

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНА МЕТАЛУРГІЙНА АКАДЕМІЯ  
УКРАЇНИ**

**К. І. УЗЛОВ**

**КРИСТАЛОГРАФІЯ, КРИСТАЛОХІМІЯ ТА  
МІНЕРАЛОГІЯ**

**ЧАСТИНА І**

Друкується за Планом видань навчальної та методичної літератури,  
затвердженим Вченою радою НМетАУ  
Протокол № 1 від 26.01.2015

**Дніпропетровськ НМетАУ 2015**

УДК 548:549:548.3(075.8)

Узлов К.І. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія. Частина І: Конспект лекцій. – Дніпропетровськ: НМетАУ, 2015. – 36 с.

Містить основні поняття і визначення кристалографії, кристалохімії та мінералогії. Розглянуті найважливіші властивості кристалів, формули симетрії, кристалографічні категорії та сингонії, закони та елементи геометричної кристалографії, атомні та іонні радіуси, ґратки Браве, координаційні числа та координаційні радіуси, типи кристалічних структур, дефекти структури, генезис, зростання та морфологія кристалів, властивості мінералів та їх класифікація.

Наведено приклад практичного застосування методу симетрії для аналізу фазових складових мікроструктур промислових сплавів.

Призначений для студентів спеціальності – 132 матеріалознавство.

Іл. 15. Табл. 3. Бібліогр.: 9 найм.

Друкується за авторською редакцією.

Відповідальний за випуск К.І. Узлов, д-р техн. наук, проф.

Рецензенти: Л.М. Дейнеко, д-р техн. наук, проф. (НМетАУ)  
Д.В. Лаухін, д-р техн. наук, проф. (ДВНЗ ПДАБА)

© Національна металургійна академія  
України, 2015

© Узлов К.І., 2015

## ЗМІСТ

	Стор.
<b>ВСТУП</b> .....	4
<b>1 КРИСТАЛОГРАФІЯ</b> .....	6
1.1 Коротка історична довідка .....	6
1.2 Основні поняття, визначення, предмет та задачі кристалографії .....	7
1.2.1 Предмет та задачі кристалографії .....	7
1.2.2 Поняття про кристал та кристалічну речовину .....	8
1.2.3 Найважливіші властивості кристалів .....	8
1.2.4 Види твердої речовини та рідкі кристали .....	9
1.3 Геометрична кристалографія .....	12
1.3.1 Симетрія кристалів .....	12
1.3.2 Елементи симетрії кристалічних багатогранників .....	13
1.3.3 Класи симетрії .....	15
1.3.4 Кристалографічні категорії, сингонії .....	17
1.3.5 Прості форми кристалів та їх комбінації .....	19
1.4 Закони геометричної кристалографії .....	23
1.5 Кристалографічні параметри Вейса та індекси площин Міллера. Міжплощинні відстані .....	24
1.6 Кристалографічні індекси площин та напрямків .....	26
1.7 Пряма та зворотна ґратки .....	29
1.8 Умови дифракції Лауе. Практичне використання понять прямої та зворотної ґраток .....	30
1.9 Принцип побудови стереографічної проєкції .....	32
<b>ЛІТЕРАТУРА</b> .....	35

## ВСТУП

Кристалографія – це наука про форму кристалів, їх симетрію, внутрішню будову, про умови структуроутворення та його впливу на властивості кристалів і кристалічних матеріалів.

Практично всі наукові та технічні досягнення сучасного матеріалознавства (комп'ютерна техніка, електронна мікроскопія, квазікристали, високотемпературні надпровідники і т.д.) безпосередньо пов'язані з кристалографією. Без знань кристалографічних законів важко зрозуміти та оцінити новітні наукові відкриття.

У становленні кристалографії як науки важливу роль зіграла геологія. Довгий час ця дисципліна була частиною геології, точніше мінералогії. В подальшому кристалографія відокремилася в самостійну галузь знань. Як будь-яка наука, вона володіє унікальним, тільки їй притаманним методом симетрії, який є загальним інструментом встановлення закономірностей розвитку Землі, її речовин.

В кожному матеріальному об'єкті існують симетричні рівні структурної організації, які взаємодіють з іншими та проявляються в системі властивостей об'єкта та його взаємодії з середовищем. Симетрія системи може бути прихованою на глибинних рівнях структурної організації, «замаскована» випадковою дисиметрією форми.

Але симетрія є головною властивістю будь-якого кристалу. Використання законів симетрії складає основу всіх кристалографічних методів, що і робить кристалографію самостійною фундаментальною наукою.

Кристалографія у сучасному природознавстві впливає на загальні концепції пізнання природи і включає в себе пошук та знайдення невідомих раніше явищ і закономірностей, знаходження об'єктів з невідомими раніше властивостями, теоретичне обґрунтування, роз'яснення та передбачення явищ, властивостей, розвиток нових методів дослідження речовини, проектування нових кристалів. Прикладна кристалографія використовує фундаментальні положення для рішення конкретних завдань – створення нових матеріалів, освоєння нових виробничих процесів, технологій, вдосконалення методів вимірювань.

Навчальна дисципліна «Кристалографія, кристалохімія та мінералогія» є нормативною і входить до циклу дисциплін професійно-практичної підготовки.

*Мета вивчення дисципліни* – засвоєння знань та отримання навичок, необхідних для аналізу кристалічної структури та кристалохімічних властивостей об'єктів досліджень сучасного матеріалознавства, а також під час вивчення властивостей металів та сплавів, процесів структуроутворення, та під час експлуатації виробів з різних матеріалів.

*В результаті вивчення дисципліни студент повинен знати:*

- основні поняття про симетрію кристалів,
- метрику кристалу та типи сингоній,
- закони та елементи геометричної кристалографії,
- основні поняття про кристалографічну зону та умови зональності,
- основні кристалохімічні поняття про просторову ґратку та її елементи,
- зв'язок кристалографічних сингоній з ґратками Браве,
- типи кристалічних структур та типи хімічних зв'язків у кристалах,
- дефекти структури кристалів,
- основні поняття про будову літосфери та генезис мінералів,
- властивості мінералів та їх класифікацію.

*вміти:*

- визначати елементи та форми простих і складних багатогранників,
- ідентифікувати просторові багатогранники за сингоніями,
- визначати кристалографічні індекси площин та напрямків,
- побудувати стереографічну проекцію простої форми кристалу.

*Критерії успішності* – отримання позитивної оцінки при складанні контрольних робіт у тестовій формі та екзамену.

*Засоби діагностики успішності навчання* – комплект тестових завдань.

*Зв'язок з іншими дисциплінами* – дисципліна є однією з основоположних у підготовці бакалаврів, спеціалістів та магістрів напрямку «Інженерне матеріалознавство». Їй передують вивчення дисциплін «Фізика», «Хімія», «Нарисна геометрія та інженерна графіка».

Набуті знання і вміння використовуються при вивченні дисциплін «Матеріалознавство», «Механічні властивості матеріалів» та інш.

# 1 КРИСТАЛОГРАФІЯ

## 1.1 Коротка історична довідка

Каміння (мінерали) визначили цілу епоху розвитку людства. В «кам'яному віці» (18 ... 12 тисячоліття до н.е.) прадавня людина використовувала уламки каміння, що мали відповідні властивості для використання їх в якості скребків, ножів, топорців (сокир) і т. інш.

Експериментальним шляхом люди встановили властивість деяких мінералів шарувато сколюватись. Таке досягнення дозволило осмислено виготовляти кам'яні знаряддя праці.

Розкопки останнього етапу кам'яного віку (3-є тисячоліття до н.е.) виявили добре відшліфовані камені з поглибленнями, отворами, візерунками.

«Бронзовий вік» (3000 ... 1000 років до н.е.), а після нього і «Залізний вік» (~1000 років до н.е.) закономірно визначили зацікавленість у рудних матеріалах:

- міді – халькопірит, борніт, малахіт;
- олова – каситерит;
- заліза – гематит, магнетит і т. інш.

Перші наукові праці китайських, грецьких, арабських вчених (500 р. до н.е.) містили в собі опис 17 найбільш відомих мінералів.

До кінця 1-го тисячоліття н.е. з'явився опис 60 кристалів.

Перша наукова класифікація «гірничої породи» німецького вченого Георга Бауера (Агриколи) з'явилась тільки у 1546 році.

Історію кристалографії прийнято відлічувати від 1669 року, тобто, з моменту відкриття датськими вченими Н. Стенсенном та Е. Бартоліном закону сталості кутів в кристалі і явища подвійного заломлення світла в кристалах ісландського шпату.

Засновником російської школи мінералогії вважається М.В. Ломоносов (1711 ... 1765 рр.). Він склав перший в Росії каталог для Петровської Академії Наук. В його книзі 1763 року «Первые основания рудных дел» міститься опис 3000 зразків.

В 18-му та до кінця 19-го віку в значній мірі були гіпотетично встановлені основні положення сучасної кристалографії: 32 класи симетрії кристалів, 230 просторових груп симетрії кристалічних ґраток та інш. Сталось

це завдяки зусиллям таких всесвітньо відомих вчених як І. Гессель, Р.Ж. Гайюї, В. Волластон, О. Браве, П. Кюрі, Є.С. Федоров, А. Шонфліс.

Експериментальне підтвердження теорії кристалічних ґраток було отримано завдяки розвитку методів дифракції рентгенівських променів. В цьому напрямку, в першу чергу, слід виділити роботи М. Лауе, Ю.В. Вульфа, Г. та Л. Бреггів (початок ХХ-го століття).

