

$$M_M = \begin{vmatrix} A_x & B_x & C_x \\ A_y & B_y & C_y \\ A_z & B_z & C_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ -\frac{b}{2} & \frac{b}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (14)$$

Обратный метрический тензор M_P^{-1} равен:

$$M_P^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{1}{b} & 0 \\ \frac{1}{a} & \frac{1}{b} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{vmatrix}. \quad (15)$$

Следовательно, формула (11) примет вид:

$$\begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix}_{m,K\Gamma} = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix}_{p,K\Gamma}, \quad (16)$$

т. е. преобразование координат узлов решетки имеет вид:

$$(100)_{p,K\Gamma} \rightarrow (110)_{m,K\Gamma}; \left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right)_{p,K\Gamma} \rightarrow \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{m,K\Gamma}; \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} 0\right)_{p,K\Gamma} \rightarrow (100)_{m,K\Gamma}.$$

Условие (16) выполняется для любых переходов от F -ячейки ромбической сингонии к I -ячейке моноклинной сингонии. Очевидно, что эта ячейка, во-первых, имеет меньший объем равный $0,5abc$, во-вторых, в этой ячейке не четыре, а две гомологичные точки, в-третьих, трансляция $\hat{T}_m = m\vec{A} + n\vec{B} + p\vec{C}$ воспроизводит всю решетку кристалла. Число параметров в P -ячейке и в M -ячейке одинаковое: a, b, c и α, β, γ соответственно.

Очевидно, что обратная решетка не изменяется, какие бы ячейки в кристалле ни выбирались. Но индексы узлов зависят от выбора ячейки.

Пусть индексы узлов обратной решетки имеют значения (hkl) – для ромбической ячейки и (HKL) – моноклинной. Из формулы (1) следует:

$$\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} = \frac{1}{\sin^2 \gamma} \frac{H}{A} \left(\frac{H}{A} - \frac{K}{A} \cos \gamma \right) + \frac{K}{A} \left(\frac{K}{A} - H \cos \gamma \right) + \frac{L^2}{C^2} \sin^2 \gamma, \quad (17)$$

поскольку $A = B, C = c$, то $L = l$.

$$\text{Следовательно, } \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} = \frac{1}{A^2 \sin^2 \gamma} (H^2 + K^2 - 2HK \cos \gamma).$$

С учетом (16) получим:

$$\begin{aligned}
 b^2 h^2 + a^2 k^2 &= (H^2 + K^2)(a^2 + b^2) - 2HK(a^2 - b^2) = \\
 &= b^2(H^2 + K^2 + 2HK) + a^2(H^2 + K^2 - 2HK) = \quad . \\
 &= b^2(H + K)^2 + a^2(H - K)^2 .
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

Следовательно:

$$\begin{cases} h = H + K \\ k = H - K \end{cases} ,
 \tag{19}$$

$$\begin{cases} H = 0,5(h + k) \\ K = 0,5(h - k) \end{cases} .
 \tag{20}$$

Центрированные грани и центрированный объем влияют на значения индексов. В первом случае индексы должны иметь одинаковую четность, во втором сумма индексов должна быть четной.

В таблице 1 приведены значения (hkl) и соответствующие им значения (HKL) .

Таблица 1. – Индексы одних и тех же узлов обратной решетки в зависимости от выбора ячейки кристалла: (hkl) – ромбическая ячейка; (HKL) – моноклинная ячейка

hkl	111	200	002	220	202	311	113	222
HKL	101	100	002	200	112	211	103	202
hkl	400	004	331	312	420	402	422	224
HKL	220	004	301	212	310	222	312	204

Индексы узлов обратной решетки, как и индексы плоскости, не являются однозначными параметрами обратной решетки и кристаллографической плоскости, т. к. зависят от исследователя, выбирающего ячейку кристалла. Свойства кристалла определяются его структурой и симметрией как прямой, так и обратной решеток. При этом учитывается, что определяющей является ячейка кристалла.

Однако можно осуществить и обратный переход, т. е., зная расположение узлов в обратной решетке, можно определять $d(hkl)$ из эксперимента при монокристаллических исследованиях, т. к. рентгенограмма отражает сечение обратной решетки (и обратного пространства в общем случае) сферой отражения (Эвальда) [5]. От гранецентрированной ячейки можно перейти не только к ячейке I -типа, но и к примитивной ячейке, которую можно выбрать для любых структур.

Изменение индексов узлов обратной решетки при переходе от гранецентрированной к примитивной ячейке

На рисунке 3 приведена схема выбора примитивной ячейки в решетке кристалла, у которой была выбрана гранецентрированная ячейка ромбической сингонии с параметрами a, b, c .

