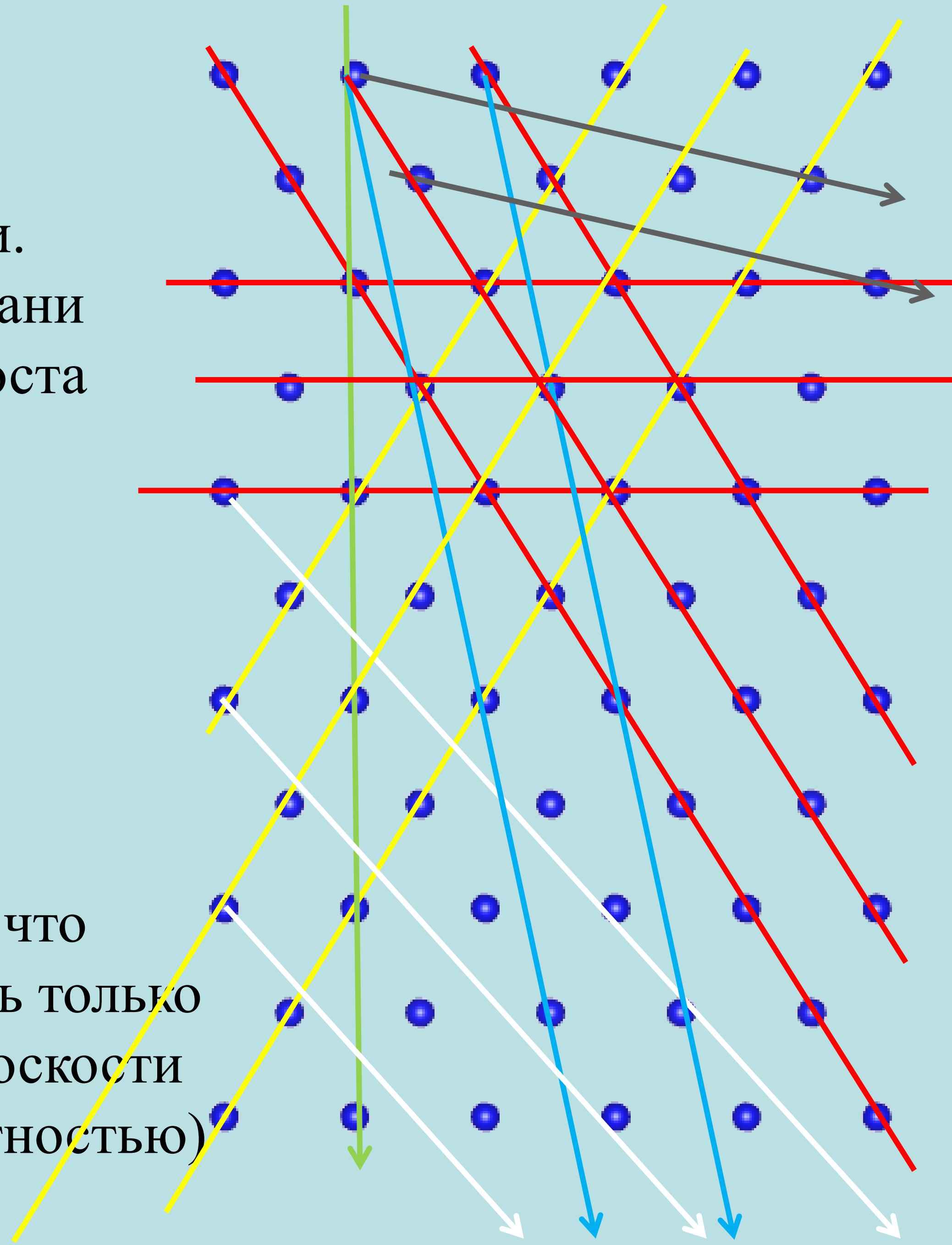
- Математически это означает, что символ грани – это координаты вектора нормали (или обратное отношение параметров), измеренные в ***кристаллографическом масштабе.***

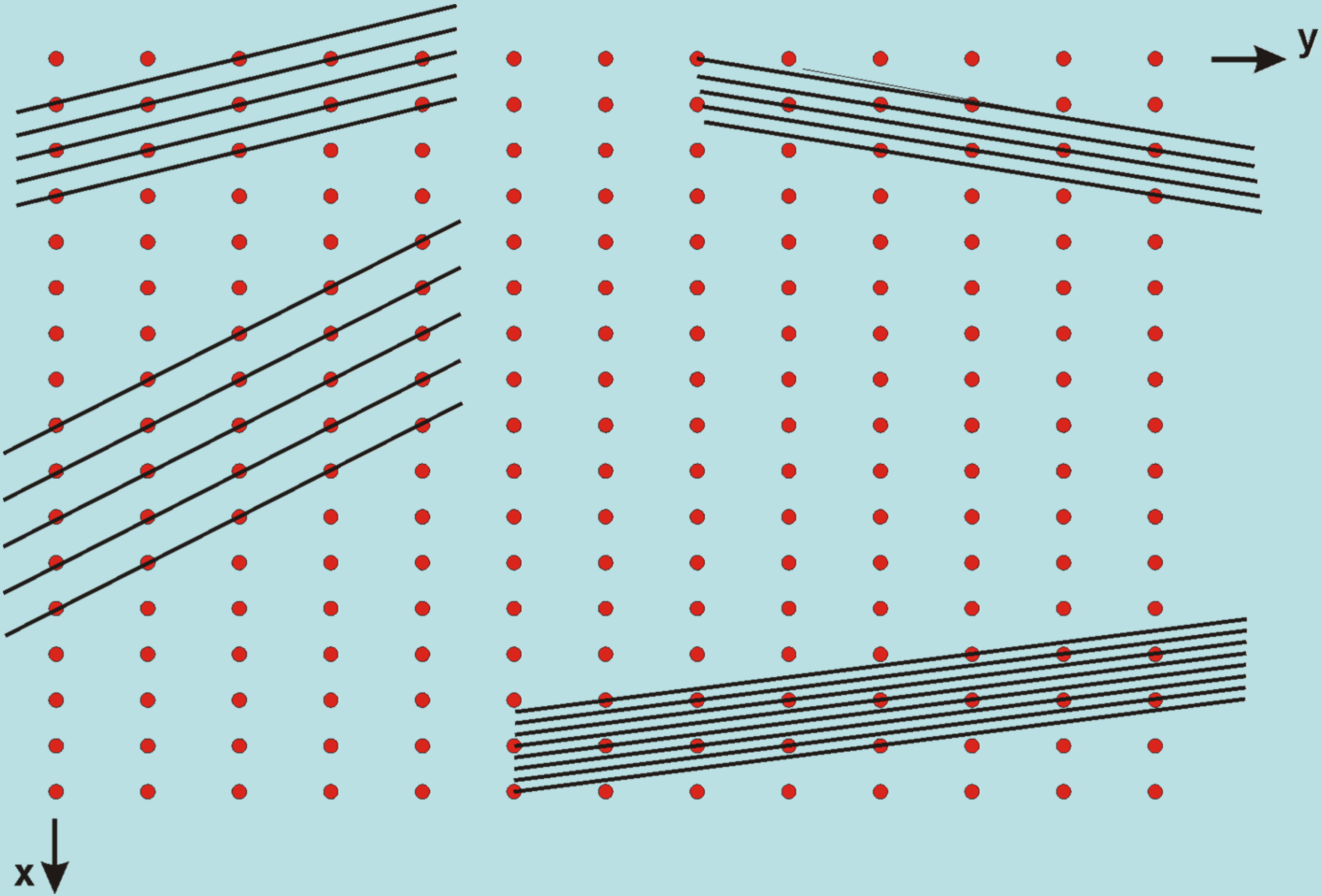
- Символы граней кубической сингонии в силу одномасштабности координатных осей – просто координаты вектора нормали или обратное отношение параметров

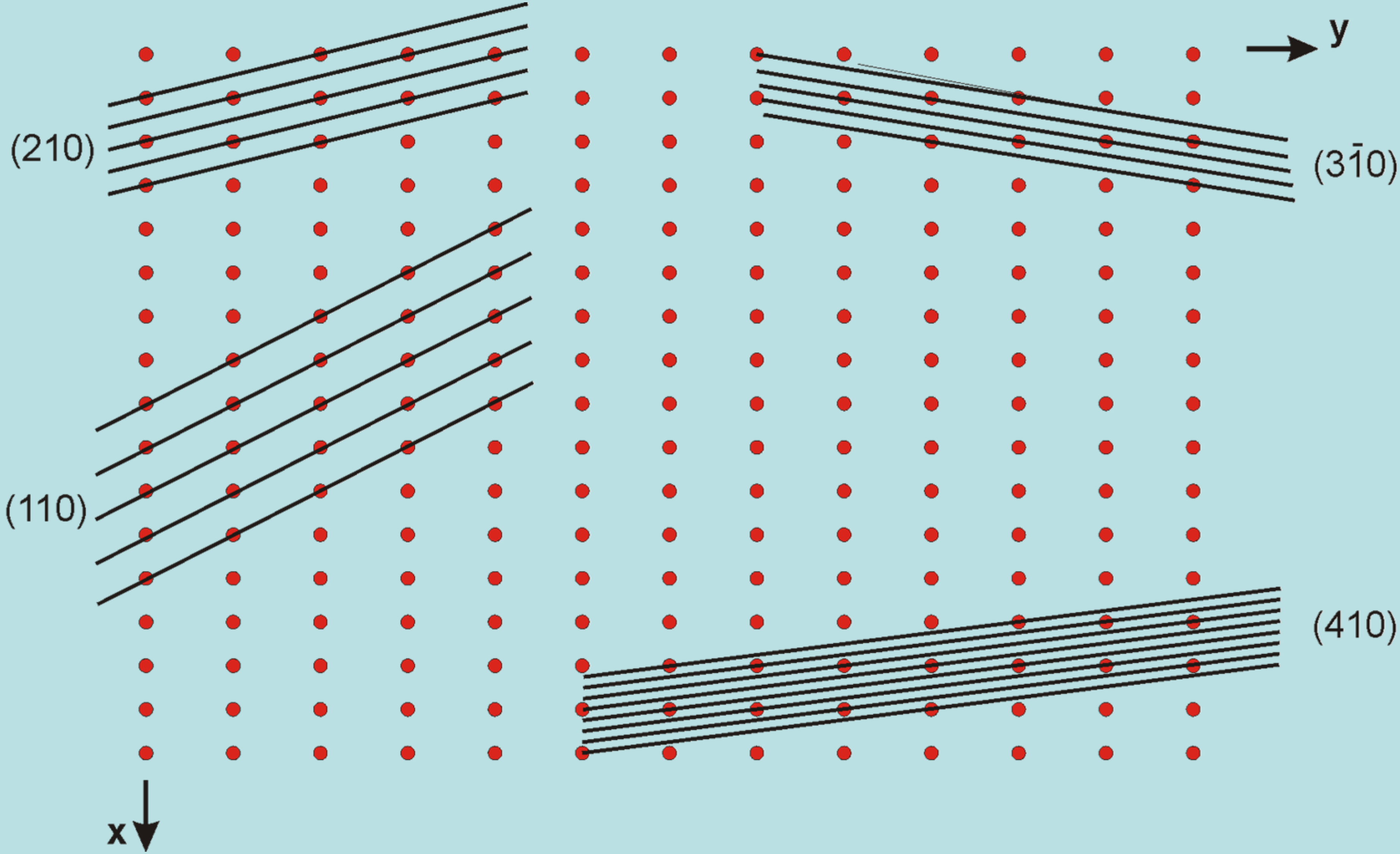
Кристалл ограняется самыми медленно растущими гранями. Наиболее быстрорастущие грани выклиниваются в процессе роста



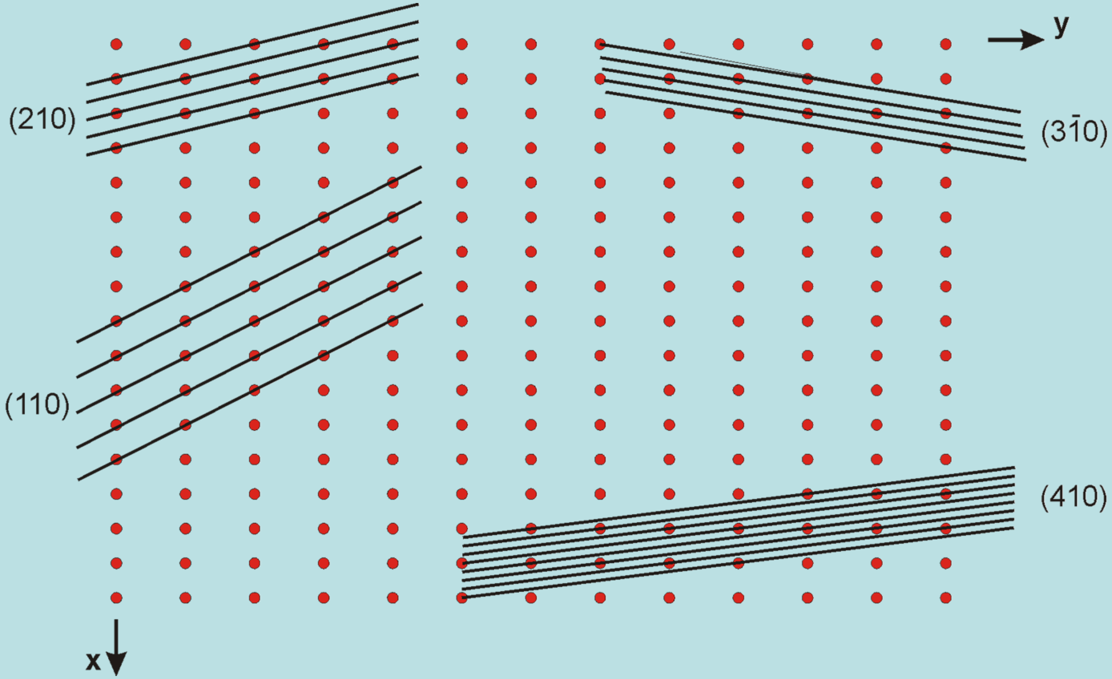
На микроуровне это означает, что гранями кристалла могут стать только самые плотноупакованные плоскости (с высокой ретикулярной плотностью)




y
x



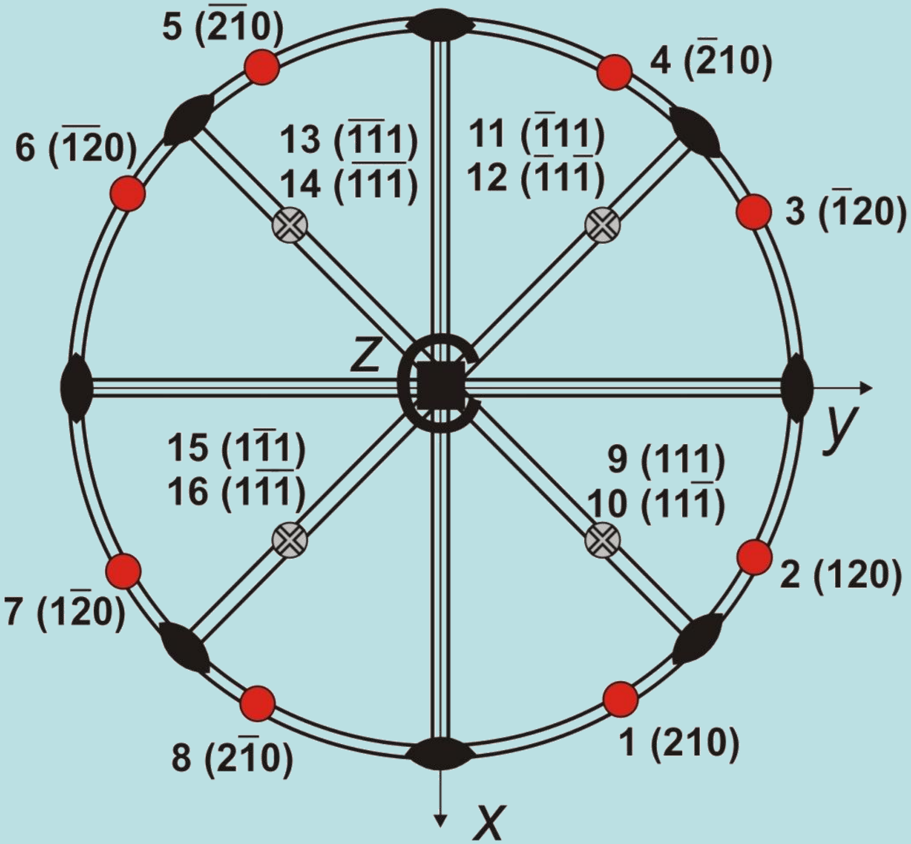
Закон рациональных отношений носит фундаментальный характер