## **1.2 Основні поняття, визначення, предмет та задачі кристалографії**

В грецькій мові «кристаллос» – лід, «графо» – опис. Греки вважали, що гірський кришталь (тобто, кварц) це лід, який з часом втратив здатність танути. Закономірно, що спадкоємці їх давньої культури латиняни словом «crystallus» називали і «лід» і «гірський кришталь».

**Кристалографія** – наука, що вивчає процеси утворення, форми, структури та фізико-механічні властивості кристалів.

### **1.2.1 Предмет та задачі кристалографії**

Кристалографія займається вивченням різноманіття кристалів. Вона виявляє ознаки і закони єдності в цьому різноманітті, досліджує властивості і структуру одиночних кристалів та кристалічних агрегатів.

Кристалографія вивчає явища що протікають в кристалах, взаємодію кристалів з середовищем, зміни, що відбуваються в кристалах під впливом зовнішніх і інших впливів. Тобто, в цій дисципліні:

«ПРЕДМЕТ» – кристали;

«МЕТОД» – використання симетрії;

«ЗАДАЧІ» – вивчення утворення, будови та властивостей кристалів не тільки ідеальних але і з реальною структурою.

Ці знання важливі, також, для синтезу сучасних штучних кристалів, які все більш затребувані в приладобудуванні, радіотехніці, технічній оптиці, акустиці та інш.

## 1.2.2 Поняття про кристал та кристалічну речовину

**Кристалами** називають тверді тіла, що мають форму природного багатогранника і характеризуються закономірним розташуванням в просторі елементарних часток – атомів, іонів, молекул.

Окремі цілісні кристали називають **монокристалами**.

Агрегати хаотично орієнтованих дрібних кристалів різного розміру і неправильної форми називають **полікристалами**.

**Кристалічний стан** завжди термодинамічно рівноважний.

**Основною властивістю** кристалічного стану є наявність правильного, впорядкованого та симетричного розташування матеріальних часток в просторі.

Кожна кристалічна речовина фіксованого хімічного складу має визначену **кристалічну структуру**.

Закономірність розташування часток, їх природа, їх енергетичні характеристики та сили зв'язку визначають **фізичні властивості кристалічної речовини**.

**Кристалічна структура** – конкретне розташування матеріальних часток у просторі, симетрія і закони цього розташування.

## 1.2.3 Найважливіші властивості кристалів

З макроскопічної точки зору кристалічна речовина має три основні властивості:

- однорідність;
- анізотропність;
- здатність самоогранятися.

**Однорідність (ізотропність)** – властивість фізичного тіла бути однаковим у всьому об'ємі. Проявляється в тому, що два однакових елементарних об'єму кристалічної речовини, однаково орієнтовані в просторі, але обрані в різних точках тіла, абсолютно однакові.

**Анізотропність (відмінність властивостей у різних напрямках)** – особливість однорідного тіла, що полягає в тому, що властивості тіла однакові по паралельним напрямкам але не однакові по непаралельним їм.

Анізотропність – закономірне явище обумовлене решітчною будовою. Теплове розширення графіту вздовж вертикальної осі в 14 разів більше, ніж в



поперечному напрямку. Кальцит ( $\text{CaCO}_3$ ) в поздовжньому напрямку при нагріванні розширяється, в поперечному стискається. Анізотропія механічних властивостей також очевидна. Приклад: слюда, гіпс, графіт – розщеплюються на тонкі пластинки, внаслідок шаруватої структури їх ґратки.

**Здатність самоогранятися** – властивість кристалів приймати багатогранну специфічну форму при стаціонарних умовах їх росту.

Багатогранність кристалів визначається неоднаковістю швидкості їх росту в різних напрямках по різних площинах. Характер самоогранки визначається внутрішньою кристалічною структурою речовини.

#### 1.2.4 Види твердої речовини та рідкі кристали

**Аморфні тверді речовини (скло)** – при нагріванні розм'якшуються, втрачають в'язкі властивості і поступово переходять в рідкий стан (рис. 1.1, крива **а**). Температуру плавлення такої речовини визначити неможливо. «Аморфний» в перекладі з грецької мови означає «безформний».

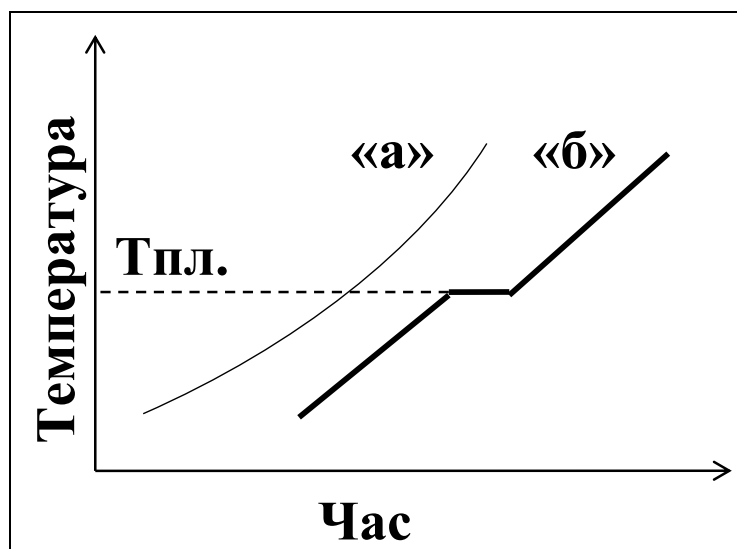


Рисунок 1.1 – Криві нагріву аморфних (а) та кристалічних (б) тіл

За своєю структурою скло подібне до рідини (рис. 1.2 в, г), але зі зниженою рухливістю матеріальних часток. Розташування матеріальних часток в аморфних тілах не впорядковане (рис. 1.2 г) в масштабі «дальнього порядку».

Аморфній твердій речовині притаманний «ближній порядок» в локальних об'ємах.

**Кристалічні тіла** характеризуються зупинкою на кривій «час – температура». Весь процес плавлення, в даному випадку (рис.1.1, крива **б**), відбувається при постійній температурі.

Цей ефект пов'язаний з руйнуванням впорядкованої будови кристалічної ґратки (рис. 1.2 а та рис. 1.3) і переходом речовини в рідкий стан (рис. 1.2 в) з неупорядкованим розташуванням матеріальних часток речовини.

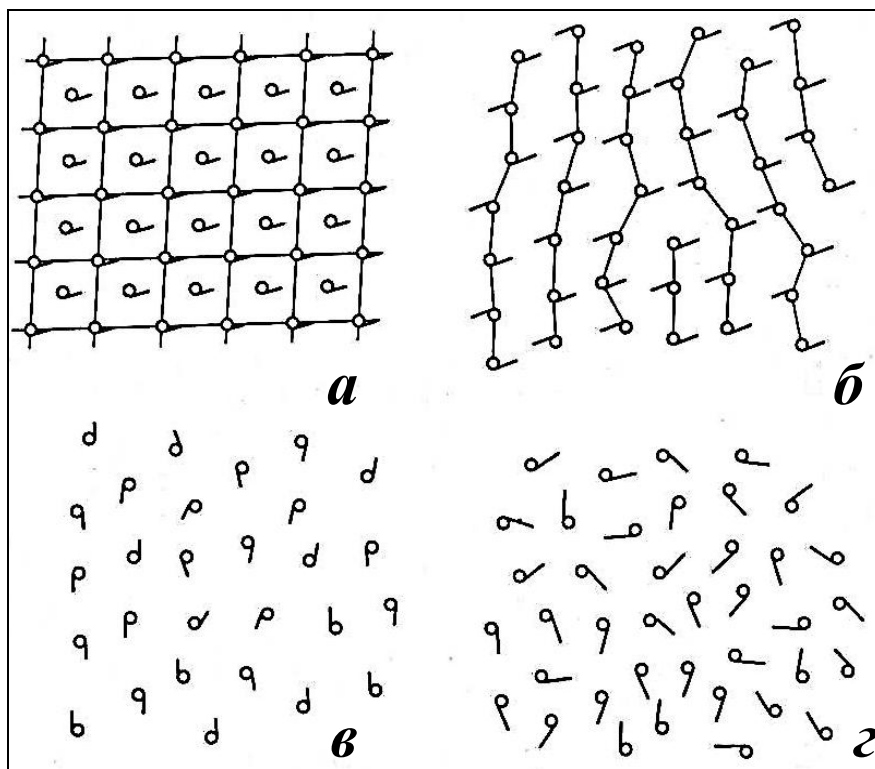


Рисунок 1.2 – Двовимірна схема розташування матеріальних часток в кристалах (а), полімерах (б), рідких кристалах (в) та аморфних тілах (г)

Промислове виробництво **металевих сплавів**, що твердіють в рівноважних умовах в кристалічному стані, в **аморфному** вигляді піддається реалізації при швидкостях охолодження  $\geq 10^4$  К/с (спінігування розплаву – тонкі стрічки, порошки надшвидкого гартування).

