

Министерство образования и науки Российской Федерации

Национальный исследовательский ядерный университет  
«МИФИ»

**В.Н. Яльцев, В.И. Скрытный**

**ПРАКТИКУМ ПО ФИЗИЧЕСКОЙ  
КРИСТАЛЛОГРАФИИ**

*Рекомендовано УМО «Ядерные физика и технологии»  
в качестве учебного пособия  
для студентов высших учебных заведений*

Москва 2011

УДК 548.0:53(075)  
ББК 22.37я7  
Я 53

*Яльцев В.Н., Скритный В.И.* **Практикум по физической кристаллографии:**  
Учебное пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2011. – 88 с.

Предназначено для студентов, обучающихся по специальности «Физика металлов», и аспирантов, специализирующихся в области физики конденсированных сред и материаловедения. Может быть полезно молодым специалистам в области физики металлов, твердого тела и материаловедения.

Подготовлено в рамках Программы создания и развития НИЯУ МИФИ.

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. В.Т. Заболотный

ISBN 978-5-7262-1553-2

© *Национальный исследовательский  
ядерный университет «МИФИ», 2011*

Редактор Е.Г. Станкевич

Подписано в печать 15.11.2011. Формат 60×84 1/16  
Печ. л. 5,5. Уч.-изд. л. 5,5. Тираж 100 экз.  
Изд. № 3/4. Заказ № 66

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».  
155409 Москва, Каширское шоссе, 31

ООО «Полиграфический комплекс «Курчатовский».  
114000, Московская область, г. Электросталь, ул. Красная, д. 42.

## СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие.....	4
1. Основы кристаллографии.....	5
1.1. Кристаллографические проекции.....	5
1.2. Стереографическая проекция.....	7
1.3. Применение стереографической проекции.....	9
<i>Контрольные упражнения и задачи.....</i>	<i>18</i>
2. Пространственная решетка.....	20
2.1. Кристаллографические символы.....	23
2.2. Обратная решетка.....	27
2.3. Основные формулы структурной кристаллографии.....	33
<i>Контрольные упражнения и задачи.....</i>	<i>35</i>
3. Симметрия кристаллов.....	37
3.1. Поворотные оси симметрии.....	38
3.2. Инверсионные оси.....	40
3.3. Зеркально-поворотные оси.....	41
3.4. Точечные группы симметрии.....	42
3.5. Предельные группы симметрии.....	44
<i>Контрольные упражнения и задачи.....</i>	<i>46</i>
4. Физические свойства кристаллов.....	49
4.1. Принцип симметрии в кристаллофизике.....	49
4.2. Упругие свойства кристаллов.....	51
<i>Контрольные упражнения и задачи.....</i>	<i>53</i>
5. Кристаллография пластической деформации.....	54
5.1. Пластическая деформация монокристаллов.....	55
5.2. Кристаллографическая текстура.....	57
<i>Контрольные упражнения и задачи.....</i>	<i>60</i>
6. Кристаллография границ зерен и мартенситных превращений.....	62
6.1. Малоугловые границы.....	63
6.2. Высокоугловые границы.....	63
6.3. Кристаллография мартенситных превращений.....	65
<i>Контрольные упражнения и задачи.....</i>	<i>67</i>
Указания к решению задач.....	68
Тесты по дисциплине «Физическая кристаллография».....	74
Список рекомендуемой литературы.....	88

## Предисловие

Учебное пособие содержит краткое изложение основ кристаллографии, описание симметрии кристаллов, физических свойств кристаллов, кристаллографии пластической деформации, границ зерен и мартенситных превращений. При рассмотрении теоретических вопросов и решении задач и упражнений используются матричные и тензорные методы.

Каждый раздел содержит краткое рассмотрение основ теории для решения задач, контрольные упражнения и задачи разного уровня. Приводится краткое изложение решения задач повышенной сложности.

Тесты используются при проведении коллоквиумов и зачета по дисциплине «Физическая кристаллография».

Пособие составлено в соответствии с государственным образовательным стандартом (ГОС) для направления 651800 «Физическое материаловедение» по специальности 150702 «Физика металлов» для дисциплины «Кристаллография, рентгенография и микроскопия: физическая кристаллография».

# 1. ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

## 1.1. Кристаллографические проекции

Для изображения расположения плоскостей (и ребер) кристалла используют графические методы проектирования на плоскость или сферу. При этом вместо кристалла рассматривают *прямой кристаллографический комплекс*. При переходе от кристалла к кристаллографическому комплексу все параллельные грани кристалла заменяются одной плоскостью, а все параллельные ребра – одной прямой. Точка пересечения указанных геометрических элементов носит название *центра комплекса*.

Совокупность плоскостей, пересекающихся по общей прямой, называется *кристаллографической зоной*, а общее направление – *осью зоны*. Таким образом, кристаллографический комплекс состоит из ряда кристаллографических зон.

Во многих случаях используют *обратный (полярный) комплекс*, в котором плоскости прямого (кристаллографического) комплекса заменены нормальными к ним, а прямые – перпендикулярными к ним плоскостями. Для кубического кристалла изображения прямого и обратного комплексов совпадают. Кристаллографическая зона в обратном комплексе изображается плоскостью, отвечающей оси зоны прямого комплекса, и совокупностью пересекающихся в общей точке прямых, являющихся нормальными к плоскостям прямого комплекса.

Для изображения кристаллов чаще всего применяются следующие виды проекций: линейная, гномоническая, стереографическая и гномостереографическая.

В *линейной* проекции используют прямой кристаллографический комплекс, центр которого  $C$  располагают на определенном расстоянии  $D$  от плоскости проекции  $P$  (рис. 1.1).

Линии и точки пересечения плоскостей и прямых комплекса являются его линейной проекцией. Таким образом, кристаллографическая зона проектируется совокупностью прямых, пересекающихся в общей точке  $M$ , являющейся проекцией оси зоны.

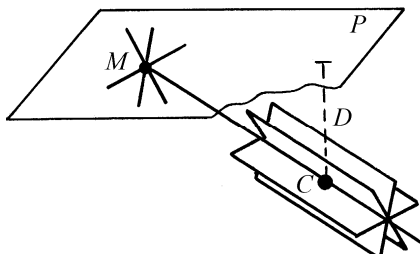


Рис. 1.1. Линейная проекция кристаллографической зоны

Неудобство линейной проекции состоит в том, что для изображения всех прямых и плоскостей кристаллографического комплекса необходима бесконечная плоскость проекции. Из-за отмеченных недостатков линейная проекция применяется редко.

### **Гномоническая проекция**

отличается от линейной тем, что вместо прямого комплекса используется обратный. В этом случае плоскости прямого комплекса изображаются на проекции точками, а прямые – линиями. Зона плоскостей проектируется рядом точек, расположенных на прямой, являющейся проекцией оси зоны (рис. 1.2).

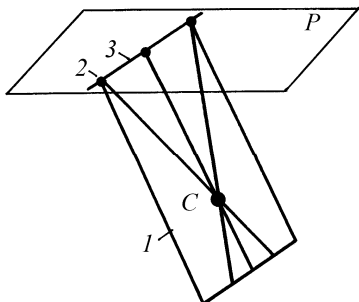


Рис. 1.2. Гномоническая проекция кристаллографической зоны:

- 1 – кристаллографическая зона в обратном комплексе;
- 2 – гномоническая проекция плоскости;
- 3 – гномоническая проекция оси зоны;
- C – центр комплекса;
- P – плоскость проекции

Гномоническая проекция иногда применяется для построения проекций по лауэграммам ориентированных монокристаллов.

Недостаток гномонической проекции тот же, что и линейной – для полного изображений всех плоскостей и прямых обратного комплекса необходима бесконечная плоскость проекции.

## 1.2 Стереографическая проекция

При построении стереографической проекции центр кристаллографического комплекса  $C$  совмещается с центром сферы  $O$  (рис. 1.3).

В качестве плоскости проекции используют плоскость, проходящую через центр сферы. Сечение сферы плоскостью проекции называют *основным кругом* проекции, а точки пересечения диаметра сферы, перпендикулярного к плоскости проекции, – *полюсами проекции*. Северный полюс (точка  $N$ ) лежит над плоскостью проекции, а южный (точка  $S$ ) – под ней. Для получения стереографической проекции прямой соответствующую линию  $L$  проводят до пересечения со сферой в точке  $M_1$  и соединяют эту точку проектирующим лучом  $SM_1$ , исходящим из южного полюса  $S$ . Пересечение проектирующего луча с плоскостью проекции дает стереографическую проекцию данной прямой в виде точки  $M_1'$ . Соответственно проектирование точки пересечения той же прямой  $L$  в южном полушарии  $M_2$  проводят проектирующим лучом из полюса  $N$ , что дает стереографическую проекцию в виде крестика  $M_2'$ .

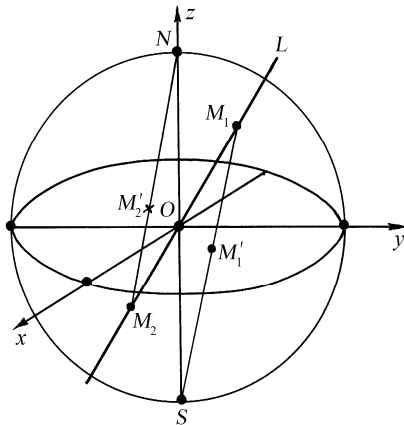


Рис. 1.3. Стереографическая проекция прямой

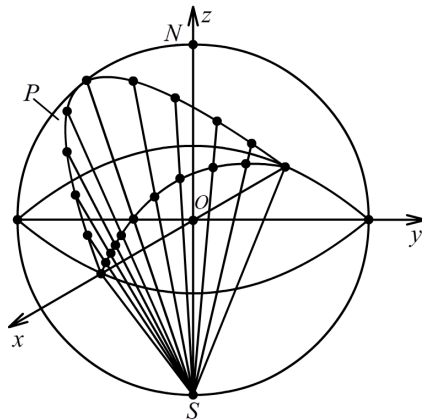


Рис. 1.4. Стереографическая проекция плоскости

Для различения проекций точек северного и южного полушарий первые обозначают точками, а вторые – крестиками.

Таким образом, стереографическая проекция прямой кристаллографического комплекса представляет собой две точки (точку и крестик), расположенные на равных расстояниях от центра проекции. Прямая, лежащая в плоскости проекции, изображается двумя точками, находящимися на основном круге проекции. Прямая, перпендикулярная к плоскости проекции, проектируется в ее центр.

Плоскость кристаллографического комплекса  $P$  проектируется как дуга большого круга (рис. 1.4), опирающаяся на диаметр основного круга проекции (сплошная при проектировании из северного полушария, пунктирная – из южного).

Плоскость, перпендикулярная к плоскости проекции, имеет вид прямой, проходящей через центр основного круга.

Зона плоскостей проектируется как серия дуг больших кругов, пересекающихся в двух диаметрально противоположных точках, являющихся проекциями оси зоны.

**Гномостереографическая проекция** (стереографическая проекция обратного комплекса) является более удобной для решения практических задач. На этой проекции плоскости изображаются точками, а прямые – большими кругами. Зона плоскостей проектируется в виде точек, расположенных на большом круге.

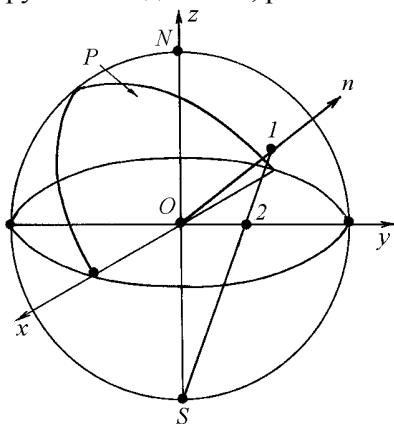


Рис. 1.5. Гномостереографическая проекция плоскости

Принцип построения гномостереографической проекции плоскости показан на рис. 1.5.

Плоскость  $P$  кристаллографического комплекса (центр комплекса совпадает с центром сферы) заменяется нормалью  $n$ , проходящей через центр сферы и пересекающей сферу в точке  $I$ . Соединив точку  $I$  проектирующим лучом с точкой  $S$ , получаем на плоскости проекции точку  $2$ , являющуюся гномостереографической проекцией плоскости.

**Сетка Вульфа.** Принцип построения *сетки Вульфа* показан на рис. 1.6. Любой меридиан – стереографическая проекция плоско-



сти, а меридианы сетки Вульфа – стереографическая проекция кристаллографической зоны, плоскости которой повернуты на  $2^\circ$  вокруг оси, лежащей в плоскости проекции. Любая параллель является проекцией конуса с осью  $x$ , а параллели сетки Вульфа – стереографическая проекция семейства соосных конусов, угол полураствора которых вокруг оси, лежащей в плоскости проекции, отличается на  $2^\circ$ .

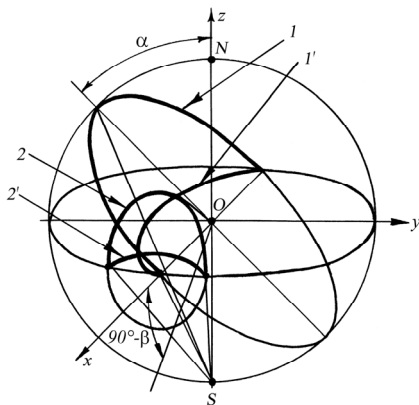


Рис. 1.6. Построение сетки Вульфа: плоскость  $I$  проецируется меридианом  $I'$ ; конус  $2$  проецируется параллелью  $2'$

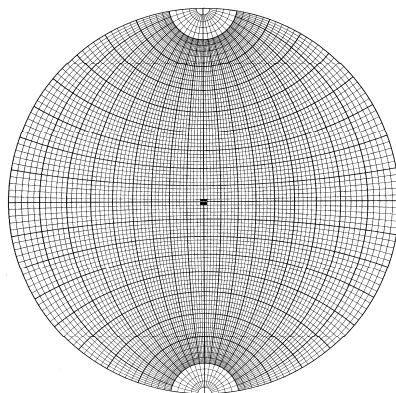


Рис. 1.7. Сетка Вульфа

Особенности сетки Вульфа (рис. 1.7) – равномерная угловая шкала основного круга проекции и неравномерные, но одинаковые шкалы нулевого меридиана и нулевой параллели (экватора).

Рассмотрим основные задачи, решаемые с помощью координатных сеток.

### 1.3. Применение стереографической проекции

**Определение угла между двумя направлениями.** Поскольку все направления и плоскости кристаллографического комплекса проходят через общую точку – центр комплекса, то любые два направления всегда лежат в одной плоскости. Угол между двумя рассматриваемыми направлениями находится в этой же плоскости, которая на стереографической проекции изображается меридианом. Поэтому

кальку с нанесенными на ней точками (проекциями рассматриваемых направлений) поворачивают вокруг центра сетки Вульфа до тех пор, пока эти точки (1–2) не окажутся на одном меридиане сетки (рис. 1.8). Искомый угол  $\alpha$  определяют по разности широт, соответствующих параллелям точек 1, 2.

Если проекции двух направлений получены проектированием из разных полушфер (на кальке отмечены соответственно точка 3' и крестик 4), то кальку поворачивают таким образом, чтобы оба выхода направлений попали на симметричные меридианы относительно нулевого меридиана. Искомый угол  $\alpha$  определяется суммой углов  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , отсчитываемых по соответствующим меридианам до полюса сетки.

Возможен и другой вариант нахождения угла  $\alpha$ . Для этого следует перевести проекцию направления 4 (крестик) в точку 4', что будет отвечать случаю проектирования обоих рассматриваемых направлений из одной (северной) полушферы. Перевод крестика 4 в точку 4' осуществляется просто: крестик 4 соединяют прямой с центром проекции, на продолжении этой прямой откладывают расстояние, равное расстоянию от крестика 4 до центра. Полученную точку 4' располагаем на одном меридиане с точкой 3'. Искомый угол ( $\alpha' = 180^\circ - \alpha$ ) отсчитывают вдоль этого меридиана.

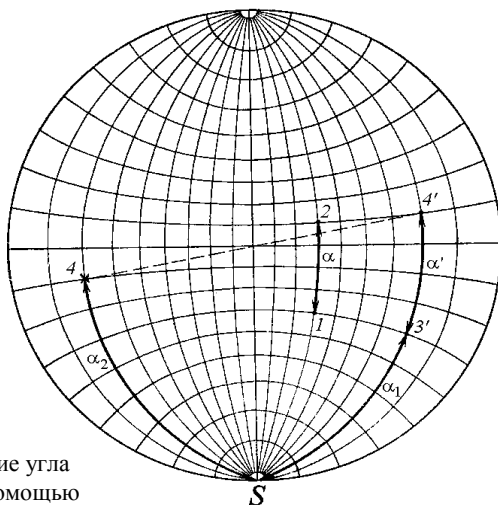


Рис. 1.8. Определение угла между прямыми с помощью сетки Вульфа

**Определение направляющих углов для направления.** Направляющие углы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  для произвольного направления можно определить после последовательного измерения углов между стереографической проекцией этого направления  $R$  и стереографическими проекциями осей системы координат  $x$ ,  $y$ ,  $z$  (рис. 1.14).

