

Лабораторна робота № 2

ВИБІР КООРДИНАТНИХ СИСТЕМ ДЛЯ ОПИСУ КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКІВ І МЕТОД ІНДЕКСУВАННЯ ГРАНЕЙ КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКІВ

Мета роботи – навчитись на моделях кристалічних многогранників вибирати кристалографічні координатні системи та описувати в них грані многогранників за допомогою метода індексування.

Основні теоретичні відомості

Для опису будь-якого кристалічного многогранника можна використовувати дві координатні системи: полярну та спеціальну.

Полярна система координат застосовується для визначення координат точок будь-якого кристала за допомогою двох координат – довготи (φ), яка визначається кутом між площиною нульового меридіана і площиною меридіана, який проходить через задану точку та полярною відстанню (ρ). Ця координата є кутом між північним полюсом сфери та заданою точкою.

Спеціальна система координат – кристалографічні – застосовується для певної групи (сингонії) кристалів. Кожна зі спеціальних координатних систем забезпечує максимальну простоту опису кристалів відповідної симетрії. Так як для координатних напрямків спеціальних координатних систем вибирають або певні елементи симетрії самих многогранників (осі симетрії, нормалі до площин симетрії), або напрямки ребер, то ці системи називають природними.

Початок координат в таких системах завжди знаходиться у середині кристалічного многогранника і співпадає або з центром симетрії, або, за відсутності першого, з центром мас. Ці системи координат є правими. Вісь

OX завжди направлена на дослідника, вісь OY – у право, вісь OZ – догори. Осі мають як додатні, та і від’ємні напрямки.

Спеціальні системи координат для кожної сингонії характеризуються метрикою, до якої входять одиничні відрізки по координатних осях a , b , c та кути між осями α , β , γ (рис. 5).

Триклинна (тричі косокутна, клинео (грец.) – нахил) кристалографічна система координат дуже зручна для опису найбільш низькосиметричних кристалів. Ця координатна система характеризується неоднаковими (і непрямыми) кутами α , β , γ між осями координат OX , OY , OZ ($\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$), а також нерівними осьовими (масштабними) одиницями ($a \neq b \neq c$).

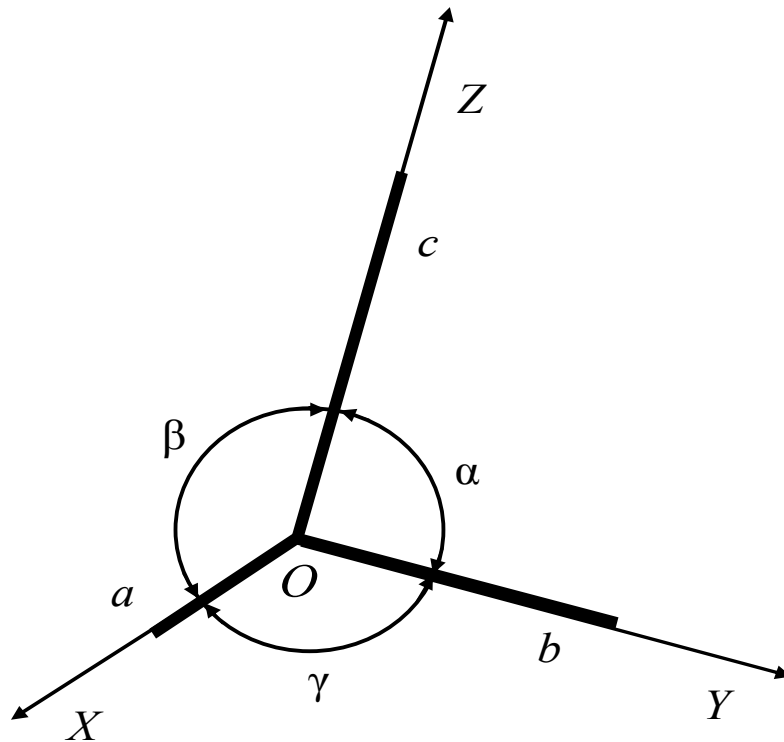


Рисунок 5 – Загальний вигляд кристалографічної системи координат

У *моноклінній* координатній системі (моно (грец.) – один) один кут (β) не прямий, а два інші кути між осями координат (α та γ) – прямі ($\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$; $a \neq b \neq c$).