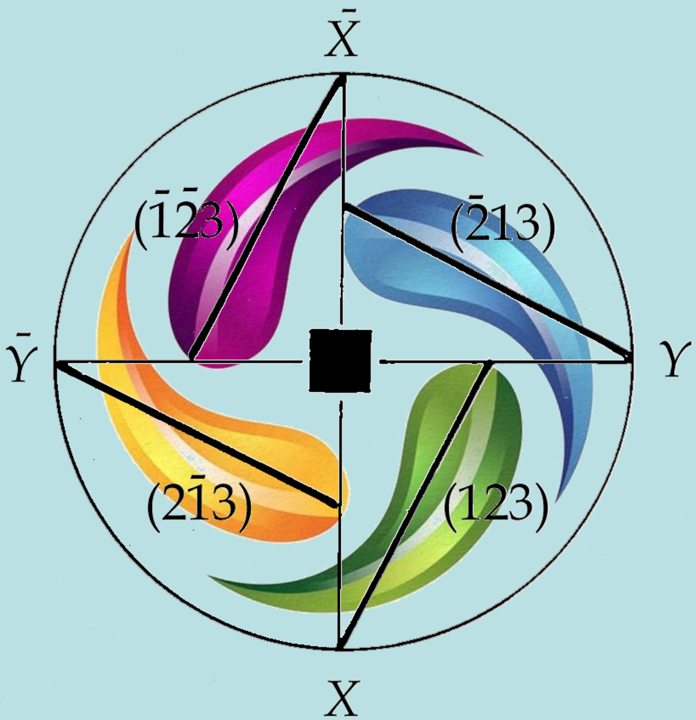
Закон рациональных отношений носит фундаментальный характер:

1. Символы граней кристалла – **небольшие числа**
2. Символы граней кристалла – **целые числа**
3. Символы граней кристалла – взаимно простые числа

Чрезвычайно удобны индексы в плане размножения граней элементами симметрии



Символы граней, связанных элементами симметрии содержат одни и те же цифры в качестве индексов, изменяются только их порядок следования и знаки.



Индексы эквивалентных плоскостей однотипны

Изменение индексов граней подчиняются *матрице преобразования координатных осей.*

Что это такое?

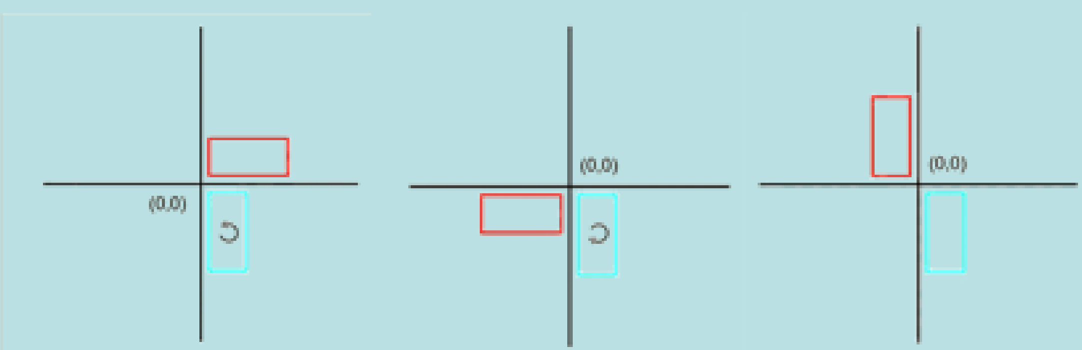
Изменение символов плоскости {123} тетрагонального кристалла при поворотах вокруг оси 4-ого порядка

Методы представления операций симметрии

1. Модельный способ

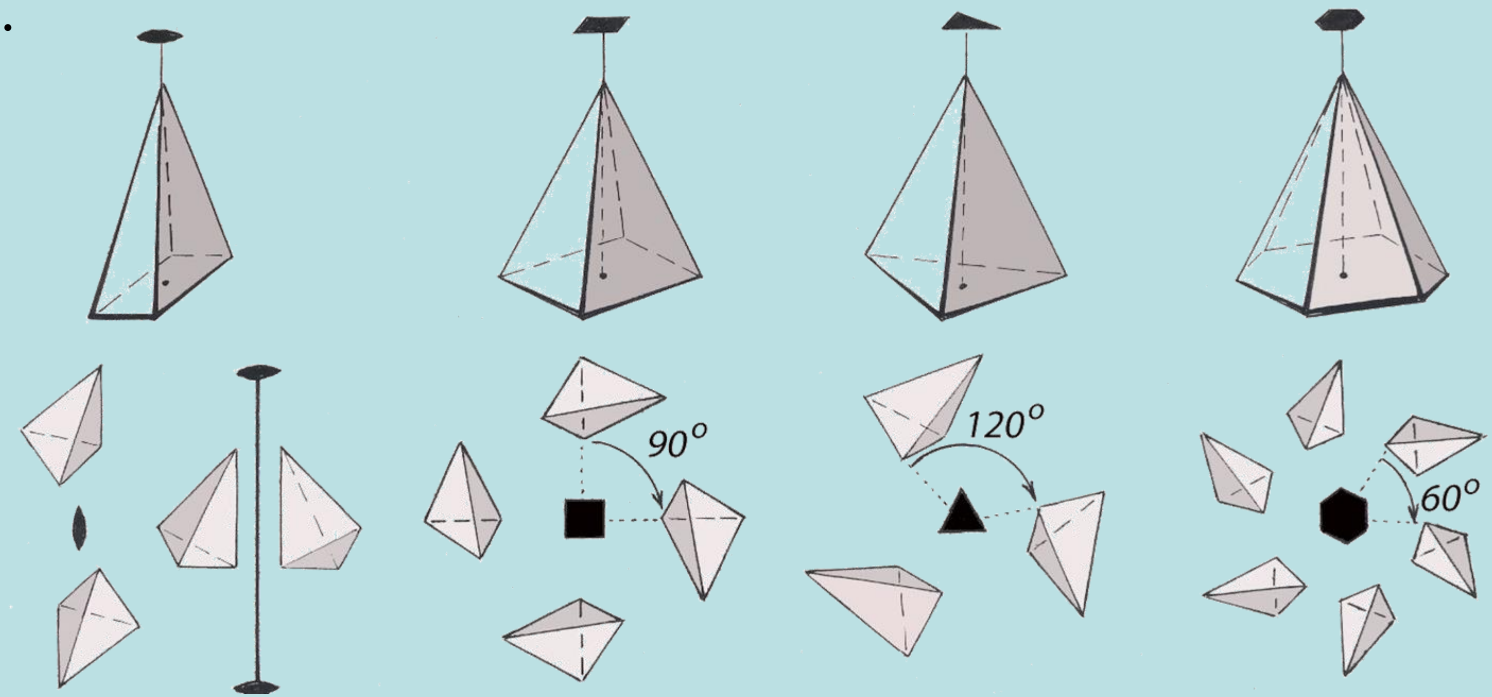
2. Координатный способ

3. Матричный способ

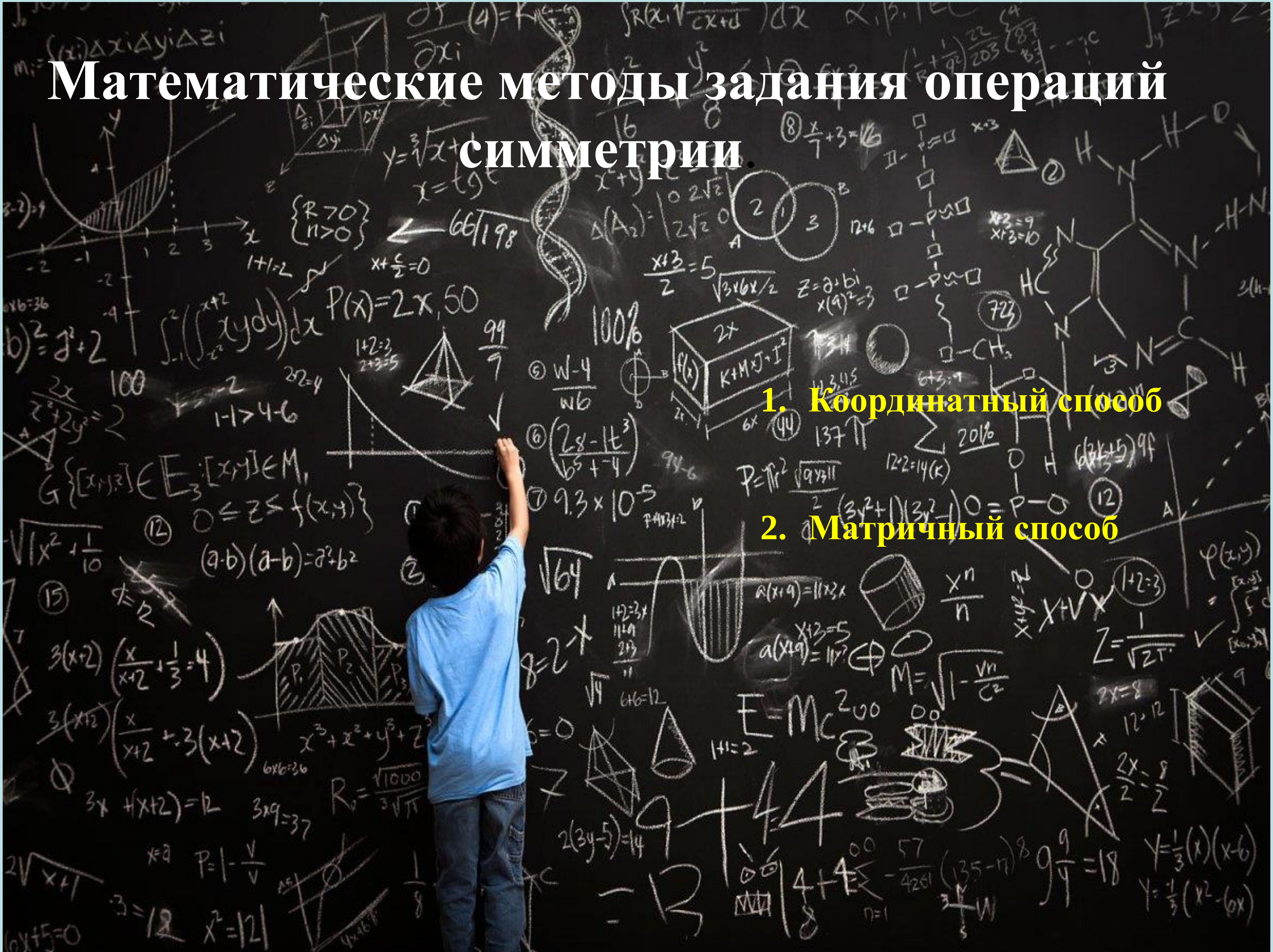


Модельный способ.

Модельный способ очень прост и нагляден. Он позволяет «увидеть» элементы симметрии в конкретных объектах. Однако он решает лишь конкретную задачу – определить наличие и положение элементов симметрии, но не дает возможности выявить законы взаимодействия симметрических операций в обобщенном виде.



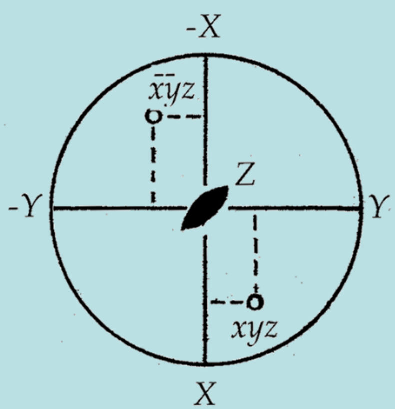
Математические методы задания операций симметрии.



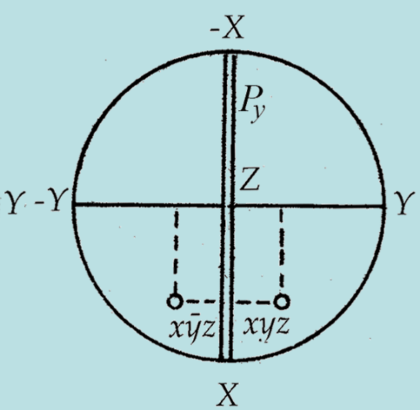
1. Координатный способ
2. Матричный способ

Координатный метод представления симметрических операций

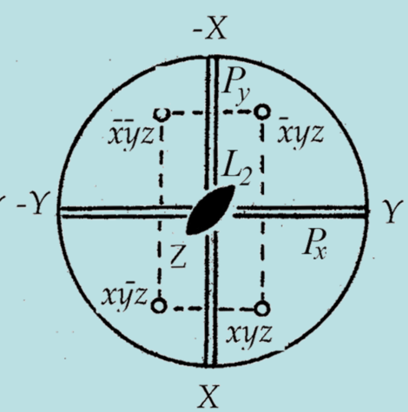
Любую симметрическую операцию можно описать, задав координаты начального и конечного положения точки



Изменение координат точки под действием поворота вокруг оси L_{2z}



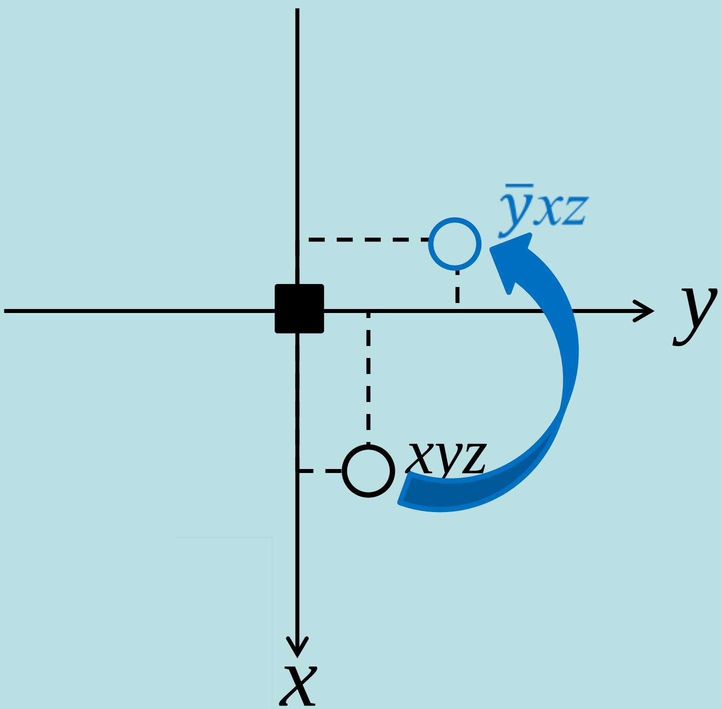
Изменение координат точки под действием отражения в плоскости симметрии P_y,

