

делением висмута и сурьмы по поверхности и глубине. Средний размер зерна исходных фольг составляет около 10 мкм, среднее значение удельной поверхности межзеренных границ – около  $290 \text{ мм}^{-1}$ .

Исходные фольги имеют четко выраженную двойную текстуру  $(10\bar{1}2)+(20\bar{2}0)$ .

Термическая обработка фольг выше температуры  $180 \text{ }^\circ\text{C}$  приводит к увеличению среднего размера зерна и уменьшению удельной поверхности межзеренных границ.

Распределение компонентов в отожженной фольге однородное.

Компонент текстуры  $(10\bar{1}2)$  при температурах отжига выше  $180 \text{ }^\circ\text{C}$  ослабевает, а компонент текстуры  $(20\bar{2}0)$  усиливается.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 20.03.2019

**Demidchik A. V. Structure of Quickly Turned Foil Alloy  $\text{Bi}_{0,89}\text{Sb}_{0,11}$ , Received by Spinning**

*The resulting ultrafast quenching of the  $\text{Bi}_{0,89}\text{Sb}_{0,11}$  alloy foil has an unstable microcrystalline structure, the formation of which is associated with a significant supercooling of the liquid phase during the crystallization process. The distribution of the components in the original foil is homogeneous. The average grain size of the original foil is about  $10 \mu\text{m}$ , the average value of the specific surface of grain boundaries is about  $290 \text{ mm}^{-1}$ . Annealing of foils leads to an increase in the average grain size and a decrease in the specific surface of grain boundaries depending on the annealing temperature and its duration. The distribution of components in the annealed foil is uniform.*

УДК 538.9

**В. А. Лионо<sup>1</sup>, И. А. Лявшук<sup>2</sup> Е. В. Овчинников<sup>3</sup>,  
А. В. Сабуть<sup>4</sup>, С. С. Секержицкий<sup>5</sup>**

<sup>1</sup>д-р физ.-мат. наук, проф., проф. каф. теоретической физики и теплотехники

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>2</sup>ст. преподаватель каф. информационных систем и технологий

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>3</sup>д-р техн. наук, доц., зам. декана по научной работе

факультета инновационных технологий машиностроения

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>4</sup>канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. теоретической физики и теплотехники

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>5</sup>канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. общей и теоретической физики

Брестского государственного университета имени А. С. Пушкина

e-mail: Sekerzhitsky@rambler.ru

### **ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА ЯЧЕЙКИ В КРИСТАЛЛЕ НА ЯЧЕЙКУ ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ**

*Три любых некопланарных вектора решетки кристалла, соединяющих соседние гомологичные точки, формируют ячейку решетки с базисом  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ . В любой решетке можно построить различные ячейки, в которых может находиться одна гомологичная точка (Р-ячейка), две гомологичные точки (I), (С(АВ))-ячейки, четыре гомологичные точки (F-ячейка) и даже восемь гомологичных точек (алмазоподобная ячейка). Каждой ячейке кристаллической решетки сопоставляется решетка в обратном пространстве. Ячейка обратной решетки связана с ячейкой прямой решетки. Проанализирован метод перехода между различными ячейками прямого и обратного пространства. Показано, что наиболее полное описание обратной решетки следует при выборе Р-ячейки, во всех остальных случаях в обратной решетке появляются узлы с нулевым «весом», которые на самом деле не имеют смысла.*

#### **Введение**

Главным признаком кристаллических объектов является их решеточное строение. Это означает следующее: в кристалле, во-первых, можно выделить структурную единицу, которая распределена по всему объему кристалла. Это может быть атом, молекула, химический радикал. Если два любых таких объекта поменять местами, то кристалл не изменит ни одного из своих свойств. Такие «частицы» называют гомологичными. Во-вторых, если любую из этих точек принять за начальную и провести через нее три любые некопланарные прямые, а затем найти расстояние от начала координат до ближайшей гомологичной точки по каждому из направлений  $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ , то все точки с координатами  $t\vec{a}, n\vec{b}, p\vec{c}$  при любых целых  $t, n, p$  гомологичны. На этих векторах строится параллелепипед, который является своеобразным «атомом», т. е. наименьшей, неделимой частью кристаллического объекта.

Решетка определяется кристаллом, а этот параллелепипед, называемый ячейкой, зависит от исследователя. Поэтому ячейки могут включать не только гомологичные точки в ее вершинах, но и в объеме ячейки. Эти ячейки имеют название ячейки Бравэ, и часто название ячейки переносят на всю решетку, что неправильно. Ячейки могут быть разными, но их трансляции должны воспроизводить всю решетку.