У *ромбічній* координатній системі всі кути між осями координат – прямі ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$), а осьові одиниці нерівні ($a \neq b \neq c$). Часто цю систему називають орторомбічною (ортогональною ромбічною).

Тетрагональна координатна система є також ортогональною ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$), дві осьові одиниці збігаються ($a = b \neq c$).

Тригональна координатна система характеризується наявністю чотирьох координатних осей. Між трьома осями OX , OY , OZ , що лежать в одній площині, кут складає 120° , а вісь OZ перпендикулярна до цих трьох осей ($\alpha = \beta = \delta = 120^\circ$, $\gamma = 90^\circ$). Для осьових відрізків діє співвідношення $a = b = w \neq c$. Ідентична система координат приймається для *гексагональної* сингонії (рис. 6).

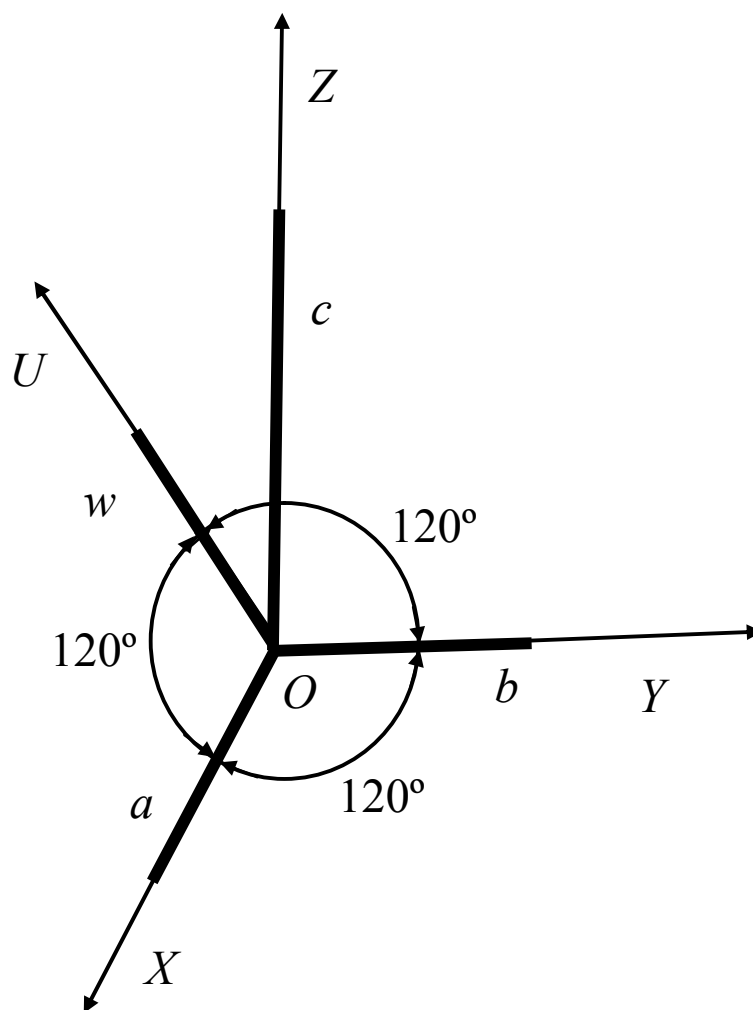


Рисунок 6 – Система координат для тригональної та гексагональної сингоній

Кубічна координатна система (найбільш широко відома під назвою декартової) є ортогональною ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$), рівноосьовою ($a = b = c$) і застосовується для опису найбільш високосиметричних кристалів.

Для опису граней кристалічних многогранників застосовується метод кристалографічного індексування, зручний для всіх кристалографічних систем координат незалежно від того, прямокутні вони чи косокутні, однакові в них масштабні відрізки по осях чи різні.

При індексуванні кожна грань кристалу характеризується певним набором індексів – символом грані.