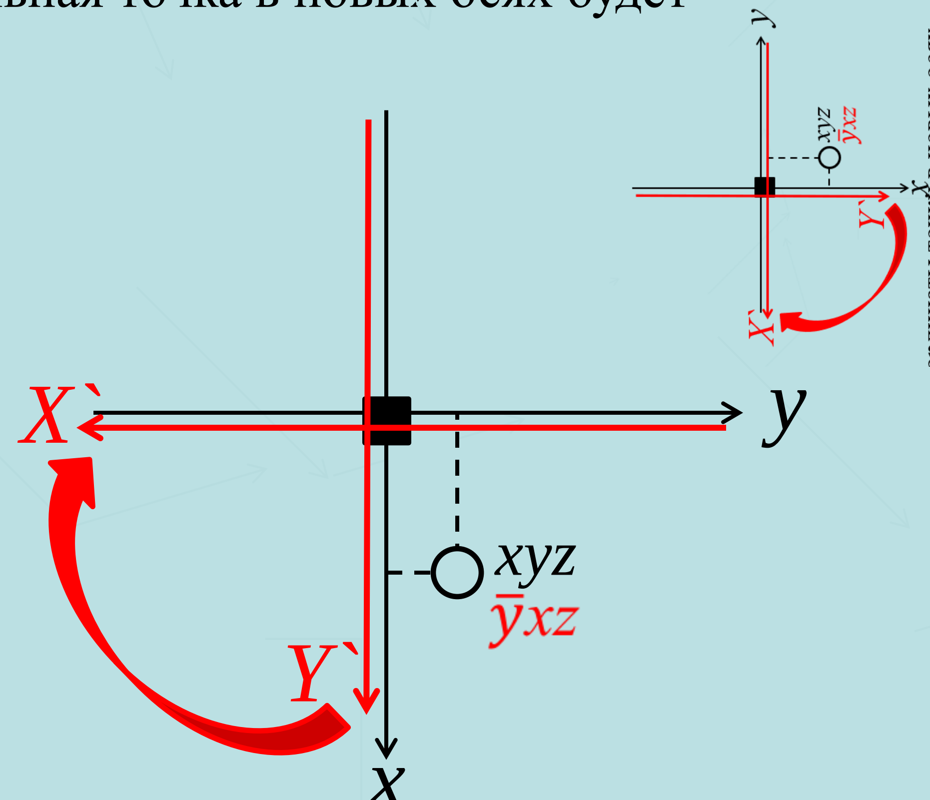


Изменение координат точки под действием отражений сначала в плоскости P_x, а затем в P_y

Матричный метод представления симметрических операций

Поворот точки на 90° против часовой стрелки вокруг оси 4_z можно представить как поворот координатной системы на тот же угол в противоположную сторону. Тогда изначальная точка в новых осях будет выглядеть как повернутая в старых.





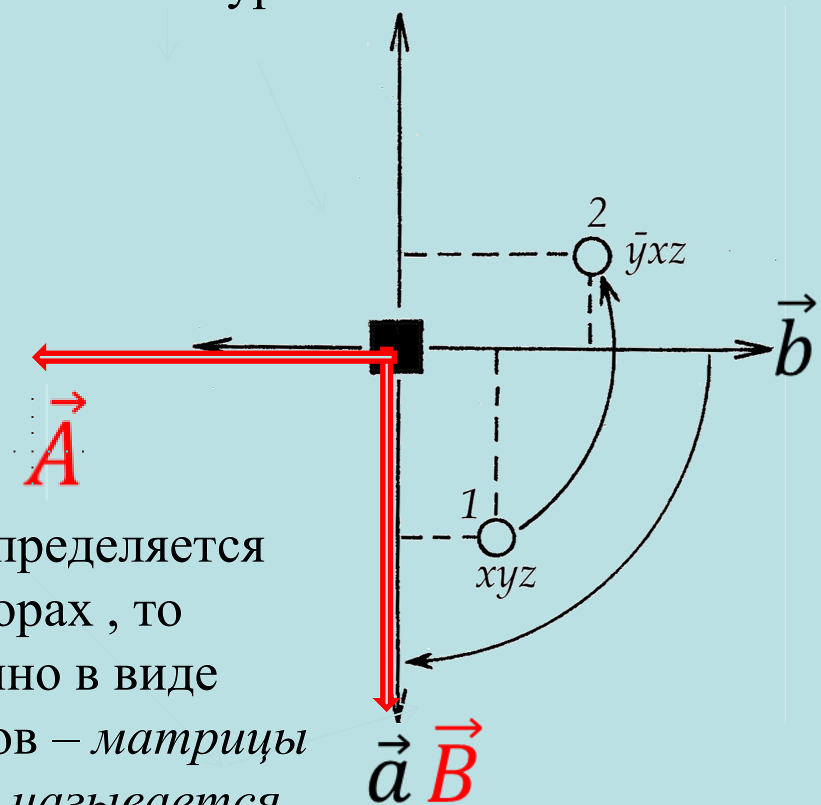
координаты точки в новых осях – это координаты повернутой точки в старых

Данное преобразование координатного репера можно представить в виде системы линейных уравнений, выразив единичные векторы новой координатной системы, как векторные суммы параметров исходной координатной системы. Получается система линейных уравнений:

$$\vec{A} = 0\cdot\vec{a} - 1\cdot\vec{b} + 0\cdot\vec{c},$$

$$\vec{B} = 1\cdot\vec{a} + 0\cdot\vec{b} + 0\cdot\vec{c},$$

$$\vec{C} = 0\cdot\vec{a} + 0\cdot\vec{b} + 1\cdot\vec{c},$$

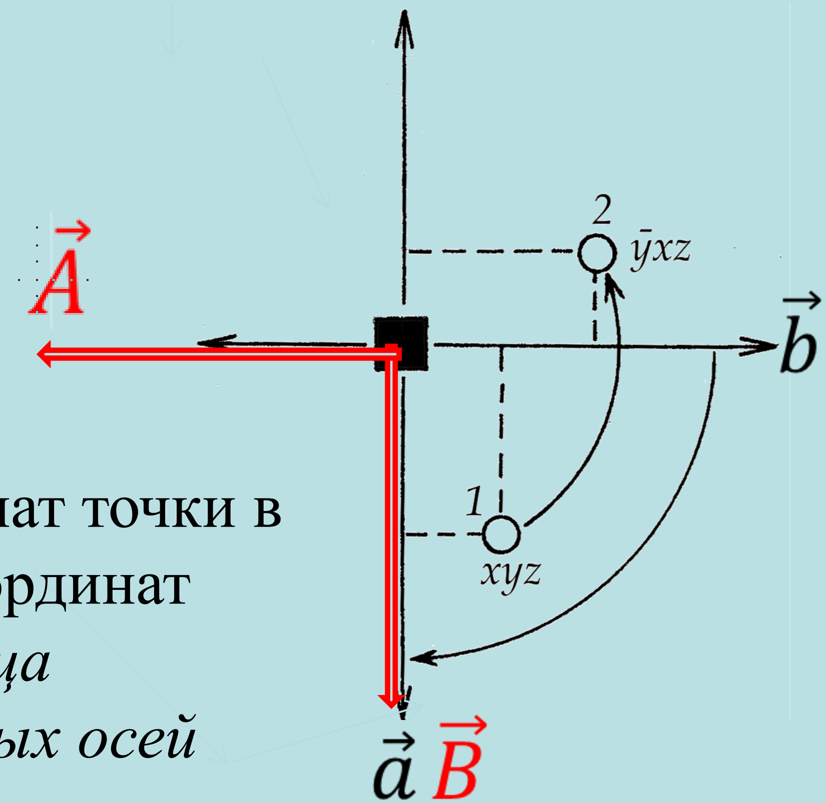


Поскольку характер такого преобразования определяется только коэффициентами при единичных векторах , то систему уравнений можно записать сокращенно в виде таблицы, составленной из этих коэффициентов – *матрицы преобразования координатных осей, которая называется прямой матрицей*:

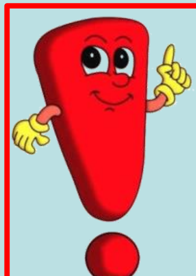
$$(M)_{ст\to нов} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (0\,\bar{1}\,0/100/001).$$

Что бы получить координаты точки после поворота на 90° против часовой стрелки (4^1) необходимо матрицу *преобразования координатных осей (прямую матрицу)* умножить на одностолбцовую матрицу координат.

$$\begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{vmatrix}$$

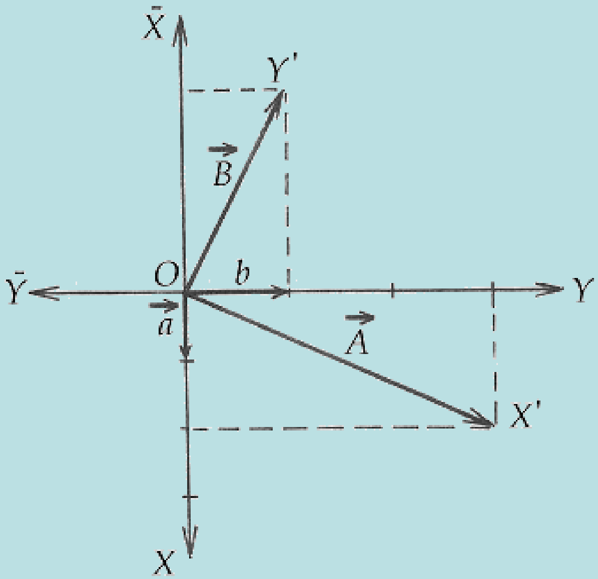


Для преобразования координат точки в **прямоугольной** системе координат используется *прямая матрица преобразования координатных осей*



Важно помнить! Симметрическая операция задается поворотом координатных осей в противоположную сторону

В общем случае преобразования ортогональных координатных систем, обычно используемых в кристаллофизике, можно выразить системой линейных уравнений, предварительно обозначив единичные отрезки вдоль новых координатных осей X′, Y′, Z′ и - вдоль старых X, Y, Z:

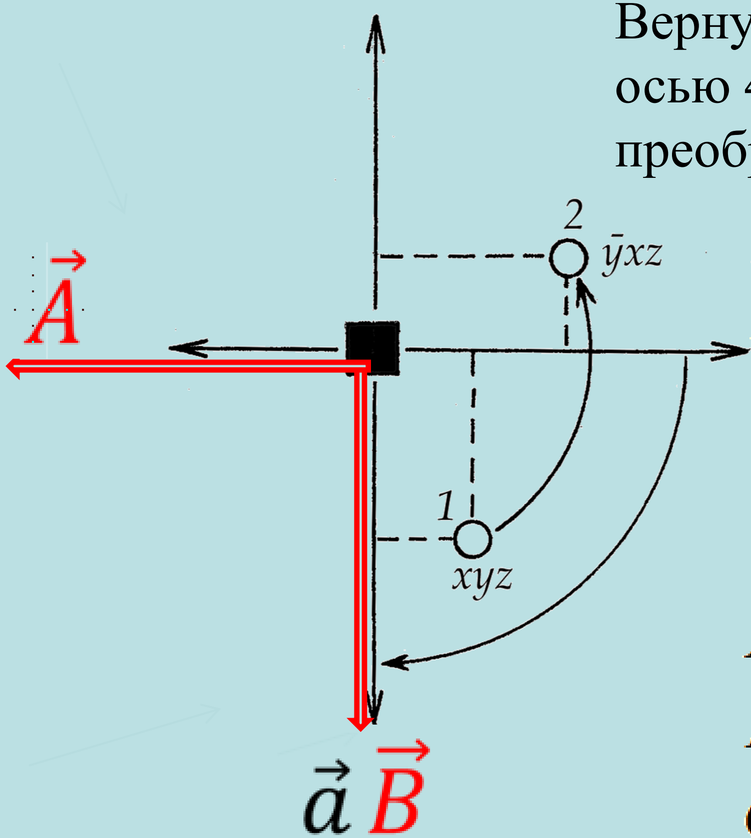


$$\vec{A} = a_{11}\cdot\vec{a} + a_{12}\cdot\vec{b} + a_{13}\cdot\vec{c};$$
$$\vec{B} = a_{21}\cdot\vec{a} + a_{22}\cdot\vec{b} + a_{23}\cdot\vec{c};$$
$$\vec{C} = a_{31}\cdot\vec{a} + a_{32}\cdot\vec{b} + a_{33}\cdot\vec{c};$$

Члены матриц преобразования ортогональной координатной системы есть не что иное, как косинусы углов между соответствующими осями новой (преобразованной) и старой (исходной) координатных систем. Поэтому такую матрицу называют *матрицей направляющих косинусов*

$$\vec{A} = \vec{a}\cdot\cos X'X + \vec{b}\cdot\cos X'Y + \vec{c}\cdot\cos X'Z,$$
$$\vec{B} = \vec{a}\cdot\cos Y'X + \vec{b}\cdot\cos Y'Y + \vec{c}\cdot\cos Y'Z,$$
$$\vec{C} = \vec{a}\cdot\cos Z'X + \vec{b}\cdot\cos Z'Y + \vec{c}\cdot\cos Z'Z.$$

Вернувшись к рассмотренному примеру с поворотной осью 4-го порядка, вычислим единичные векторы преобразованной координатной системы:



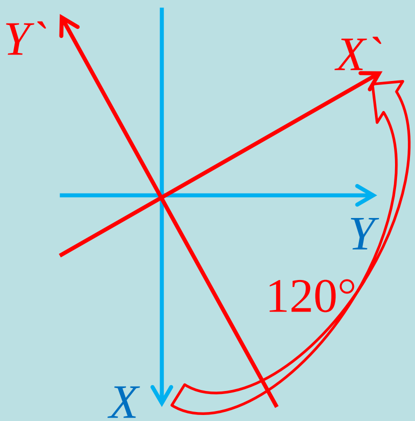
$$\vec{A} = \vec{a}\cdot\cos X'X + \vec{b}\cdot\cos X'Y + \vec{c}\cdot\cos X'Z,$$
$$\vec{B} = \vec{a}\cdot\cos Y'X + \vec{b}\cdot\cos Y'Y + \vec{c}\cdot\cos Y'Z,$$
$$\vec{C} = \vec{a}\cdot\cos Z'X + \vec{b}\cdot\cos Z'Y + \vec{c}\cdot\cos Z'Z.$$

$$\vec{A} = \vec{a}\cdot\cos 90^\circ + \vec{b}\cdot\cos 180^\circ + \vec{c}\cdot\cos 90^\circ$$
$$\vec{B} = \vec{a}\cdot\cos 0^\circ + \vec{b}\cdot\cos 90^\circ + \vec{c}\cdot\cos 90^\circ$$
$$\vec{C} = \vec{a}\cdot\cos 90^\circ + \vec{b}\cdot\cos 90^\circ + \vec{c}\cdot\cos 0^\circ$$

т. е. тот же вид, что и матрица, составленная на основании векторных сумм

$$M = \begin{pmatrix} \cos 90^\circ & \cos 180^\circ & \cos 90^\circ \\ \cos 0^\circ & \cos 90^\circ & \cos 90^\circ \\ \cos 90^\circ & \cos 90^\circ & \cos 0^\circ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

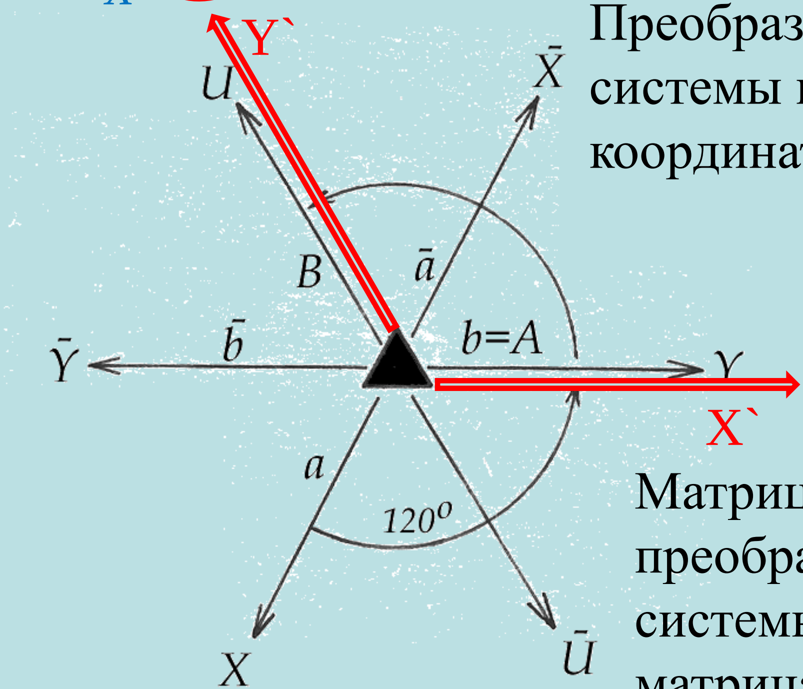
Искусственное введение ортогонального координатного репера в гексагональную сингонию (в присутствии осей 3-го и 6-го порядка) значительно усложняет матрицу направляющих косинусов, тогда как матрица преобразования кристаллографической координатной системы, составленная на основе векторных сумм, будет 0-1-матрицей.