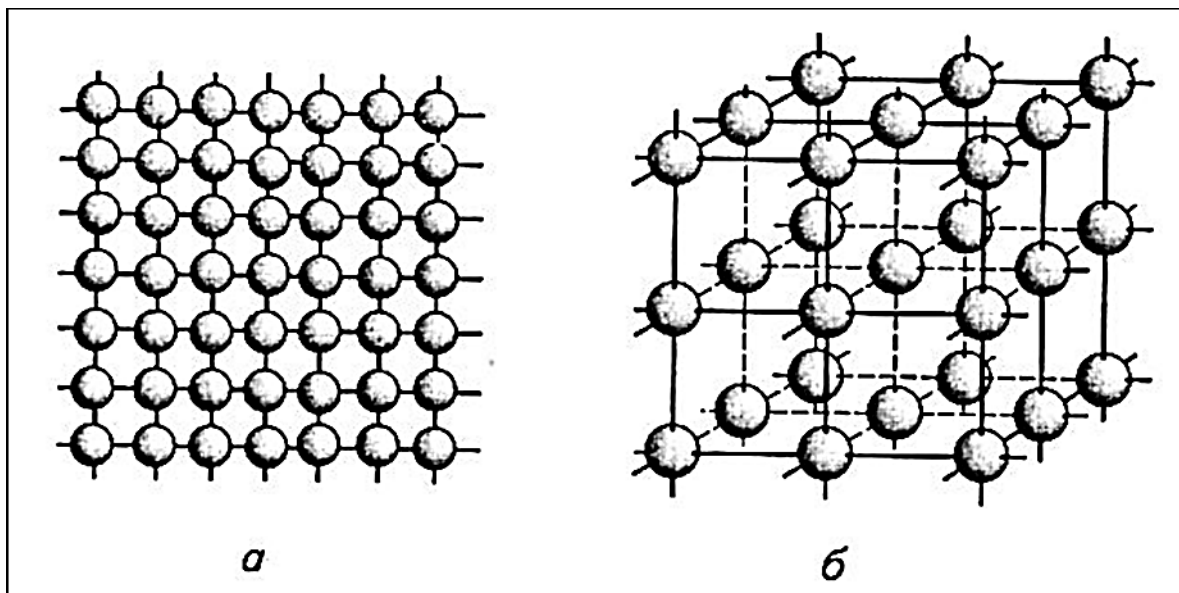


Рисунок 1.3 – Схема розташування атомів металу в кристалографічній площині (а) та в просторі кристалічної ґратки (б)

Навпаки, при надмалих швидкостях охолодження технічно можливе отримання склокристалічних матеріалів – **ситали**.

**Ситали (склокераміка)** – це склокристалічні матеріали, які складаються з однієї або декількох кристалічних фаз, рівномірно розподілених у скловидній фазі. Вони займають проміжне положення між звичайним склом і керамікою. Ситали містять велику кількість дрібних (< 1 мкм) кристалів, що пов'язані між собою міжкристалічним прошарком (скловидною фазою). Концентрація кристалів може змінюватись у значних межах (20–90 % за об'ємом).

Твердість більшості ситалів 6,5 – 7 одиниць за Моосом, границя міцності при згині до 250 МПа, термостійкість до 1000 °С.

**Полімерні речовини** (рис. 1.2 б) – проміжні за своєю структурою. Складаються зі стійких атомних угруповань (мономерних ланок), з'єднаних стійкими хімічними зв'язками в ланцюжок та з міжатомними зв'язками між молекулами полімерів.

**Рідкі кристали** – текучі, як і звичайна рідка речовина, але вони анізотропні. Існують в визначеному температурному інтервалі, вище якого «плавляться» в ізотропну рідину, нижче – кристалізуються.

**Квазікристал** – це тверде тіло, що характеризується симетрією, забороненою в класичній кристалографії і наявністю далекого порядку, тобто речовина, яка має упорядковану, але не періодичну структуру. Воно

складається з атомів, що не утворюють кристалічної ґратки, але можуть когерентно розсіювати випромінювання, тобто мати, подібну до кристалів, дискретну картину дифракції.

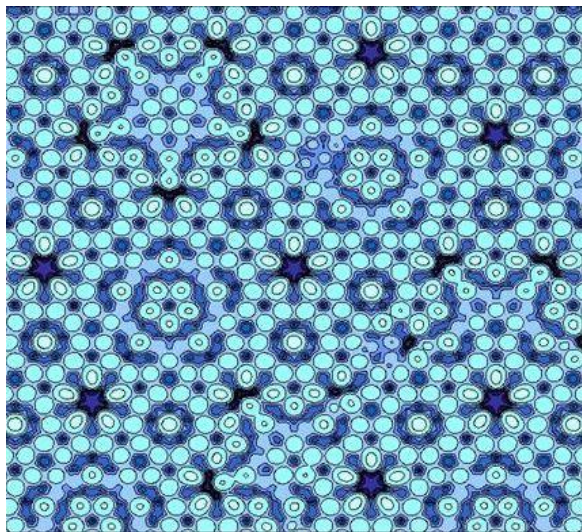


Рисунок 1.4 – Атомна модель Ag-Al квазікристалу

Квазікристали були відкриті в 1984 році Даном Шехтманом (рис. 1.4). Здебільшого квазікристали утворюються при швидкому охолодженні розплавлених сплавів металів (Al-Li-Cu, Al-Mn-Si, Al-Ni-Co, Al-Pd-Mn, Al-Cu-Fe, Al-Cu-V, Cd-Yb, Ti-Zr-Ni, Zn-Mg-Ho, Zn-Mg-Sc, In-Ag-Yb, Pd-U-Si тощо). Вони є нестабільними, однак виявлені також стабільні квазікристалічні речовини.

Вперше породи з природними Fe-Cu-Al квазікристалами знайдені на Коряцькому нагір'ї в 1979 році. Але тільки після одержання наукових уявлень про ці матеріали в 2009 році учені з Принстона змогли описати їх структуру. Вони також довели, що цей квазікристал має позаземне походження.

## 1.3 Геометрична кристалографія

### 1.3.1 Симетрія кристалів

**Симетрія** (з грецької) – співмірність.

**Симетрія** – закономірність, що спостерігається в розташуванні речовин або їх частин на площині або в просторі.

Тобто, це здатність кристалу закономірно повторювати свої частини в просторі.

Це означає, що **симетрична фігура** складається з рівних, правильно повторюваних частин і може поєднуватись сама із собою в результаті симетричних перетворень.

**Операції або перетворення** симетрії – це відображення, обертання, переноси що призводять фігуру до суміщення з собою.

**Елементи симетрії** – окремі симетричні перетворення

Симетричні перетворення поділяються на два типи:

- **скінченні** або **точкові** перетворення, при яких хоча б одна точка фігури чи простору залишається на місці;
- **нескінченні** або **просторові** перетворення, при яких жодна точка фігури чи простору не залишається на місці.

Скінченні симетричні перетворення відповідають симетрії ідеальних кристалічних багатогранників.

Нескінченні відповідають симетрії структур.

У таблиці 1.1 представлені дві найбільш розповсюджені системи умовних символів симетричних перетворень:

- міжнародна система;
- символіка, що заснована на формулах симетрії.

Таблиця 1.1 – Позначення елементів симетрії кінцевих фігур

Назва елементів симетрії	Площина	Центр	Обертальна вісь симетрії					Інверсійна вісь симетрії			
			Будь-яка	Подвійна	Потрійна	Четверна	Шестерна	Будь-яка	Потрійна	Четверна	Шестерна
Міжнародний символ	m	ī	n	2	3	4	6	ī	3̄	4̄	6̄
За формулою симетрії	P	C	L <sub>n</sub>	L <sub>2</sub>	L <sub>3</sub>	L <sub>4</sub>	L <sub>6</sub>	L <sub>n̄}=L<sub>i</sub>n</sub>	L <sub>3̄}=L<sub>i</sub>3</sub>	L <sub>4̄}=L<sub>i</sub>4</sub>	L <sub>6̄}=L<sub>i</sub>6</sub>

### 1.3.2 Елементи симетрії кристалічних багатогранників

**Центр симетрії** – точка всередині фігури, яка характеризується тим, що будь яка проведена через цю точку пряма по обидві сторони від неї на рівних відстанях зустрічає однакові (відповідні) точки фігури.

**Центр симетрії (C) або інверсії (ī)** у фігури може бути лише один.

Перевірка фігури на наявність центру симетрії: при укладанні фігури пласкою гранню на рівну поверхню, протилежна грань має бути паралельна їй. Якщо це не так, хоча б в одному випадку – фігура не має центру симетрії.

**Площина симетрії  $P$  ( $m$ )** – уявна площина, яка ділить фігуру на дзеркально рівні частини, розташовані одна щодо іншої як предмет і його дзеркальне відображення.

Площини симетрії проходять через центри граней і середини ребер перпендикулярно їм або вздовж ребер, утворюючи рівні кути з однаковими гранями та ребрами (рис. 1.5). **Кристали можуть мати від 1 до 7 площин симетрії. Тільки куб має 9 площин симетрії** (рис. 1.5).

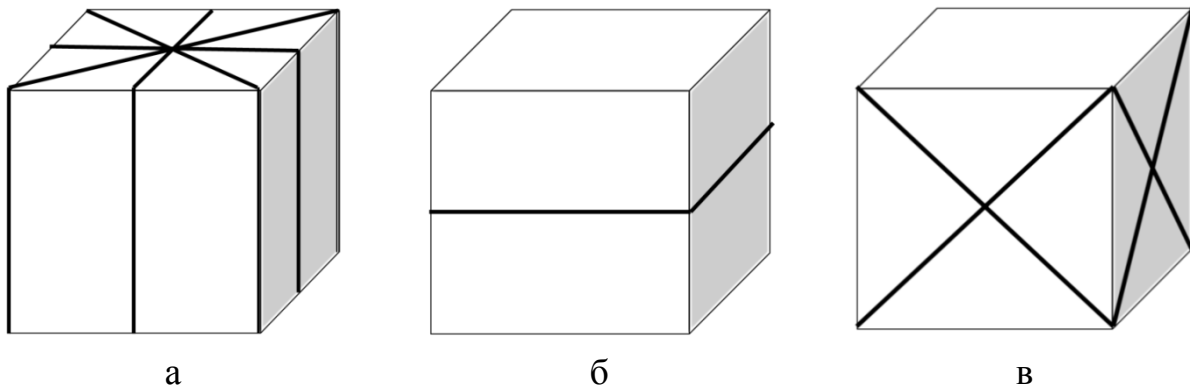


Рисунок 1.5 – 9 площин симетрії кубу – вертикальні (а), горизонтальні (б), похилі (в)

**Осі симетрії ( $L_n$  або  $n$ )** – уявна пряма при обертанні навколо якої на деякий кут фігура суміщається з собою (рис. 1.6).