Если известны направляющие углы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  для направления, то координаты  $R_x$  и  $R_y$  стереографической проекции этого направления вычисляют как

$$R_x = r \operatorname{tg}(\gamma/2) \cos \alpha / (\sin \gamma), \quad R_y = r \operatorname{tg}(\gamma/2) \cos \beta / (\sin \gamma), \quad (1.1)$$

где  $r$  – радиус основного круга проекции.

Процедура определения сферических углов  $\varphi$  и  $\theta$  для произвольной прямой показана на рис. 1.9, а координаты  $R_x$  и  $R_y$  стереографической проекции этой прямой вычисляют так:

$$R_x = r \operatorname{tg}(\theta/2) \cos \varphi, \quad R_y = r \operatorname{tg}(\theta/2) \sin \varphi. \quad (1.2)$$

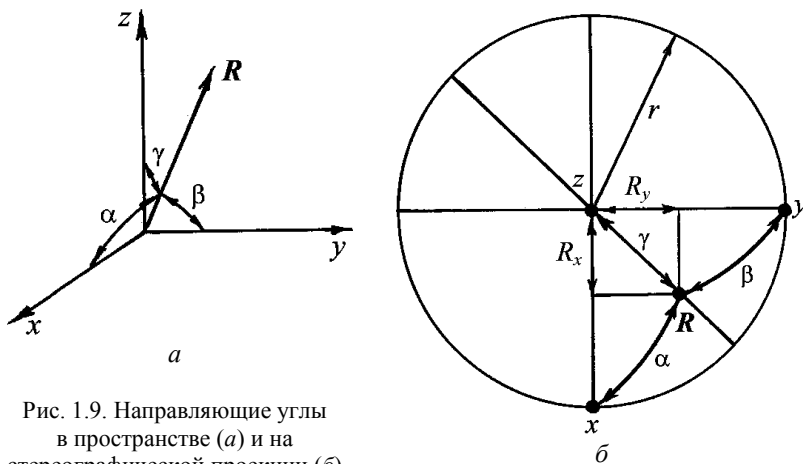


Рис. 1.9. Направляющие углы в пространстве (а) и на стереографической проекции (б)

**Построение гномостереографической проекции плоскости.**

Плоскость кристаллографического комплекса изображается на стереографической проекции меридианом  $P$ . Для построения нормали к плоскости кальку с нанесенной проекцией плоскости  $P$  поворачивают вокруг центра сетки Вульфа до совпадения с одним из меридианов сетки (рис. 1.10).

Далее по экватору сетки Вульфа отсчитывают  $90^\circ$ . Полученная точка  $N$  является стереографической проекцией нормали к плоскости или гномостереографической проекцией этой плоскости.

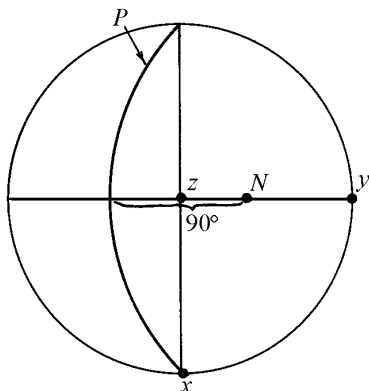


Рис. 1.10. Построение гномостереографической проекции плоскости

**Определение угла между двумя плоскостями.** Поскольку угол между плоскостями равен углу между нормальными к этим плоскостям, то достаточно определить угол между гномостереографическими проекциями плоскостей. Сначала найдем нормали  $N_1$  и  $N_2$  к плоскостям  $P_1$  и  $P_2$  (рис. 1.11), затем, поворачивая кальку, добиваемся совмещения точек  $N_1$  и  $N_2$  с одним из меридианов сетки Вульфа. Искомый угол  $\alpha$  определяется вдоль этого меридиана.

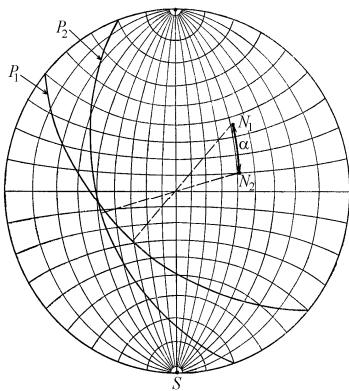


Рис. 1.11. Определение угла между плоскостями

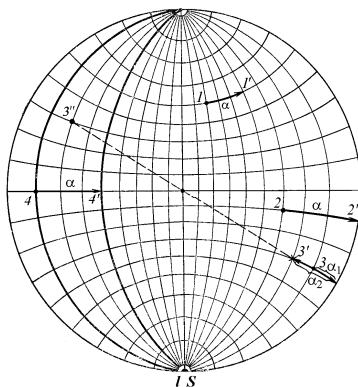


Рис. 1.12. Поворот направления вокруг оси, лежащей в плоскости проекции

**Поворот вокруг оси, лежащей в плоскости проекции.** Поскольку любое вращение направления связано с нахождением этого направления на конусе, то на стереографической проекции поворот прямой  $l$  вокруг оси  $l$ , лежащей в плоскости проекции и совпа-

дающей с южным полюсом  $S$ , происходит путем перемещения по соответствующей параллели (рис. 1.12).

Сначала совмещают проекцию оси поворота  $l$  с полюсом сетки Вульфа, затем точку  $l$  смещают по параллели на нужный угол  $\alpha$ . Перемещение точек слева направо отвечает повороту вокруг оси  $l$  по часовой стрелке. Соответственно перемещение точек справа налево отвечает вращению против часовой стрелки. Если точка располагается на параллели ближе к основному кругу проекции, чем угол поворота  $\alpha$  (например, точка  $3$ ), то после поворота на угол  $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2$  эта точка окажется в другой (нижней) полусфере и уже будет изображаться крестиком ( $3'$ ). Можно эту точку перевести в верхнюю полусферу, соединив прямой точку  $3'$  с центром и отложив на ее продолжении угол, равный расстоянию от точки  $3'$  до центра (точка  $3''$  на проекции).

Для осуществления поворота плоскости удобно рассматривать гномостереографическую проекцию плоскости, то есть вместо поворота плоскости  $P$  поворачивают нормаль  $N$  к этой плоскости, а затем переходят к повернутой плоскости  $P'$  (рис. 1.13).

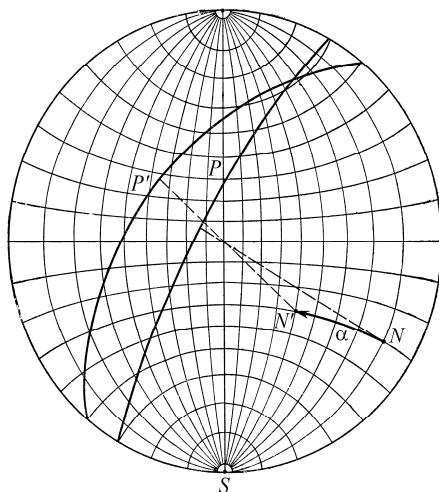


Рис. 1.13. Поворот плоскости вокруг оси, лежащей в плоскости проекции

Для плоскости  $P$  находят гномостереографическую проекцию  $N$ , перемещают по параллели на угол  $\alpha$  (точка  $N'$ ), а затем для  $N'$  находят повернутую стереографическую проекцию плоскости  $P'$ .

**Поворот вокруг оси, перпендикулярной к плоскости проекции.**  
Для такого поворота удобно использовать сетку Болдырева (рис. 1.14).

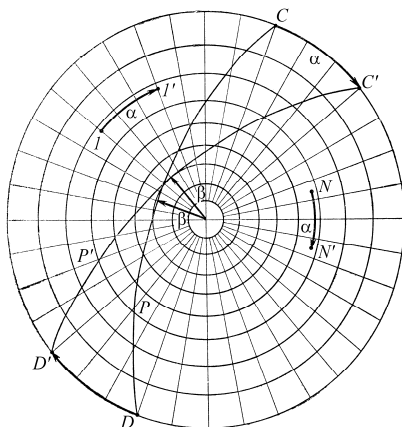


Рис. 1.14. Поворот вокруг оси, перпендикулярной плоскости проекции

Точки, соответствующие стереографической проекции направления  $I$  и гномостереографической проекции плоскости  $N$ , перемещаются на угол  $\alpha$  по концентрическим окружностям, переходя в точки  $I'$  и  $N'$  соответственно. Поворот стереографической проекции плоскости  $P$  тоже достаточно прост. Точки пересечения плоскости  $C$  и  $D$  с основным кругом поворачивают на угол  $\alpha$  (точки  $C'$  и  $D'$ ). Затем, поместив точки  $C'$  и  $D'$  в полюса сетки Вульфа, на кальке проводят меридиан  $P'$ , отстоящий от центра сетки на тот же угол  $\beta$ , что и меридиан, соответствующий плоскости  $P$ .

**Построение малого круга.** Малый круг получается при стереографическом проектировании кругового конуса  $1$  с углом полураствора меньше  $90^\circ$  (рис. 1.15).

Проектирующий конус  $2$  является эллиптическим с двумя круговыми сечениями: одно из них – при пересечении со сферой, а второе – на стереографической проекции, причем стереографическая проекция оси кругового конуса не совпадает с центром окружности на стереографической проекции.

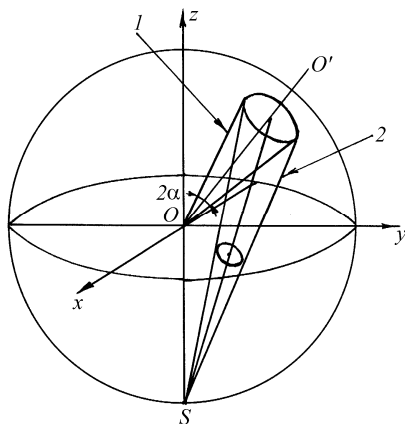


Рис. 1.15. Малый круг на стереографической проекции

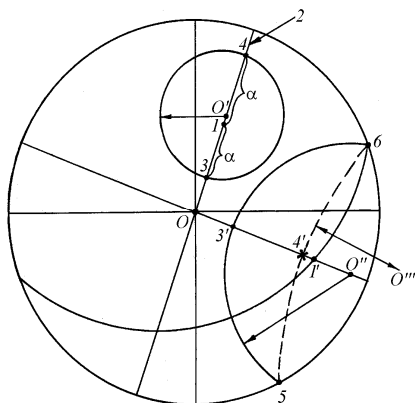


Рис. 1.16. Построение малого круга

Если ось конуса на стереографической проекции изображается точкой  $O^I$  (рис. 1.16), то малый круг представляет собой геометрическое место точек, образующих с  $O^I$  угол  $\alpha$  – угол полураствора конуса.

Для построения малого круга можно провести нулевой меридиан 2 через точку 1 и, откладывая по нему с помощью сетки Вульфа в обе стороны от 1 угол  $\alpha$ , получить точки 3 и 4. Поскольку эти точки лежат на диаметре малого круга, то, измерив расстояние между ними и поделив его пополам, найдем центр окружности  $O'$ , который не совпадает со стереографической проекцией оси конуса вследствие неравномерности угловой шкалы по нулевому меридиану или экватору сетки Вульфа.

Для конуса с достаточно большим углом раствора конуса  $\alpha$  диаметрально противоположные точки  $3'$  и  $4'$  могут быть получены проектированием из разных полушарий (точка  $3'$  из северного, точка  $4'$  из южного и показана крестиком). Теперь для построения малого круга можно подобрать с помощью сетки Вульфа такие меридианы, для которых расстояния от полюсов (точки 5 и 6) до  $I'$  равны  $\alpha$ . Малый круг в северном полушарии получим, проведя окружность (с центром в точке  $O''$ ) через точки  $3'$ , 5, 6, а в южном полушарии через точки  $4'$ , 5 и 6 (окружность с центром в  $O'''$ ).

**Поворот вокруг произвольной оси.** При вращении вокруг произвольной оси  $l$  траектория перемещения направления  $l$ , образующего угол  $\alpha$  с  $l$ , будет изображаться соответствующим малым кругом (рис. 1.23).

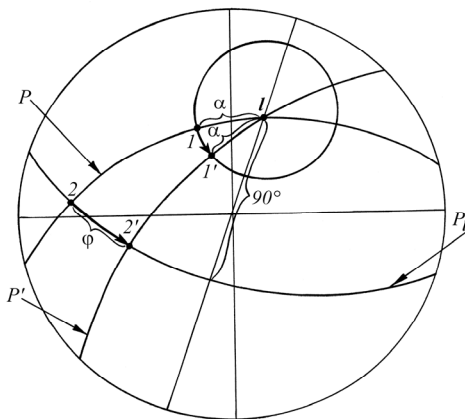


Рис. 1.17. Поворот вокруг произвольной оси

Из-за неравномерности угловой шкалы по малому кругу угол поворота  $\varphi$  точки  $l$  вокруг  $l$  нельзя откладывать непосредственно с помощью транспортира.

Угол поворота  $\varphi$  – центральный в плоскости  $P_l$ , перпендикулярной к оси поворота  $l$ . Его можно найти как угол между направлением  $2$  – пересечением плоскости  $P$ , содержащей  $l$  и  $l$  до поворота, и направлением  $2'$ , соответствующим пересечению с плоскостью  $P'$  после поворота. Искомое направление  $l'$  находится в плоскости  $P'$  на угловом расстоянии  $\alpha$  от оси поворота  $l$ .

**Определение эйлеровских углов поворота.** Эйлеровские углы используются для описания поворота твердого тела (рис. 1.18,а).

Первый поворот на угол  $\varphi$  происходит вокруг оси  $z$ , при этом ось  $x$  переходит в  $x'$ , ось  $y$  – в  $y'$ , а система координат  $xuz$  – в  $x'y'z'$ . Второй поворот на угол  $\theta$  – вокруг оси  $x'$ , при этом ось  $y'$  переходит в  $y''$ , ось  $z$  – в  $z'$ , а система координат  $x'y'z'$  – в  $x'y''z'$ . Третий поворот на угол  $\psi$  происходит вокруг оси  $z'$ , при этом ось  $x'$  переходит в  $x''$ , ось  $y''$  – в  $y'''$ , а система координат  $x'y''z'$  – в  $x''y'''z'$ . Соответствующие повороты на стереографической проекции показаны на рис. 1.18,б.



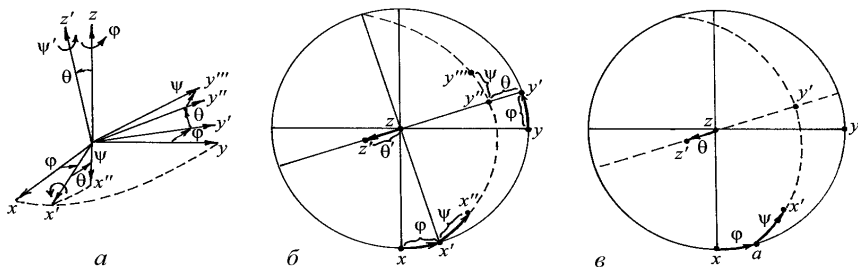


Рис. 1.18. Эйлеровские углы поворота в пространстве (а), на стереографической проекции (б), определение эйлеровских углов на стереографической проекции (в)

Если известно положение осей ортогональной системы координат на стереографической проекции в исходном положении ( $xyz$ ) и после поворота ( $x'y'z'$ ) (рис. 1.18,в), то, сравнивая с рис. 1.18,а, можно определить эйлеровские углы следующим образом. Если расположить оси  $x'$  и  $y'$  на меридиане, то его пересечение с основным кругом проекции в точке  $a$  позволяет определить угол  $\varphi$ , а угол между точками  $a$  и  $x'$  соответствует углу  $\psi$ . Угол  $\theta$  определяют как угол между  $z$  и  $z'$ , расположенными на экваторе.

**Определение угла и оси поворота.** В кристаллографии для описания поворота твердого тела часто используются такие параметры, как ось поворота  $l$  и угол поворота  $\alpha$ . Если при повороте направления  $1$  и  $2$  переходят в  $1'$  и  $2'$  соответственно, то, как видно из рис 1.19,а, ось поворота  $l$  находится на пересечении биссекторных плоскостей  $B_1$  и  $B_2$ .

Каждая биссекторная плоскость проходит через соответствующую биссектрису и нормаль к плоскости, содержащей направления до и после поворота. Угол поворота  $\alpha$  является центральным углом в отчетной плоскости  $P_l$  с нормалью  $l$ .

Если при повороте система координат  $xuz$  переходит в  $x'y'z'$  (рис. 1.19,б), то ось поворота  $l$  можно определить по пересечению меридианов  $B_1$  и  $B_2$ . Каждый из них проходит через гномостереографическую проекцию плоскости  $N_{yy'}$  или  $N_{zz'}$  и соответствующую биссектрису  $b_1$  или  $b_2$ . Угол поворота  $\alpha$  измеряют в плоскости  $P_l$

между точками  $Z_P$  и  $Z'_P$ , являющимися проекциями  $z$  и  $z'$  на плоскость  $P_I$ .