Поворот на 120° против часовой стрелки в прямоугольной системе

$$\vec{A} = \vec{a}\cdot\cos X'X + \vec{b}\cdot\cos X'Y + \vec{c}\cdot\cos X'Z,$$
$$\vec{B} = \vec{a}\cdot\cos Y'X + \vec{b}\cdot\cos Y'Y + \vec{c}\cdot\cos Y'Z,$$
$$\vec{C} = \vec{a}\cdot\cos Z'X + \vec{b}\cdot\cos Z'Y + \vec{c}\cdot\cos Z'Z.$$

$$\begin{vmatrix} - & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ - & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$



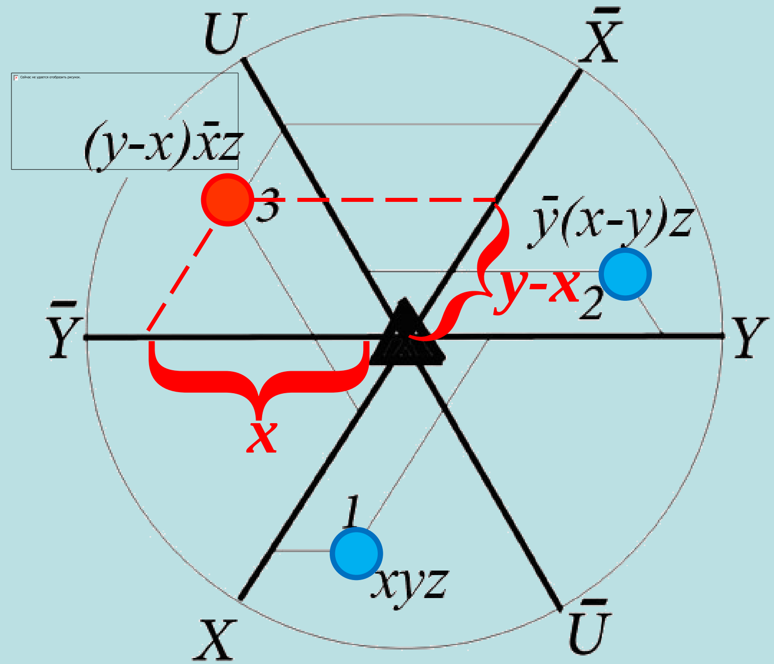
Преобразование кристаллографической координатной системы в векторной форме в соответствующей системе координат, выразится системой уравнений

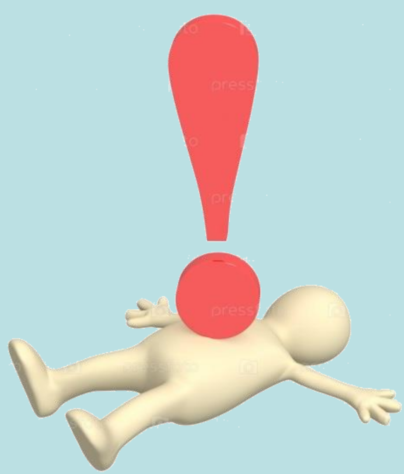
Матрицей такого симметрического преобразования координатной системы окажется «ноль-один» матрица

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

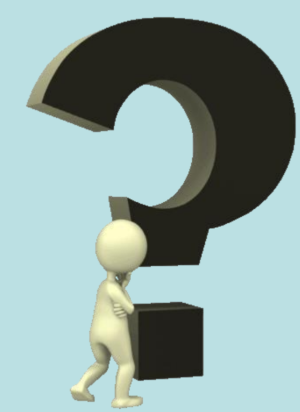
$$M=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ \bar{1} & \bar{1} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

Преобразование координат точки в <u>гексагональной</u> системе координат



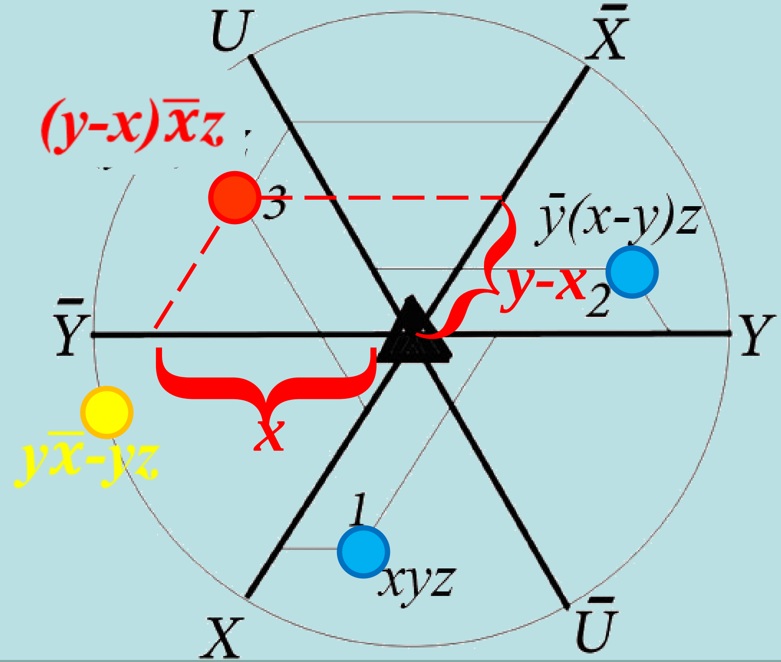


Как получить координаты преобразованной точки в <u>гексагональной</u> системе координат?

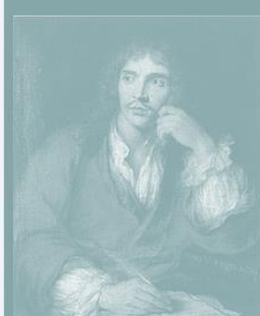


$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Если использовать для преобразования координат точки прямую матрицу преобразования координатных осей, получится ***чушь и галиматья:*** $y\bar{x}$-yz

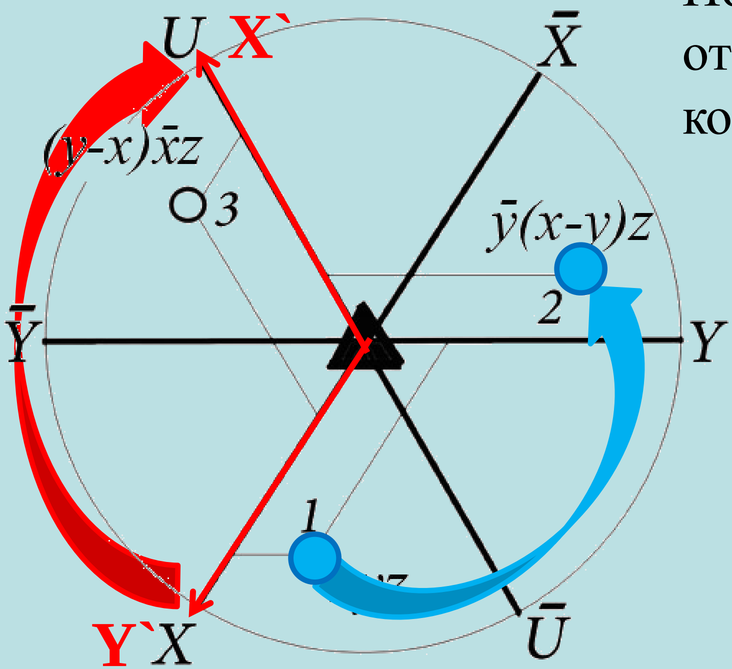


Что делать?



Когда говорит человек в мантии и шапочке, всякая галиматья становится ученостью, а всякая глупость — разумной речью.

(Мольер)



Поворот объекта против часовой стрелки отражает прямая матрица поворота координатной системы по часовой стрелке:

$$M = \begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Изменение координат точки при повороте на 120º против часовой стрелки отражает обратнотранспонированная матрица

$$M' = \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

т. е. точка 2 получит координаты: $\bar{y}(x\text{-}y)z$

Симметрические преобразования

прямая матрица преобразования координатных осей

- ***координатные оси***
- ***индексы граней***

КОВАРИАНТНЫЙ ЗАКОН

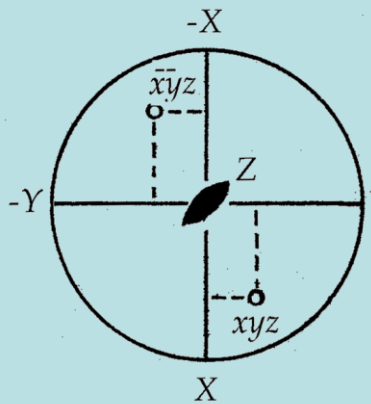
обратнотранспонированная матрица матрица преобразования координатных осей

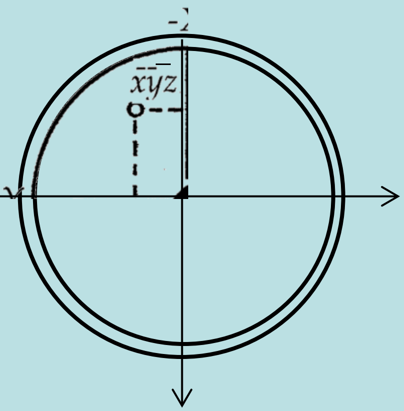
- ***координаты точек***
- ***индексы направлений***

КОНТРВАРИАНТНЫЙ ЗАКОН

Рассмотрим на матричном уровне последовательные действия двух симметрических операций: $L_{2z} \cdot P_z$. В итоге *взаимодействие двух операций симметрии приводит к появлению третьей, результирующей.* На матричном уровне умножение («взаимодействие») двух матриц приведет к новой «0-1»-матрице.

Для этого представим каждую из рассматриваемых операций соответствующей матрицей





L_{2z} $\qquad$ P_z $\qquad$ C

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

Связь между индексом плоскости и индексом лежащего в ней узлового ряда

Х.С.Вейс
1780-1856

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 есть суть **закона Вейса - закона поясов или зон:**

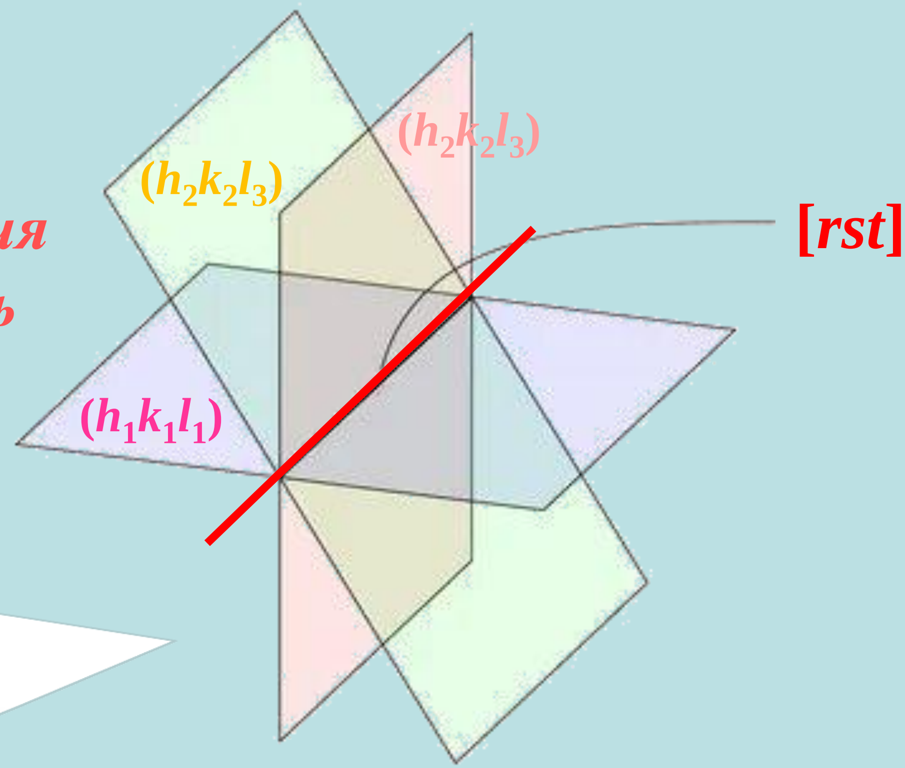
всякая плоскость, параллельная двум пересекающимся ребрам кристалла (принадлежащая двум его зонам), представляет собой возможную грань кристалла, а всякое направление, параллельное линии пересечения двух граней кристалла, - его возможное ребро.