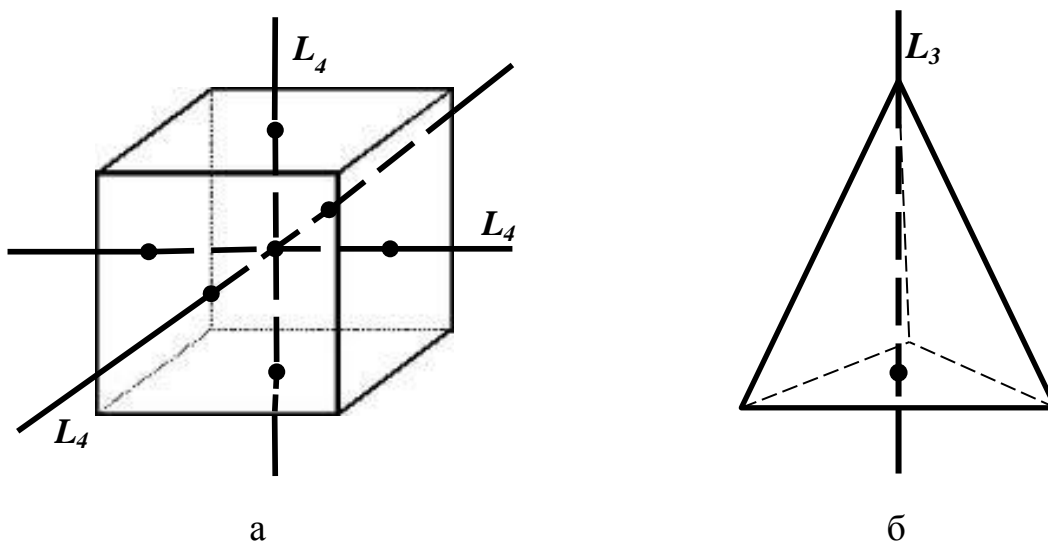


Рисунок 1.6 – Багатогранники – куб з осями симетрії  $3L_4$  (а) та піраміда з віссю симетрії  $L_3$  (б)

**Порядок осі симетрії «n»** визначає кількість суміщень з собою фігури при її обертанні на  $360^\circ$ . Кут оберту, при якому здійснюється суміщення, називається **елементарним кутом обертання «L»**, тобто  $n = 360^\circ / L$ .

В кристалічних багатогранниках присутні лише осі симетрії I-го; II-го; III-го; IV-го і VI-го порядків з елементарними кутами обертання «L», відповідно –  $360^\circ$ ;  $180^\circ$ ;  $120^\circ$ ;  $90^\circ$ ;  $60^\circ$ .

**Інверсійні осі  $L\bar{n}$  ( $\bar{n}$ )** – пряма при обертанні довкола якої на деякий кут з наступним відображенням в центральній точці фігури «**центрі інверсії**», як і в центрі симетрії, фігура суміщається сама з собою.

### 1.3.3 Класи симетрії

Цілком очевидно, що всі розглянуті вище елементи симетрії, в одному кристалічному багатограннику бути присутніми не можуть.

Встановлено, що можливі тільки 32 комбінації різних угруповань елементів симетрії або 32 кристалографічних класи або виду симетрії – таблиця 1.2.

**Класом або видом симетрії** називається повна сукупність елементів симетрії кристалічного багатогранника.

**Породжуючі елементи симетрії** – два або три вихідних для подальшого розрахунку.

**Породжені елементи симетрії** – встановлені шляхом розрахунку із породжуючих.

**Примітивний клас симетрії** – тільки головні осі симетрії.

**Центральний клас симетрії** – центр симетрії + головні осі (можливі).

**Планарний клас симетрії** – осі та площини симетрії.

**Аксіальний клас симетрії** – декілька осей симетрії різного порядку.

**Планаксіальний клас симетрії** – осі, площини та центр симетрії.

**Інверсійно-примітивний клас** – тільки осі  $L\bar{n}$ .

**Інверсійно-планарний клас** – інверсійні осі та площини ( $L\bar{n}$  та P).

**Формула симетрії** складається із записаних підряд всіх елементів симетрії даного кристалу.

На першому місці прийнято відобразити **осі симетрії** від вищих до нижчих, на другому – **площини симетрії** і далі – **центр симетрії**.

Приклад: Тетрагональна призма –  $L_4L_25PC$ .

Таблиця 1.2 – Тридцять два класи симетрії кристалів

Категорії	Сингонії	Вид симетрії						
		примітивний	центральный	планальний	аксіальний	планаксіальний	інверсійно-примітивний	інверсійно-планальний
Нижча	Триклінна	1 -	2 <i>C</i>					
	Моноклінна			3 <i>P</i>	4 <i>L<sub>2</sub></i>	5 <i>L<sub>2</sub>PC</i>		
	Ромбічна			6 <i>L<sub>2</sub>2P</i>	7 <i>3L<sub>2</sub></i>	8 <i>3L<sub>2</sub>3PC</i>		
Середня	Тригональна	9 <i>L<sub>3</sub></i>	10 <i>L<sub>3</sub>C</i>	11 <i>L<sub>3</sub>3P</i>	12 <i>L<sub>3</sub>3L<sub>2</sub></i>	13 <i>L<sub>3</sub>3L<sub>2</sub>3PC</i>		
	Тетрагональна	14 <i>L<sub>4</sub></i>	15 <i>L<sub>4</sub>PC</i>	16 <i>L<sub>4</sub>4P</i>	17 <i>L<sub>4</sub>4L<sub>2</sub></i>	18 <i>L<sub>4</sub>4L<sub>2</sub>5PC</i>	19 <i>L<sub>i4</sub></i> (= <i>L<sub>2</sub></i> )	20 <i>L<sub>i4</sub>2L<sub>2</sub>2P</i> (= <i>3L<sub>2</sub>2P</i> )
	Гексагональна	21 <i>L<sub>6</sub></i>	22 <i>L<sub>6</sub>PC</i>	23 <i>L<sub>6</sub>6P</i>	24 <i>L<sub>6</sub>6L<sub>2</sub></i>	25 <i>L<sub>6</sub>6L<sub>2</sub>7PC</i>	26 <i>L<sub>i6</sub></i> (= <i>L<sub>3</sub>P</i> )	27 <i>L<sub>i6</sub>3L<sub>2</sub>3P</i> (= <i>L<sub>3</sub>3L<sub>2</sub>4P</i> )
Вища	Кубічна	28 <i>3L<sub>4</sub>4L<sub>3</sub></i>	29 <i>3L<sub>4</sub>4L<sub>3</sub>3PC</i>	30 <i>3L<sub>4</sub>4L<sub>3</sub>6P</i>	31 <i>3L<sub>4</sub>4L<sub>3</sub>6L<sub>2</sub></i>	32 <i>3L<sub>4</sub>4L<sub>3</sub>6L<sub>2</sub>9PC</i>		



### 1.3.4 Кристалографічні категорії, сингонії

За симетрією та числом одиничних напрямків кристали поділяють на **три категорії** (табл. 1. 3): **вища, середня, нижча**.

У кристалах **вищої категорії** відсутні одиничні напрямки, але мають місце декілька симетрично-еквівалентних напрямків. Властивості кристалів в цих напрямках однакові, завдяки чому анізотропія кристалів вищої категорії слабо виражена. Зовнішня форма кристалів ізометрична – куб.

Кристалам **середньої категорії** – притаманний єдиний одиничний напрямок, співпадаючий з віссю вищого порядку (3, 4, 6,  $\tilde{4}$ ,  $\tilde{6}$ ). Анізотропія властивостей значно виражена і виявляється вздовж та в поперек головної осі симетрії. Категорія представлена призмами, пірамідами.

Для кристалів **нижчої категорії** характерною є відсутність осі порядку вище за 2-й, але одиничних напрямків декілька. Анізотропія яскраво виражена. Зовнішня форма найменш симетрична.

Зазначені три категорії, в свою чергу, поділяють на **7 сингоній** (з грецької – кутова подібність).

Для зручності описування кристалічних багатогранників кожна сингонія має свою систему координат та характеризується своїм елементарним паралелепіпедом.