Целью работы являлось доказательство отсутствия узлов обратной решетки для непримитивных ячеек Бравэ с индексами, запрещенными правилами погасания.

Объект исследования – кристаллографические координаты узлов обратной решетки в зависимости от выбора ячейки кристаллов.

Решаемые задачи:

- а) показать, что выбор ячейки кристалла влияет только на кристаллографические координаты узлов обратной решетки;
- б) показать, что взаимоконфигурация узлов обратной решетки не зависит от выбора ячейки кристалла;
- в) проанализировать метод перехода между координатами узлов в прямой (кристаллической) и обратной решетках, в зависимости от выбора ячейки в пространстве кристалла.

### Ячейки кристаллической и обратной решеток

Рассмотрим произвольно выбранную ячейку в пространстве кристалла. Выберем в кристалле плоскость, проходящую через начало координат. Т. к. кристаллическая решетка обладает трансляционной симметрией, то такая же плоскость, параллельная исходной, будет проходить через другие вершины ячейки. Между этими плоскостями могут быть гомологичные им плоскости. Расстояние между ними обозначается  $d$  (межплоскостное расстояние). Эти плоскости отсекают от ребер  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  отрезки  $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$  [1].

Рассматриваются ближайшие к началу координат плоскости из «стопы» гомологичных плоскостей. Ячейка кристалла в общем случае косоугольная, т. е. наряду с тремя линейными параметрами имеется три угловых  $\alpha, \beta, \gamma$ , обозначение которых по международному стандарту приведено на рисунке 1.

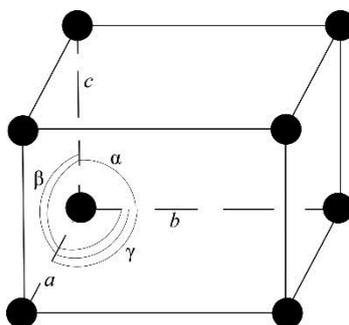


Рисунок 1. – Ячейка решетки кристалла

Межплоскостное расстояние  $d$  связано с параметрами ячейки  $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma)$  или  $(a_j, \alpha_j)_{j=1,2,3}$  условием:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{\frac{h}{a} \begin{vmatrix} h/a & \cos \gamma & \cos \beta \\ k/b & 1 & \cos \alpha \\ l/c & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix} + \frac{k}{b} \begin{vmatrix} 1 & h/a & \cos \beta \\ \cos \gamma & k/b & \cos \alpha \\ \cos \beta & l/c & 1 \end{vmatrix} + \frac{l}{c} \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & h/a \\ \cos \gamma & 1 & k/b \\ \cos \beta & \cos \alpha & l/c \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ \cos \beta & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix}}, \quad (1)$$

т. е.  $d = f(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma, h, k, l)$ . Условие 1 называется квадратичной формулой [2]. Межплоскостное расстояние  $d$  определяется экспериментально рентгеновским дифрактометрическим методом:

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}, \quad (2)$$

где  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения,  $\theta$  – угол, равный  $\theta = \frac{\varphi}{2}$ , где  $\varphi$  – угол между направлением падающего луча и отраженного от плоскости  $(hkl)$ .

Если при описании решетки кристалла взяты две различные ячейки, то один и тот же рентгеновский рефлекс будет описываться разными наборами  $(a_j, \alpha_j, h, k, l)$ , но значения  $d$  будут одинаковыми, т. к. эта величина определяется кристаллом, а не выбранной ячейкой.

В кристаллографии (и в кристаллофизике) используются две координатные системы [3]. Первая – декартовая система, которая называется кристаллофизической  $(K\Phi)$ , вторая – кристаллографической  $(K\Gamma)$ . У кристаллографической оси координат лежат на векторах  $\vec{a}_j$ , причем за единицу измерения вдоль каждой оси принят соответствующий параметр. Переход от  $(K\Gamma)$ -координат к  $(K\Phi)$ -системе осуществляется по формуле:

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{K\Phi} = \begin{pmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{K\Gamma} = |M| \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{K\Gamma}, \quad (3)$$

где  $|M|$  – метрический тензор.

Если  $a$  совпадает с осью  $X$   $(K\Phi)$ -системы,  $b$  – лежит в плоскости  $(XY)_{K\Phi}$ , то метрический тензор примет вид:

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{K\Phi} = \begin{pmatrix} a & b \cos \gamma & c \cos \beta \\ 0 & b \sin \gamma & c \frac{\cos \alpha - \cos \beta \cos \gamma}{\sin \gamma} \\ 0 & 0 & \frac{cr}{\sin \gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{K\Gamma} = |M| \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{K\Gamma}, \quad (4)$$

где  $r = (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{\frac{1}{2}}$ .