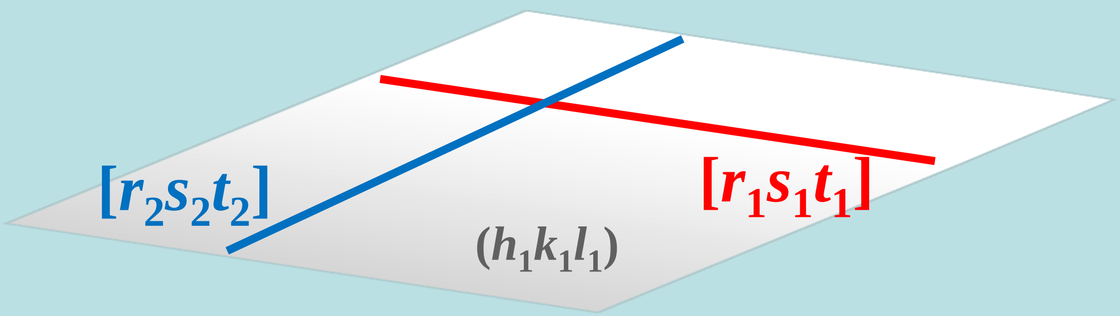
Вывод из уравнения Вейса:

$$\boxed{hr + ks + lt = 1}$$

две непараллельные плоскости определяют направление (ребро) в кристалле

два неколлинеарных направления определяют атомную плоскость





Для кристаллического могогранника это означает, что две грани определяют реальное или возможное ребро кристалла, а два ребра - 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 $(h_2k_2l_2)$

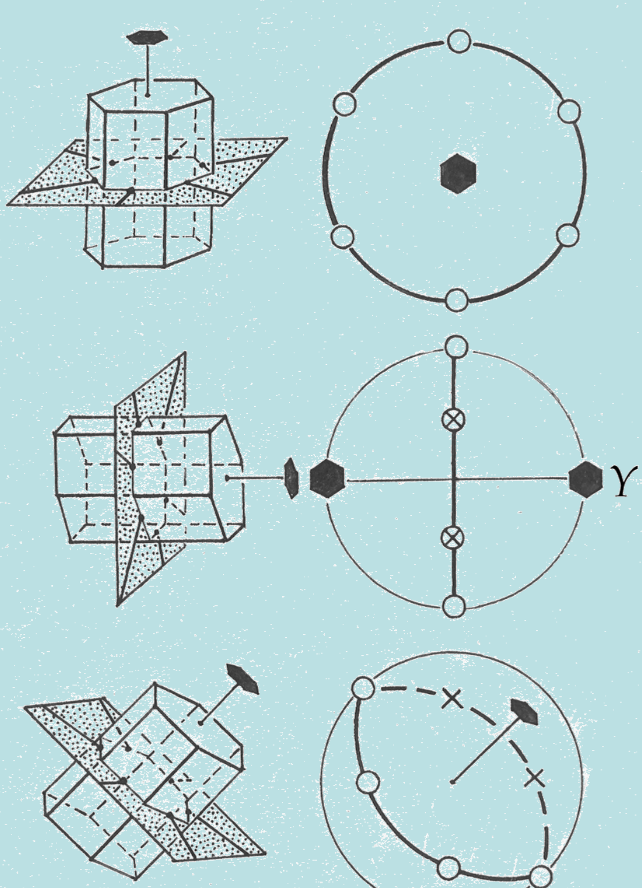
которое является решением системы уравнений:

$$\left.\begin{aligned} h_1r + k_1s + l_1t = 1 \\ h_2r + k_2s + l_2t = 1 \end{aligned}\right\}$$

Такие системы удобно решать с помощью мнемонического правила перекрестного умножения:

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

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

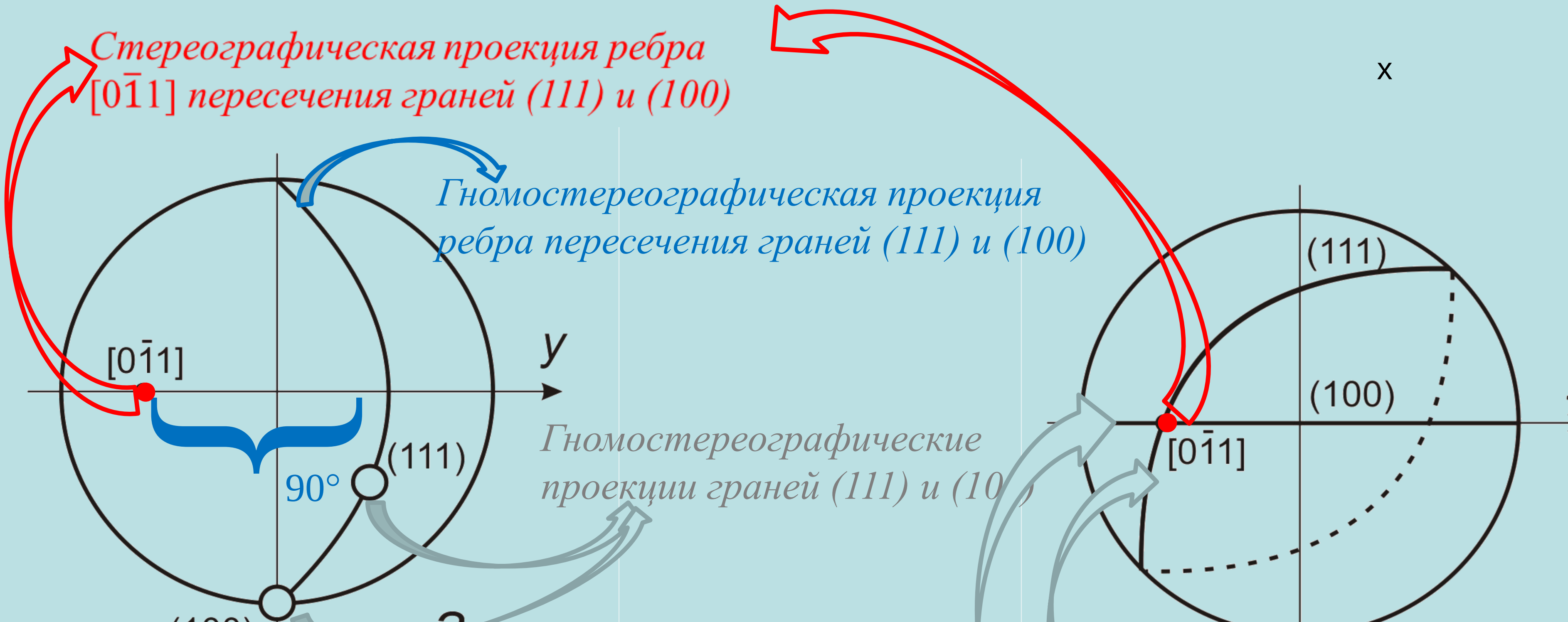


Проекции таутозональных граней, связанных осью 6-го порядка, являющейся осью зоны.

Зона (поясом) кристалла - это совокупность ***таутозональных*** граней, нормали которых лежат в одной плоскости. В кристалле такие грани пересекаются по по параллельным ребрам, а их гномостереографические проекции попадают на один меридиан (окружность или диаметр)

Зная символы пересекающихся граней, можно рассчитать символ ребра, по которому они пересекаются и, наоборот, по символам двух пересекающихся ребер можно определить символ грани, в которой они лежат

Графическое определение символа ребра, являющегося пересечением граней (100) и (111)

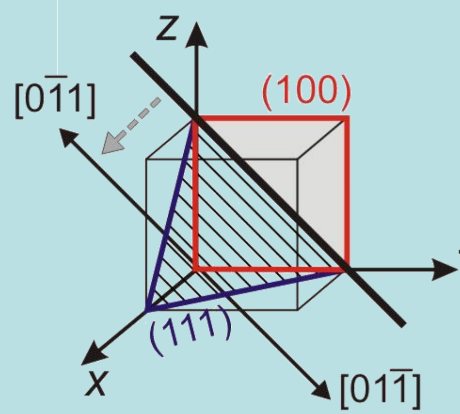


Определение символа ребра

$$\begin{array}{c|cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline \multicolumn{6}{c}{rst \quad 011} \end{array}$$

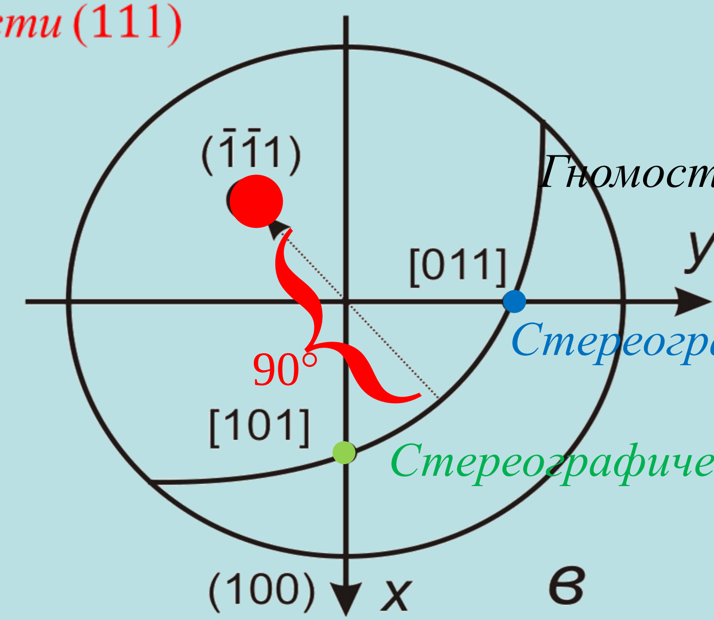
$r = 1 \times 0 - 0 \times 1 = 0$ $\quad s = 1 \times 1 - 0 \times 1 = 1$

$t = 1 \times 0 - 1 \times 1 = \bar{1}$



Графическое определение символа грани, в которой лежат ребра [101] и [011].

Гномостереографическая проекция плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$



Гномостереографическая проекция ребра [011]

Стереографическая проекция ребра [011]

Стереографическая проекция ребра [101]

Определение символа грани

$$\begin{array}{c|cccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ \hline hkl & \bar{1} & \bar{1} & 1 & & \end{array}$$

$h=0\times1-1\times1=$

$k=1\times0-1\times1$

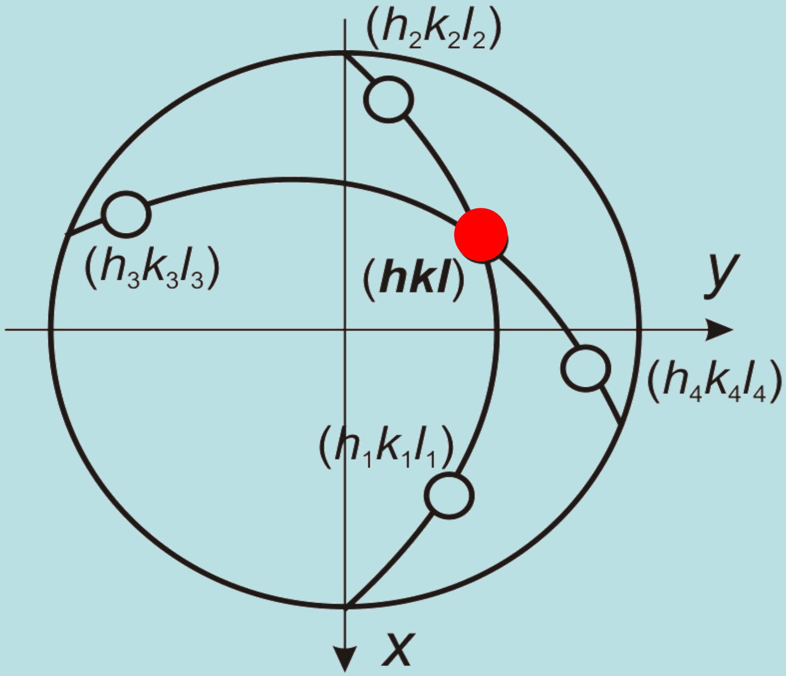
$l=1\times1-0\times0$

Метод развития зон (поясов), или метод Вейса
(графическое получение возможных граней и ребер кристалла).

Некоторые следствия из соотношения $hr + ks + lt = 1$:

- *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,* $h \cdot 1 + k \cdot 0 + l \cdot 0 = 1$, *откуда* $h = 1$.
- *Для всех граней, принадлежащих любой из проходящей через грань (001) зон, кроме самой грани (001), постоянно отношение* $h : k = const$.

Для символов таутозональных граней (hkl), $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ существует следующая зависимость:.

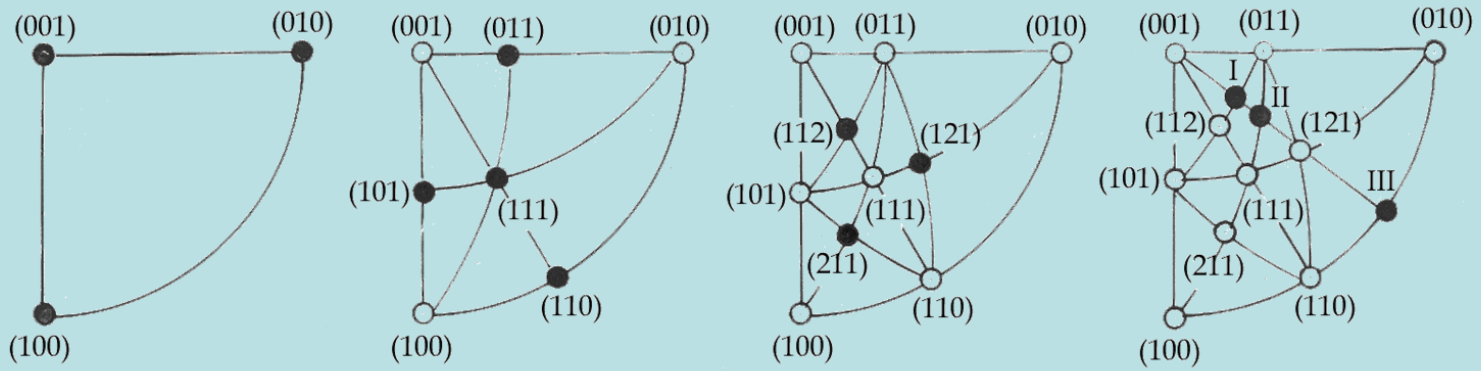


грань, символ которой получен простым почленным сложением индексов двух других граней, принадлежит этой же зоне

$$\left.\begin{array}{l}(h_1 + h_2)r : (k_1 + k_2)s : (l_1 + l_2)t = (hkl) \\ (h_3 + h_4)r : (k_3 + k_4)s : (l_3 + l_4)t = (hkl)\end{array}\right\}$$

Метод развития зон.

С помощью этого метода можно, не прибегая к промежуточным расчетам, получить все возможные грани. Для этого необходимы 3 координатные грани, с известными символами (100), (010), (001) и предварительно выбранная единичная – (111)



Зоны рекомендуется проводить последовательно, соединяя точки с минимальной суммой индексов:

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 .

Метод зон – кристаллографическое СУДОКУ!