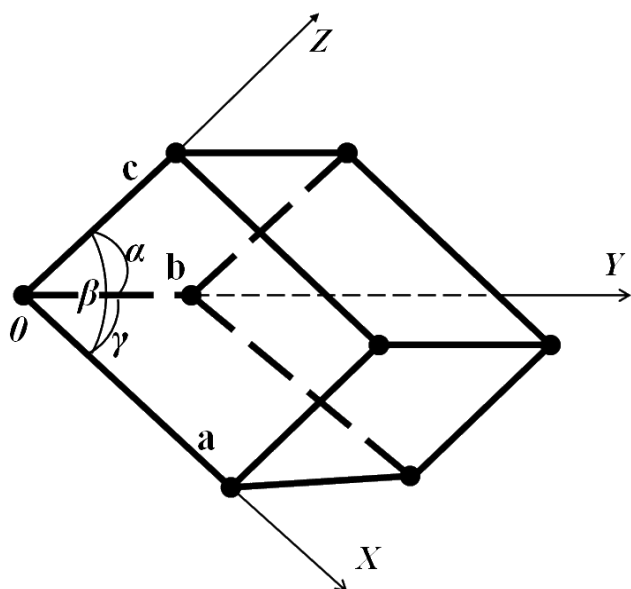


Рисунок 1.7 – Елементарний паралелепіпед

Кожен елементарний паралелепіпед (рис. 1.7) характеризується трьома осьовими відрізками **a, b** та **c** і трьома кутами **α, β** та **γ** між осями. В загальному випадку координати косокутні.

Величини **a, b, c** та **α, β, γ** є метрикою кристалу (осьові одиниці та кути).

Тобто, класифікація кристалів за сингоніями визначається обранням кристалографічної системи координат.

Таблиця 1.3 – Характеристика сингоній кристалів

Категорія	Сингонія	Метрика кристалів	Головні напрямки	Кількість класів в сингонії	Типові представники	Розподілення вивчених кристалів
Нижча	Триклінна	$a \neq b \neq c;$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$		2	$K_2Cr_2O_7$	290-3,5 %
	Моноклінна	$a \neq b \neq c;$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$L_2$	3	$CaSO_4 \times 2H_2O$	2345-27 %
	Ромбічна	$a \neq b \neq c;$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$3L_2$	3	$Fe_3C$	1980-22,5 %
Середня	Тригональна	$a = b = c;$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$L_3; L_{i3}$	5	Al; Sb; Bi	967-11 %
	Тетрагональна	$a = b \neq c;$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$L_4; L_{i4}$	7	$\beta - Sn$	799-9 %
	Гексагональна	$a = b \neq c;$ $\alpha = \beta = 90^\circ;$ $\gamma = 120^\circ$	$L_6; L_{i6}$	7	Sn; Cd	645-6 %
Вища	Кубічна	$a = b = c;$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$3L_4$	5	Більшість металів і іонних кристалів	1763-20 %

Як наслідок, сингонія кристалу визначається співвідношенням показників метричних характеристик елементарної комірки.

**Сукупність елементів симетрії** залежить від внутрішньої структури кристалу, яка в свою чергу, залежить від елементарної комірки і її кількісних параметрів (метрик).

### 1.3.5 Прості форми кристалів та їх комбінації

Кожен кристал, як було зазначено вище, характеризується цілком визначеним комплексом елементів симетрії (табл. 1.3): 32 класи, 7 сингоній, 3 категорії.

**Габітус (зовнішня форма) кристалу** – сукупність всіх граней, яку можна поділити на сукупності граней що симетрично рівні між собою.

В залежності від розмірів по трьох головних осях розрізняють такі обриси: **ізометричний** (коли всі три розміри близькі), **видовжений** (кристал розвинутий в одному напрямі), **сплощений**.

**Проста форма** – це сукупність граней кристалу, пов'язаних між собою елементами симетрії. Грані кожної окремої простої форми кристалів хімічних речовин є однаковими за фізичними і хімічними властивостями, а в ідеальних кристалах – і за обрисами та розмірами.

Чим більше елементів симетрії у виді (класі) симетрії, тим складніші прості форми, що властиві кристалу.

Загальна кількість простих форм – 47 (рис. 1.8).

Розрізняють загальні і власні прості форми.

**Загальна проста форма** – грані розміщені косо щодо усіх осей і площин симетрії.

**Власна проста форма** – грані або перпендикулярні хоча б до однієї осі чи площини симетрії, або паралельні до неї, або розміщені симетрично щодо двох чи декількох однакових осей або площин симетрії.

**Комбінацією простих форм** кристалів називається сукупність двох або кількох простих форм, об'єднаних елементами симетрії, якщо кристал утворений декількома видами граней.

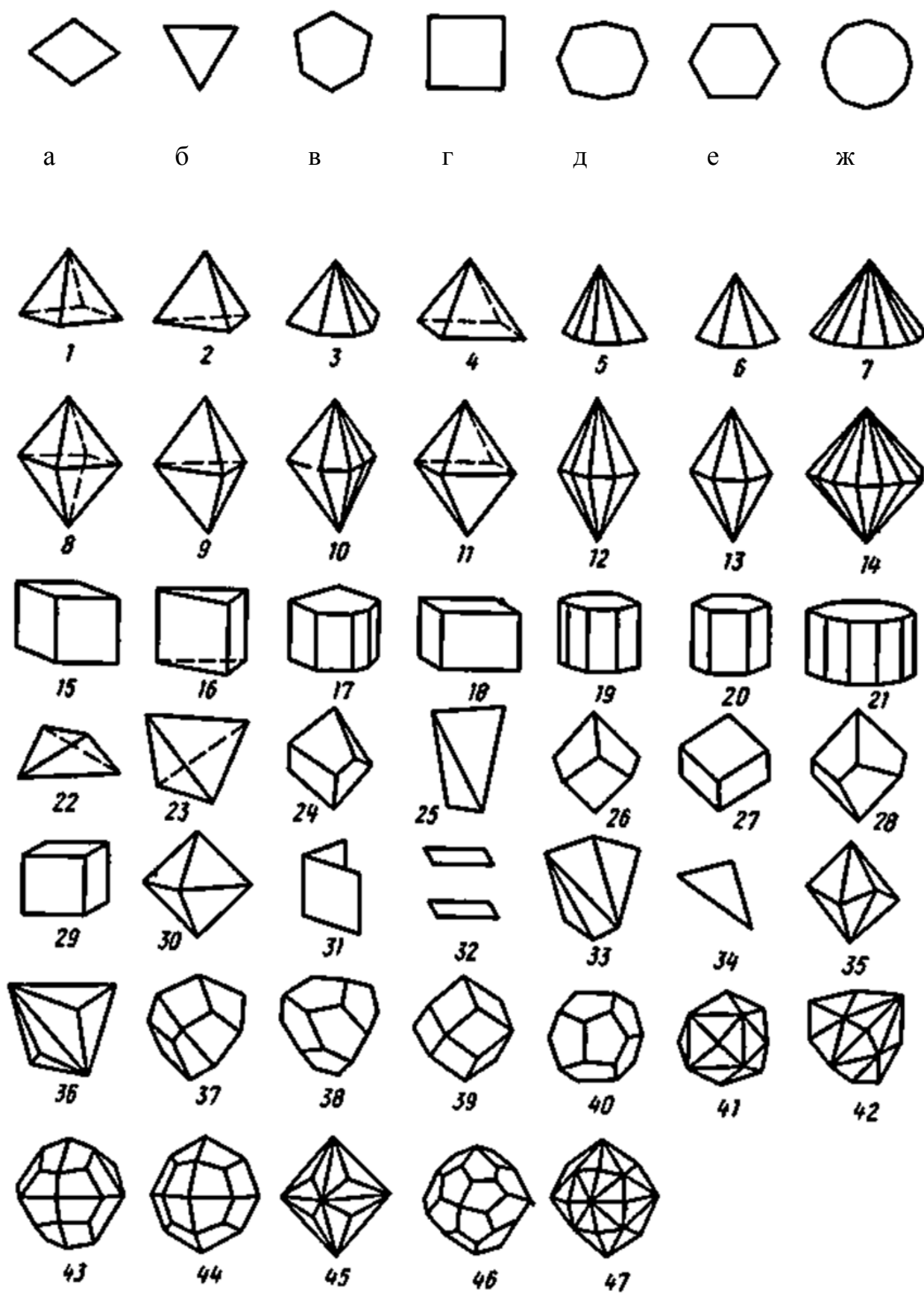


Рисунок 1.8 – Прості форми кристалів

На сьогоднішній день кількісний порядок вивчених кристалів становить показник  $\sim 10^4$ . При цьому, число типів граней, за даними сучасних досліджень, може бути призведеним до значення 47 – рисунок 1.8.

Прості форми **відкриті** – сукупність граней не замикає простір. У якості прикладів відкритих простих форм на рисунку 1.8 представлені: а ... ж, 34 – моноедр, 31 – діедр, 32 – пінакоїд.

Прості відкриті форми існують в кристалі тільки в поєднанні з іншими простими формами, формуючи комбінації простих форм.

Прості форми **замкнені** – простір замкнуто.