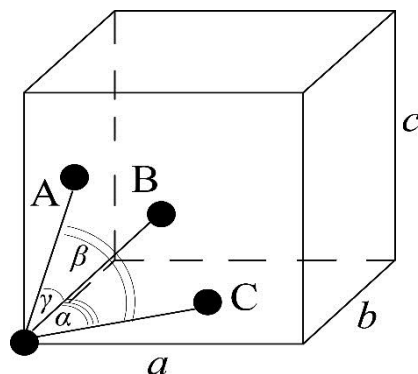


Рисунок 3. – Примитивная ячейка, выделенная в структуре F -ячейки ромбического кристалла

Координаты вершин выбранной ячейки P -типа в репере $ГЦК$ -ячейки имеют значения 000 , $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$, $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$, $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$, 111 , $\frac{1}{2}\frac{1}{2}1$, $\frac{1}{2}1\frac{1}{2}$, $1\frac{1}{2}\frac{1}{2}$. В этой P -ячейке оператор трансляции, определяющий всю решетку, имеет вид:

$$\hat{T} \Leftrightarrow m\vec{A} + n\vec{B} + p\vec{C}, \quad (21)$$

где $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ – базисные для P -ячейки векторы.

Если соединить концы этих векторов попарно, то строятся три треугольника с углами ячейки равной: $U_\alpha = \frac{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}}{2}$, $V_\beta = \frac{\sqrt{\alpha^2 + \gamma^2}}{2}$, $W_\gamma = \frac{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}{2}$. Линейные размеры базисных векторов известны: $A = \frac{\sqrt{b^2 + c^2}}{2}$, $B = \frac{\sqrt{a^2 + c^2}}{2}$, $C = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{2}$.

Косинусы углов α, β, γ определяются по теореме косинусов:

$$\begin{cases} \cos \alpha = \frac{a^2}{\left[(a^2 + c^2)(a^2 + b^2) \right]^{\frac{1}{2}}} \\ \cos \beta = \frac{b^2}{\left[(b^2 + c^2)(a^2 + b^2) \right]^{\frac{1}{2}}} \\ \cos \gamma = \frac{c^2}{\left[(a^2 + c^2)(c^2 + b^2) \right]^{\frac{1}{2}}} \end{cases} \quad (22)$$

Т. е. для этой P -ячейки можно записать квадратичную формулу (1) и сравнить значения d , определяемые по индексам hkl ромбической и HKL примитивной ячеек.

Формулы расчета метрического тензора P -ячейки, как и ее квадратичной формулы, легко записываются, но они имеют достаточно громоздкий вид.

Для иллюстрации рассмотрим P -ячейку: $A = B = C$, $\alpha = \beta = \gamma$. В этом случае [1] примет вид:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{\begin{vmatrix} H/A & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ K/A & 1 & \frac{1}{2} \\ L/A & \frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix} + \frac{K}{A} \begin{vmatrix} 1 & H/A & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & K/A & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & L/A & 1 \end{vmatrix} + \frac{L}{A} \begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} & H/A \\ \frac{1}{2} & 1 & K/A \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & L/A \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix}}$$

т. е.:

$$h^2 + k^2 + l^2 = 3(H^2 + K^2 + L^2) - 2(HK + KL + LH). \quad (23)$$

В ячейке Бравэ P -типа базисом является значение $[000]$, т. е. внутри ячейки нет гомологичных точек, связанных трансляцией. Никаких условий, ограничивающих значения hkl , в таких ячейках нет.

В таблице 2 приведены значения HKL в ряду этих индексов без пропусков и индексы соответствующих им узлов в F -ячейке.

Таблица 2. – Индексы узлов обратной решетки в зависимости от выбора ячейки кристалла: (hkl) – ромбическая ячейка; (HKL) – примитивная ячейка

HKL	100	110	111	200	210	211	220	221
hkl	3	4	3	12	11	8	16	11
	111	200	111	222	311	220	400	311
HKL	311	222	321	322	400	410	330	331
hkl	19	12	20	19	48	43	36	27
	331	222	420	331	444	533	600	511

Легко убедиться, что всем индексам узлов в P -ячейке соответствуют индексы узлов в ячейке F -типа, т. е. hkl имеют одинаковую четность. В таблице 1 было показано, что в I -ячейке, построенной на базе F -ячейки, все узлы с одинаковой четностью соответствуют узлам с четной суммой индексов. В таблице 2 для значений HKL 100 и 111 в F -ячейке соответствуют узлы с индексами $h^2 + k^2 + l^2 = 3$. Узлу $HKL = (100)$ соответствуют $hkl = \pm[(1,1,-1), (-1,1,-1), (-1,-1,1)]$, а узлу $HKL = (111)$ соответствуют узлы $hkl = \pm(111)$. Выбор ячейки Бравэ зависит от исследователя. Решетка кристалла, как и обратная решетка не могут описываться каким-либо символом Бравэ. Тип Бравэ относится только к ячейке, которая может не совпадать с общепринятыми. Например, в ячейке $ГЦК$ (F -типа) можно выбрать ячейку I -типа в моноклинной сингонии при условии $a = b$. Очевидно, что индексы узлов обратной решетки зависят от выбора ячейки Бравэ, но при любом выборе ячейки абсолютные значения модулей радиусов-векторов узлов должны быть инвариантными $|\vec{r}^*| = \frac{1}{d}$, как и то, что $\vec{r}^* \parallel \vec{d}$. Отсюда следует, что узел $\{100\}$ не является узлом с нулевым весом, он просто отсутствует в обратной решетке. Геометрическое положение узла $\{100\}$ может быть определено на основе

базиса ячейки Бравэ. Однако «вес» этого узла может быть нулевым, т. е. этот узел инвариантен любой точке обратного пространства, не совпадающей с узлами решетки. Если этот узел при любом выборе ячейки Бравэ сохраняет свое геометрическое положение при нулевом «весе», то этому узлу следует придать смысл виртуального узла. Если это условие не выполняется, то для ячеек Бравэ непримитивного типа в обратном пространстве необходимо выбирать суперъячейку с параметрами, кратными $\vec{a}_j^*$ [6]. Параметр $(\vec{a}_j^* \cdot \vec{a}_k) = \delta_{jk}$ определяет лишь связь параметров для примитивной ячейки. Если ячейка не учитывается, то:

$$(\vec{a}_j^* \cdot \vec{a}_k)_n = \vec{a}_s^*, \quad (24)$$

где n – целое число. Для ячеек F - и I - типов $n = 2$. Для алмазоподобной ячейки – $n = 4$. Для базоцентрированной $n = 2$ только для параметров центрированной грани. Для третьего параметра $n = 1$.

Заключение

На примере трехслойной плотнейшей упаковки, для которой общепринятой является $ГЦК$ -ячейка Бравэ, показано, что в решетках такого типа можно выбрать ячейки с точечными группами $4/mmm$ и $3m$.

Для всех ячеек обратная решетка имеет один и тот же вид, но координаты узлов, т. е. кристаллографические индексы плоскостей, отображаемых этими узлами, различные. Следовательно, тип ячейки Бравэ применим исключительно к выбранной исследователем ячейке. Решетка – как обратная, так и прямая – это свойство кристалла и не относится к какой-либо схеме Бравэ.

Кроме этого, рефлекс, запрещенный, т. е. подчиняющийся правилу погасания, в одной из выбранных схем ячейки Бравэ, запрещен и в любой другой схеме, например, рефлекс с индексами $\{100\}$ в F - и I -ячейках отсутствует. Его нет и в случае ячейки P -типа. Но в таких ячейках все индексы разрешены, узел с $|r^*| = \frac{1}{d}(100)$.

Следовательно, такой узел, запрещенный при каком-либо выборе ячейки, равнозначен любой точке вне узлов решетки. Таким образом, необходимо от параметра обратной ячейки $(\vec{a}_j^* \cdot \vec{a}_k) = \delta_{jk}$ переходить к параметру суперъячейки $\vec{a}_s^* = n(\vec{a}^* \cdot \vec{a})$.

Для F и I - типов ячеек Бравэ $ГЦК$ -типа $n = 2$. Это следует учитывать, например, при анализе дисперсионных соотношений, при использовании теоремы Блоха и условий Борна – Кармана как следствия этой теоремы и др.

Результаты исследований могут быть использованы в теории и практике структурного анализа.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шаскольская, М. П. Кристаллография : учеб. пособие для втузов / М. П. Шаскольская. – 2-е изд., перераб. и доп. – М., : Высш. шк., 1984. – 376 с.
2. Лиопо, В. А. Матричная кристаллография / В. А. Лиопо. – Гродно : Изд-во ГрГУ, 1998. – 78 с.
3. Бокий, Г. Б. Кристаллохимия : учеб. пособие для вузов / Г. Б. Бокий. – М. : Наука, 1971. – 400 с.