Если имеется тензор  $M^*$  такой, что  $M^* \cdot M = M \cdot M^* = I$ , где  $I$  – единичная матрица, то  $M^* = M^{-1}$  является обратным тензором для  $M$  [2]. Очевидно, что:

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{K\Gamma} = M^{-1} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{K\Phi}. \quad (5)$$

Для метрического тензора (4) обратный метрический тензор имеет вид:

$$M^* = \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{\text{ctg } \gamma}{a} & \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{ar \sin \gamma} \\ 0 & \frac{1}{b \sin \gamma} & \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{br \sin \gamma} \\ 0 & 0 & \frac{\sin \gamma}{cr} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

тензор  $M^* = M^{-1}$  можно записать в форме:

$$M^* = \begin{pmatrix} \frac{a^* r^*}{\sin \alpha^*} & \frac{a^* (\cos \gamma^* - \cos \alpha^* \cos \beta^*)}{\sin \alpha^*} & a^* \cos \beta^* \\ 0 & b^* \sin \alpha^* & b^* \cos \alpha^* \\ 0 & 0 & c^* \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где  $r^* = (1 - \cos^2 \alpha^* - \cos^2 \beta^* - \cos^2 \gamma^* + 2 \cos \alpha^* \cos \beta^* \cos \gamma^*)^{\frac{1}{2}}$ .

Если матрицу (6) записать в транспонированном виде, то видно сходство  $|M^{*t}|$  с матрицей  $M$  (см. (3)). Параметры  $(a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*)$  являются параметрами ячейки так называемого обратного пространства, в котором линейные параметры ячейки имеют размерность обратной длины.

Параметры  $\vec{a}_j^*$  и  $\vec{a}_k$  связаны соотношением  $(\vec{a}_j^* \cdot \vec{a}_k) = \delta_{jk}$ , где «дельта»-функция имеет значения:  $\delta_{jk} = 1$  при  $j = k$  и  $\delta_{jk} = 0$  при  $j \neq k$ . Связь между численными значениями параметров ячеек кристаллической (индекс (0)) и обратной (индекс (\*)) решеток имеет вид:

$$\cos \alpha_j^{0(*)} = \frac{\cos \alpha_{j+1}^{*(0)} \cdot \cos \alpha_{j+2}^{*(0)} - \cos \alpha_j^{*(0)}}{\sin \alpha_{j+1}^{*(0)} \cdot \sin \alpha_{j+2}^{*(0)}}, \quad (8)$$

а также:

$$\sin \alpha_j^{0(*)} = \frac{r^{*(0)}}{\sin \alpha_{j+1}^{*(0)} \cdot \sin \alpha_{j+2}^{*(0)}}. \quad (9)$$

Для линейных параметров связь следующая:

$$\alpha_j^{0(*)} = \frac{\alpha_{j+1}^{*(0)} \cdot \alpha_{j+2}^{*(0)} \cdot \sin \alpha_j^{*(0)}}{V^{*(0)}}, \quad (10)$$

где  $V^0, V^*$  – объемы ячеек кристаллической (прямой (0)) и (обратной (\*)) решеток и численно равны детерминантам матриц (3) и (6) соответственно. Следовательно, решетка, обратная обратной, является решеткой кристалла [4].

Координаты узлов обратной решетки в кристаллографическом базисе – это три целых числа  $(hkl)$ , соответствующих индексам плоскости, которая отображается этим

узлом. Радиус-вектор узла обратной решетки  $\vec{r}^* \parallel d(hkl)$ , при этом  $(\vec{r}^*(hkl) \cdot \vec{d}(hkl)) = 1$ . Если выбраны вектора  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  в пространстве кристалла (их называют базисом ячейки), то базис ячейки обратной решетки не может быть произвольным. Он обязательно соответствует условиям (8–10).