Якщо грань $A_0B_0C_0$ вибрати за одиничну, то її параметри OA_0 , OB_0 , OC_0 (одиничні відрізки) вважаються одиницями вимірювання по відповідних осях – осьові одиниці (рис. 7). У загальному випадку вони можуть бути не однаковими ($OA_0 \neq OB_0 \neq OC_0$). Осьові одиниці позначають: по осі X – a , по осі Y – b , по осі Z – c . Отже, положення грані $A_0B_0C_0$ визначається параметрами a , b , c ; положення грані $A_1B_1C_1$ – $2a$, $2b$, $3c$; $A_2B_2C_2$ – $3a$, $3b$, $2c$.

Індекси грані ABC (індекси Міллера) – три цілі числа h , k , l , що визначаються як обернені величини до параметрів грані:

$$h:k:l = \frac{1}{a} : \frac{1}{b} : \frac{1}{c}.$$

Параметри грані a , b , c можуть приймати значення від $-\infty$ до $+\infty$, у той час як індекси h , k , l можуть приймати будь-які від'ємні або додатні значення, як правило, виражені малим, однозначним числом, в тому числі – нулем. Рівність нулю того або іншого індексу показує, що дана грань паралельна відповідній осі координат.

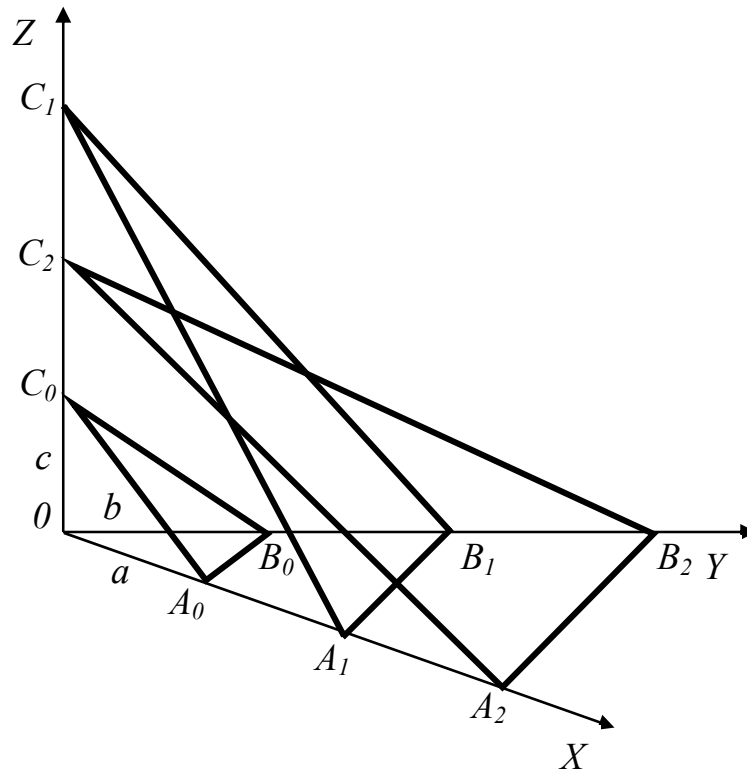


Рисунок 7 – Розташування граней $A_0B_0C_0$, $A_1B_1C_1$, $A_2B_2C_2$ в системі координат OX , OY , OZ

Індекси Міллера показують, що площина ABC поділяє одиничний відрізок по осі OX на h частин, по осі OY на k частин, по осі OZ на l частин.

Три індекси, взяті у круглі дужки (hkl) , називаються символом грані ABC . Грані кристала, які пов'язані тими або іншими елементами симетрії (і тому мають однакові розміри і форму), мають однотипні символи, тобто такі, що відрізняються лише знаками індексів та порядком їхнього запису в символі грані.

Абсолютні значення осьових одиниць визначають за даними рентгеноструктурного аналізу.

Порядок виконання роботи

- 1) Визначити елементи симетрії кристалічного многогранника.
- 2) Визначити сингонію та категорію кристалічного многогранника.
- 3) Вибрати спеціальну координатну систему для відповідної сингонії.

