

Определение индексов Миллера для плоскостей и направлений в кристаллических решетках

Кристаллическая структура – внутреннее состояние твердых тел, способ взаимного расположения атомов, ионов или молекул, из которых состоит тело. Кристаллическая структура описывается параметрами кристаллической решетки и её дефектов. Она определяет свойства и внешний облик кристаллов. Термины кристаллическая структура и кристаллическая решетка – разные. Первый термин относится к реальной картине атомного строения кристалла, а второй – к геометрическому образу, описывающему трехмерную периодичность в размещении атомов, ионов или молекул в кристаллическом пространстве. Существует огромное количество разнообразных кристаллических структур, которым соответствует всего лишь 14-ть элементарных ячеек, решеток Бравэ. Поэтому одна и та же ячейка Бравэ может описывать различные на первый взгляд кристаллические структуры.

Кристаллическая решетка – пространственная структура, которую формируют частицы, образующие кристаллы. Основу кристаллической решетки составляет элементарная решетка определенной геометрической формы, в вершинах, узлах, которой расположены атомы, молекулы или ионы. Кристаллическая решетка представляет собой правильное расположение атомов, ионов или молекул, присущее веществу в кристаллическом состоянии, и характеризуется периодической повторяемостью в трёх измерениях. Ввиду такой периодичности для описания кристаллической решетки достаточно знать размещение атомов в **элементарной ячейке**, повторением которой путём параллельных дискретных переносов, **трансляций**, образуется вся структура кристалла. В соответствии с симметрией кристалла элементарная ячейка имеет форму косоугольного или прямоугольного параллелепипеда, квадратной или шестиугольной призмы, или куба. Размеры рёбер элементарной ячейки **a**, **b**, **c** называются периодами кристаллической решетки.

Элементарная ячейка кристалла – минимальный воображаемый объём кристалла, параллельные переносы, трансляции, которого в трёх измерениях позволяют как из «кирпичиков» построить трёхмерную кристаллическую решётку в целом. Содержимое элементарной ячейки позволяет охарактеризовать всю структуру кристаллического твердого тела. Часть структуры, охватываемая элементарной ячейкой, состоит из регулярно расположенных атомов, удерживаемых вместе благодаря силам взаимодействия, при этом атомы из смежных ячеек связаны также между собой. Такие ячейки, бесконечно повторяющиеся в трехмерном пространстве, образуют кристалл. Элементарная ячейка не является физическим телом, ее

можно передвигать по структуре параллельно самой себе. При этом независимо от выбора начала координат ячейка будет содержать те же атомы в прежних количествах, так как структура является периодической. Элементарная ячейка представляет собой такой минимальный период в трех направлениях.

Применяемые в кристаллографии элементарные ячейки имеют вид параллелепипедов, их форма и размер определяются заданием трех некопланарных, не лежащих в одной плоскости векторов, трансляций решетки, т. е. трех ребер ячейки. Ячейка полностью определяет кристаллическую решетку. Но в одной и той же решетке выбор ячейки может совершаться по-разному. Ячейка, построенная на трех кратчайших некопланарных трансляциях решетки, называется основной ячейкой. Объем такой ячейки минимален, она содержит всего один узел кристаллической решетки, и относится поэтому к примитивным ячейкам. Нередко такая ячейка оказывается низкосимметричной, но при том симметрия самой структуры выше. В таком случае выбирают другую, высокосимметричную ячейку большего объема, с дополнительными узлами решетки (непримитивная, или центрированная ячейка).

Ячейка, обладающая симметрией структуры и имеющая минимальный объем из всех ячеек такого же качества, называется характеристической ячейкой, или **ячейкой Браве**. О.Браве установил, что существует всего 14-ть типов характеристических ячеек; часть из них - примитивные, часть - центрированные. Размеры элементарных ячеек в разных минералах различные и зависят от размеров, числа и взаимного расположения атомов, ионов или молекул в структуре. Параметры ячейки измеряются в нанометрах ($1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$). Составленные вместе элементарные ячейки кристалла плотно и без зазоров заполняют объём, образуя кристаллическую решётку.

Кристаллы подразделяются по признаку симметрии элементарной ячейки, которая характеризуется соотношением между ее ребрами и углами. При помощи рентгеноструктурного анализа можно определить размеры элементарной ячейки кристаллического материала, его сингонию, вид симметрии и пространственную группу симметрии, а также идентифицировать кристаллическую структуру.