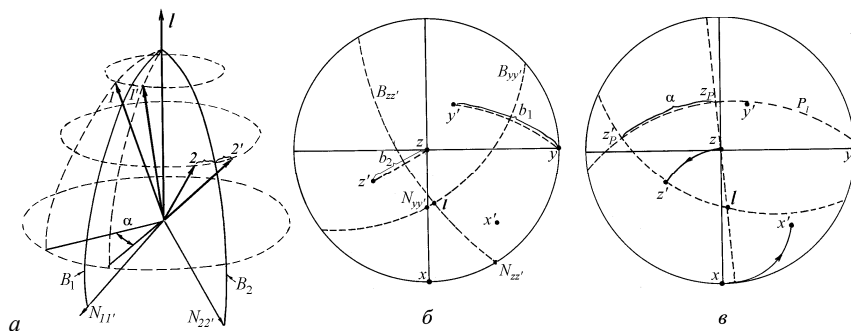


Рис. 1.19. Определение оси и угла поворота в пространстве (а) и на стереографической проекции (б, в)

### **Контрольные упражнения и задачи**

1.1. Определите графически с использованием сетки Вульфа угол  $\varphi_{12}$  между заданными направлениями 1 и 2.

1.2. Определите графически с использованием сетки Вульфа направляющие углы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  для заданного направления 1.

1.3. Определите графически с использованием сетки Вульфа сферические углы  $\theta$ ,  $\varphi$  для направления заданного 3.

1.4. Используя сетку Вульфа, найдите стереографическую проекцию плоскости  $P_{13}$ , проходящей через направления 1 и 3.

1.5. Найдите графически с использованием сетки Вульфа гномостереографическую проекцию плоскости  $N_{23}$ , проходящей через заданные направления 2 и 3.

1.6. Найдите графически с использованием сетки Вульфа стереографическую проекцию плоскости  $P_4$ , если ее гномостереографическая проекция задана точкой 4.

1.7. Определите графически с использованием сетки Вульфа угол  $\varphi$  между направлением 1 и плоскостью  $P_{34}$ , проходящей через направления 3 и 4.

1.8. Определите графически с использованием сетки Вульфа угол  $\delta$  между плоскостью  $P_{12}$ , проходящей через направления 1 и 2, и плоскостью  $P_{13}$ .

1.9. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *направление B*, заданное направляющими углами  $\alpha = 60^\circ$ ,  $\beta = 70^\circ$ .

1.10. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *направление C*, заданное сферическими углами  $\theta = 50^\circ$ ,  $\varphi = 120^\circ$ .

1.11\*. В системе координат 245 с использованием сетки Вульфа найдите *направление D*, заданное направляющими углами  $\alpha = 50^\circ$ ,  $\beta = 60^\circ$ .

1.12\*. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *угол*  $\omega$  между проекциями направлений 1 и 2 на плоскость  $P_{45}$ .

1.13\*. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *угол*  $\eta$  между следами плоскостей  $P_{12}$  и  $P_{24}$  на плоскости  $P_{56}$ .

1.14. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *направление A'* в результате поворота заданного направления *A* вокруг оси *X* против часовой стрелки на  $20^\circ$ .

1.15. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *направление A''* в результате поворота заданного направления *A* вокруг оси *Y* по часовой стрелке на  $40^\circ$ .

1.16. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *направление A'''* в результате поворота заданного направления *A* вокруг оси *Z* против часовой стрелки на  $60^\circ$ .

1.17. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *стереографическую проекцию плоскости*  $P_{12}$ , проходящей через заданные направления 1 и 2, после поворота вокруг оси *X* по часовой стрелке на  $90^\circ$ .

1.18. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *траекторию вращения* направления 2 вокруг 1.

1.19\*. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *направление 5* в результате поворота направления 3 вокруг 4 по часовой стрелке на  $40^\circ$ .

1.20\*. Определите графически с использованием сетки Вульфа *угол* между направлениями 1 (точка) и 2 (крестик).

1.21\*. Определите графически с использованием сетки Вульфа *угол* между направлением 1 и плоскостью, проходящей через направления 2 (крестик) и 3 (точка).

1.22. Найдите графически с использованием сетки Вульфа *направление 2* в результате поворота направления 1 на  $90^\circ$  против часовой стрелки вокруг 3 – нормали к плоскости  $P_{14}$ , содержащей направления 1 и 4.

1.23. Определите графически с использованием сетки Вульфа *эйлеровские углы*  $\varphi_1, \theta, \varphi_2$  для системы координат, заданной направлениями 1, 2, 3 относительно  $XYZ$ .

1.24\*. Найдите графически с использованием сетки Вульфа стереографическую проекцию *оси разворота*  $l$  при совмещении поворотом систем координат  $XYZ$  и  $123$ .

1.25\*. Определите графически с использованием сетки Вульфа *угол поворота*  $\alpha$  при совмещении поворотом вокруг оси  $l$  систем координат  $XYZ$  и  $123$ .

*Примечание.* Звездочкой помечены упражнения и задачи повышенной сложности.

## 2. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ РЕШЕТКА

Любой узел пространственной решетки можно записать в виде  $\mathbf{R}_m = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$ , где  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  – векторы трансляций, а  $m_1, m_2, m_3$  – целые числа. Начало координат при этом может быть выбрано в любом узле пространственной решетки

Пространственные решетки по симметрии расположения узлов разделяются на семь видов, называемых *сингониями* (табл. 2.1).

Таблица 2.1

Кристаллографические системы координат

Сингонии	Число независимых параметров	Параметры
Триклинная	6	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Моноклинная	4	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$
Ромбическая	3	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тетрагональная	2	$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ромбоэдрическая или тригональная	2	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Гексагональная	2	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$
Кубическая	1	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Важной характеристикой кристаллографической системы является *метрическая матрица*  $\mathbf{G} = \{g_{ij}\}$ , элементы которой определяются скалярными произведениями базисных векторов  $g_{ij} = (\mathbf{a}_i \mathbf{a}_j)$ .

Метрические матрицы для некоторых сингоний имеют вид

$$\mathbf{G}_{\text{куб}} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_{\text{тетра}} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{G}_{\text{гекс}} = \begin{pmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_{\text{ромбич}} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}.$$

В некоторых случаях для описания пространственной решетки используют *сложные элементарные ячейки*, ребра которых не являются кратчайшими трансляциями, а в центрах граней или в центре объема имеются дополнительные узлы (правила выбора элементарных ячеек будут рассмотрены в дальнейшем). В этом случае положение узла в решетке задается вектором  $\mathbf{R}_{mn} = \mathbf{R}_m + \mathbf{R}_n$ , где вектор  $\mathbf{R}_n$  определяет положение дополнительных узлов  $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ ,  $n_1, n_2, n_3$  – дробные числа, являющиеся координатами трансляционно неидентичных узлов внутри элементарной ячейки, т.е. *базис решетки*. В матричном виде базисы объемно-центрированной ( $I$ ), гранецентрированной ( $F$ ), и  $A$ -центрированной решеток ( $A$ ) имеют вид

$$I - \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{vmatrix}, \quad A - \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{vmatrix},$$

$$F - \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{vmatrix}.$$

**Решетки Браве.** Огюст Браве показал, что все многообразие кристаллических структур можно описать с помощью 14 типов решеток, по формам элементарных ячеек и по симметрии и подразделяющихся на семь кристаллографических сингоний. Эти решет-

ки были названы *решетками Браве*. Любую кристаллическую структуру можно представить с помощью одной из таких решеток Браве. Для выбора *ячейки Браве* используют три условия:

1) симметрия элементарной ячейки должна соответствовать симметрии кристалла, точнее, наиболее высокой симметрии той сингонии, к которой относится кристалл. Ребра элементарной ячейки должны быть трансляциями решетки;

2) элементарная ячейка должна содержать максимально возможное число прямых углов или равных углов и равных ребер;

3) элементарная ячейка должна иметь минимальный объем.

Эти условия должны выполняться последовательно, т.е. при выборе ячейки первое условие важнее второго, а второе важнее третьего.

По характеру взаимного расположения основных трансляций или по расположению узлов все кристаллические решетки разбиваются, по Браве, на четыре типа:

примитивные ( $P$ ), базоцентрированные ( $C$ ,  $B$  или  $A$ ), объемноцентрированные ( $I$ ) и гранецентрированные ( $F$ ).

Распределение ячеек Браве по сингониям показано в табл. 2.2.

Таблица 2.2

**Распределение ячеек Браве по сингониям**

Сингонии	Ячейки Браве	Сингонии	Ячейки Браве
Триклинная	$P$	Тетрагональная	$P, I$
Моноклинная	$P, C$	Ромбоэдрическая (тригональная)	$R$
Ромбическая (орторомбическая)	$P, C, I, F$	Гексагональная	$P$
		Кубическая	$P, I, F$

В примитивной ячейке узлы решетки располагаются только в вершинах ячейки, а в сложных ячейках имеются еще дополнительные узлы. В объемноцентрированной  $I$ -ячейке – один узел в центре ячейки, в гранецентрированной  $F$ -ячейке по одному узлу в центре каждой грани, в базоцентрированной  $C$  ( $A$ ,  $B$ )-ячейке – по одному узлу в центрах пары параллельных граней.

## 2.1. Кристаллографические символы

**Символы узла.** Положение любого узла в пространственной решетке определяется вектором  $\mathbf{R}_{mnp}$   $\mathbf{R}_{mnp} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ . Три целых числа  $m, n, p$  однозначно определяют положение узла и называются *индексами* данного узла. Совокупность чисел  $m, n, p$ , записанная в двойных квадратных скобках  $[[m_1 \ m_2 \ m_3]]$ , называется *символом узла*.

**Символы узловой прямой.** Решетку можно представить как семейство параллельных узловых прямых. Это семейство можно характеризовать прямой, проходящей через начало координат, которое принимается за первую точку, определяющую данную прямую. Второй определяющей точкой является ближайший узел с *целочисленными* координатами. Координаты этого узла, взятые в квадратные скобки, принимают за *кристаллографический символ прямой*  $[mnp]$ . Индексы важнейших направлений в кубическом кристалле приведены на рис. 2.1.

Оси координат имеют символы:  $ox - [100]$ ,  $oy - [010]$ ,  $oz - [001]$ . Одно из основных преимуществ кристаллографической символики состоит в неизменности символов осей координат от сингонии кристалла.

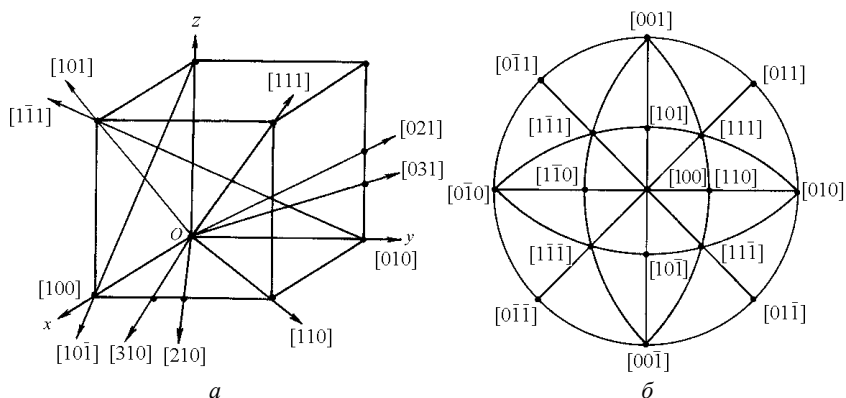


Рис. 2.1. Индексы важнейших направлений в пространстве (а) и на стереографической проекции (б)

Индексы в угловых скобках  $\langle mnp \rangle$  используют для обозначения направлений определенного типа, связанных элементами симметрии.

рии. Например, для кубической сингонии символ  $\langle 100 \rangle$  обозначает направления  $[100]$ ,  $[010]$  и  $[001]$ , а также  $[\bar{1}00]$ ,  $[0\bar{1}0]$ ,  $[00\bar{1}]$ , т.е. направления, индексы которых отличаются либо перестановкой, либо знаком.

В сложных ячейках можно выделить примитивные ячейки, построенные на кратчайших векторах трансляций. Так, в случае гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки примитивная ячейка будет построена на векторах  $\frac{1}{2}a[110]$ ,  $\frac{1}{2}a[011]$ ,  $\frac{1}{2}a[101]$  (рис. 2.2).

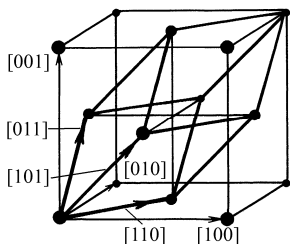


Рис. 2.2. Примитивная ячейка в ГЦК-решетке

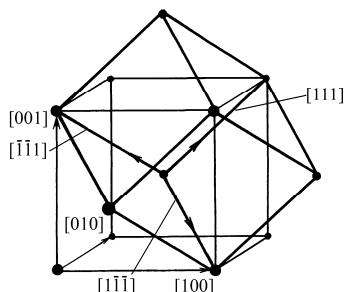


Рис. 2.3. Примитивная ячейка в ОЦК-решетке

Примитивная ячейка для объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетки построена на векторах  $\frac{1}{2}a[11\bar{1}]$ ,  $\frac{1}{2}a[\bar{1}11]$ ,  $\frac{1}{2}a[1\bar{1}1]$  (рис. 2.3).

Базисные векторы примитивной решетки можно представить в матричном виде как

$$A_{\text{ГЦК}} = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \end{pmatrix}, \quad A_{\text{ОЦК}} = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{pmatrix}.$$

**Символы плоскости.** Пространственная решетка может быть представлена семейством параллельных узловых плоскостей. Пусть одна из таких плоскостей семейства отсекает на осях координат отрезки  $A$ ,  $B$ ,  $C$ .

*Кристаллографическими индексами плоскости (индексами Миллера)* называют три целых взаимно простых числа  $h$ ,  $k$ ,  $l$ , которые



являются обратным отношением длин отрезков, отсекаемых плоскостью на осях координат, выраженных в соответствующих длинах трансляций:  $h : k : l = 1/(A/a) : 1/(B/b) : 1/(C/c)$ .

Индексы, заключенные в круглые скобки, называют *кристаллографическим символом плоскости* ( $hkl$ ).

На рис. 2.4 показано расположение различных кристаллографических плоскостей в кубической элементарной ячейке.

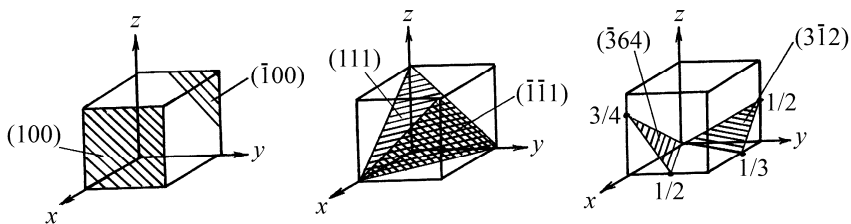


Рис. 2.4. Расположение различных плоскостей в кубической элементарной ячейке

Символ в фигурных скобках  $\{hkl\}$  используют для обозначения плоскостей определенного типа, связанных элементами симметрии, и называется *кристаллической формой*. Например, для кубической сингонии символ  $\{100\}$  отвечает плоскостям  $(100)$ ,  $(010)$ ,  $(001)$ ,  $(\bar{1}00)$ ,  $(0\bar{1}0)$ ,  $(00\bar{1})$ , связанных между собой преобразованиями симметрии. Следует отметить, что плоскости, принадлежащие одной кристаллической форме, характеризуются одинаковым межплоскостным расстоянием

**Четвертый индекс в гексагональной системе.** Элементарная ячейка в гексагональной решетке определяется двумя равными векторами  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ , расположенными под углом  $120^\circ$  друг к другу, и осью  $c$ , находящейся под прямым углом к плоскости, в которой лежат векторы  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ , называемой *базисной плоскостью*. Узлы решетки, расположенные в базисной плоскости, имеют гексагональную симметрию и характеризуются тремя равноправными осями  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  и  $\mathbf{a}_3$ .

Поэтому в гексагональной системе принято определять положение плоскости с помощью четырех индексов  $(hkil)$ , где четвертый

индекс  $i$  берется по оси  $a_3$ , причем  $i = -(h + k)$ , т.е. четвертый индекс равен сумме первых двух, взятой с противоположным знаком.

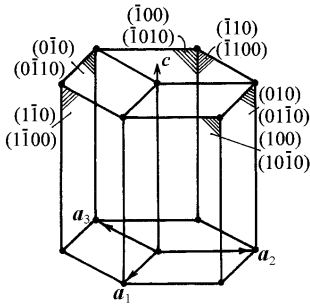


Рис. 2.5. Обозначения плоскостей в гексагональной элементарной ячейке

На рис. 2.5 плоскости гексагональной призмы обозначены с помощью трех и четырех индексов. Символы этих плоскостей в четырехиндексном обозначении отличаются только перестановкой первых трех индексов формы  $\{10\bar{1}0\}$ . Таким образом, при обозначении с помощью четырех индексов легко обнаруживаются равнозначные плоскости. Однако расчеты в гексагональной системе для упрощения проводят с помощью трех индексов. Чет-

вертый индекс часто опускается и заменяется точкой, т.е. записывается  $(hk.l)$ .

Символом  $\{hkil\}$  обозначают симметрично-равнозначные (эквивалентные) плоскости, которые переводятся друг в друга каким-либо элементом симметрии.

Система обозначений с четырьмя индексами может быть использована и для направлений в гексагональной решетке. Если в системе с тремя индексами направление  $\mathbf{R}$  записывается в виде  $\mathbf{R}(3) = Ua_1 + Va_2 + Wc$ , то в системе с четырьмя индексами оно запишется  $\mathbf{R}(4) = ua_1 + va_2 + ta_3 + wc$ , где индекс  $t$  вводится условием  $u + v + t = 0$ .