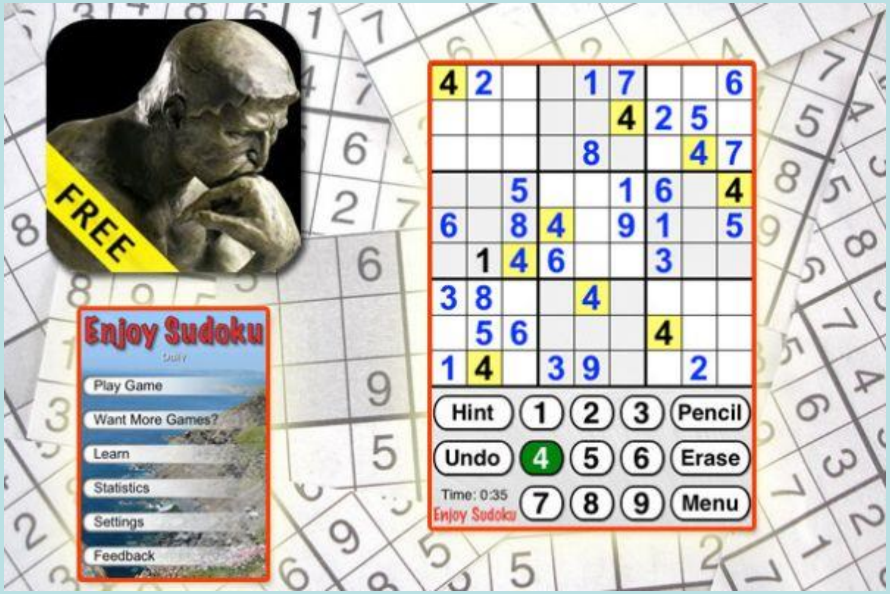
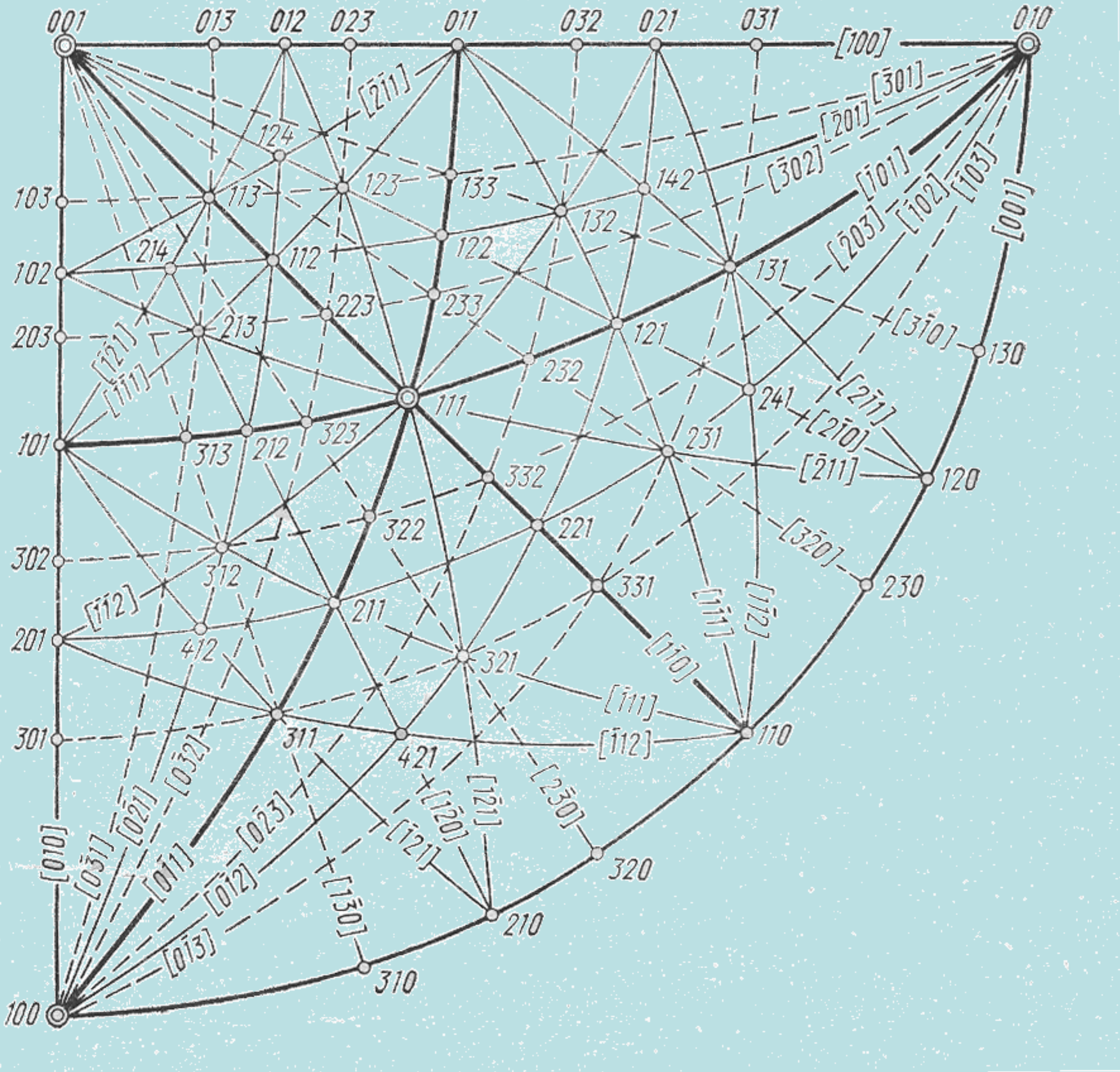


Схема получения возможных граней кубического кристалла методом развития зон (поясов)



Как найти положение грани с заданным символом?

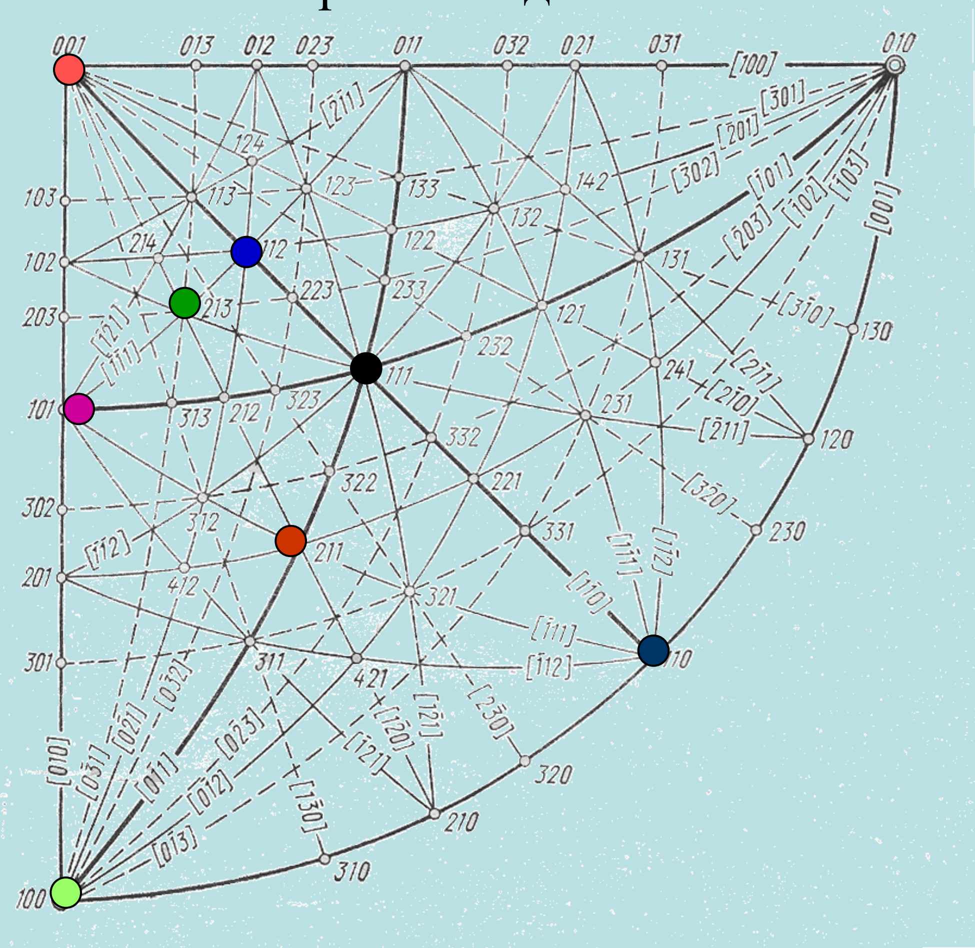
Грань с символом ***(213)*** в кубическом кристалле. Положение единичной грани однозначно фиксируется координатами φ=45° и ρ≈55°. Символ грани следует представить как сумму символов различных пар (обратная задача к сложению символов).

Расщепив символ ***(213)*** двумя способами, найдем две такие зоны: (101) – (112) и (001) – (212), на пересечении которых находится искомая грань.

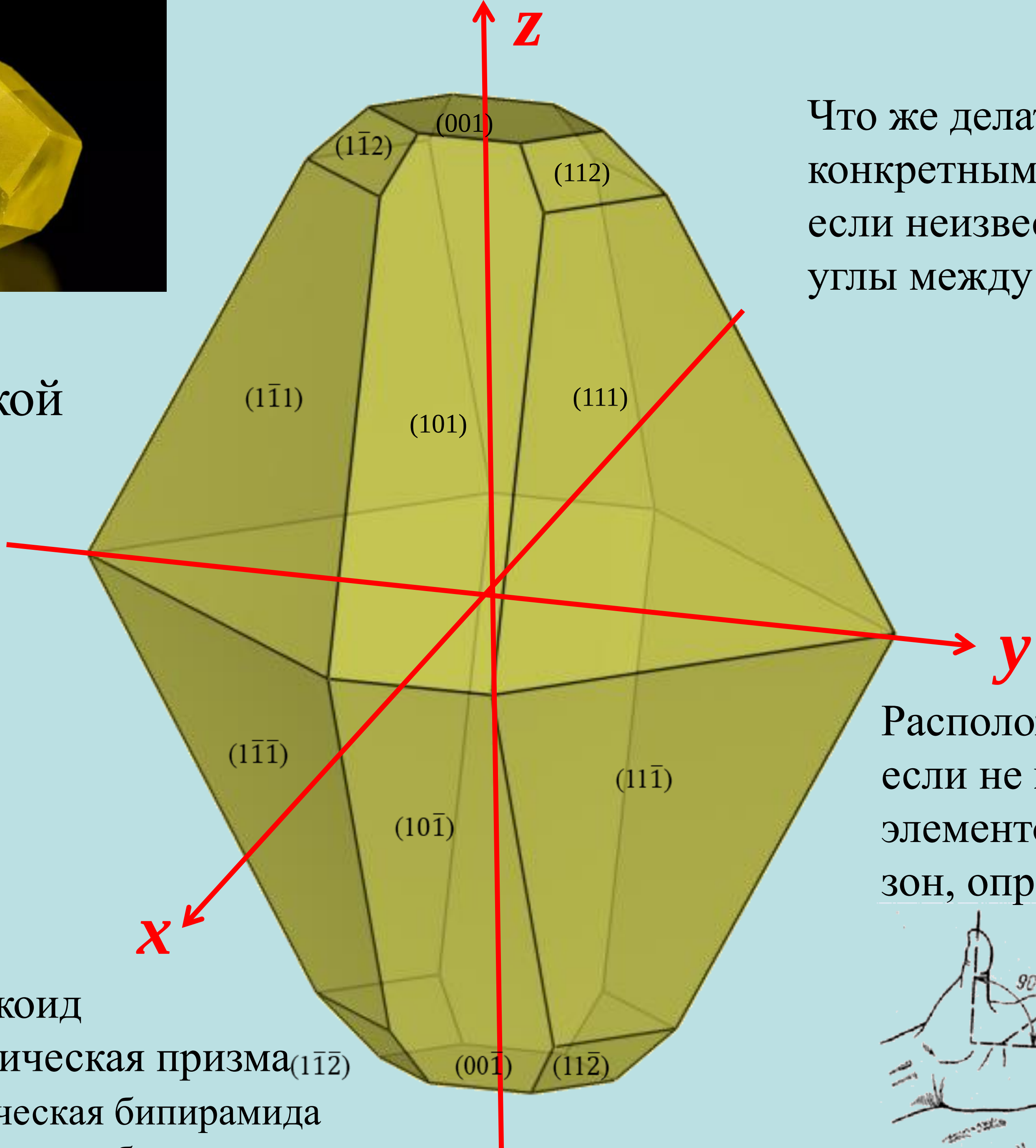
Всякая грань, кроме координатных и единичной, нуждается в подтверждении двумя зонами.

(112) = (111) – (001),
(212) = (211) – (001).

(211) = (100) – (111)
и (101) – (110).

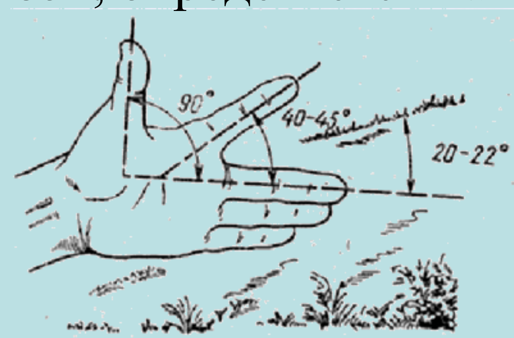


Кристалл ромбической серы



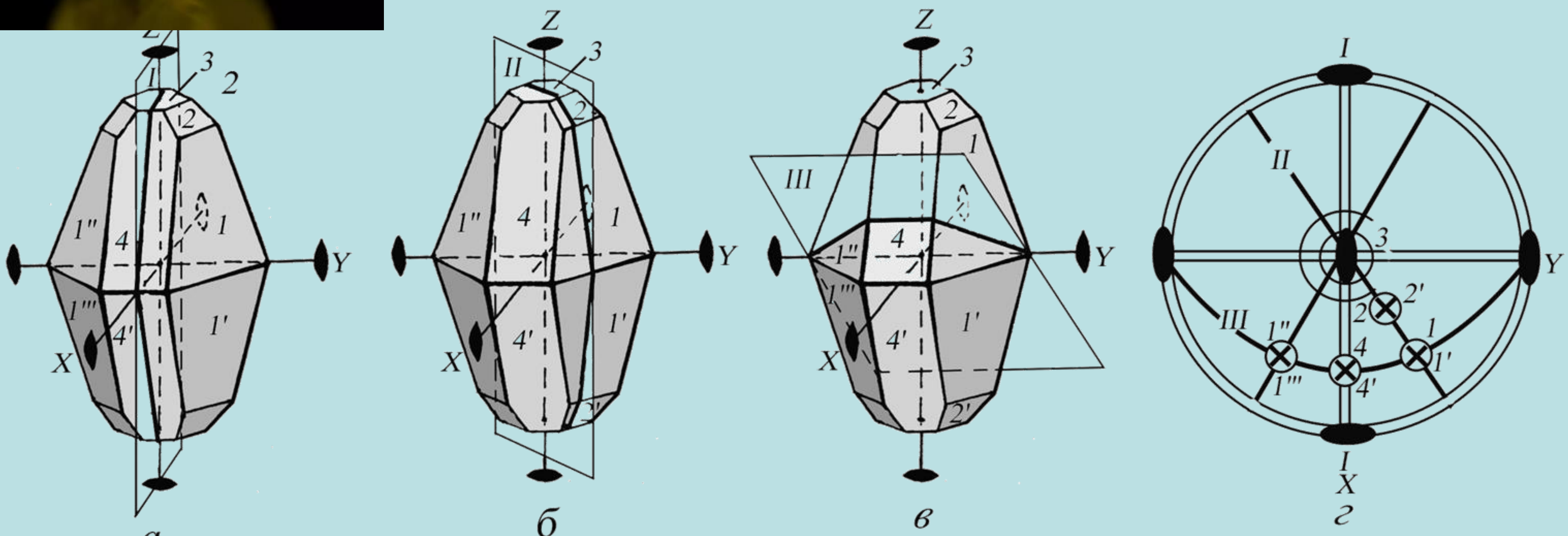
Что же делать с конкретным кристаллом, если неизвестны точные углы между гранями?

Расположение граней, если не хватает элементов симметрии и зон, определяется на гла



{001} – пинакоид
{101} – ромбическая призма
{111} – ромбическая бипирамида
{112} – ромбическая бипирамида

Кристалл ромбической серы

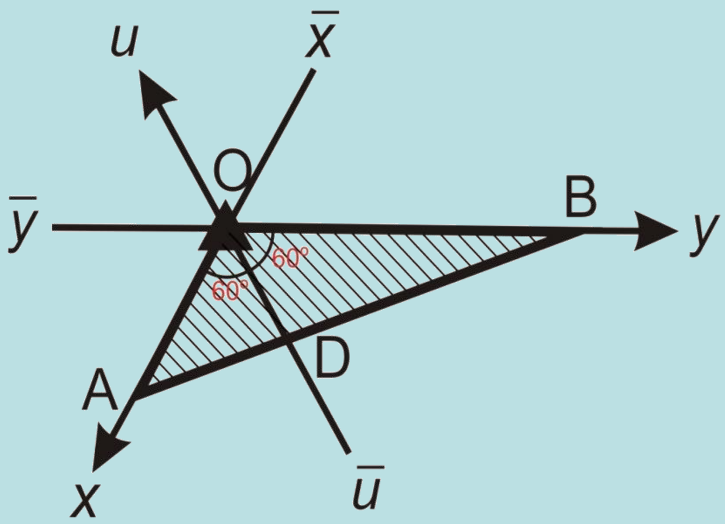


Зоны III и II позволяют однозначно позиционировать грани ***1*** и ***4*** относительно друг друга.

Грань ***2*** наносится приблизительно на зону II между гранями ***3*** и ***1***.