Узлы кристаллической решетки - точки, в которых размещены ионы, атомы или молекулы, образующие кристаллическое тело.

Радиус-вектора, направления трансляции – это три вектора $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, позволяющие построить бесконечную пространственную решетку, называются **векторами трансляции**. Примитивная ячейка образуется именно этими векторами трансляции $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, которые выступают в

качестве ребер. Если в элементарной ячейке находится несколько атомов (узлов), то решетка такого вида называется решеткой с базисом, который может соответствовать точкам, узлам, **A**, **B**, или **C**.

Радиус-вектор любого узла кристаллической решетки можно представить следующим образом:

$$\vec{R} = n\vec{a} + m\vec{b} + p\vec{c}, \quad (1)$$

где **n**, **m**, **p** - произвольные целые числа.

Кристаллографическое направление – это прямая, проходящей не менее чем через два узла решетки. Направления в кристаллах принято характеризовать символом узла, через который проходит данная узловая прямая и ближайшего к узлу, где находится начало системы координат: **[mnp]**.

Индексы Вейса – кристаллографические индексы, характеризующие направление векторов решётки. Индексы записывают как группы чисел, заключённые в квадратные скобки, например [110], [101], [101], [111] и др. Запись вида **[mnp]** означает, что вектор решётки имеет вид (1).

Кристаллографическая плоскость - это плоскость, проходящая не менее чем через три узла решетки, не лежащие на одной прямой. Система параллельных кристаллографических плоскостей, расположенных на одинаковом межплоскостном расстоянии **d** друг от друга, образует семейство плоскостей. Любая пространственная решетка может быть представлена семействами узловых плоскостей неограниченным числом способов. Для обозначения направлений и плоскостей в кристалле используются **индексы Миллера**.

Индексы Миллера – кристаллографические индексы, характеризующие расположение атомных плоскостей в кристалле. Индексы Миллера связаны с отрезками, отсекаемыми выбранной плоскостью на трёх осях кристаллографической системы координат. Таким образом, возможны три варианта относительного расположения осей и плоскости, представленных на рис.1:

- плоскость пересекает одну ось и параллельна двум другим
- плоскость пересекает две оси, а третьей параллельна
- плоскость пересекает все три оси.