Переход от  $u, v, t, w$  к  $U, V, W$  имеет вид

$$\begin{aligned} U &= 2u + v; \\ V &= u + 2v; \\ W &= w, \end{aligned} \quad (2.1)$$

а обратный переход

$$\begin{aligned} u &= 2U - V; \\ v &= 2V - U; \\ w &= 3W; \\ t &= -(u + v). \end{aligned} \quad (2.2)$$

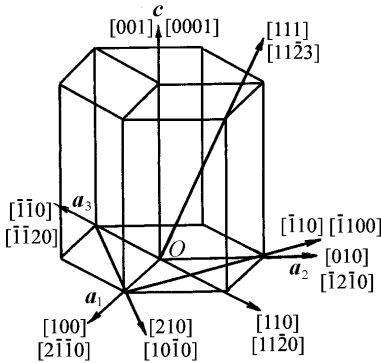


Рис. 2.6. Индексы направлений в гексагональной системе

Примеры перехода от системы обозначений с тремя индексами к обозначениям, в которых используются четыре индекса, даны на рис. 2.6.

Обозначения в четырех индексах позволяют найти симметрично-равнозначные (эквивалентные) направления  $\langle uv tw \rangle$ .

## 2.2. Обратная решетка

Базисные векторы обратной решетки  $\mathbf{b}_j$  задаются соотношением

$$(\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j) = \delta_{ij}, \quad (2.3)$$

где  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера;  $\delta_{ii} = 1$ ;  $\delta_{ij} = 0$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ).

Из соотношения (2.3) следует, что вектор  $\mathbf{b}_1$  перпендикулярен к векторам  $\mathbf{a}_2$  и  $\mathbf{a}_3$ , поэтому его направление определяется векторным произведением

$$\mathbf{b}_1 = [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3] / V, \quad (2.4)$$

где  $V$  – объем ячейки, построенной на базисных векторах прямой решетки.

Базисные векторы  $\mathbf{b}_2$  и  $\mathbf{b}_3$  получают циклической перестановкой соотношения (2.4).

Как видно из (2.3), прямая и обратная решетки – взаимно-обратные. Объемы ячеек прямой  $V$  и обратной решеток  $V^*$  также являются взаимно-обратными величинами, т.е.  $V V^* = 1$ .

В матричном виде условие (2.5) имеет вид

$$\mathbf{a}\tilde{\mathbf{b}} = \tilde{\mathbf{b}}\mathbf{a} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{I}, \quad (2.5)$$

где  $\mathbf{I}$  – единичная матрица;  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  – матрицы-столбцы;  $\tilde{\mathbf{a}}$ ,  $\tilde{\mathbf{b}}$  – матрицы-строки:

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}; \quad \tilde{\mathbf{a}} = (a_1 \ a_2 \ a_3); \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}; \quad \tilde{\mathbf{b}} = (b_1 \ b_2 \ b_3).$$

Метрические матрицы прямого  $\mathbf{G}$  и обратного  $\mathbf{G}^{-1}$  базисов являются взаимно-обратными, т.е.  $\mathbf{G}\mathbf{G}^{-1} = \mathbf{I}$ .

Обратные метрические матрицы для некоторых сингоний имеют вид

$$\mathbf{G}^{-1}_{\text{куб}} = \begin{pmatrix} 1/a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/a^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}^{-1}_{\text{ромбич}} = \begin{pmatrix} 1/a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/b^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/c^2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{G}^{-1}_{\text{гекс}} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3a^2} & \frac{2}{3a^2} & 0 \\ \frac{2}{3a^2} & \frac{4}{3a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}^{-1}_{\text{тетраг}} = \begin{pmatrix} 1/a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/c^2 \end{pmatrix}.$$

Базисные векторы прямой и обратной решеток можно представить в виде матриц  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$ , причем если базисные векторы  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  прямой решетки в  $\mathbf{A}$  представлены строками, а базисные векторы  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  обратной решетки – столбцами в  $\mathbf{B}$ , то (2.5) можно записать как  $\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{I}$ , или

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} & b_{31} \\ b_{12} & b_{22} & b_{32} \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Если матрица  $\mathbf{A}$  состоит из базисных векторов ГЦК решетки в прямом пространстве, то  $\mathbf{A}^{-1}$  – соответствует базисным векторам ОЦК решетки в обратном пространстве:

$$\begin{pmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{1}{a} & \frac{1}{a} \\ \frac{1}{a} & \frac{1}{a} & -\frac{1}{a} \\ -\frac{1}{a} & \frac{1}{a} & \frac{1}{a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Причем если ГЦК-решетка в прямом пространстве построена на векторах длиной  $a$  и объемом  $a^3$ , то в обратном пространстве ей соответствует ОЦК-решетка, построенная на векторах длиной  $2/a$  и объемом  $8/a^3$ .

**Вектор обратной решетки.** Произвольный узел обратной решетки определяется *вектором обратной решетки*

$$\mathbf{H}_{HKL} = H\mathbf{b}_1 + K\mathbf{b}_2 + L\mathbf{b}_3,$$

где  $H, K, L$  – целые числа с общим множителем  $q$ , т.е.  $H = qh, K = qk, L = ql$ .

**Свойства вектора обратной решетки.** Вектор обратной решетки  $\mathbf{H}_{hkl}$  по направлению совпадает с нормалью к плоскости  $(hkl)$ , а по модулю равен обратному значению межплоскостного расстояния  $d_{hkl}$ :  $|\mathbf{H}_{hkl}| = 1/d_{hkl}$  (рис. 2.7).

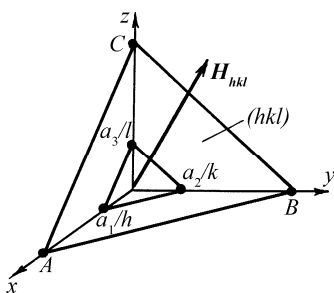


Рис. 2.7. Вектор обратной решетки  $\mathbf{H}_{hkl}$

В дифракционных методах исследования, в частности в методе Лауэ, гномостереографические проекции плоскостей называют *точками первого рода*, а стереографические проекции направлений – *точками второго рода*. В кубических кристаллах все точки первого и второго рода совпадают, в тетрагональных кристаллах точки первого рода  $\{hk0\}$  и  $\{001\}$  совпадают с точками второго рода  $\langle hk0 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$  соответственно.

В гексагональных кристаллах точки первого рода в четырехиндексном обозначении  $\{hki0\}$  и  $\{0001\}$  совпадают с точками второго рода  $\langle hki0 \rangle$  и  $\langle 0001 \rangle$ , а в трехиндексном обозначении  $\{hk0\}$  и  $\langle hk0 \rangle$  не совпадают, тогда как  $\{001\}$  и  $\langle 001 \rangle$  совпадают.

**Матрица ортогонального преобразования.** Для описания поворотных элементов симметрии используются матрицы ортогонального преобразования, которые сохраняют длины векторов и углы между ними. Для матрицы ортогонального преобразования  $A$  выполняется соотношение

$$\sum_{i=1}^3 a_{ik} a_{il} = \delta_{kl} \quad (k, l = 1, 2, 3),$$

где  $a_{ij}$  – элементы матрицы  $A$ , а  $\delta_{kl} = 1$  при  $k = l$  и  $\delta_{kl} = 0$  при  $k \neq l$ . Если  $A$  – матрица ортогонального преобразования, то  $\det A = \pm 1$  и  $A^{-1} = \tilde{A}$ . Матрица  $A$  с  $\det A = +1$  соответствует *собственному* повороту, а с  $\det A = -1$  – *несобственному* повороту.

Собственные значения матрицы  $A$  должны иметь вид:  $1$ ,  $\exp(-i\alpha)$ ,  $\exp(+i\alpha)$ . При этом фаза  $\alpha$  комплексного собственного значения называется *углом поворота*, а собственный вектор  $\mathbf{u}$  с собственным значением  $\lambda = 1$  – *осью поворота*.

Угол поворота  $\alpha$  находят из следа матрицы поворота  $A$ :

$$\text{tr}A = a_{11} + a_{22} + a_{33} = 1 + \exp(-i\alpha) + \exp(+i\alpha) = 1 + 2\cos\alpha.$$

Компоненты оси поворота определяются из элементов матрицы поворота  $A$  как

$$u_1 : u_2 : u_3 = (a_{32} - a_{23}) : (a_{13} - a_{31}) : (a_{21} - a_{12}).$$

Направляющие косинусы оси вращения  $\mathbf{u}$  определяются как

$$\begin{aligned} l_1 &= u_1(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)^{-0,5}; \\ l_2 &= u_2(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)^{-0,5}; \\ l_3 &= u_3(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)^{-0,5}. \end{aligned}$$

В общем случае матрица поворота на угол  $\varphi$  вокруг оси  $\mathbf{u}$  с направляющими косинусами  $l_1, l_2, l_3$  имеет вид

$$\begin{aligned} &\mathbf{R}(\mathbf{u}, \varphi) = \\ &= \begin{pmatrix} l_1^2(1 - \cos\varphi) + \cos\varphi & l_1l_2(1 - \cos\varphi) - l_3\cos\varphi & l_1l_3(1 - \cos\varphi) + l_2\sin\varphi \\ l_1l_2(1 - \cos\varphi) + l_3\sin\varphi & l_2^2(1 - \cos\varphi) + \cos\varphi & l_2l_3(1 - \cos\varphi) - l_1\sin\varphi \\ l_1l_3(1 - \cos\varphi) - l_2\sin\varphi & l_2l_3(1 - \cos\varphi) + l_1\sin\varphi & l_3^2(1 - \cos\varphi) + \cos\varphi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Если поворот задан эйлеровскими углами  $\varphi, \theta, \psi$ , то каждая из матриц поворота имеет простой вид в соответствующей *повернутой* системе координат (рис. 1.18). Так, матрицы первого поворота на угол  $\varphi$  вокруг оси  $z$  –  $\mathbf{R}_z(\varphi)$ , второго поворота на угол  $\theta$  вокруг оси  $x'$  –  $\mathbf{R}_{x'}(\theta)$  и третьего поворота на угол  $\psi$  вокруг оси  $z'$  –  $\mathbf{R}_{z'}(\psi)$  имеют вид:

$$\mathbf{R}_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_{x'}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{R}_z(\psi) = \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Матрица поворота  $\mathbf{R}(\varphi, \theta, \psi)$  обычно записывается в неподвижной системе координат  $xuz$ , причем если ее выражать через матрицы  $\mathbf{R}_z(\varphi)$ ,  $\mathbf{R}_x(\theta)$  и  $\mathbf{R}_z(\psi)$ , то порядок их перемножения обратен порядку выполняемых поворотов, т.е.  $\mathbf{R}(\varphi, \theta, \psi) = \mathbf{R}_z(\varphi) \mathbf{R}_x(\theta) \mathbf{R}_z(\psi)$ , так что

$$\mathbf{R}(\varphi, \theta, \psi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \psi - \cos \theta \sin \varphi \sin \psi & -\cos \varphi \sin \psi - \cos \theta \sin \varphi \cos \psi & \sin \theta \sin \varphi \\ \sin \varphi \cos \psi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi & -\sin \varphi \sin \psi + \cos \theta \cos \varphi \cos \psi & -\sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \psi & \sin \theta \cos \psi & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Углы  $\varphi$  и  $\psi$  изменяются от 0 до  $2\pi$ , а угол  $\theta$  – от 0 до  $\pi$ .

Эйлеровские углы поворота часто используются в физике твердого тела, в кристаллографии интересуются кристаллографическими индексами оси поворота и значением угла поворота.

В результате поворота, определяемого матрицей  $\mathbf{A}$ , произвольный вектор  $\mathbf{r}$  переходит в  $\mathbf{r}'$ , что в матричном виде записывается как

$$\mathbf{r}' = \mathbf{A}\mathbf{r}, \quad (2.8)$$

т.е.

$$\begin{pmatrix} r'_1 \\ r'_2 \\ r'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

где  $a_{ij}$  – элементы матрицы  $\mathbf{A}$ ,  $(r_1, r_2, r_3)$  – компоненты вектора  $\mathbf{r}$ ,  $(r'_1, r'_2, r'_3)$  – компоненты вектора  $\mathbf{r}'$ .

Компоненты матрицы  $\mathbf{A}$  легко определить исходя из соотношения (2.9). Действительно, направление  $[100]$  с координатами  $(r_1, r_2, r_3)$  после поворота имеет координаты  $(r'_1, r'_2, r'_3)$ . Таким образом, матрицу  $\mathbf{A}$  можно представить состоящей из матриц-столбцов  $\mathbf{a}_{*1}$ ,  $\mathbf{a}_{*2}$ ,  $\mathbf{a}_{*3}$ , компонентами которых являются координаты векторов  $[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$  после поворота.

Если матрица  $\mathbf{A}$  задает операцию в системе координат  $xuz$

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{A}\mathbf{r}_1, \quad (2.10)$$

то в системе координат  $x'y'z'$  эта операция задается матрицей  $\mathbf{A}'$

$$\mathbf{r}'_2 = \mathbf{A}'\mathbf{r}'_1.$$

Переход из системы координат  $xuz$  в систему координат  $x'y'z'$  осуществляется матрицей  $C$ , т.е.

$$r'_1 = Cr_1 \text{ и } r'_2 = Cr_2, \quad r_1 = C^{-1}r'_1 \text{ и } r_2 = C^{-1}r'_2.$$

Подставляя  $r_1$  и  $r_2$  в (2.10), получим  $C^{-1}r'_2 = AC^{-1}r'_1$  или, умножая слева и справа на  $C$ , имеем  $r'_2 = CAC^{-1}r'_1$ . Матрица  $CAC^{-1} = A'$  осуществляет в системе координат  $x'y'z'$  такую же операцию, как и  $A$  в системе  $xuz$ . Матрицы  $A$  и  $A'$ , связанные соотношением

$$A' = CAC^{-1} \quad (2.11)$$

или, если  $D = C^{-1}$ ,  $A' = D^{-1}AD$ , называют *матрицами подобия*. У матриц подобия равны все инварианты, в том числе и линейный инвариант (след матрицы), т.е.

$$\text{tr } A = \text{tr } A' = 1 + 2 \cos \alpha. \quad (2.12)$$

**Преобразование индексов направлений и плоскостей при изменении системы координат.** Произвольное направление  $[mnp]$  задается вектором  $R_{mnp} = ma_1 + na_2 + pa_3$  или вектором  $R_{m_1m_2m_3} = m_1a_1 + m_2a_2 + m_3a_3$ . В матричном виде  $R_{m_1m_2m_3} \rightarrow R_m$ :

$$R_m = (a_1 \ a_2 \ a_3) \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \tilde{a}m, \quad (2.13)$$

где  $\tilde{a}$  – матрица-строка из базисных векторов, а  $m$  – матрица-столбец из компонентов вектора.

При переходе из системы координат  $xuz$  к системе  $x'y'z'$  базисные векторы преобразуются как

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}a_1 & A_{12}a_1 & A_{13}a_1 \\ A_{21}a_2 & A_{22}a_2 & A_{23}a_2 \\ A_{31}a_3 & A_{32}a_3 & A_{33}a_3 \end{pmatrix}, \text{ т.е. } a' = Aa,$$

а компоненты вектора  $R$  преобразуются как *контравариантные* векторы с помощью матрицы  $\tilde{A}^{-1}$ , называемой матрицей *контраградиентного* преобразования

$$m' = \tilde{A}^{-1}m. \quad (2.14)$$

Скалярное произведение между векторами  $R_{m_1m_2m_3}$  и  $H_{hkl}$  равно  $R_{m_1m_2m_3}H_{hkl} = m_1h + m_2k + m_3l$  или в матричной записи



$$(h \ k \ l) \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{h}} \mathbf{m} .$$

При изменении системы координат скалярное произведение сохраняется  $\tilde{\mathbf{h}} \mathbf{m} = \tilde{\mathbf{h}}' \mathbf{m}'$  и с учетом (2.14)  $\tilde{\mathbf{h}} \mathbf{m} = \tilde{\mathbf{h}}' \tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{m}$  и  $\tilde{\mathbf{h}} = \tilde{\mathbf{h}}' \tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ , откуда

$$\mathbf{h}' = \mathbf{A} \mathbf{h} . \quad (2.15)$$

Следовательно, при изменении системы координат компоненты вектора обратной решетки и базисные векторы преобразуются как *ковариантные* векторы с помощью матрицы  $\mathbf{A}$ .

### 2.3. Основные формулы структурной кристаллографии

**Период идентичности.** Период идентичности  $I_{[mnp]}$  вдоль данного направления  $[mnp]$  – расстояние между ближайшими узлами вдоль данной прямой – равен абсолютной величине вектора  $\mathbf{R}_{mnp}$ . Длину вектора проще вычислить через скалярное произведение  $I_{[mnp]} = (\mathbf{R}_{mnp} \mathbf{R}_{mnp})^{1/2}$ , записанное в матричном виде

$$I_{m_1 m_2 m_3} = \sqrt{\tilde{\mathbf{m}} \mathbf{G} \mathbf{m}} . \quad (2.16)$$

**Квадратичная форма.** Длина вектора обратной решетки  $|\mathbf{H}_{hkl}|$  может быть представлена аналогично как

$$|\mathbf{H}_{hkl}| = \sqrt{\tilde{\mathbf{h}} \mathbf{G}^{-1} \mathbf{h}} . \quad (2.17)$$

Выражение  $\frac{1}{d_{hkl}^2} = |\mathbf{H}_{hkl}|^2 = \tilde{\mathbf{h}} \mathbf{G}^{-1} \mathbf{h}$ , которое является функцией параметров решетки  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ , называют *квадратичной формой* соответствующей сингонии.

Квадратичные формы для некоторых сингоний имеют вид:  
для кубической сингонии

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} , \quad (2.18)$$

для ромбической сингонии

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}, \quad (2.19)$$

для гексагональной сингонии

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4(h^2 + hk + k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}. \quad (2.20)$$

**Угол между направлениями.** Угол  $\varphi$  между направлениями  $[m_1^{(1)} m_2^{(1)} m_3^{(1)}]$  и  $[m_1^{(2)} m_2^{(2)} m_3^{(2)}]$  определяют из соотношения

$$\cos \varphi = \frac{\tilde{m}^{(2)} \mathbf{G} m^{(1)}}{\sqrt{\tilde{m}^{(1)} \mathbf{G} m^{(1)}} \sqrt{\tilde{m}^{(2)} \mathbf{G} m^{(2)}}}, \quad (2.21)$$

где  $\tilde{m}^{(1)}$ ,  $\tilde{m}^{(2)}$  – матрицы-строки;  $m^{(1)}$ ,  $m^{(2)}$  – матрицы-столбцы.

**Угол между плоскостями.** Угол  $\varphi$  между плоскостями  $(h_1^{(1)} h_2^{(1)} h_3^{(1)})$  и  $(h_1^{(2)} h_2^{(2)} h_3^{(2)})$  равен углу между нормальными к этим плоскостям:

$$\cos \varphi = \frac{\tilde{h}^{(2)} \mathbf{G}^{-1} h^{(1)}}{\sqrt{\tilde{h}^{(1)} \mathbf{G}^{-1} h^{(1)}} \sqrt{\tilde{h}^{(2)} \mathbf{G}^{-1} h^{(2)}}}. \quad (2.22)$$

**Угол между плоскостью и направлением.** Угол  $\varphi$  между плоскостью  $(h_1 h_2 h_3)$  и направлением  $[m_1 m_2 m_3]$  определяют как

$$\sin \varphi = \frac{\tilde{h} m}{\sqrt{\tilde{h} \mathbf{G}^{-1} h} \sqrt{\tilde{m} \mathbf{G} m}}. \quad (2.23)$$

**Объем элементарной ячейки.** Объем элементарной ячейки, построенной на базисных векторах прямой решетки  $a_1, a_2, a_3$ , выражается смешанным произведением

$$V = a_1 [a_2 \times a_3], \quad (2.24)$$

или с использованием метрической матрицы прямой решетки

$$V = \sqrt{\det \mathbf{G}}. \quad (2.25)$$

Для обратной решетки, построенной на базисных векторах  $b_1, b_2, b_3$ , объем элементарной ячейки определяется аналогичными выражениями

$$V^* = b_1 [b_2 \times b_3] = \sqrt{\det \mathbf{G}^{-1}}. \quad (2.26)$$

## Контрольные упражнения и задачи

2.1. Определите кристаллографические индексы направлений, проходящих через точки  $[[11\bar{2}]]$  и  $[[01\bar{1}]]$ ,  $[[12\bar{1}]]$  и  $[[\frac{1}{2}10]]$ .

2.2. Покажите в элементарной ячейке кристаллографические направления  $[1\bar{1}1]$ ,  $[\bar{2}\bar{1}1]$ ,  $[3\bar{1}\bar{2}]$ .

2.3. Определите кристаллографические индексы плоскостей, отсекающих на осях координат отрезки  $1$ ,  $-1$ ,  $\infty$  и  $-1$ ,  $1$ ,  $\frac{1}{2}$ .

2.4. Покажите в элементарной ячейке кристаллографические плоскости  $(1\bar{1}1)$ ,  $(\bar{2}\bar{1}1)$ ,  $(3\bar{1}\bar{2})$  на рис. 2.1.

2.5. Определите кристаллографические индексы направлений, проходящих в гексагональной ячейке через точки  $[[100]]$  и  $[[011]]$ ,  $[[00\frac{1}{2}]]$  и  $[[110]]$ .

2.6. Покажите в гексагональной ячейке кристаллографические направления  $[11\bar{2}0]$  и  $[10\bar{1}0]$ .

2.7. Определите кристаллографические индексы плоскостей, отсекающих на осях координат гексагональной ячейки отрезки  $-\frac{1}{2}$ ,  $1$ ,  $1$  и  $1$ ,  $1$ ,  $\infty$ .

2.8. Покажите в гексагональной ячейке кристаллографические плоскости  $(11\bar{2}0)$ ,  $(10\bar{1}0)$ .

2.9. Вычислите период идентичности  $I_{[11\bar{2}]}$  для кристалла алюминия с параметром решетки  $a$ .

2.10. Вычислите период идентичности  $I_{[\bar{3}11]}$  для кристалла хрома с параметром решетки  $a$ .

2.11. Вычислите период идентичности  $I_{[1\bar{2}3]}$  для кристалла ниобия с параметром решетки  $a$ .

2.12\*. Вычислите период идентичности  $I_{[2\bar{1}\bar{1}0]}$  для гексагонального кристалла с параметрами решетки  $a$  и  $c$ .

2.13. Покажите на стереографической проекции направления  $[1\bar{1}2]$ ,  $[\bar{1}10]$ ,  $[1\bar{2}\bar{3}]$ .

2.14. Покажите гномостереографическую проекцию зоны плоскостей: ось зоны  $-[11\bar{1}]$ , плоскости зоны  $-(2\bar{1}1)$ ,  $(\bar{1}10)$ ,  $(\bar{1}\bar{1}\bar{2})$ .

2.15. Вычислите угол между направлениями  $[110]$  и  $[0\bar{1}1]$  кубического кристалла.

2.16. Запишите выражение для определения *угла* между направлениями  $[111]$  и  $[10\bar{1}]$  тетрагонального кристалла с параметрами решетки  $a$  и  $c$ .

2.17. Запишите выражение для определения *угла* между направлениями  $[011]$  и  $[11\bar{1}]$  ромбического кристалла с параметрами решетки  $a$ ,  $b$  и  $c$ .

2.18\*. Вычислите *угол* между направлениями  $[11\bar{2}0]$  и  $[10\bar{1}0]$  гексагонального кристалла.

2.19. Вычислите *угол* между плоскостями  $(110)$  и  $(0\bar{1}1)$  кубического кристалла.

2.20. Запишите выражение для определения *угла* между плоскостями  $(\bar{1}01)$  и  $(1\bar{1}1)$  тетрагонального кристалла с параметрами решетки  $a$  и  $c$ .

2.21. Запишите выражение для определения *угла* между плоскостями  $(011)$  и  $(11\bar{1})$  ромбического кристалла с параметрами решетки  $a$ ,  $b$  и  $c$ .

2.22\*. Вычислите *угол* между плоскостями  $(11\bar{2}0)$  и  $(10\bar{1}0)$  гексагонального кристалла.

2.23. Вычислите для кубического кристалла *индексы оси* кристаллографической зоны, включающей плоскости  $(112)$  и  $(1\bar{1}1)$ .

2.24. Вычислите в кубическом кристалле *индексы плоскости*, проходящей через направления  $[\bar{1}01]$  и  $[1\bar{1}1]$ .

2.25. Вычислите в кубическом кристалле *угол* между плоскостью  $(1\bar{1}1)$  и направлением  $[\bar{1}01]$ .

2.26. Вычислите в кубическом кристалле *угол* между направлением  $[\bar{1}01]$  и плоскостью, содержащей  $[121]$  и  $[1\bar{1}1]$ .

2.27. Запишите выражение для определения *угла* между направлением  $[1\bar{1}1]$  и плоскостью  $(110)$  тетрагонального кристалла с параметрами решетки  $a$  и  $c$ .

2.28. Запишите выражение для определения *угла* между направлением  $[110]$  и плоскостью  $(111)$  ромбического кристалла с параметрами решетки  $a$ ,  $b$  и  $c$ .

2.29\*. Вычислите *угол* между направлением  $[10\bar{1}0]$  и плоскостью  $(11\bar{2}0)$  гексагонального кристалла.

2.30\*. Вычислите индексы оси зоны плоскостей, включающей плоскости  $(10\bar{1}0)$  и  $(11\bar{2}0)$  гексагонального кристалла

2.31\*. Определите *направляющие углы* и постройте на стереографической проекции направления  $[10\bar{1}0]$  и  $[11\bar{2}1]$  и нормали к плоскостям  $(10\bar{1}0)$  и  $(11\bar{2}1)$  гексагонального кристалла  $\alpha$ -Zr ( $a = 0,323$  нм и  $c = 0,515$  нм).

2.32\*. Определите *направляющие углы* и постройте на стереографической проекции направления  $[10\bar{1}]$  и  $[11\bar{2}]$  и нормали к плоскостям  $(10\bar{1})$  и  $(11\bar{2})$  ромбического кристалла  $\alpha$ -U ( $a = 0,286$  нм,  $b = 0,588$  нм и  $c = 0,494$  нм).

2.33\*. Определите *кристаллографические индексы* направлений  $[100]$ ,  $[0\bar{1}1]$ ,  $[\bar{1}1\bar{1}]$  и плоскостей  $(100)$ ,  $(0\bar{1}1)$ ,  $(\bar{1}1\bar{1})$  после перехода от гранецентрированной решетки Браве к примитивной.

2.34\*. Определите *кристаллографические индексы* направлений  $[100]$ ,  $[0\bar{1}1]$ ,  $[\bar{1}1\bar{1}]$  и плоскостей  $(100)$ ,  $(0\bar{1}1)$ ,  $(\bar{1}1\bar{1})$  после перехода от объемно-центрированной решетки Браве к примитивной.

### 3. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

Симметрия кристаллического пространства определяется заданием всех преобразований, которые сохраняют расстояния между любыми точками пространства и приводят к совмещению пространства с самим собой. Элементы симметрии делят на закрытые и открытые. *Открытые элементы симметрии* содержат трансляции и поэтому описывают симметрию бесконечного пространства. *Закрытые элементы симметрии* оставляют одну точку неподвижной и после конечного числа операций возвращают кристаллическое пространство в исходное положение. Закрытые элементы симметрии задаются матрицами ортогонального преобразования  $\mathbf{R}$  с  $\det \mathbf{R} = \pm 1$ . Они могут быть сведены к поворотным осям симметрии (*чистое* или *собственное вращение* с  $\det \mathbf{R} = + 1$ ) и к инверсионным осям (*вращение с отражением в точке*, лежащей на оси, или *несобственное вращение* с  $\det \mathbf{R} = - 1$ ).

### 3.1. Поворотные оси симметрии

Осью симметрии называют прямую, при повороте вокруг которой на некоторый угол  $\alpha_n$  гомологические (эквивалентные) точки кристаллического пространства совмещаются. Угол поворота  $\alpha_n$  равен  $360^\circ/n$ , где  $n$  – целое число. Таким образом, через  $n$  поворотов в одном направлении на угол  $\alpha_n$  кристаллическое пространство возвращается в исходное положение. Наименьший угол поворота  $\alpha_n$  для данной оси симметрии называют *элементарным углом* оси симметрии, а  $n$  – *порядком* оси поворота.

В кристаллическом пространстве возможны лишь повороты на углы равные 0, 60, 90, 120 и 180°, т.е. существуют оси симметрии первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков.

Отсутствие осей пятого порядка в трехмерном или 3D-пространстве связано с наличием в кристаллическом пространстве трансляционной симметрии. Оси пятого порядка появляются в 4D-пространстве.

В кристаллах с ГЦК решеткой осями второго порядка являются направления  $\langle 110 \rangle$ , осями третьего порядка –  $\langle 111 \rangle$ , осями четвертого порядка  $\langle 100 \rangle$  (рис. 3.1).

**Матрицы поворотных элементов симметрии.** Компоненты матрицы поворотного элемента симметрии можно получить с использованием стандартной стереографической проекции. Если оси системы координат *хуз* совпадают с направлениями  $[100]$ ,  $[010]$  и  $[001]$ , то, как было показано, компонентами матрицы поворота будут индексы направлений  $\langle 100 \rangle$  после поворота.

При повороте вокруг оси  $[100]$  на 90° против часовой стрелки, как показано на рис. 3.2, направление  $[100]$  остается на месте, а направления  $[010]$  и  $[001]$ , перемещаясь по основному кругу проекции, переходят в  $[001]$  и  $[0\bar{1}0]$  соответственно.

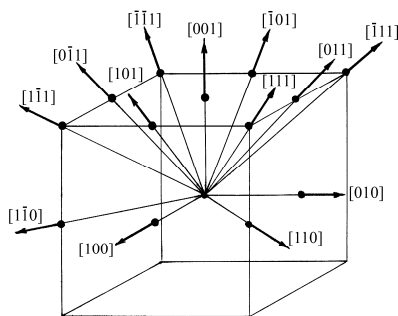


Рис. 3.1. Основные оси симметрии в кубической сингонии

Таким образом, компоненты матриц-столбцов  $C_4^{[100]}$  – (100), (001) и  $(0\bar{1}0)$ , и матрица  $C_4^{[100]}$  будет иметь вид

$$C_4^{[100]} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Действительно,  $C_4^{[100]}$  – матрица ортогонального преобразования с  $\det C_4^{[100]} = +1$  – описывает поворот на  $90^\circ$ , так как  $\text{tr } C_4^{[100]} = +1$ , вокруг  $[100]$ , поскольку для  $\lambda = 1$  собственным вектором матрицы  $C_4^{[100]}$  является  $[100]$ .

Точно так же при повороте вокруг  $[1\bar{1}1]$  на  $120^\circ$  против часовой стрелки направление  $[100]$  переходит в  $[001]$ ,  $[0\bar{1}0]$  – в  $[100]$ , т.е.  $[010] \rightarrow [1\bar{0}0]$ , а  $[001] \rightarrow [0\bar{1}0]$ . Соответствующая матрица имеет вид

$$C_3^{[1\bar{1}1]} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрица  $C_3^{[1\bar{1}1]}$  ортогонального преобразования с  $\det C_3^{[1\bar{1}1]} = +1$  описывает поворот на  $120^\circ$ , так как  $\text{tr } C_3^{[1\bar{1}1]} = 0$ , а собственным вектором матрицы  $C_3^{[1\bar{1}1]}$  является  $[1\bar{1}1]$ .

При повороте вокруг  $[011]$  на  $180^\circ$  направление  $[100]$ , будучи перпендикулярным к  $[011]$ , переходит в противоположное  $[\bar{1}00]$ , а  $[010] \rightarrow [001]$  и  $[001] \rightarrow [010]$ , и матрица имеет вид

$$C_2^{[011]} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

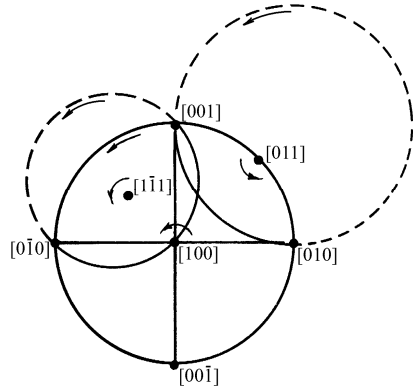


Рис. 3.2. Траектории движения при поворотах вокруг  $[100]$ ,  $[1\bar{1}1]$ ,  $[011]$  в кубической сингонии

### 3.2. Инверсионные оси

Кроме чистых вращений возможны также сочетания поворотных осей с отражением в лежащей на них точке. Подобные элементы симметрии называют *инверсионными осями*. Так как число поворотных осей ограничено (1, 2, 3, 4, 6), то инверсионные оси имеют тот же порядок и обозначаются  $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ . Если отражение происходит в точке, совпадающей с началом координат (*центр инверсии*), то матрица, описывающая это отражение, имеет вид

$$\mathbf{i} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Умножая эту матрицу на матрицу поворота, например вокруг оси  $ox$ , получаем матрицу несобственного (инверсионного) поворота

$$\mathbf{Ri} = \mathbf{iR} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -\cos \alpha & \sin \alpha \\ 0 & -\sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Определитель этой матрицы  $\det \mathbf{Ri} = -1$ , а след матрицы инверсионного преобразования

$$\text{tr } \mathbf{Ri} = -1 - 2 \cos \alpha. \quad (3.3)$$

Инверсионной оси  $\bar{1}$  отвечает  $\alpha = 0$ , эта ось эквивалентна центру инверсии. Для инверсионной оси второго порядка вдоль [100] соответствующая матрица, описывающая эту операцию, имеет вид

$$\mathbf{C}_2^{[100]} \mathbf{i} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{m}. \quad (3.4)$$

Очевидно, что при этой операции любая точка зеркально отображается относительно плоскости  $yz$ . Таким образом, инверсионная ось  $\bar{2}$  эквивалентна *плоскости зеркального отражения* или *плоскости симметрии*, обозначаемой буквой  $m$  (от слова «mirror» – зеркало), расположенной перпендикулярно к этой оси.



Нетрудно убедиться, что ось  $\bar{3}$  ( $\alpha = 120^\circ$ ) эквивалентна осям  $3$  и  $\bar{1}$ . Ось  $\bar{6}$  эквивалентна осям  $3$  и  $\bar{2}$ . Ось  $\bar{4}$  – независимая и содержит поворотную ось второго порядка  $2$ .

Среди инверсионных осей независимыми являются  $\bar{1}$ ,  $\bar{2}$ ,  $\bar{4}$ , а оси  $\bar{3}$  и  $\bar{6}$  составными:  $\bar{3} = 3 + \bar{1}$  и  $\bar{6} = 3 + \bar{2}$ .

### 3.3. Зеркально-поворотные оси

Инверсионные оси – это комбинация центра инверсии и поворотных осей, но несобственное вращение может быть получено также комбинацией плоскости симметрии и поворотных осей, что соответствует зеркально-поворотным осям  $\tilde{1}, \tilde{2}, \tilde{3}, \tilde{4}, \tilde{6}$ . Нетрудно показать, что  $\tilde{1} = \bar{2}$ ,  $\tilde{2} = \bar{1}$ ,  $\tilde{3} = \bar{6}$ ,  $\tilde{4} = \bar{4}$ ,  $\tilde{6} = \bar{3}$ .

Матрица, соответствующая зеркально-поворотной оси вдоль оси  $x$ , имеет вид

$$\mathbf{Rm} = \mathbf{mR} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}.$$

Определитель этой матрицы  $\det \mathbf{Rm} = -1$ , а след матрицы зеркально-поворотного преобразования равен

$$\text{tr } \mathbf{Rm} = -1 + 2 \cos \alpha. \quad (3.5)$$

Важной характеристикой направлений в кристаллах является *полярность*. Вдоль любой прямой можно двигаться в противоположные стороны. Если эти два направления равноценны, то прямая неполярна и преобразуется в себя какой-либо операцией, меняющей местами (совмещающей) ее противоположные «концы», например плоскостью симметрии, перпендикулярной этой прямой или лежащей на ней центром симметрии. Так, инверсионные оси всегда неполярны, поворотные оси полярны, если они не пересекаются с элементами симметрии  $\bar{1}$ ,  $m$ ,  $2$ . Полярности направлений в кристаллах соответствует полярность физических свойств.

### 3.4. Точечные группы симметрии

*Точечной* называется группа операций симметрии, оставляющих неподвижной одну точку.

При рассмотрении симметрии кристаллического пространства *точечные группы* (или *кристаллические классы*) являются комбинацией закрытых элементов симметрии, причем точечные группы (кристаллические классы) *первого рода* связаны с комбинацией поворотных осей. Учитывая наличие циклических групп  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$ , связанных с поворотными осями 1, 2, 3, 4, 6, и возможные комбинации поворотных осей 222, 32, 422, 622, 23, 432, получаем 11 точечных групп с поворотными осями симметрии.

На рис. 3.3 показаны стереографические проекции элементов симметрии кристаллографических групп 222 и 422.

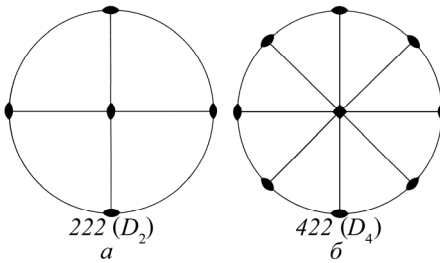


Рис. 3.3. Стереографические проекции элементов симметрии групп:  
 $a - 222 (D_2)$ ;  $b - 422 (D_4)$

Группа 222 содержит три оси второго порядка  $L_2$ . Группа 422 содержит ось четвертого порядка  $L_4$  и четыре оси второго порядка  $L_2$ .

Группа 23 – группа тетраэдра  $T$  – имеет четыре оси третьего порядка  $L_3$  и три оси второго порядка  $L_2$ .

Группа 432 – группа октаэдра  $O$  – имеет четыре оси третьего порядка  $L_3$ , три оси четвертого порядка  $L_4$  и шесть осей второго порядка  $L_2$ .

Рассматривая комбинации поворотных и инверсионных осей, получим еще 21 точечную группу (*группы второго рода*); таким образом, возможно существование 32 точечных групп.

Стереографические проекции элементов симметрии для групп  $23 (T)$ ,  $432 (O)$  и  $m\bar{3}m (O_h)$  приведены на рис. 3.4, а для групп  $m\bar{3} (T_h)$  и  $\bar{4}3m (T_d)$  – на рис. 3.5.

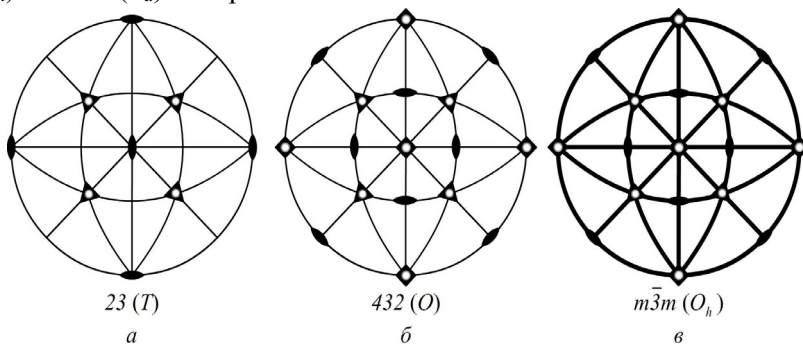


Рис. 3.4. Стереографические проекции элементов симметрии групп:  
 $a - 23 (T)$ ;  $б - 432 (O)$ ;  $в - m\bar{3}m (O_h)$

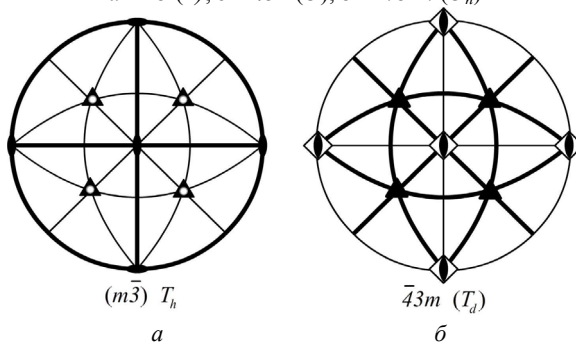


Рис. 3.5. Стереографические проекции элементов симметрии групп:  
 $a - m\bar{3} (T_h)$ ;  $б - \bar{4}3m (T_d)$

**Наличие или отсутствие центра симметрии.** В классах с центром симметрии не может быть полярных направлений, а значит, не может быть и физических свойств, характеризующих полярную симметрию (пирозлектричество, пьезоэлектричество).

В дифракционных методах исследования особенно выделяют классы симметрии, содержащие центр симметрии, их называют лауэвскими:  $m\bar{3}m$ ,  $m\bar{3}$ ,  $6/mmm$ ,  $6/m$ ,  $4/mmm$ ,  $4/m$ ,  $\bar{3}m$ ,  $\bar{3}$ ,  $mmm$ ,  $2/m$ ,  $\bar{1}$ . Таким образом, существует 11 лауэвских классов.

### 3.5. Предельные группы симметрии

Для конечных физических систем, наряду с кристаллографическими группами, большое значение имеют группы, содержащие оси симметрии бесконечного порядка. Такая симметрия характерна для физических полей, тел вращения и некоторых физических свойств кристаллов.

*Предельными группами симметрии, или группами Кюри, называются точечные группы симметрии, содержащие оси симметрии, бесконечного порядка. Кюри показал, что имеется семь предельных точечных групп.*

1. Группа симметрии равномерно вращающегося кругового конуса с международным символом  $\infty$ . Группа полярна и энантиоморфна, потому что конус может вращаться вправо и влево.

2. Группа симметрии покоящегося кругового конуса  $\infty m$ . Группа полярна, но не энантиоморфна, потому что энантиоморфными называются фигуры, которые можно совместить друг с другом только путем зеркального отражения. Такова симметрия однородного электрического поля: вектор его напряженности  $\mathbf{E}$  является полярным, т.е. группа  $\infty m$  – группа *симметрии полярного вектора*. Группа содержит ось симметрии бесконечного порядка и бесконечное число продольных плоскостей симметрии.

3. Группа симметрии вращающегося цилиндра  $\infty/m$ . Группа содержит ось симметрии бесконечного порядка, поперечную плоскость симметрии и центр симметрии. Ось симметрии не полярна, поскольку оба ее конца можно совместить друг с другом путем отражения в поперечной плоскости симметрии.

Цилиндр, вращающийся вправо, можно совместить с цилиндром, вращающимся влево, отражая его в имеющемся центре симметрии или просто перевернув и наложив один на другой, без отражения. Поэтому в этой группе нет энантиоморфных форм.

Симметрией  $\infty/m$  обладает поле постоянного магнита, вектор напряженности которого  $\mathbf{H}$  является аксиальным, т.е. группа  $\infty/m$  – группа *симметрии аксиального вектора*.

4. Группа симметрии  $\infty 2$  цилиндра, концы которого закручены в разные стороны. Группа содержит ось симметрии бесконечного

порядка и бесконечное число поперечных осей 2. Такая симметрия характерна для удельного вращения плоскости поляризации в анизотропной среде.

5. Группа симметрии покоящегося цилиндра  $\infty/mmm$ . Группа содержит ось симметрии бесконечного порядка, одну поперечную и бесконечное множество продольных плоскостей симметрии, бесконечное множество поперечных осей 2 и центр симметрии.

Такова симметрия однородного поля одноосных сжимающих или растягивающих механических напряжений.

6. Группа  $\infty/\infty$  симметрии своеобразного шара, у которого все диаметры закручены по правому или левому винту соответственно правой или левой энантиоморфной формам. Группа содержит бесконечное множество осей бесконечного порядка без плоскостей симметрии и центра симметрии.

Такова симметрия удельного вращения плоскости поляризации в изотропной среде. Поскольку группа содержит только поворотные оси, ее называют иногда *группой вращения*.

7. Группа симметрии  $\infty/\infty t$  описывает симметрию обычного шара, имеет центр симметрии и бесконечное множество осей бесконечного порядка и плоскостей симметрии. Это – симметрия таких скалярных воздействий, как гидростатическое сжатие или однородный нагрев.

Поскольку эта группа содержит все точечные операции в трехмерном пространстве или, другими словами, все движения, относительно которых инвариантна сфера или однородный шар, ее часто называют *ортогональной*.

Понятие предельных групп оказывается чрезвычайно полезным в кристаллофизике.

Стереографические проекции элементов симметрии для предельных групп симметрии полярного вектора, аксиального вектора и однородного поля одноосных сжимающих или растягивающих механических напряжений приведены на рис. 3.6.

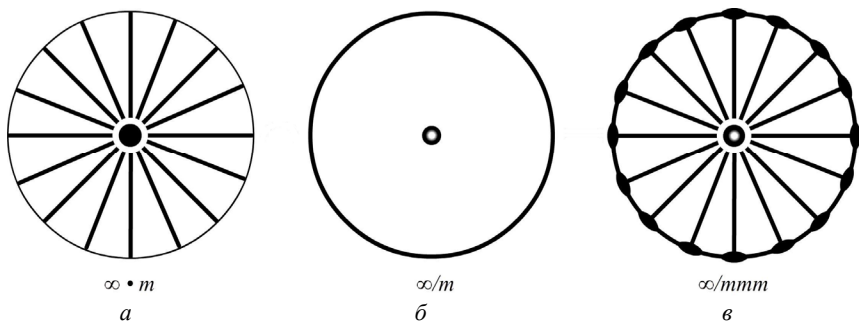


Рис. 3.6. Стереографические проекции элементов симметрии групп:  
*a* – полярного вектора ( $\infty \cdot m$ ); *б* – аксиального вектора ( $\infty/m$ ); *в* – однородного поля одноосных сжимающих или растягивающих механических напряжений ( $\infty/mmm$ )

### Контрольные упражнения и задачи

3.1. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу поворота  $C_4^{[0\bar{1}0]}$  – вокруг оси  $[01\bar{1}]$  на  $90^\circ$  по часовой стрелке.

3.2. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу поворота  $C_3^{[1\bar{1}1]}$  – вокруг оси  $[1\bar{1}1]$  на  $120^\circ$  против часовой стрелки.

3.3. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу поворота  $C_2^{[110]}$  – вокруг оси  $[110]$  на  $180^\circ$ .

3.4. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу  $C$ , отвечающую инверсионной оси  $\bar{2}$  для  $[0\bar{1}1]$ :  $C = C_2^{[0\bar{1}1]}i$ , где  $C_2$  – матрица поворота вокруг  $[0\bar{1}1]$  на  $180^\circ$ ,  $i$  – матрица центра инверсии.

3.5. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу  $C$ , отвечающую инверсионной оси  $\bar{3}$  для  $[11\bar{1}]$ :  $C = C_3^{[11\bar{1}]}i$ , где  $C_3$  – матрица поворота вокруг  $[11\bar{1}]$  на  $120^\circ$ ,  $i$  – матрица центра инверсии.

3.6. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу  $C$ , отвечающую инверсионной оси  $\bar{4}$  для  $[0\bar{1}0]$

$C = C_4^{[0\bar{1}0]} \mathbf{i}$ , где  $C_4^{[0\bar{1}0]}$  – матрица поворота вокруг  $[0\bar{1}0]$  на  $90^\circ$  против часовой стрелки,  $\mathbf{i}$  – матрица центра инверсии.

3.7. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу  $C$ , отвечающую инверсионной оси  $\bar{6}$  для  $[0001]$   $C = C_6^{[0001]} \mathbf{i}$ , где  $C_6^{[0001]}$  – матрица поворот вокруг  $[0001]$  на  $60^\circ$  против часовой стрелки,  $\mathbf{i}$  – матрица центра инверсии.

3.8. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу  $\sigma^{(\bar{1}10)}$ , описывающую отражение в плоскости  $(\bar{1}10)$ .

3.9. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу  $C$ , отвечающую зеркально-поворотной оси  $\tilde{2}$  для  $[001]$ :  $C = C_2^{[001]} \sigma^{(10\bar{1})}$ , где  $C_2^{[001]}$  – матрица поворота вокруг оси  $[001]$  на  $180^\circ$ ,  $\sigma^{(10\bar{1})}$  – матрица отражения в плоскости  $(10\bar{1})$ .

3.10. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу  $C$ , отвечающую зеркально-поворотной оси  $\tilde{3}$  для  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$   $C = C_3^{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]} \sigma^{(101)}$ , где  $C_3^{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}$  – матрица поворота вокруг оси  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  на  $120^\circ$  против часовой стрелки,  $\sigma^{(101)}$  – матрица отражения в плоскости  $(101)$ . Определите для матрицы  $C$  порядок, тип (поворотная или инверсионная) и кристаллографические индексы оси симметрии.

3.11. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицу  $C$ , отвечающую зеркально-поворотной оси  $\tilde{4}$  для  $[0\bar{1}0]$   $C = C_4^{[0\bar{1}0]} \sigma^{(\bar{1}0\bar{1})}$ , где  $C_4^{[0\bar{1}0]}$  – матрица поворота вокруг оси  $[0\bar{1}0]$  на  $90^\circ$ ,  $\sigma^{(\bar{1}0\bar{1})}$  – матрица отражения в плоскости  $(\bar{1}0\bar{1})$ . Определите для матрицы  $C$  порядок, тип (поворотная или инверсионная) и кристаллографические индексы оси симметрии.

3.12. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите матрицы поворота  $C_4^{[001]}$  – вокруг оси  $[001]$  на  $90^\circ$  по часовой стрелке и  $C_2^{[01\bar{1}]}$  – вокруг оси  $[01\bar{1}]$  на  $180^\circ$ , вычислите аналитический результат последовательного выполнения операций симметрии  $C = C_2^{[01\bar{1}]} C_4^{[001]}$ , определите для матрицы  $C$  порядок, тип

(поворотная или инверсионная) и кристаллографические индексы оси симметрии.

3.13. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите *матрицы*  $\sigma^{(1\bar{1}0)}$  – отражение в плоскости  $(1\bar{1}0)$  и  $\sigma^{(101)}$  – отражение в плоскости  $(101)$ , вычислите аналитический результат последовательного выполнения операций симметрии  $\sigma^{(101)}\sigma^{(1\bar{1}0)}$ , определите для результирующей операции порядок, тип (поворотная или инверсионная) и кристаллографические индексы оси симметрии.

3.14. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите *матрицу*  $\sigma^{(011)}$  – отражение в плоскости  $(011)$ , вычислите аналитический результат последовательного выполнения операций симметрии  $\sigma^{(011)}i$ , где  $i$  – центр симметрии (центр инверсии), определите для результирующей операции порядок, тип (поворотная или инверсионная) и кристаллографические индексы оси симметрии.

3.15. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите *матрицы*  $C_3^{[\bar{1}\bar{1}1]}$  – поворота вокруг оси  $[\bar{1}\bar{1}1]$  на  $120^\circ$  против часовой стрелки и  $\sigma^{(01\bar{1})}$  – отражение в плоскости  $(01\bar{1})$ , вычислите аналитический результат последовательного выполнения операций симметрии  $C_3^{[\bar{1}\bar{1}1]}\sigma^{(01\bar{1})}$ , определите для результирующей операции порядок, тип (поворотная, инверсионная или зеркально-поворотная) и кристаллографические индексы оси симметрии.

3.16. Используя стандартную стереографическую проекцию, запишите *матрицы*  $C_2^{[101]}$  – поворота вокруг оси  $[101]$  на  $180^\circ$  и  $\sigma^{(101)}$  – отражение в плоскости  $(101)$ , вычислите аналитический результат последовательного выполнения операций симметрии  $C_2^{[101]}\sigma^{(101)}$ , определите для результирующей операции порядок, тип (поворотная, инверсионная или зеркально-поворотная) и кристаллографические индексы оси симметрии.