Рекомендації щодо вибору напрямків координатних осей у кристалічних многогранниках різних сингоній:

кубічна – за осі координат приймають три взаємно перпендикулярних осі $3L_4$ або $3L_4$, а у випадку їх відсутності – $3L_2$;

гексагональна і тригональна – за вісь OZ приймають L_6 або L_6 (гексагональна сингонія), L_3 або L_3 (тригональна), за осі OX , OY , OU – горизонтальні осі L_2 , а за їх відсутності – нормалі до вертикальних площин симетрії, за відсутності останніх – три горизонтальних ребра, розташованих під кутом 120° ;

тетрагональна – за вісь OZ , приймають L_4 або L_4 , за осі OX і OY – взаємно перпендикулярні горизонтальні осі L_2 , а за їх відсутності – нормалі до вертикальних взаємно перпендикулярних площин симетрії, за відсутності останніх – два горизонтальних взаємно перпендикулярних ребра;

ромбічна – три взаємно перпендикулярні осі $3L_2$, за їх відсутності єдина вісь L_2 приймається за OZ , а нормалі до двох взаємно перпендикулярних площин симетрії – за осі OX і OY ;

моноклинна – за вісь OY приймають L_2 або нормаль до площини симетрії, за осі OX і OZ – два ребра, розташовані перпендикулярно до OY ;

триклинна – напрямки трьох не компланарних ребер.

4) Розбити всі наявні грані кристалічного многогранника на групи, у які входять грані однакової форми й однакового розміру.

5) Визначити символи граней кристалічного многогранника, записуючи їх в окремі групи відповідно до п. 4. Для спрощення запису відрізки, що відтинаються на координатних осях, приймаються рівними одиниці.

Приклад. На рисунку 8 зображено кристалічний многогранник у вигляді тетрагональної призми.

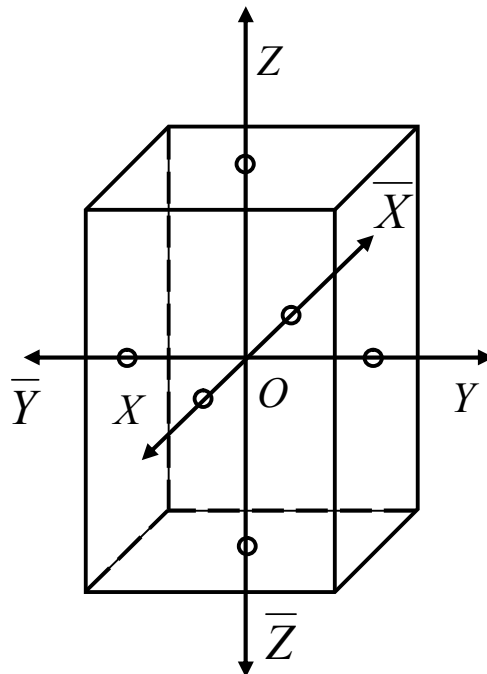


Рисунок 8 – Установка кристалів тетрагональної сингонії

Елементи симетрії цього кристалічного многогранника L_4L_25PC .

Вибираємо спеціальну координатну систему для тетрагональної сингонії. Вісь OZ – вісь L_4 ; осі OX і OY – дві взаємно перпендикулярні координатні осі L_2 . Грані кристалічного многогранника складають дві групи. У першу входять чотири вертикальні грані, а в другу – дві горизонтальні.

Записуємо символи граней кристала по групах:

I група	II група
(100)	(001)
($\bar{1}00$)	(00 $\bar{1}$)
(010)	
(0 $\bar{1}0$)	

Під час запису символу грані на першому місці ставлять індекс по осі OX , на другому – по осі OY , на третьому – по осі OZ . Для гексагональної і тригональної сингонії символ грані складається з чотирьох індексів (на третьому місці стоїть індекс по осі OU , а на четвертому – по осі OZ).

Контрольні питання

- 1) Скільки типів координатних систем застосовується в кристалографії?
- 2) Особливості моноклінної координатної системи.
- 3) Що таке параметри площини a, b, c ?
- 4) Що таке індекси площини h, k, l ?