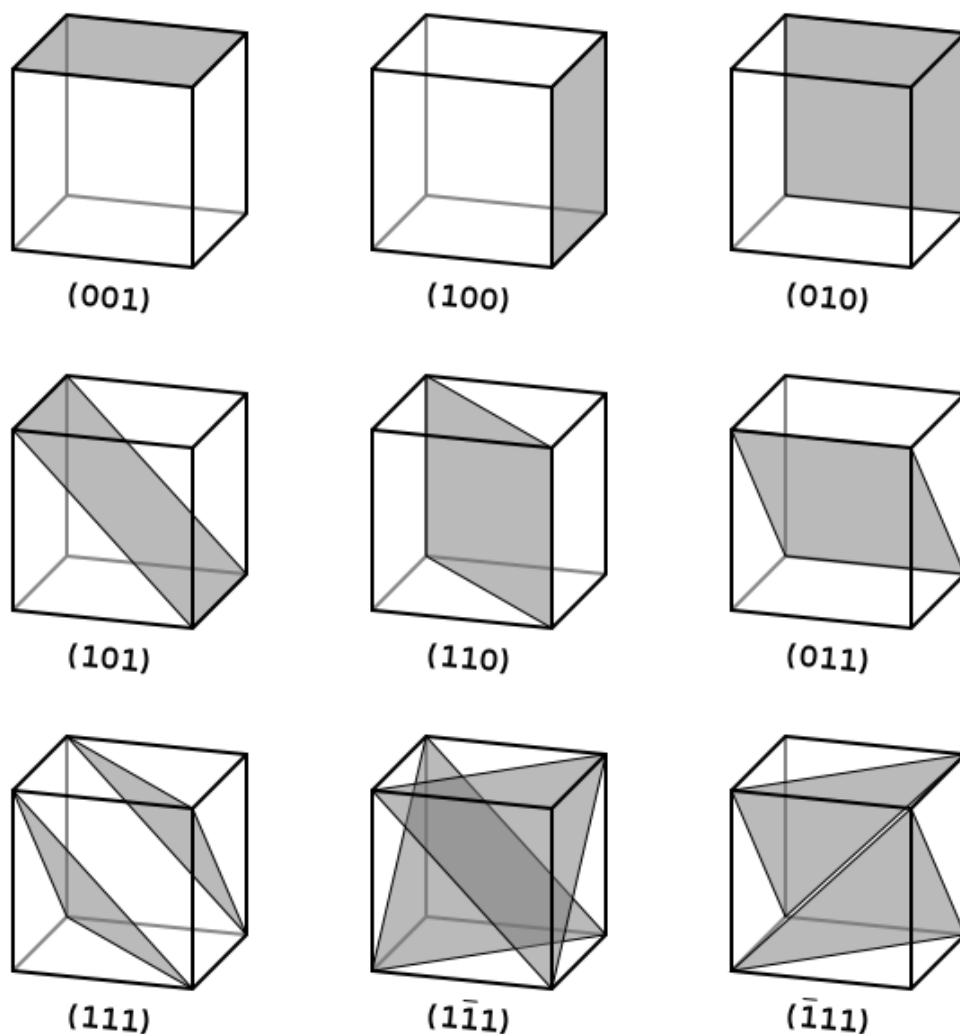


Рис.1. Ориентация кристаллографических плоскостей в кубических ячейках

Определение индексов Миллера. Индексы Миллера выглядят как три взаимно простых целых числа, записанные в круглых скобках: (111) , (101) , (110) , ... Семейство параллельных кристаллографических плоскостей характеризуется тремя простыми числами (hkl) – индексами Миллера, которые удовлетворяют соотношению: $(a/x):(b/y):(c/z) = h:k:l$, где x, y, z – длины отрезков, отсекаемых плоскостью (hkl) , ближайшей к началу координат, на осях, параллельных ребрам элементарной ячейки. Если плоскость пересекает ось в области отрицательных значений, координат, то над соответствующим индексом Миллера ставится черта. Индексы Миллера $(h\ k\ l)$ определяют кристаллографическую ориентацию плоскости, т.е. они задают семейство параллельных плоскостей. На рис. 2 приведены символы основных плоскостей в кубической решетке.