### Переходы между базисами в пределах одной решетки

Рассмотрим кристаллическую решетку, в которой построены две ячейки с базисами  $(\vec{a}_j)_{j=1,2,3}$  и  $(\vec{a}_k)_{k=1,2,3}$ . В одном из этих базисов возьмем точку в ячейке с известными кристаллографическими координатами  $(xyz)_1 = (xyz)_{1j=1,2,3}$ . Для определения координаты этой точки в базисе второй ячейки необходимо решить уравнение:

$$\begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix}_{2KG} = M_2^{-1} M_1 \begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix}_{1KG} . \quad (11)$$

Если в качестве точки взят узел ячейки (1), то после преобразования по формуле (8) узел преобразуется сам в себя, но его кристаллографические координаты, т. е. индексы, изменятся. Следовательно, индексы узлов обратной решетки не являются фиксированными параметрами, но зависят от базиса ячейки. Для изучения индексов узлов обратной решетки в зависимости от базиса выберем гранецентрированную ячейку ромбической сингонии. Ячейка кристалла выбирается с учетом условий:

- а) точечная симметрия ячейки должна соответствовать точечной симметрии макро- (моно-) кристалла;
- б) число прямых углов  $(\alpha, \beta, \gamma)$  должно быть наибольшим;
- в) полная поверхность должна быть наименьшей.

Очевидно, что эти требования противоречивы, например, гексагональная сингония в качестве обязательного точечного преобразования имеет повороты вокруг оси  $b$  или  $\bar{b}$ . Но построить параллелепипед с такой точечной симметрией невозможно. Выполнение условия (2) противоречит требованиям условия (3), т. к. приводит к появлению ячеек Бравэ  $F, I, G$  ( $AB$ ) типов. Наиболее простая ячейка – это ячейка  $P$ -типа, но число неизвестных параметров увеличивается от двух (ромбическая ячейка) в общем случае до шести. Следовательно, обратная решетка – это набор точек (узлов), кристаллографические координаты которых в любом базисе ячейки кристалла являются целыми числами. «Вес» узла, определяемый структурной амплитудой (экспериментальная величина), является параметром обратной решетки. Индексы узлов, а также тип ячейки Бравэ зависит от базиса выбранной ячейки кристалла. Объективным параметром узла обратной решетки является его значение в единицах СИ, т. к.  $r^* = d^{-1}$ .

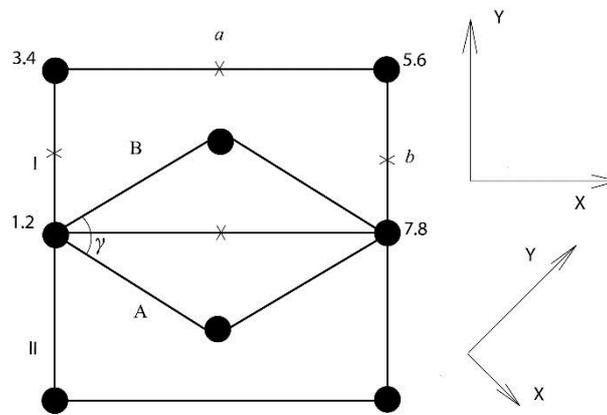
Межплоскостное расстояние определяется по формуле (2) и абсолютно не зависит ни от  $(hkl)$ , ни от типа ячейки Бравэ кристалла. Если перечисленные требования к выбору ячейки кристалла дополнить двумя условиями (объем ячейки должен быть наименьшим, как и число гомологичных точек в ячейке), то в этом случае вместо ячейки  $F$ -типа ромбического кристалла можно выбрать  $I$ -ячейку моноклинного типа, которая в традиционной кристаллографии отсутствует, но с учетом дополнительных условий допустима. Проанализировано изменение индексов узлов обратной решетки ромбического кристалла ячейки  $F$ -типа при переходе к ячейке  $I$ -типа моноклинной сингонии.

**Изменения индексов узлов кристаллической и обратной решеток при переходе от ромбической  $F$ -ячейки к  $I$ -ячейке моноклинного типа**

Проекция двух ячеек ромбической сингонии на плоскость ( $XY$ ) приведена на рисунке 2. Т. к. направление базисных векторов ромбической установки совпадает с направлениями кристаллографической системы, то метрический тензор  $P$ -ячейки имеет вид:

$$M_P = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix}. \quad (12)$$

На рисунке 2 приведены направления координатных осей для ромбической и моноклинной установок.



(•) – узлы на  $[00W]$ , четные –  $Z = 0$ ;  
нечетные –  $Z = 1$ ; X – узлы  $Z = 0,5$ .

**Рисунок 2. – Проекция ячеек I, II на плоскость (XY)**

Параметры «моноклинной» ячейки:

$$\begin{cases} A = B = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{2}, & C = c \\ \cos \frac{\gamma}{2} = \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}}, & \sin \frac{\gamma}{2} = \frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} \\ \cos \gamma = \frac{a^2 - b^2}{a^2 + b^2}, & \sin \gamma = \frac{2ab}{a^2 + b^2} \end{cases} \quad (13)$$

Прямой и обратный метрический тензоры моноклинной ячейки имеют с учетом (13) вид [2]: