

УДК 538.9

**В. А. Лионо¹, И. А. Лявшук² Е. В. Овчинников³,
А. В. Сабуть⁴, С. С. Секержицкий⁵**

¹д-р физ.-мат. наук, проф., проф. каф. теоретической физики и теплотехники

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

²ст. преподаватель каф. информационных систем и технологий

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

³д-р техн. наук, доц., зам. декана по научной работе

факультета инновационных технологий машиностроения

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

⁴канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. теоретической физики и теплотехники

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

⁵канд. 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 (P-ячейка), две гомологичные точки (I), (C(AB)-ячейка), 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 P-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 α, β, γ , обозначение которых по международному стандарту приведено на рисунке 1.

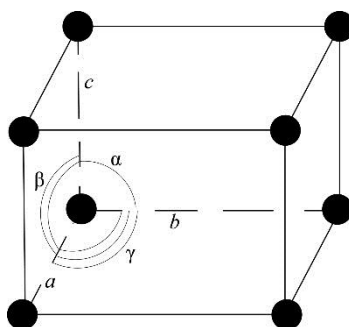


Рисунок 1. – Ячейка решетки кристалла

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 λ – длина волны рентгеновского излучения, θ – угол, равный $\theta = \frac{\varphi}{2}$, где φ – 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, α_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 (α, β, γ) 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. $r^* = d^{-1}$.

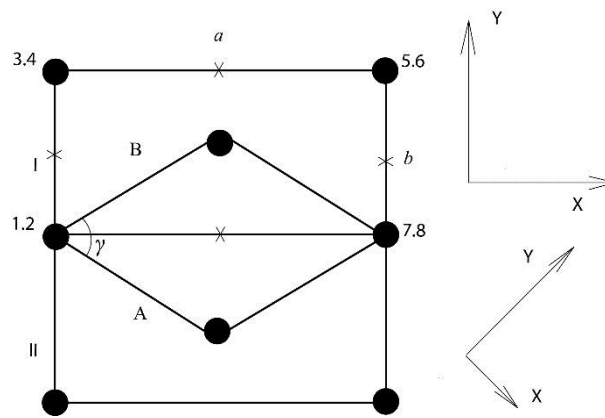
Межплоскостное расстояние определяется по формуле (2) и абсолютно не зависит ни от (hkl) , ни от типа ячейки Бравэ кристалла. Если перечисленные требования к выбору ячейки кристалла дополнить двумя условиями (объем ячейки должен быть наименьшим, как и число гомологичных точек в ячейке), то в этом случае 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]:

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

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:

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

т. е. преобразование координат узлов решетки имеет вид:

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

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:

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

Следовательно:

$$\begin{cases} h = H + K \\ k = H - K \end{cases} \quad (19)$$

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

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 .

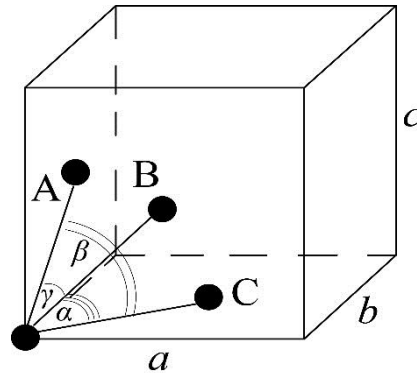


Рисунок 3. – Примитивная ячейка, выделенная в структуре F -ячейки ромбического кристалла

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:

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

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:

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

т. е.:

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

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 $n = 1$.

Заклучение

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