3.17. Запишите *матрицу поворота R* вокруг оси  $[2\bar{1}\bar{1}0]$  на  $180^\circ$  против часовой стрелки для гексагонального кристалла.

3.18. Запишите *матрицу поворота R* вокруг оси  $[0001]$  на  $60^\circ$  по часовой стрелке для гексагонального кристалла.



## 4. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

Изучением физических свойств кристаллов занимается специальный раздел кристаллографии – кристаллофизика. Вследствие макроскопических свойств (однородности, симметрии и анизотропии) в кристаллах обнаруживается ряд свойств, невозможных в изотропных телах. Задачей кристаллофизики является установление влияния симметрии на физические свойства кристаллов, а также изучение влияния внешних воздействий на свойства кристаллов.

### 4.1. Принцип симметрии в кристаллофизике

Поскольку для любого макроскопического свойства кристалл рассматривается как однородная среда, то совершенно несущественны различия между простыми и винтовыми осями, между зеркальными плоскостями и плоскостями скользящего отражения. Таким образом, симметрия макроскопических свойств кристаллов определяется не пространственной, а точечной группой симметрии кристалла. Это соответствует известному *принципу Неймана*, современная формулировка которого гласит: *«Элементы симметрии любого физического свойства кристалла должны включать элементы симметрии точечной группы кристалла»*.

Если на кристалл накладывается физическое воздействие, обладающее определенной симметрией, то симметрия такого кристалла, находящегося в поле воздействия, изменяется и может быть определена при помощи *принципа суперпозиции Кюри*: *«Кристалл, находящийся под влиянием внешнего воздействия, сохраняет лишь те элементы симметрии, которые являются общими для кристалла без воздействия и для воздействия без кристалла»*.

Для определения симметрии результирующего явления важна не только симметрия взаимодействующих явлений, но и взаимное расположение их элементов симметрии. При решении такого рода задач удобно пользоваться стереографическими проекциями точечных групп симметрии кристаллов.

Рассмотрим, например, воздействие одноосного механического растягивающего усилия на кристалл класса  $m\bar{3}m$ . Растягивающее усилие относится к одной из предельных групп симметрии Кюри  $\infty/mmm$ , т.е. симметрии покоящегося цилиндра. Если это усилие направлено вдоль одной из осей 4, то, как видно из рис. 4.1, сохраняются лишь общие элементы симметрии: одна ось 4, четыре поперечные оси 2, четыре продольные и одна поперечная плоскости  $m$  и центр симметрии. В результате кубический кристалл  $m\bar{3}m$  под действием механического растяжения вдоль оси 4 приобретает свойства тетрагонального кристалла класса  $4/mmm$ .

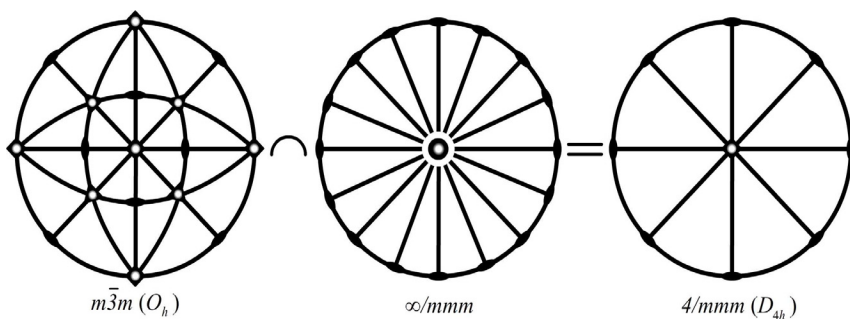


Рис. 4.1. Изменение симметрии кристалла  $m\bar{3}m$  под действием одноосного растяжения вдоль  $[100]$

Если к тому же кристаллу приложить то же усилие вдоль одной из его осей 3, то останутся только общие элементы симметрии: ось 3, три продольные плоскости симметрии  $m$ , три поперечные оси 2 и центр симметрии, т.е. кристалл станет тригональным класса  $\bar{3}m$ .

Действие электрического поля повлияет на симметрию кристалла не так, как действие механического напряжения, потому что симметрия электрического поля и механического усилия различны. Симметрию однородного электрического поля можно изобразить как симметрию неподвижного конуса  $\infty m$ . Под действием электрического поля вдоль оси 4 кристалл  $m\bar{3}m$  переходит в кристалл класса  $4mm$  (рис. 4.2), а под действием электрического поля вдоль оси 3 – в  $3m$ .

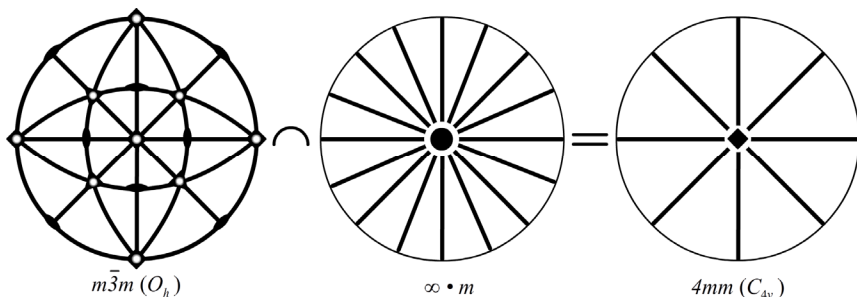


Рис. 4.2. Изменение симметрии кристалла  $m\bar{3}m$  под действием электрического поля вдоль  $[100]$

Иногда используют *обобщенный принцип суперпозиции Кюри*: когда несколько различных явлений природы накладываются друг на друга, образуя одну систему, их диссимметрии складываются. Под диссимметрией, по А.В. Шубникову, следует понимать отсутствующие элементы симметрии.

#### 4.2. Упругие свойства кристаллов

Основным законом теории упругости твердых тел в области малых деформаций является *закон Гука*. Для изотропных тел закон Гука выражается соотношениями  $\sigma = c\varepsilon$ , где  $\sigma$  – напряжение,  $\varepsilon$  – деформация,  $c$  – жесткость (используются также названия модуль Юнга, константа упругой жесткости) или  $\varepsilon = s\sigma$ , где  $s$  – податливость или константа упругой податливости, причем  $s = 1/c$ .

С использованием тензоров напряжения и деформации закон Гука в обобщенной форме имеет вид

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl} \quad (4.1)$$

или

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}, \quad (4.2)$$

где коэффициенты упругой жесткости  $c_{ijkl}$  и упругой податливости  $s_{ijkl}$  образуют тензоры четвертого ранга.

Коэффициенты упругости  $c_{ijkl}$  и  $s_{ijkl}$  в (4.1) и (4.2) удобнее записать с помощью матричных обозначений вместо тензорных.

Тензорные обозначения: 11 22 33 23 32 31 13 12 21

Матричные обозначения: 1 2 3 4 5 6

Теперь (4.1) и (4.2) можно записать как

$$\sigma_j = c_{ij} \varepsilon_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6); \quad (4.3)$$

и

$$\varepsilon_j = s_{ij} \sigma_i \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6). \quad (4.4)$$

Матрицы  $c_{ij}$  и  $s_{ij}$  являются взаимно-обратными, т.е.  $c_{ij}s_{jk} = \delta_{ik}$ , где  $\delta_{ik}$  – единичная матрица. Вследствие симметрии кристалла некоторые из компонентов  $c_{ij}$  и  $s_{ij}$  становятся равными нулю или равными друг другу, а число независимых среди неравных нулю коэффициентов уменьшается.

Матрицы коэффициентов упругости для кристаллов кубической сингонии имеют вид

$$\begin{array}{cccccc} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 & s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 & s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 & s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} \end{array} \quad (4.5)$$

а для кристаллов гексагональной сингонии

$$\begin{array}{cccccc} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 & s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 & s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 & s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(s_{11} - s_{12}) \end{array} \quad (4.6)$$

Если использовать более привычные величины:  $E$  – модуль Юнга,  $G$  – модуль сдвига и  $\nu$  – коэффициент Пуассона, получим

$$s_{11} = \frac{1}{E}, \quad s_{12} = -\frac{\nu}{E}, \quad s_{44} = \frac{1}{G}.$$

В кубических кристаллах вводят параметр упругой анизотропии

$$A = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12}) = 2(s_{11} - s_{12})/s_{44}.$$

**Модуль Юнга в произвольном направлении.** Чтобы определить модуль Юнга в произвольном направлении, задаваемом направляющими косинусами  $l_1, l_2, l_3$ , требуется преобразовать систему координат так, чтобы ось  $x'_1$  располагалась вдоль выбранного направления, тогда  $E(l_1, l_2, l_3) = 1/s'_{11}$ .

Для кубических кристаллов

$$s'_{11} = \frac{1}{E_{l_1 l_2 l_3}} = s_{11} - 2\left(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44}\right)\left(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_1^2 l_3^2\right), \quad (4.7)$$

для гексагональных –

$$s'_{11} = \frac{1}{E_{l_1 l_2 l_3}} = \left(1 - l_3^2\right)^2 s_{11} + l_3^4 s_{33} + l_3^2 \left(1 - l_3^2\right) \left(2s_{13} + s_{44}\right). \quad (4.8)$$

Отметим, что для кубической сингонии модуль Юнга не является изотропным. Для ГЦК-кристаллов модуль Юнга увеличивается при движении от  $\langle 100 \rangle$  к  $\langle 111 \rangle$ , тогда как у ОЦК-кристаллов модуль Юнга при движении от  $\langle 100 \rangle$  к  $\langle 111 \rangle$  уменьшается. С точки зрения упругой анизотропии наиболее изотропным является вольфрам, а среди ГЦК-кристаллов – алюминий.

### **Контрольные упражнения и задачи**

4.1. Определите *элементы симметрии* кристалла с точечной группой  $T_h$  под действием одноосного растяжения (предельная группа симметрии  $\infty/mmm$ ) вдоль  $[1\bar{1}0]$ .

4.2. Определите *элементы симметрии* кристалла с точечной группой  $O_h$  под действием однородного электрического поля (предельная группа симметрии  $\infty m$ ) вдоль  $[1\bar{1}\bar{1}]$ .

4.3. Определите *элементы симметрии* кристалла с точечной группой  $T_d$  под действием однородного магнитного поля (предельная группа симметрии  $\infty/m$ ) вдоль  $[101]$ .

4.4. Определите модули Юнга  $E$  для монокристалла Nb вдоль направлений  $[110]$ ,  $[1\bar{1}0]$ ,  $[1\bar{1}\bar{1}]$  (для Nb константы жесткости  $c_{11} = 246$  ГПа,  $c_{12} = 134$  ГПа,  $c_{44} = 29$  ГПа).

4.5\*. Определите модули Юнга  $E$  для монокристалла  $\text{Cu}$  вдоль направлений  $[0\bar{1}0]$ ,  $[10\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}1]$  (для  $\text{Cu}$  константы жесткости  $c_{11} = 168$  ГПа,  $c_{12} = 121$  ГПа,  $c_{44} = 76$  ГПа).

4.6\*. Определите модули Юнга  $E$  для монокристалла  $\text{Be}$  вдоль направлений  $[\bar{2}110]$ ,  $[1\bar{1}00]$ ,  $[\bar{1}011]$  (для  $\text{Be}$  константы жесткости  $c_{11} = 292$  ГПа,  $c_{12} = 27$  ГПа,  $c_{13} = 14$  ГПа,  $c_{33} = 336$  ГПа,  $c_{44} = 162$  ГПа,  $c_{66} = 133$  ГПа, отношение  $c/a = 1,57$ ).

4.7\*. Запишите тензор деформации для винтовой дислокации в кристаллографической системе координат с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[110]$ .

4.8\*. Запишите тензор напряжений для винтовой дислокации в кристаллографической системе координат с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[0\bar{1}1]$ .

4.9\*. Запишите тензор деформации для краевой дислокации в кристаллографической системе координат с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$ .

4.10\*. Запишите тензор напряжений для краевой дислокации в кристаллографической системе координат с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[1\bar{1}1]$ .

## 5. КРИСТАЛЛОГРАФИЯ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Под действием механического напряжения кристаллы деформируются. При малых напряжениях кристалл деформируется упруго, когда связь между деформацией и напряжением подчиняется закону Гука. *Предел упругости* связан с предельным напряжением, до которого выполняется закон Гука. Практически предел упругости неотличим от напряжений, при которых появляется остаточная деформация, т.е. так называемого *предела текучести*. Если нагрузить кристалл больше предела текучести, а затем разгрузить, то его прежняя форма не восстанавливается, кристалл остается пластически деформированным.

## 5.1. Пластическая деформация монокристаллов

Пластическая деформация монокристалла может происходить путем скольжения или двойникования.

Основным способом пластической деформации кристаллов при нормальных и низких температурах является *скольжение*. Оно представляет собой перемещение одной части кристалла относительно другой без изменения объема кристалла. Обычно скольжение осуществляется по определенным кристаллографическим плоскостям вдоль определенных кристаллографических направлений в зависимости от структуры кристалла.

При пластической деформации скольжением выполняется закон критического скальвающего напряжения (закон Шмида), который заключается в том, что деформация начинается лишь тогда, когда внешнее напряжение впервые достигает величины критического скальвающего напряжения по одной из систем скольжения.

Рассмотрим монокристалл в форме цилиндра, который растягивается под действием нормального напряжения  $\sigma$  вдоль направления  $F$  (рис. 1.75).

На плоскость скольжения  $S$  с нормалью  $n$  действует напряжение  $\sigma \cos \chi$ , а компонента  $\sigma_m$  его в направлении скольжения  $m$  равна  $\sigma_m = \sigma \cos \chi \cos \lambda$ , где  $\lambda$  – угол между направлением скольжения и осью растяжения. Скольжение начнется лишь в условиях, когда критическое скальвающее напряжение  $\sigma_m$  достигнет значения, равного пределу текучести. Множитель  $\cos \chi \cos \lambda$  называют *ориентационным множителем* или *фактором Шмида*.

Если кристалл находится под действием тензора напряжения  $\sigma$ , то ориентационный множитель находят из соотношения

$$\sigma_{hm} = \tilde{h} \sigma_m, \quad (5.1)$$

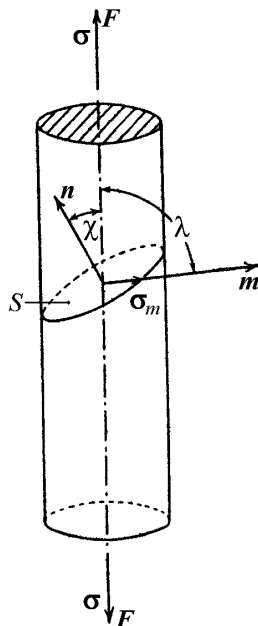


Рис. 5.1. К закону критического скальвающего напряжения

где  $\tilde{h}$  – матрица-строка, компонентами которой являются направляющие косинусы нормали к плоскости скольжения, а  $m$  – матрица-столбец с направляющими косинусами направления скольжения.

**Скольжение в металлах с ГЦК-структурой.** Плоскостями и направлениями скольжения, как правило, служат плоскости и направления плотнейшей упаковки. В металлах с ГЦК-структурой *системой скольжения* является  $\{111\}\langle 110\rangle$ , т.е. имеется восемь плоскостей скольжения с шестью направлениями в каждой плоскости. Однако из-за centrosимметричности скольжения имеется 12 различных систем скольжения, которые удобно представить на стереографической проекции.

Обычно ось растяжения  $F$  показывают в пределах *стандартного стереографического треугольника*  $[100]-[110]-[111]$  (рис. 5.2).

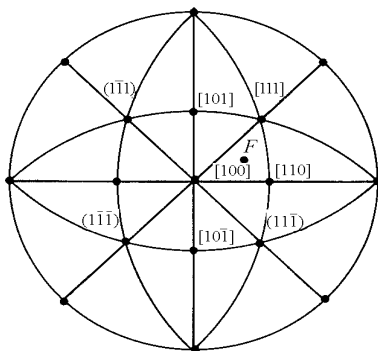


Рис. 5.2. Системы скольжения ГЦК-кристалла на стандартной стереографической проекции:

$(11\bar{1})[101]$  – первичная система скольжения;  $(1\bar{1}\bar{1})[110]$  – сопряженная или вторичная система скольжения;  $(111)[10\bar{1}]$  – критическая система скольжения;  $(1\bar{1}\bar{1})[101]$  – поперечная система скольжения

Тогда *первичной системой скольжения* – с максимальным значением множителя Шмида – будет система  $(11\bar{1})[101]$ . Благодаря повороту в процессе растяжения ось  $F$  перемещается к направлению скольжения  $[101]$  и переходит в треугольник  $[100]-[101]-[111]$ , в котором действует *сопряженная (или вторичная) система*



скольжения  $(1\bar{1}1)[110]$ , и ось растяжения возвращается в стандартный стереографический треугольник. Точно также при сжатии ось  $F$  смещается к направлению нормали к плоскости скольжения и оказывается в треугольнике  $[100]-[110]-[11\bar{1}]$ , где действует критическая система скольжения  $(111)[10\bar{1}]$ . Систему скольжения  $(1\bar{1}\bar{1})[101]$  называют *поперечной*.