**На рисунку 1.8 представлені:**

- 1 – ромбічна піраміда, 2 – тригональна піраміда, 3 – дітригональна піраміда,
- 4 – тетрагональна піраміда, 5 – дітетрагональна піраміда,
- 6 – гексагональна піраміда, 7 – дігексагональна піраміда,
- 8 – ромбічна діпіраміда, 9 – тригональна діпіраміда,
- 10 – дітригональна діпіраміда, 11 – тетрагональна діпіраміда,
- 12 – дітетрагональна діпіраміда, 13 – гексагональна діпіраміда,
- 14 – дігексагональна діпіраміда, 15 – ромбічна призма,
- 16 – тригональна призма, 17 – дітригональна призма,
- 18 – тетрагональна призма, 19 – дітетрагональна призма,
- 20 – гексагональна призма, 21 – дігексагональна призма,
- 22 – ромбічний тетраедр, 23 – тетраедр, 24 – тригональний трапезоедр,
- 25 – тетрагональний тетраедр, 26 – тетрагональний трапезоедр,
- 27 – ромбоедр, 28 – гексагональний трапезоедр, 29 – куб, 30 – октаедр,
- 31 – діедр, 32 – пінакоїд, 33 – тетрагональний скаленоедр, 34 – моноедр,
- 35 – дітригональний скаленоедр, 36 – тригонтритетраедр,
- 37 – тетрагон-тритетраедр, 38 – пентагон-тритетраедр, 39 – ромбододекаедр,
- 40 – пентагон-додкаедр, 41 – тетрагексаедр, 42 – гексатетраедр,
- 43 – дідодкаедр, 44 – тетрагон-триоктаедр, 45 – тригон-триоктаедр,
- 46 – пентагон-триоктаедр, 47 – гексаоктаедр,

Число граней залежить від виду простої форми: від одиниці – моноедр (рис. 1.8 № 34) ... до 48 – гексаоктаедр (рис. 1.8 № 47).

Піраміди – (1 – 7) рівні трикутні грані, що перетинаються в одній точці.

Діпіраміди – (8 – 14) дві піраміди, складені своїми основами.

Призми – (15 – 21) чотирикутні грані, пересічні по паралельним ребрам.

По формі поперечного перерізу призми, піраміди і діпіраміди поділяють на: ромбічні, тригональні, дітригональні, тетрагональні, дітетрагональні, гексагональні, дігексогональні (рис. 1.8 а ... ж).

Дітригональні, дітетрагональні та дігексагональні призми, піраміди та діпіраміди утворюються із відповідних простих форм шляхом здвоєння їх сторін. Такі прості форми в поперечному перерізі дають багатокутники з кутами, які повторюються через один.

Ромбічні призми мають в поперечному перерізі форму ромба та можуть бути похилими. Кут між ребрами і поперечним перерізом  $\neq 90^\circ$ .

Трапецоедри (рис. 1.8 №26; №28) утворені чотирикутними гранями та можуть бути представлені як повернуті навколо вертикальної осі на деякий кут половини відповідної діпіраміди.

Скаленоедри (рис.1.8 №33, №35) утворені гранями, що мають форму нерівносторонніх трикутників.

Ромбоедр (рис. 1.8 №27) – шість граней у вигляді ромбу. Фактично це витягнутий або стиснутий за однією з осей куб.

Тетраедр (рис. 1.8 №№22 – 25) – чотири непаралельні трикутні грані. За типом трикутної грані – кубічний тетраедр (рівносторонні трикутники), тетрагональний тетраедр (рівнобедрені трикутники), ромбічний тетраедр (трикутники зі скошеними кутами).

Куб (рис.1.8 №29) – проста форма вищої категорії (табл. 1.3).

Тобто, при наявності розглянутих 47 простих форм (рис. 1.8) їх комбінацій у природних кристалах безліч.

**Напівправильні форми багатогранників.** Багатогранники, у яких всі багатогранні кути рівні, а грані – правильні, але правильні багатокутники різнойменні. Багатогранники такого типу називаються **рівнокутно – напівправильними**.

До напівправильних багатогранників відносяться **антипризми**, тобто призми зі зміщеними на певний кут основами.

Найбільш простими напівправильними багатогранниками є просторові тіла з кутами багатогранника які **усічені** площинами іншої симетрії – **усічений тетраедр, усічений октаедр, усічений ікосаедр** та інш.

**Зірчасті багатогранники** – це багатогранники, які можуть бути одержані шляхом продовження граней вихідного багатогранника через ребра до їх наступного перетину з іншими гранями по новим ребрам.

#### **1.4 Закони геометричної кристалографії**

Закони взаємного розташування граней та ребер кристалів (габітус кристалів) є макроскопічним виявом існування просторової ґратки в розташуванні матеріальних елементів кристалічної речовини.

**Закон сталості кутів** – при постійних термодинамічних умовах ( $T = \text{const}$ ,  $P = \text{const}$ ) кути між відповідними гранями даного кристалу постійні.

**Огранювання** кристалів і називається цим словом, через те, що існують пласкі грані.

Форми та розміри кристалічних граней можуть бути різними в залежності від реальних умов кристалізації, але кути між відповідними гранями даної речовини завжди незмінні.

Вперше закон був відкритим в 1669 році Н. Стенсеном. Отримав розвиток та кількісний опис в 1749 р. та 1783 р. (М. В. Ломоносов та Роме-де-Ліль, відповідно).

Завдяки цьому, закон сталості кутів називається, також, **законом Стенсена – Ломоносова – Роме-де-Ліля**.

Оскільки, як було зазначено вище, індикатором типу ґратки є **кут**, то метод визначення типу кристалу називається **гоніометричним** («гоніа» з грецької – кут).

**Закон раціональності відношення параметрів** – подвійні відношення параметрів, що відсікаються двома будь-якими гранями кристалу на трьох його не компланарних (не паралельних) ребрах, рівні відношенню цілих та порівняно малих чисел.

Закон носить, також, назву «**Закон цілих чисел**». Відкритий в 1784 р. французьким абатом Р. Гаюї. Тому часто цей закон називають «**Закон Гаюї**». Геометрична презентація основних положень закону наведена на рисунку 1.9.

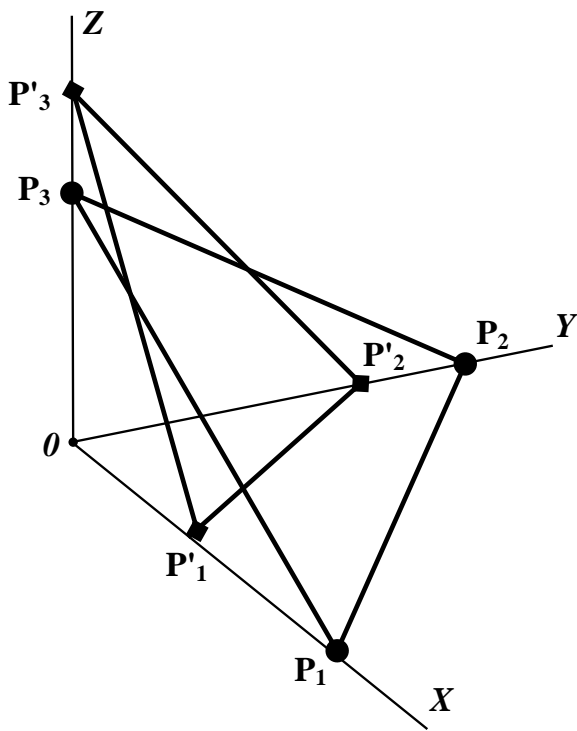


Рисунок 1.9 – Закон Гаюї

$OX; OY; OZ$  – не компланарні ребра в якості координатних осей.

т.  $O$  – точка перетину не компланарних ребер.

$P_1 P_2 P_3; P'_1 P'_2 P'_3$  – грані кристалу.

$OP_1; OP_2; OP_3$  – параметри грані  $P_1 P_2 P_3$  кристалу.

$OP'_1; OP'_2; OP'_3$  – параметри грані  $P'_1 P'_2 P'_3$  кристалу.

Тоді:

$$OP_1 / OP'_1 : OP_2 / OP'_2 : OP_3 / OP'_3 = p : q : r$$

$p; q; r$  – цілі та невеликі числа.

## 1.5 Кристалографічні параметри Вейса та індекси площин Міллера. Міжплощинні відстані

Із наведеного вище закону Гаюї очевидно, що серію відношень раціональних чисел для всіх паралельних площин можна представити як відношення цілих взаємно простих чисел  **$p:q:r$**  – параметри Вейса.

В кристалографії прийнято характеризувати площини (або нормалі до них) не параметрами, а **індексами Міллера**. Індекси Міллера – це величини, зворотні параметрам Вейса, приведені до цілих чисел.

Подвійні відношення параметрів одиничної грані до даної грані:

$$p / mp : q / nq : r / sr = 1 / m : 1 / n : 1 / s = h : k : l$$

Тоді  $(hkl)$  – символи істинної (даної) грані.

Тобто,  $h, k, l$  – індекси символу грані, індекси Міллера.

Рисунок 1.10 ілюструє порядок визначення індексів Міллера для компланарних площин з параметрами Вейса:



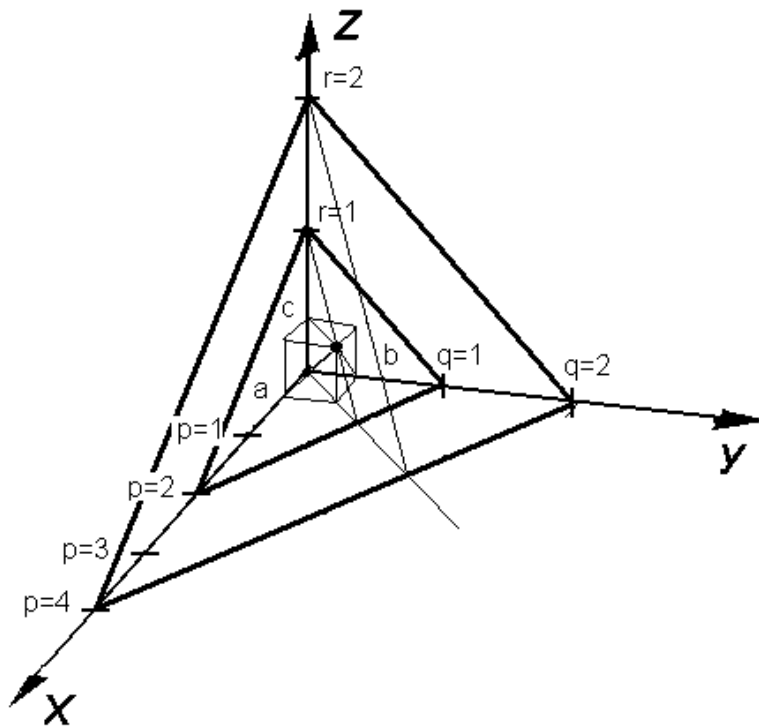


Рисунок 1.10 – Кристалографічні індекси площин

Площина №1:

$$p = 2; q = 1; r = 1$$

*Індекси Міллера:*

$$1/2 : 1/1 : 1/1 = 1, 2, 2$$

Площина №2:

$$p = 4; q = 2; r = 2$$

*Індекси Міллера:*

$$1/4 : 1/2 : 1/2 = 1, 2, 2$$

Далі площина №3 буде:

$$p = 6; q = 3; r = 3$$

*Індекси Міллера:*

$$1/6 : 1/3 : 1/3 = 1, 2, 2$$

і т.д.