Индицирование гексагональных кристаллов

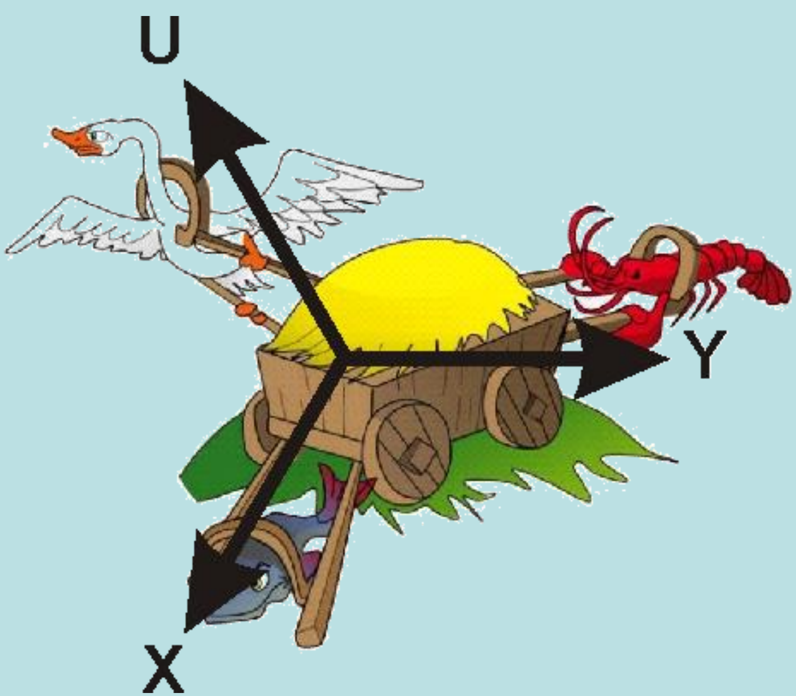
Особенности индицирования гексагональных кристаллов обусловлены принятой для описания гексагональных кристаллов четырехосной системой координат. Обязательное присутствие оси третьего или шестого порядков в этой сингонии ведет к появлению еще одной горизонтальной оси. «Лишняя» ось U полностью эквивалентна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



Наличие трех осей в одной плоскости, другими словами в двумерном пространстве, делает символ по третьей оси зависимым от двух остальных:

$$h + k + i = 0$$

Координаты точки в такой четырехосной системе неоднозначны

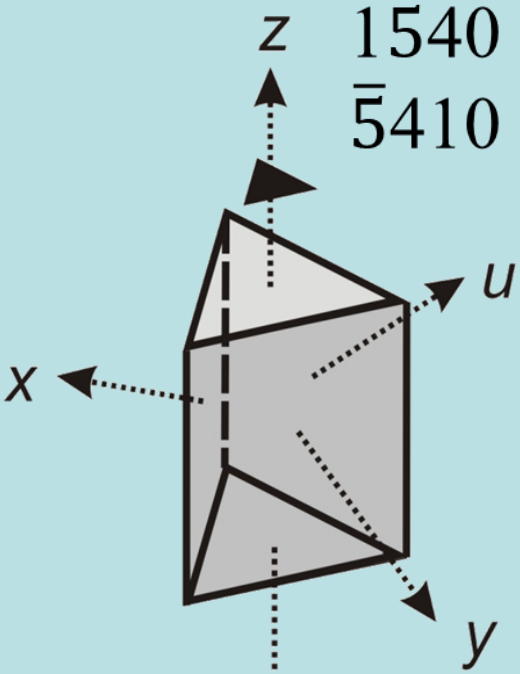


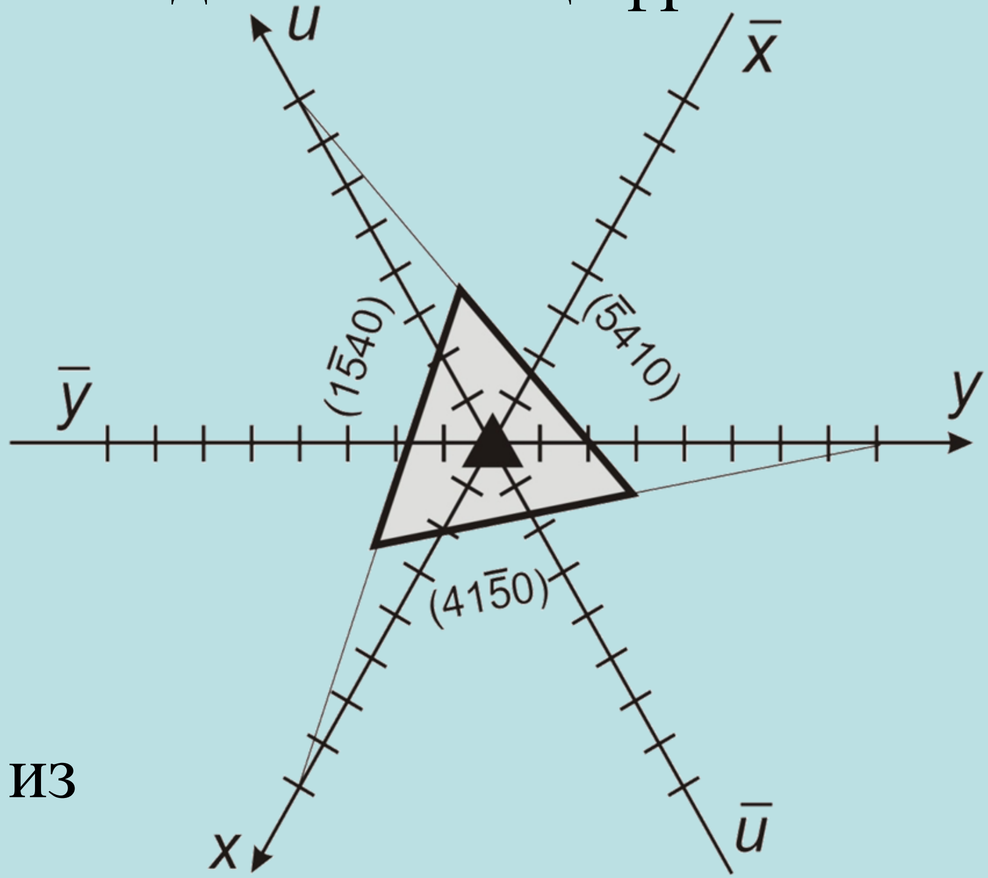
Четырехпозиционные индексы граней, связанных осью третьего или шестого порядка в явном виде демонстрируют их однотипность.

Индексы $41\bar{5}0$ состоят из одинаковых цифр

$1\bar{5}40$

$\bar{5}410$



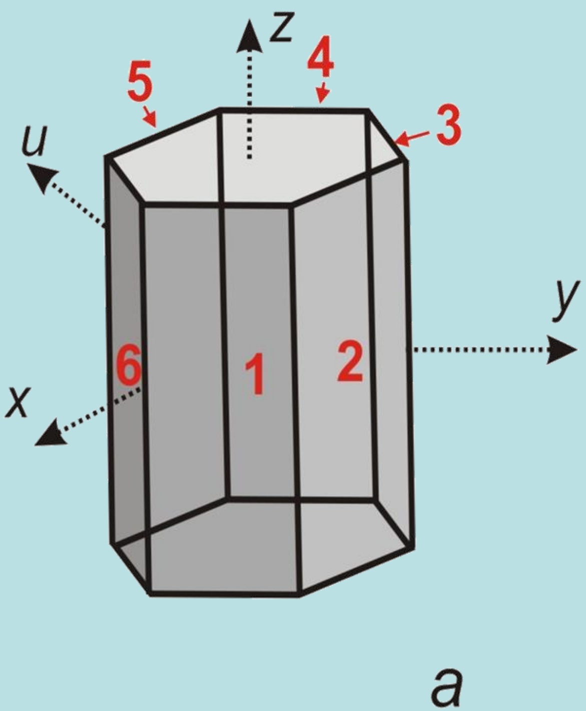


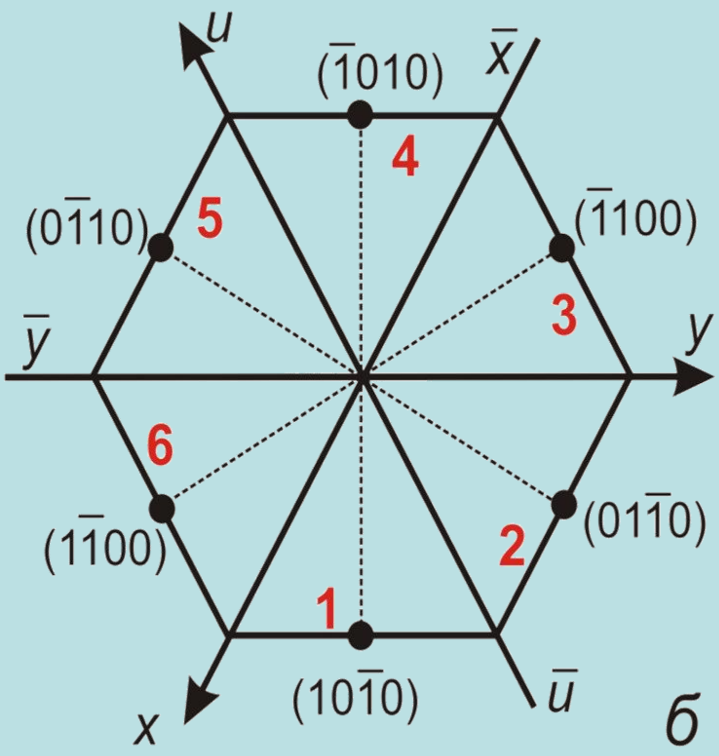
Индексы 410 состоят из

$1\bar{5}0$ разных

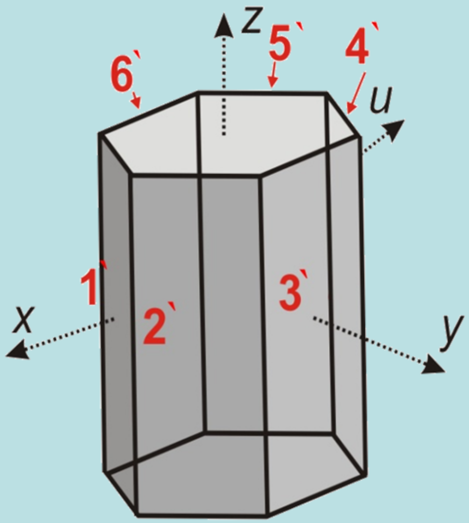
$\bar{5}40$ цифр

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

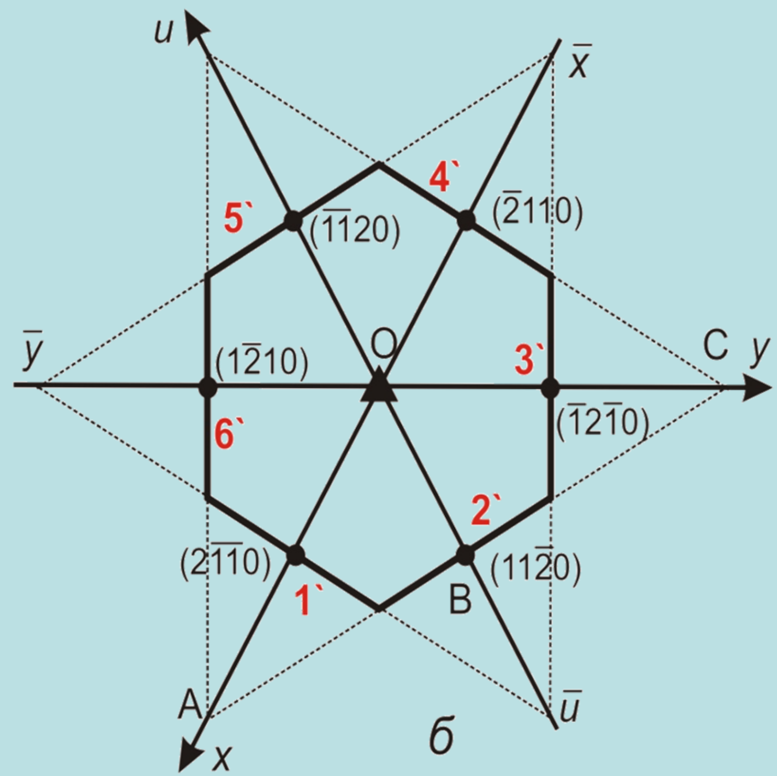




Индицирование граней гексагональной призмы $\{2\bar{1}\bar{1}0\}$.

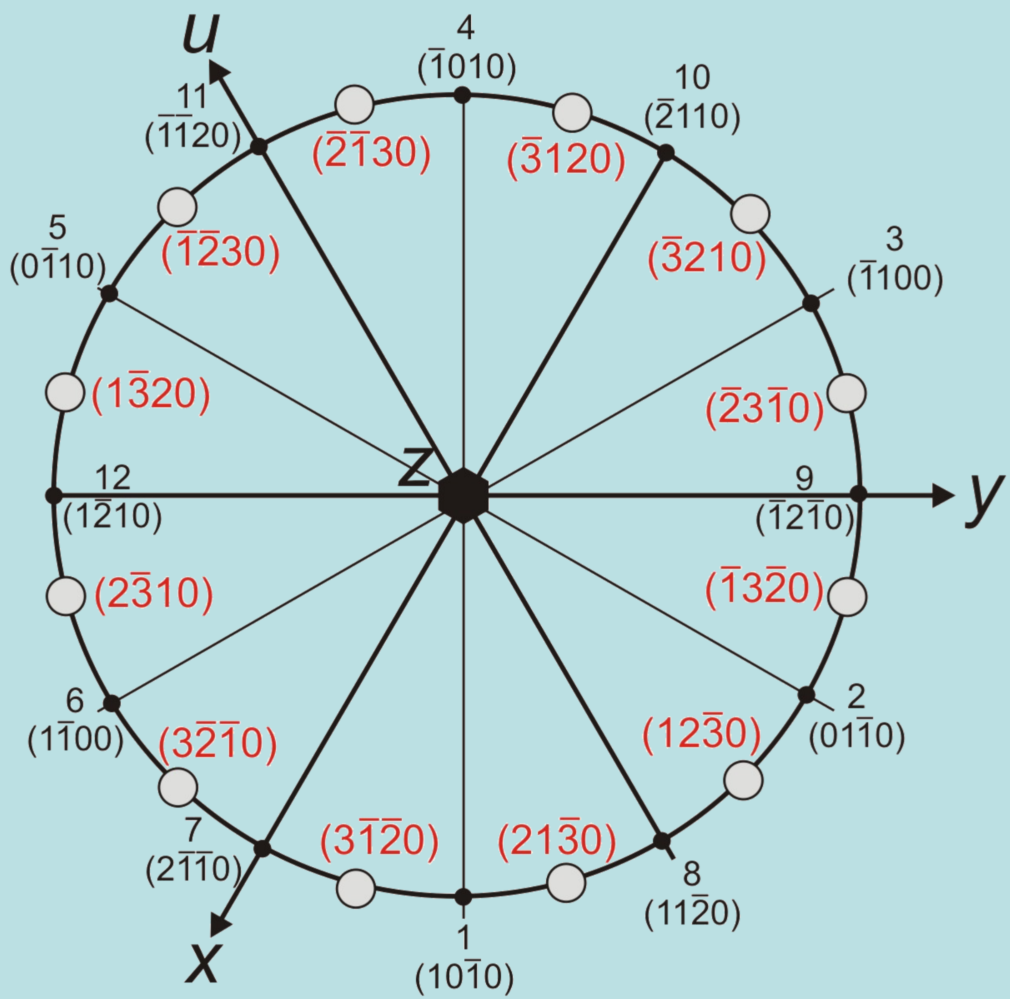


а



б

Индицирование 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 уголковые скобках $\langle rst' \rangle$ – 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 элементов кристалла, 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.