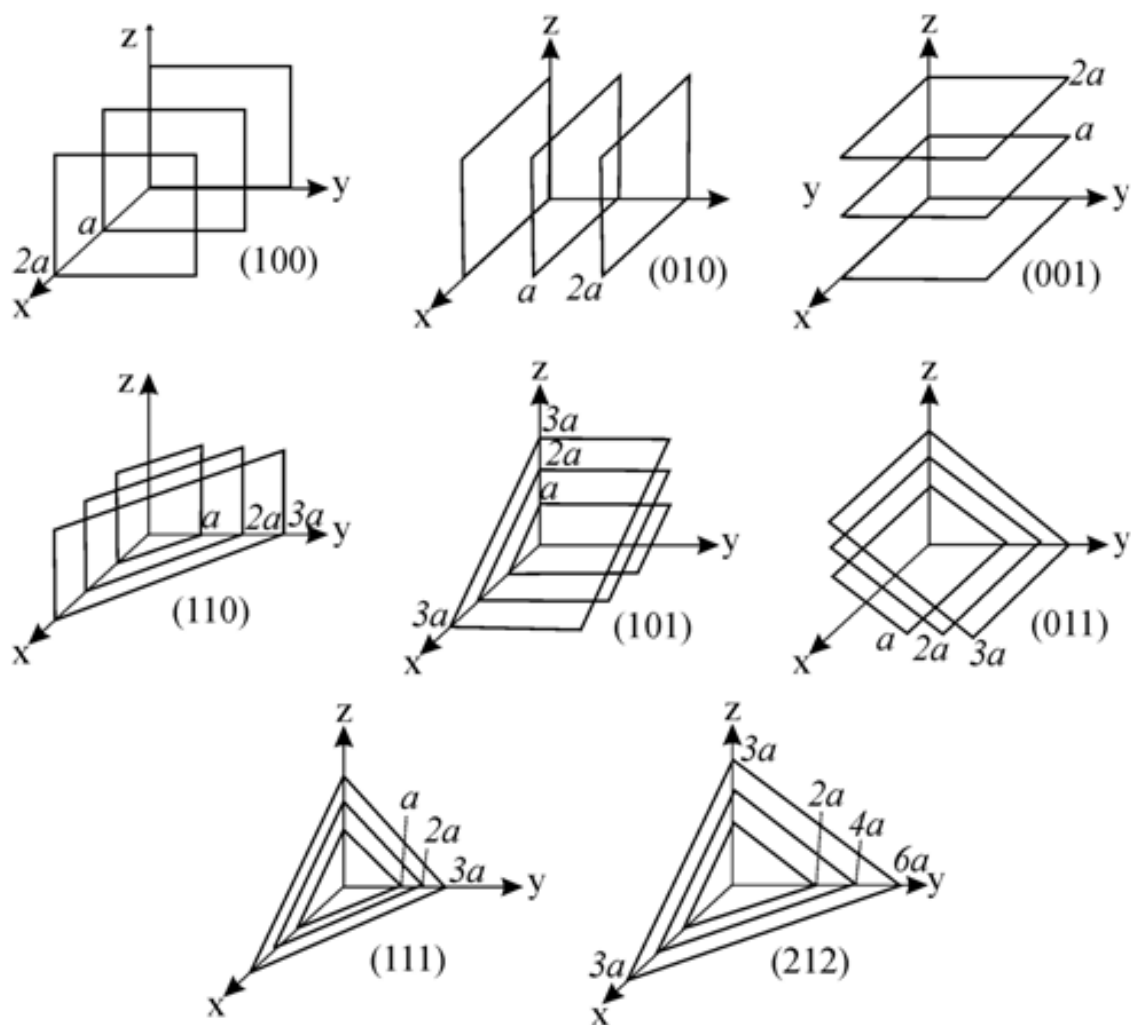


Рис. 2. Символы основных плоскостей в кубической решетке

Как определить индексы Миллера? Из курса геометрии известно, что положение и ориентация плоскостей определяется заданием координат трех точек, не лежащих на одной прямой. В кристаллической решетке точками служат узлы-атомы, ионы или молекулы. Например, если эти точки имеют координаты $(3,0,0)$, $(0,1,0)$, $(0,0,2)$ в единицах постоянной решетки a , то плоскость может быть охарактеризована тремя числами 3, 1, 2. Для нахождения индексов Миллера нужно сначала найти точки, в которых плоскость пересекает кристаллографические оси, и координаты этих точек выразить в единицах постоянной решетки a .

В примере на рис. 3 это **3, 1 и 2**. Теперь возьмем обратные значения полученных чисел – это $1/3$, 1 , $1/2$ и приведем их к общему знаменателю, в нашем случае это цифра **6**, то есть соответственно получаем $2/6$, $6/6$, $3/6$. Числа, полученные в числителе дроби, после указанных преобразований и будут **индексами Миллера**. Их изображают в круглых скобках, для плоскости, изображенной на рис. 3, индексы Миллера выглядят так: **(263)**. Если индекс Миллера принимает отрицательное значение, то его изображают

цифрой с верхним подчеркиванием, например $(\bar{2}31)$. Когда плоскость параллельна оси координат, то соответствующий индекс Миллера равен нулю.

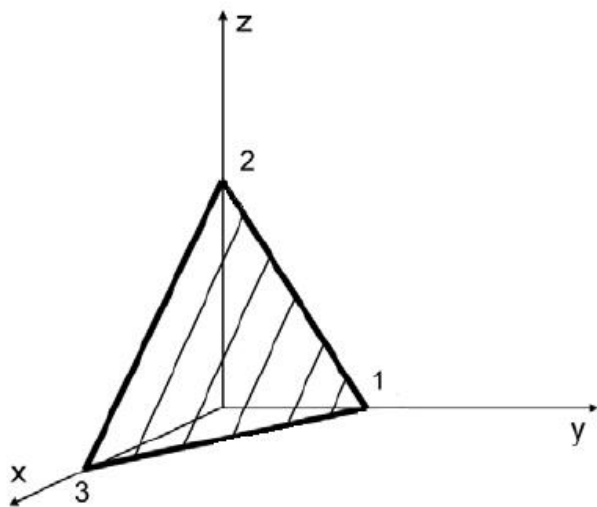


Рис. 3. Кристаллографическая плоскость с индексами Миллера (263)