У загальному вигляді  
знаходження індексів

Міллера:

$$(h=1/p \quad k=1/q \quad l=1/r)$$

$$(h=1/4 \quad k=1/2 \quad l=1/2)$$

$$(h=1/4 \quad k=2/4 \quad l=2/4)$$

$$(h=1 \quad k=2 \quad l=2)$$

$$(hkl) = (122)$$

Тобто, всі площини цієї 1-ої, 2-ої, 3-ої і т.д. **n-ої** трансляції завжди будуть мати одні й ті ж самі індекси Міллера, тому вони складають у розглянутому прикладі сімейство площин **(122)**, або в загальному вигляді – **(hkl)**.

Ребра кристалу відповідають рядам ґратки (див. рис. 1.3 б), а грані площинам сітки (див. рис. 1.3 а) з найвищою ретикулярною щільністю.

Тому, наявність цілих чисел в законі Гаюї пояснюється тим, що пласкі сітки збігаються з вузлами рядів. Наявність малих чисел пов'язана з тим, що гранню кристалу є не аби яка пласка сітка, а тільки сітка густо всаджена матеріальними частками (ретикулярно щільна).

Кожне **сімейство площин** з індексами (hkl) характеризується своєю міжплощинною відстанню «**d**», тобто, відстань між двома сусідніми паралельними площинами в сімействі площин з індексами (hkl) (**d<sub>hkl</sub>** – в загальному вигляді), наприклад – **d<sub>010</sub>** на рис. 1.11 а.

Всі кристалографічно ідентичні сімейства площин, тобто, сімейства площин з однаковою міжплощинною відстанню, утворюють **сукупність площин {hkl}**.

Розрахунок міжплощинної відстані виконується за формулами що пов'язують індекси відповідної площини та параметри (періоди) ґратки. Наприклад, для кубічної ґратки відповідні розрахункові формули такі:

$$\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} = \frac{1}{d^2}$$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

## 1.6 Кристалографічні індекси площин та напрямків

Тобто, під кристалографічними індексами площини розуміють три взаємно прості числа  $h, k, l$ , зворотно пропорційних числу осьових одиниць, що відсікаються будь-якою площиною даного сімейства **{hkl}** на кристалографічних координатних осях  $x, y, z$  (рис.1.10).

Порядок знаходження індексів Міллера площин детально розглянутий вище.

В тому випадку коли площина паралельна координатній осі – відрізок що відсікається  $= \infty$ . Тоді  $1 / \infty = 0$ .

Тобто, індекс, в даному разі  $= 0$ . Див., наприклад, площину (010) на рис. 1.11 а.

Якщо площина перетинає вісь в негативному напрямку, над відповідним індексом слід ставити знак «мінус». Див., наприклад,  $(1\bar{1}0)$  на рис. 1.11 а.

Площини, що відсікають на всіх трьох осях рівні відрізки, мають індекси (111) – рис. 2.2 в, або  $(1\bar{1}\bar{1})$  – рис. 1.11 а.

В гексагональній сингонії прийнято користуватись системою координат що складається з однієї вертикальної осі «**z**» та трьох горизонтальних «**x, y, t**» з кутами в основі фігури  $120^\circ$  (рис. 1.11 б). При цьому індекси, в даному випадку (**hkil**). Індекс «**i**» відповідає горизонтальній осі «**t**» та визначається:  $i = -(h + k)$ . Найважливіші площини гексагональної ґратки та їх індекси представлені на рис. 1.11 б.



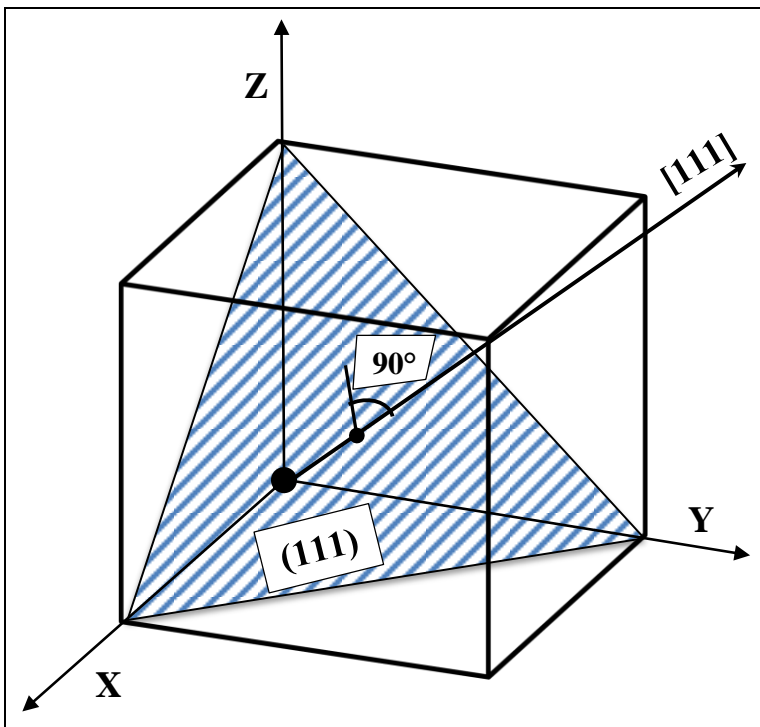
Під кристалографічними індексами напрямку розуміють три цілих простих числа, пропорційних координатам атома, розташованого на даному напрямі, виміряних в осьових одиницях (рис. 1.11 в).

Для встановлення індексів напрямку, слід перенести його паралельно самому собі в початок координат.

Найважливіші напрямки кубічної та гексагональної решіток представлені на рис. 1.11 в.

Кристалографічні індекси напрямку позначають  $[uvw]$ .

В кубічній сингонії індекси напрямку  $[uvw]$  перпендикулярного площинам  $(hkl)$  чисельно рівні індексам цієї площини (рис. 1.12).



Індекси площини  $(hkl)$ , в якій лежать два напрямки  $[u_1v_1w_1]$  та  $[u_2v_2w_2]$  визначають за правилом векторного множення:

$$\begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix} \times \times \times$$

Тоді:

$$\begin{aligned} h &= v_1w_2 - v_2w_1 \\ k &= w_1u_2 - w_2u_1 \\ l &= u_1v_2 - u_2v_1 \end{aligned}$$

Рисунок 1.12 – Зв'язок між площиною  $(111)$  та напрямком  $[111]$ :  $(111) \perp [111]$

Індекси напрямку  $[u v w]$ , по якому

перетинаються дві площини пов'язані з індексами цих площин  $(h_1k_1l_1)$  та  $(h_2k_2l_2)$  аналогічною симетричною системою рівнянь.

Кут між двома площинами  $(h_1k_1l_1)$  та  $(h_2k_2l_2)$  для кубічної сингонії визначають з рівняння:

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \times \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

Кут  $\varphi$  між двома напрямками визначають з аналогічного симетричного рівняння:

$$\cos \varphi = \frac{u_1 \cdot u_2 + v_1 \cdot v_2 + w_1 \cdot w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}}$$

Серію сімейств площин, паралельних одному напрямку  $[uvw]$  в решітці називають **кристалографічною зоною**, а сам напрямок  $[uvw]$  називається **вісь зони**.

Між індексами вісі зони  $[uvw]$  і індексами площин, що входять в дану зону, існує наступна залежність:  $hu + kv + lw = 0$ . Це рівняння – **умова зональності**.

Таким чином, напрямок в гратці  $[uvw]$ , по якому перетинаються площини граней однієї сукупності є **віссю зони** (рис. 1.13 б).

## 1.7 Пряма та зворотна гратки

Поняття зворотної решітки (гратки) є зручною абстракцією, яка дозволяє математично просто та точно описувати умови, за якими у кристалах здійснюються ті чи інші явища.

Системи площин  $\{hkl\}$  настільки щільно заповнюють простір, що складно проводити детальний геометричний аналіз дифракції промінів. Якщо замінити кожне сімейство паралельних площин  $\{hkl\}$  звичайної тривимірної решітки спеціальними векторами-нормаллями  $d^*_{hkl}$ , то кінці цих векторів, які виходять з довільно обраної точки **O** (рис. 1.15) поза кристалом, формують особливу просторову решітку, яка називається **зворотною** (рис. 1.15).

Тобто, кожній кристалічній структурі відповідають дві решітки:

- пряма просторова побудована на векторах  $\tilde{a}$ ,  $\tilde{b}$  та  $\tilde{c}$ ;
- зворотна решітка з ребрами  $\tilde{a}^*$ ,  $\tilde{b}^*$  та  $\tilde{c}^*$ .

Між параметрами прямої та зворотної решітки існує такий зв'язок:

1. Вектори зворотної решітки визначаються як векторні множення:

$$\tilde{a}^* = 1/V [\tilde{b} \times \tilde{c}]; \quad \tilde{b}^* = 1/V [\tilde{c} \times \tilde{a}]; \quad \tilde{c}^* = 1/V [\tilde{a} \times \tilde{b}],$$

де  $V$  об'єм елементарної комірки прямої решітки.

2. Пряма та зворотна решітки взаємно сполучені. Тобто, решітка зворотна зворотній є прямою –  $\tilde{a} \times \tilde{a}^* = \tilde{b} \times \tilde{b}^* = \tilde{c} \times \tilde{c}^* = 1$ . Для прямокутної системи координат (рис. 1.15)  $\tilde{a}^* = 1/a$ ,  $\tilde{b}^* = 1/b$ ,  $\tilde{c}^* = 1/c$ .

3. Об'єм  $V^*$  елементарної комірки зворотної решітки дорівнює зворотній величині об'єму  $V$  комірки прямої решітки.

4. Вектор-нормаль  $d^*_{hkl}$  зворотної решітки перпендикулярний площині  $(hkl)$  прямої решітки і за модулем рівний  $1/d_{hkl}$ .

5. Кожна площина прямої решітки у зворотному просторі відображається єдиною точкою (вузлом), а безкінечне сімейство паралельних площин – безкінечним сімейством точок (вузлів), що розташовані уздовж напрямлення яке перпендикулярне до цих площин. Тоді, відстані цих вузлів від обраної точки  $O$  (що призначена як початок координат), дорівнюють  $1/d, 2/d, 3/d \dots$

Таким чином, прямій просторовій решітці складеній з площин  $\{hkl\}$  відповідає зворотна тривимірна решітка з точок (вузлів) –  $[[hkl]]^*$  (рис. 1.15).

### 1.8 Умови дифракції Лауе. Практичне використання понять прямої та зворотної ґраток

Поняття про зворотну ґратку може бути матеріалізовано через хвильовий аналіз ґратки кристалу. Для прозорих кристалів – це світлова оптика. Для непрозорих (у т.ч. металічних матеріалів) – це електронномікроскопічний і рентгеноструктурний аналізи.

Дифракція (заломлення з відхиленням хвилі на певний кут) відбувається у тому випадку, коли виконуються **умови Лауе**:

$$a (\cos \alpha_1 - \cos \alpha_2) = n_1 \lambda;$$

$$b (\cos \beta_1 - \cos \beta_2) = n_2 \lambda;$$

$$c (\cos \gamma_1 - \cos \gamma_2) = n_3 \lambda.$$

$\alpha_1; \beta_1; \gamma_1$  – кути між відповідними напрямками та хвилею падіння;

$\alpha_2; \beta_2; \gamma_2$  – кути відповідних заломлень;

$n_1; n_2; n_3$  – порядки заломлення (порядки дифракції);

Косинуси кутів визначають напрями падаючого та дифрагованого пучку променів.

На рис. 1.15 представлені залежності міжплощинної відстані « $d$ » в ортогональній системі координат рис. 1.15 а (рис. 1.15 б – в косокутній).

**ґратка (решітка), кожен вузол якої відповідає можливому відображенню рентгенівських і електронних хвиль від площин кристалу, називається зворотною.**



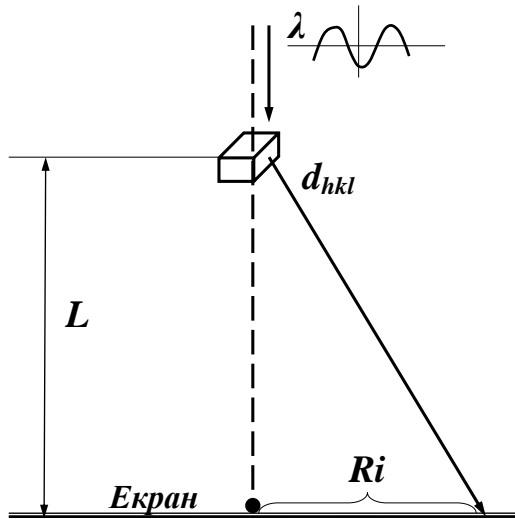


Рисунок 1.14– Схема формування електронномікроскопічного зображення

В результаті дослідження міжплощинна відстань « $d$ » **прямої ґратки**, як об'єкт аналізу (рис. 1.14), **завжди** в лабораторній системі має вигляд  $d^* = 1/d$ . Тобто при реєстрації вона представлена в якості міжплощинної відстані **зворотної ґратки** (рис. 1.14, рис. 1.15). Порядок розрахунку міжплощинної відстані « $d_{hkl}$ » прямої ґратки через геометричні параметри ( $L, Ri$ ) та довжину хвилі випромінювання  $\lambda$  експериментальної зйомки наведені на рис. 1.14.

Таким чином, зворотно пропорційний зв'язок  $d^*$  та  $d$  свідчить

про те, що **завжди найбільші значення « $d^*$ »** в дослідній (лабораторній, видимій на екрані або на запису самописця – рис. 1.15) системі зворотної ґратки **продукуватимуться найменшими « $d$ »** прямої (початкової, істинної) ґратки. Тобто:

$$d_{hkl} = \frac{\lambda L}{Ri} .$$

## 1.9 Принцип побудови стереографічної проекції

**Стереографічна проекція (стереограма)** є засобом представлення трьохмірних кутових співвідношень на площині.

На рисунку 1.13 а представлений кристал, поміщений в центр сфери. В кристалі до площини ( $hkl$ ) побудована нормаль « $OP$ ». Оскільки нормаль ортогональна до площини ( $hkl$ ), то (як вже розглядалось вище) вона має кількісно ті ж індекси [ $hkl$ ]. Тобто, вона є «носієм» індексів площини.





Тоді т.  $P$  перетину нормалі з поверхнею великого кола з'єднується з «південним полюсом» фігури прямої « $PS$ ». Перетин прямої « $PS$ » з «екваторіальною площиною» точка « $P_1$ » є проекцією точки  $P$ , тобто, **полюсом площини ( $hkl$ )**. Як наслідок, цій точці можуть бути присвоєні відповідні напрямку  $OP$  та площині індекси.

Саме тому точка  $P_1$  являє собою **гномостереографічну проекцію площини** («гномос» з грецької – нормаль).

Іноді замість екваторіальної площини для побудови стереографічної проекції використовують дотичну до сфери у т.  $N$  («північному полюсі») площину  $X'Y'Z$  (рис. 1.13 а). При цьому результат виходить той самий, тільки в іншому масштабі.

Дійсно проекція т.  $P$  на площину  $X'Y'$  дає проекцію  $P_2$ . Тоді трикутники  $SOP_1$  та  $SNP_2$  виявляються подібними. Пропорційність проекцій зберігається, в даному випадку –  $NP_2 = 2OP_1$ .

На рис. 1.13 б представлено декілька площин ( $hkl$ ) що належать зоні  $[uvw]$ .

- **Вісь зони**, при цьому, належить усім цим площинам.
- **Нормалі усіх площин зони**, автоматично, перпендикулярні осі зони.
- Раніше розглянуте **рівняння осі зони**:

$$hu + kv + lw = 0$$

є окремим випадком **узагальненого рівняння зони**:

$$hu + kv + lw = \pm C.$$

Коли  $h, k, l$  постійні, тоді  $u, v, w$  – координати вузлів ґратки, що лежать в  $C$ -й паралельній за порядком площині від початкової.

## ЛІТЕРАТУРА

1. Шаскольская М.П. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984. – 376 с.
2. Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия. М.: КДУ, 2005. – 592 с.
3. Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты кристаллической решётки. М.: Metallurgy, 1990. – 336 с.
4. Вегман Е.Ф., Руфанов Ю.Г., Федорченко И.Н. Кристаллография, минералогия, петрография и рентгенография. М.: Metallurgy, 1990. – 262 с.
5. Кривуша Л.С., Большаков В.И. Кристаллография, кристаллохимия и минералогия. Дн-вск: Gaudeamus, 2002. – 223 с.
6. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. Рентгенографический и электроннооптический анализ. М.: Metallurgy, 1970. – 366 с.
7. Розин К.М., Гусев Э.Б. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических многогранников. М.: Metallurgy, 1982. – 168 с.
8. Розин К.М., Гусев Э.Б. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических структур. М.: Metallurgy, 1985. – 168 с.
9. Узлов К.І., Петров С.С. Робоча програма, методичні вказівки та індивідуальні завдання до вивчення дисципліни «Кристаллографія, кристаллохімія та мінералогія» для студентів спеціальності – 132 матеріалознавство. – Дніпропетровськ: НМетАУ, 2014. – 37 с.

Навчальне видання

Узлов Костянтин Іванович

## Кристалографія, кристалохімія та мінералогія

### Частина I

Конспект лекцій

Тем. план 2015, поз. 71

Підписано до друку 05.10.2015. Формат 60×84 1/16. Папір друк. Друк плоский.  
Облік.-вид. арк. 2,11 умов. друк. арк. 2,09. Тираж 100 пр. Замовлення №169.

Національна металургійна академія України  
49600, м. Дніпропетровськ-5, пр. Гагаріна, 4

---

Редакційно-видавничий відділ НМетАУ