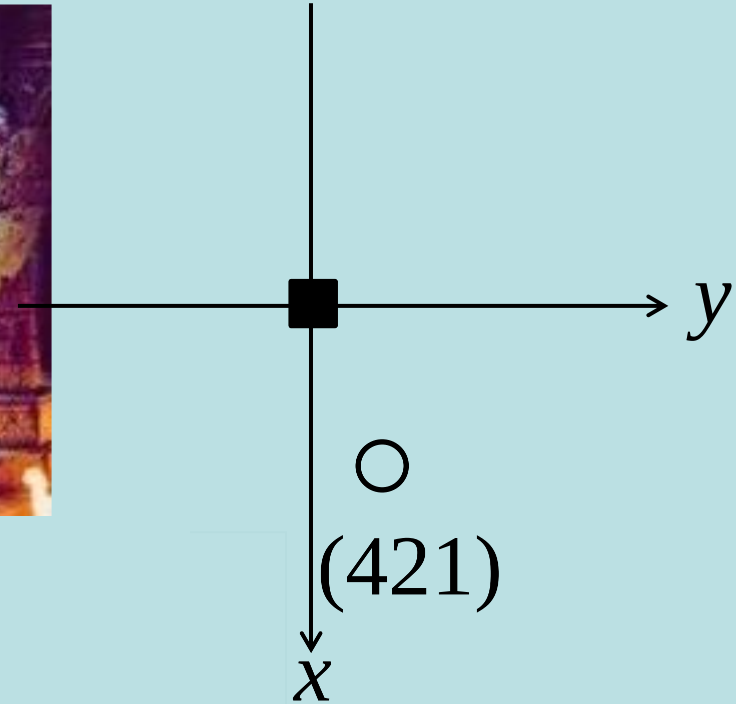
3. Выделять эквивалентные атомные ряды или плоскости, обладающие одинаковой структурой и физическими свойствами.

4. Характеризовать анизотропию кристалла и его симметрию.

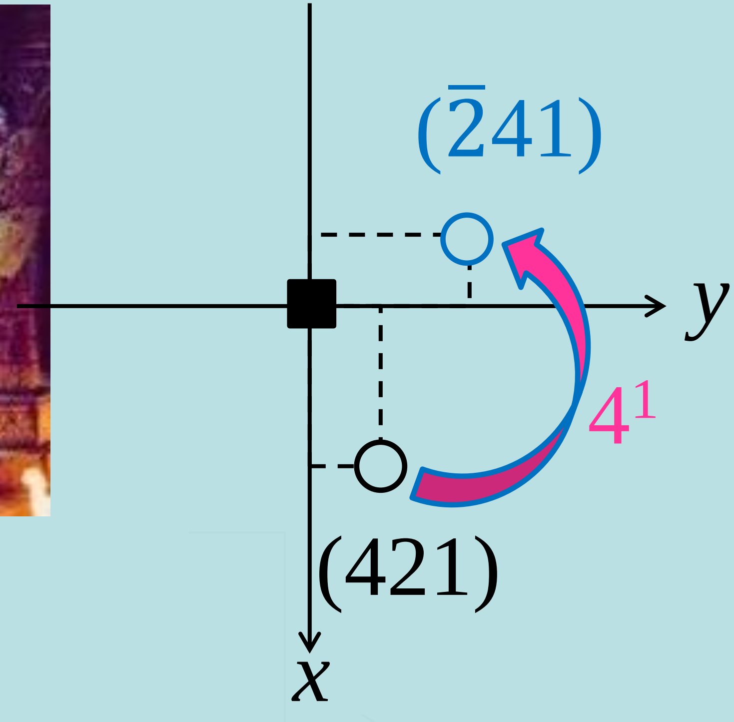
5. Рассчитывать углы между гранями и ребрами кристалла.

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.

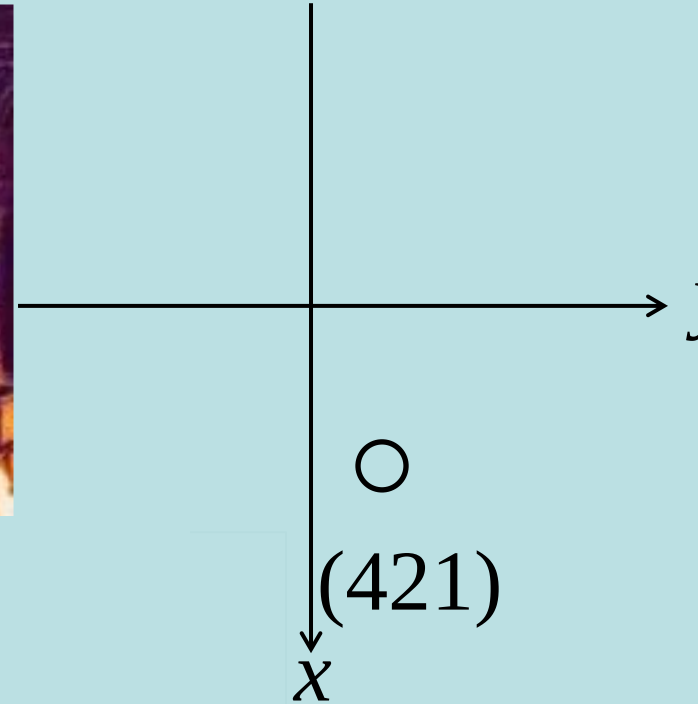


$$(421) \rightarrow (\bar{2}41)$$

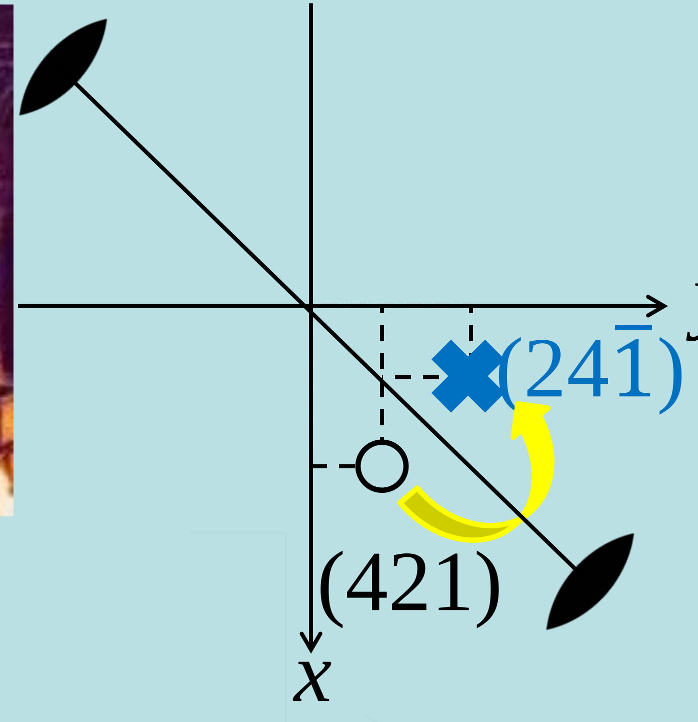


$(421) \rightarrow (\bar{2}41)$

Поворот против часовой стрелки на 180° вокруг оси 4-ого порядка 4_z

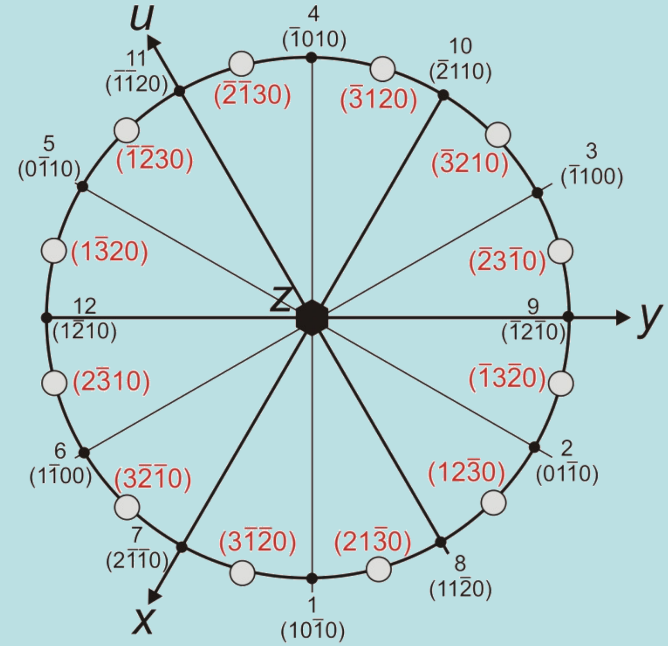


$(421) \Rightarrow (24\bar{1})$

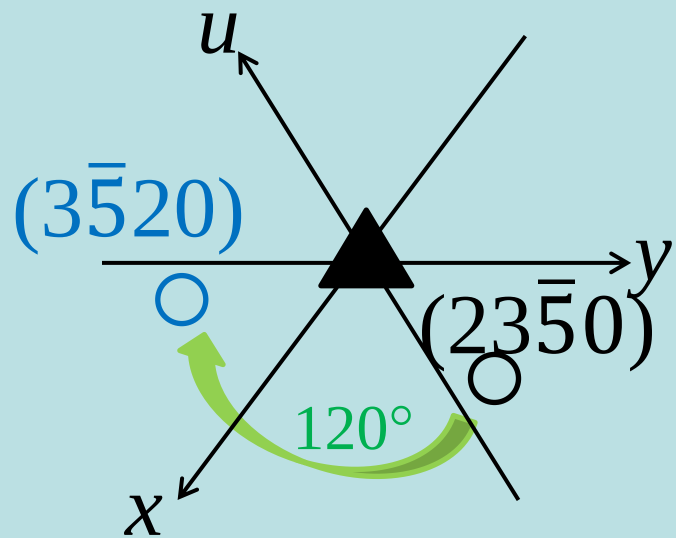


(421) $\rightarrow$ $(24\bar{1})$

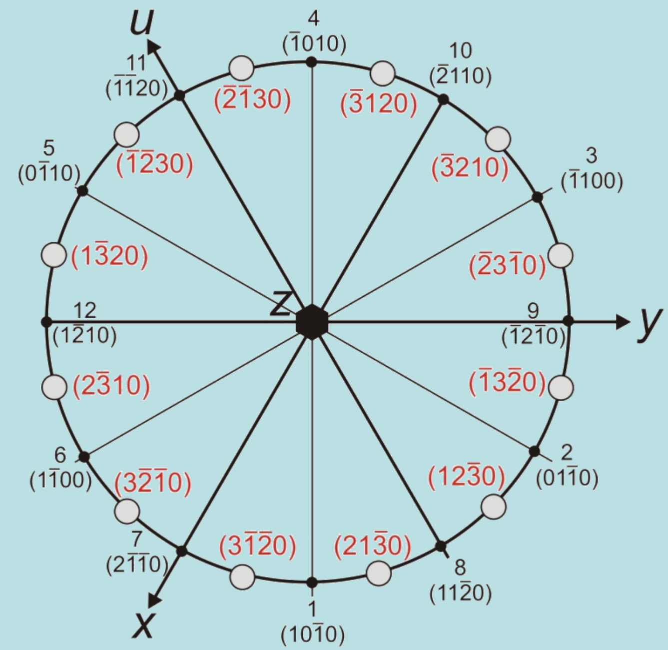
Поворот на 180 ° вокруг диагональной оси 2



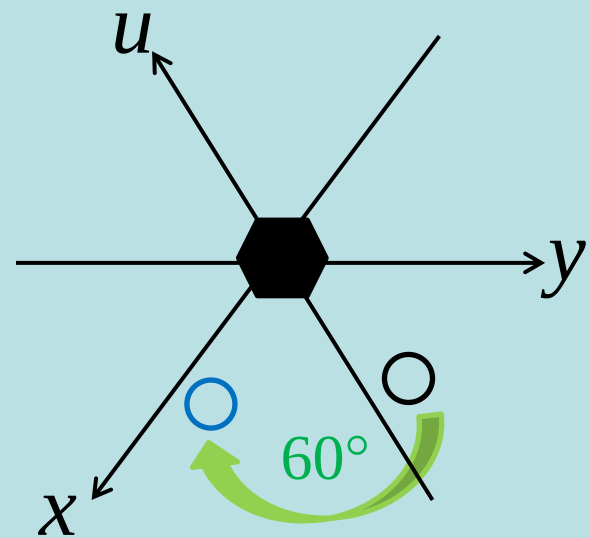
$$(23\bar{5}0) \longrightarrow (3\bar{5}20)$$



$$(23\bar{5}0) \longrightarrow (3\bar{5}20)$$

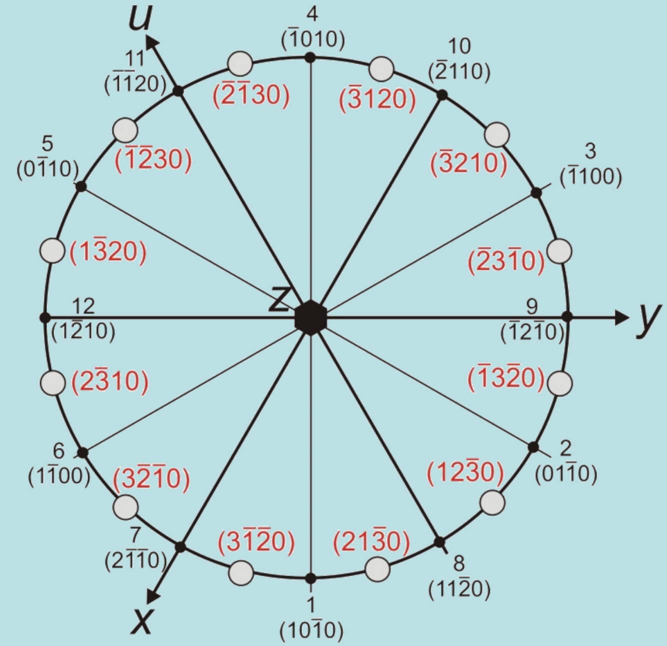


$(23\bar{5}0)$ → $(5\bar{2}\bar{3}0)$

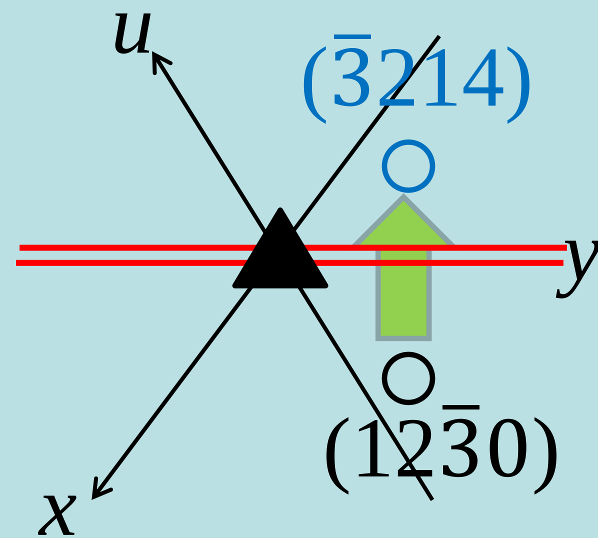


$$(23\bar{5}0) \longrightarrow (5\bar{2}\bar{3}0)$$

Поворот на 60° вокруг оси 6_z по часовой стрелки



$$(12\bar{3}4) \longrightarrow (\bar{3}214)$$



$(12\bar{3}4) \rightarrow (\bar{3}214)$

Отражение в плоскости m($x\bar{u}$)

На этом мы прощаемся с макросимметрией