4. Вайнштейн, В. Б. Современная кристаллография / В. Б. Вайнштейн. – М. : Наука, 1979. – Т. 1. – 384 с.
5. Ladd, M. Structure Determination by X-ray Crystallography / M. Ladd, R. Palmer. – Berlin : Springer, 2013. – 756 p.
6. Суперъячейка обратной решетки кристаллов / В. А. Лиопо [и др.] // Весн. Брэсц. ун-та. Сер. 4, Фізика. Матэматыка. – 2017. – № 2. – С. 47–57.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 18.10.2019

Liopo V. A., Liaushuk I. A., Auchynnikau Y. V., Sabutz A. V., Sekerzhitski S. S. Influence of Cell Choice in Crystal on Reciprocal Lattice Cell

Three any non-coplanar lattice vectors of the crystal connecting adjacent homologous points form a lattice cell with the basis $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. In any lattice it is possible to construct various cells in which there can be one homologous point (P-cell), two homologous points (I), (C(AB))-cells, four homologous points (F-cell) and even eight homologous points (diamond-like cell). Each cell of the crystal lattice is associated with a lattice in the reciprocal space. The cell of the reciprocal lattice is connected to the cell of the direct lattice. The transition method between various cells of direct and reciprocal space is analysed. It is shown that the most complete description of the reciprocal lattice follows when choosing P-cell, in all other cases in the reciprocal lattice there are knots with zero «weight» which actually do not make sense.

УДК 535.4

В. Н. Навныко¹, М. А. Аманова², В. В. Шепелевич³, В. В. Юдицкий⁴¹канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. теоретической физики и прикладной информатики
Мозырского государственного педагогического университета имени И. П. Шамякина²аспирант каф. теоретической физики и прикладной информатики

Мозырского государственного педагогического университета имени И. П. Шамякина

³д-р физ.-мат. наук, проф., проф. каф. теоретической физики и прикладной информатики
Мозырского государственного педагогического университета имени И. П. Шамякина⁴инженер лаборатории автоматизации электротехнического оборудования

РУП «БелТЭИ» Министерства энергетики Республики Беларусь

e-mail: 1valnav@inbox.ru

ИЗМЕНЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ ОБРАТНОГО ТЕНЗОРА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ КРИСТАЛЛА $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА

Изучено изменение компонентов обратного тензора диэлектрической проницаемости кубических фоторефрактивных кристаллов класса симметрии 23 под действием электрического поля пространственного заряда объемной голографической решетки. При расчетах принимались во внимание первичный и вторичный электрооптические эффекты. Построены поверхности нормальной составляющей обратного тензора диэлектрической проницаемости кристалла $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ для типичных ориентаций вектора напряженности электрического поля пространственного заряда в кристаллографической системе координат, используемых при записи голографических решеток. Получены сечения поверхностей и определены кристаллографические направления, вдоль которых достигаются экстремальные значения нормальной составляющей обратного тензора диэлектрической проницаемости. Показано, что при фиксированном направлении вектора напряженности электрического поля пространственного заряда вторичный электрооптический эффект может обуславливать как увеличение, так и уменьшение нормальной составляющей обратного тензора диэлектрической проницаемости.

Введение

Экспериментальное наблюдение изменения показателя преломления в кристаллах LiNbO_3 и LiTaO_3 под действием светового излучения впервые описано в [1]. Первоначально фотоиндуцированное изменение показателя преломления рассматривалось как ухудшение оптических характеристик кристалла. После изучения физического механизма фотоиндуцированного изменения показателя преломления в более поздних работах [2–4] этот феномен стал называться фоторефрактивным эффектом и рассматриваться в качестве одного из механизмов записи объемных голограмм в кристаллах. Теория фоторефрактивного эффекта и феноменологическая модель формирования электрического поля пространственного заряда голографической решетки (далее – электрическое поле), основанные на предположении о фотоиндуцированном перераспределении носителей заряда между дефектными центрами внутри кристалла, в наиболее подробном варианте представлены в [5; 6].

В работе [7] впервые было высказано предположение о существовании дополнительного механизма фоторефракции. Суть его заключается в появлении механических деформаций кристалла, которые индуцируются посредством обратного пьезоэлектрического эффекта под действием электрического поля. Возникающие деформации за счет фотоупругого эффекта обуславливают дополнительную модуляцию обратного тензора диэлектрической проницаемости кристалла. Совместное действие обратного пьезоэлектрического эффекта и фотоупругости далее будем называть вторичным электрооптическим эффектом.