**Скольжение в металлах с ОЦК-структурой.** Кристаллографическое скольжение включает плотнейшее направление  $\langle 111 \rangle$ . В качестве плоскости скольжения могут быть плоскости  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  или  $\{123\}$  в зависимости от металла и температуры деформации.

В металлах с ОЦК-структурой возможно *некристаллографическое скольжение* с направлением  $\langle 111 \rangle$  и по плоскости с максимальным напряжением сдвига, когда  $\chi = 90^\circ - \lambda$ .

## 5.2. Кристаллографическая текстура

При пластической деформации поликристалла каждое зерно при наличии пяти независимых систем деформации может деформироваться без образования внутренних полостей. При этом оно испытывает поворот, в результате которого образуется *преимущественная ориентировка*, или *текстура*.

Простейшим типом текстуры является такое упорядоченное расположение кристаллитов, когда определенные и равноценные кристаллографические направления  $\langle mnp \rangle$  располагаются параллельно одному внешнему направлению  $F$ , называемому *осью текстуры*. Соответствующий тип текстуры принято называть *аксиальной (осевой)*. Иногда такую текстуру называют также *волокнистой* или *неограниченной*.

Аксиальная текстура наблюдается, например, в проволоках, в которых кристаллиты ориентированы определенным кристаллографическим направлением вдоль оси проволоки.

В ОЦК-металлах ось аксиальной текстуры совпадает с  $\langle 110 \rangle$ , а в ГЦК – с  $\langle 100 \rangle$  или  $\langle 111 \rangle$  в зависимости от энергии дефекта упаковки.

В прокатанных листах, лентах и фольге возникает *ограниченная текстура* (*текстура прокатки*). При этом определенное направление  $[mnp]$  кристаллитов ориентируется параллельно направлению прокатки, а некоторая кристаллографическая плоскость  $(hkl)$  располагается параллельно плоскости прокатки (поверхности листа).

Для описания текстуры используются *прямые полюсные фигуры* (ППФ), *обратные полюсные фигуры* (ОПФ) и *функция распределения ориентаций* (ФРО).

**Прямые полюсные фигуры.** ППФ  $(hkl)$  – это изображение на стереографической проекции в системе координат, связанной с внешними осями, распределения нормали к выбранной кристаллографической плоскости  $(hkl)$ .

Если ось аксиальной текстуры  $F \parallel \langle mnp \rangle$ , то в ортогональной систему координат  $FGT$  направление  $[mnp]$  будет параллельно направлению  $F$ , а нормали к плоскостям  $\{hkl\}$  – на нескольких конусах. Например, для аксиальной текстуры с  $F \parallel [123]$  нормали к плоскостям  $\{100\}$  лежат на трех конусах с углами полураствора  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , где  $\cos \alpha_1 = 1/\sqrt{14}$ ,  $\cos \alpha_2 = 2/\sqrt{14}$ ,  $\cos \alpha_3 = 3/\sqrt{14}$ . Если  $F$  расположено в центре стереографической проекции, то ППФ  $(100)$  изображается тремя окружностями с  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ . Когда  $F$  находится на основном круге проекции, ППФ  $(100)$  состоит из набора параллелей (рис. 5.3).

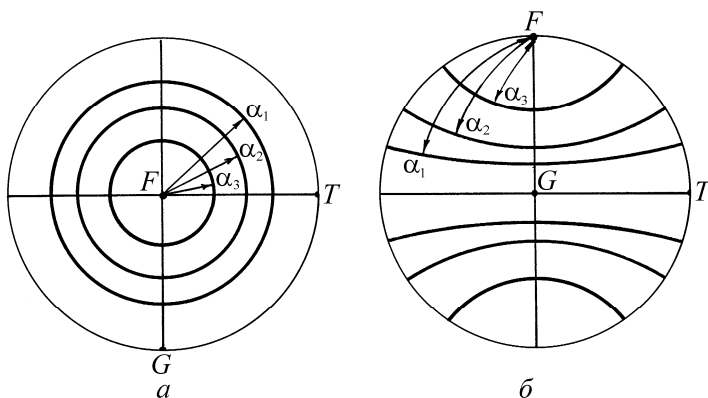


Рис. 5.3. Прямая полюсная фигура ППФ  $(100)$  для аксиальной текстуры с  $F \parallel [123]$ :  $F$  расположено в центре проекции (а) и на основном круге проекции (б)

**Обратные полюсные фигуры.** ОПФ – это изображение на стереографической проекции в системе координат, связанной с внутренними кристаллографическими осями, распределения выбранного внешнего направления.

Для аксиальной текстуры кубического материала с  $F \parallel \langle 123 \rangle$  ОПФ для  $F$  будет изображаться точкой, совпадающей с [321] на стандартном стереографическом треугольнике [100] – [110] – [111].

В кубическом материале с аксиальной текстурой  $F \parallel \langle 110 \rangle$  обратная полюсная фигура для  $G \perp F$  изображается множеством направлений, перпендикулярных [110] (рис. 5.4).

**Функция распределения ориентаций.** ФРО определяется плотностью вероятности  $f(\mathbf{g}) = f(\varphi, \theta, \psi)$  найти в данной точке ориентировку в области  $(\mathbf{g}, \mathbf{g} + d\mathbf{g})$ . Другими словами, функция распределения ориентаций показывает относительную объемную долю кристаллитов  $\Delta V_{\mathbf{g}, \mathbf{g} + \Delta \mathbf{g}}/V$ , ориентация которых находится между  $\mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi)$  и  $\mathbf{g}(\varphi + \Delta\varphi, \theta + \Delta\theta, \psi + \Delta\psi)$ , где  $\varphi, \theta, \psi$  – эйлеровские углы, изменяющиеся в пределах  $0-2\pi, 0-\pi$  и  $0-2\pi$  соответственно. Таким образом, функцию распределения ориентаций показывают в ориентационном пространстве, объем которого равен  $8\pi^2 \neq 4\pi^3 \approx 12\pi^2$ ! Это связано с тем, что функция  $f(\mathbf{g})$  задана на непрерывной группе вращений, где каждая точка имеет вес  $\sin \theta$ .

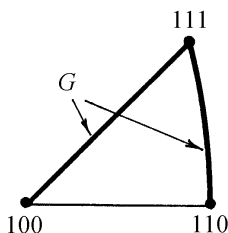


Рис. 5.4. Обратная полюсная фигура для направления  $G \perp F$  при аксиальной текстуре с  $F \parallel \langle 110 \rangle$

функция  $f(\mathbf{g})$  задана на непрерывной группе вращений, где каждая точка имеет вес  $\sin \theta$ .

Для определения ФРО в случае аксиальной текстурой  $F \parallel \langle 123 \rangle$  необходимо рассмотреть ППФ (100). Если ось текстуры  $F$  совпадает с осью  $Z$ , то можно определить эйлеровские углы  $\varphi_1, \theta_1, \psi_1$  одного из кристаллов образца, как показано на рис. 5.5,а.

При нахождении эйлеровских углов для второго кристалла трудно заметить, что  $\theta_{II} = \theta_I, \psi_{II} = \psi_I$ , т.е. в случае аксиальной текстуры ФРО в ориентационном пространстве изображается стержнем с  $\varphi - \text{var}$  и  $\theta, \psi - \text{const}$  (рис. 5.5,б).

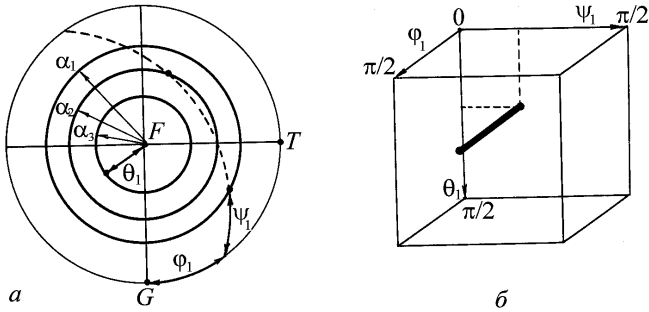


Рис. 5.5. Определение функции распределения ориентаций для аксиальной текстуры с  $F \parallel \langle 123 \rangle$ :

*a* – определение эйлеровских углов; *б* – ФРО в ориентационном пространстве

Поскольку кубические кристаллы обладают поворотной симметрией с 24 элементами, то появляется возможность выбора системы координат при определении эйлеровских углов 24 способами.

### **Контрольные упражнения и задачи**

5.1. Для металлического монокристалла с ГЦК-решеткой, подвергнутого одноосному растяжению под действием напряжения  $\sigma$  вдоль  $[\bar{1}\bar{3}2]$ , найти *сдвиговые напряжения*  $\tau$  в системах скольжения: первичной, сопряженной, поперечной, критической.

5.2. Для металлического монокристалла с ОЦК-решеткой, подвергнутого одноосному растяжению под действием напряжения  $\sigma$  вдоль  $[\bar{1}\bar{1}2]$ , найти *сдвиговые напряжения*  $\tau$ , определяющие кристалло- и некристаллографическое скольжение.

5.3. Найдите выражение для сдвигового напряжения  $\tau$  по плоскости  $(1\bar{1}1)$  вдоль  $[10\bar{1}]$  кубического кристалла для двухосного напряженного состояния ( $\sigma_1$  – вдоль  $[100]$ ,  $\sigma_2$  – вдоль  $[001]$ ).

5.4\*. Найдите выражение для сдвигового напряжения  $\tau$  по плоскости  $(1\bar{1}0)$  вдоль  $[111]$  кубического кристалла для двухосного напряженного состояния ( $\sigma_1$  – вдоль  $[101]$ ,  $\sigma_2$  – вдоль  $[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$ ).

5.5. Определите кристаллографические *индексы* направления  $l$  вдоль линии краевой дислокации ГЦК кристалла с вектором Бюргера вдоль  $[10\bar{1}]$ , скользящей по одной из плоскостей  $\{111\}$ .

5.6. Определите кристаллографические *индексы* направления  $l$  вдоль линии краевой дислокации ОЦК-кристалла с вектором Бюргера вдоль  $[111]$ , скользящей по одной из плоскостей  $\{112\}$ .

5.7. Определите векторы Бюргера *дислокаций* Шокли после расщепления полной винтовой дислокации, скользящей по плоскости  $(\bar{1}\bar{1}1)$  ГЦК-кристалла.

5.8. Определите векторы Бюргера *дислокаций* Шокли после поперечного скольжения и расщепления полной винтовой дислокации, скользящей по плоскости  $(111)$  ГЦК кристалла.

5.9. Покажите на стереографической проекции *прямую полюсную фигуру* ППФ  $(112)$  для неограниченной текстуры с осью  $F \parallel \langle 110 \rangle$ .

5.10. Покажите на стандартном стереографическом треугольнике *обратную полюсную фигуру* ОПФ для направления  $F$  вдоль оси текстуры в кубическом кристалле с неограниченной текстурой  $\langle 111 \rangle$ .

5.11. Для текстуры прокатки кубического материала с плоскостью прокатки НН  $\{112\}$  и направлением прокатки НП  $\langle 111 \rangle$  определите *кристаллографические индексы поперечного направления* ПН.

5.12\*. Покажите на стандартном стереографическом треугольнике *обратную полюсную фигуру* ОПФ для направления  $G$  перпендикулярного оси текстуры в кубическом кристалле с неограниченной текстурой  $\langle 100 \rangle$ .

5.13\*. Для текстуры прокатки кубического материала с плоскостью прокатки НН  $\{112\}$  и направлением прокатки НП  $\langle 110 \rangle$  покажите на стандартном стереографическом треугольнике *обратную полюсную фигуру* ОПФ для направления в плоскости прокатки под углом  $30^\circ$  к направлению прокатки НП.

5.14\*. Покажите на стандартном стереографическом треугольнике *обратную полюсную фигуру* ОПФ для направления  $G$  перпендикулярного оси текстуры в кубическом кристалле с неограниченной текстурой  $\langle 110 \rangle$ .

5.15\*. Покажите в пространстве эйлеровских углов *функцию распределения ориентаций* ФРО для неограниченной текстуры  $\langle 211 \rangle$ .

5.16\*. Определите функцию распределения ориентаций ФРО для аксиальной текстуры с осью  $F \parallel \langle 110 \rangle$ .

5.17\*. Найдите выражение для расчета эйлеровских углов  $\theta$ ,  $\psi$  при рассмотрении ФРО для аксиальной текстуры  $\langle mnp \rangle$  в кубическом материале.

5.18\*. Найдите выражение для расчета положения максимумов ППФ 100 на стереографической проекции, если известны эйлеровские углы  $\varphi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$  для максимума ФРО.

5.19\*. Найдите выражение для расчета положения максимума ОПФ для НП в стандартном стереографическом треугольнике, если известны эйлеровские углы  $\varphi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$  для максимума ФРО.

5.20. Определите количество систем скольжения в металлах с ОЦК структурой при скольжении по  $\{121\}$  вдоль  $\langle 111 \rangle$ .

## 6. КРИСТАЛЛОГРАФИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН И МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Во всяком поликристаллическом материале существуют внутренние границы, разделяющие соседние зерна. Это или *границы зерен* одной и той же фазы, или *межфазные границы*. В любом случае граница – двумерный дефект, имеющий макроскопические размеры в двух измерениях и атомные – в третьем измерении, т.е. является наноструктурным компонентом.

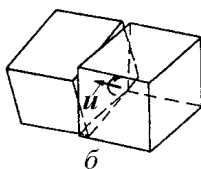
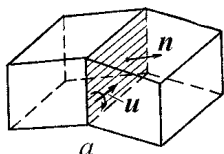


Рис. 6.1. Границы наклона (а) и кручения (б)

Границы с углом разориентации соседних зерен  $\alpha \leq 10^\circ$  относят к *малоугловым* границам, а с большей разориентацией – к *высокоугловым*. Малоугловые границы являются границами между субзернами.

Если ось разворота  $u$  лежит в плоскости границы зерен (субзерен), т.е.  $u \perp n$ , то такую границу называют *наклонной*, а если ось вращения  $u$  перпендикулярна плоскости границы, т.е.  $u \parallel n$ , то говорят о границе *кручения* (рис. 6.1).

Для задания границы в *бикристалле* с *макроскопической точки зрения* необходимы пять параметров: три – для описания взаимного разворота двух кристаллов и два – для задания  $n$  – нормали к плоскости границы. В качестве угловых параметров разворота используют три эйлеровских угла ( $\varphi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$ ) или угол разворота  $\alpha$  и ось разворота  $u$  вокруг оси  $\langle mnp \rangle$ . Из трех компонентов оси разворота

$m$ ,  $n$ ,  $p$  независимыми являются только два, поскольку  $m:n:p = l_1:l_2:l_3$ , но  $l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 1$ , где  $l_1, l_2, l_3$  – направляющие косинусы.

### 6.1. Малоугловые границы

*Малоугловыми* являются структурные дислокационные границы. *Симметричная граница наклона* состоит из стенки краевых дислокаций (рис. 6.2).

Если расстояние между дислокациями в стенке  $D$ , вектор Бюргерса  $\mathbf{b}$ , угол разориентировки  $\theta$ , то  $\sin(\theta/2) = b/(2D)$ , при малых углах  $\sin \theta \approx \theta$

$$D = \frac{b}{\theta}. \quad (6.1)$$

Чем больше угол разориентировки, тем меньше расстояние между дислокациями. При углах разориентировки более  $\sim 10^\circ$  дислокационная модель неприменима, так как дислокации располагаются очень близко друг к другу и их ядра сливаются.

В *несимметричных границах наклона* располагаются дислокации с различными векторами Бюргерса.

Малоугловая граница кручения состоит из сетки двух параллельных рядов винтовых дислокаций.

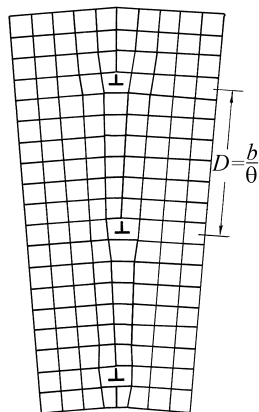


Рис. 6.2. Дислокационная структура симметричной границы наклона в простой кубической решетке

### 6.2. Высокоугловые границы

При рассмотрении структуры *высокоугловых границ* первоначально была предложена модель *аморфной прослойки* по границам зерен, обеспечивающей сцепление соседних зерен.

Следующим важным шагом в изучении границ зерен была *островковая* модель Мотта, согласно которой граница состоит из областей «хорошего» и «плохого» сопряжения решеток двух зерен.

В настоящее время эту модель в ее первоначальном виде уже не используют, но общую идею о чередовании в структуре границы областей хорошего и плохого сопряжения широко применяют в большинстве современных моделей высокоугловых границ.

**Решетка совпадающих узлов (PCY)** (в английской терминологии – coincidence site lattice, CSL) возникает при определенных строго фиксированных значениях оси и угла разворота соседних кристаллов (*соотношения Кронберга–Вильсона*). Например, при повороте на угол  $\theta = 2 \operatorname{arctg}(1/2) = 36,9^\circ$  вокруг оси  $[100]$  возникает решетка, в которой совпадающие узлы лежат в каждой пятой плоскости  $(012)$  (рис. 6.3).

Для характеристики PCY часто используют обратную плотность совпадающих узлов, обозначаемую  $\Sigma$ , – число узлов решетки, приходящихся на один совпадающий узел, причем число  $\Sigma$  всегда простое. Так,  $\Sigma = 1$  означает полное совпадение решеток и отсутствие границы. При  $\Sigma = 3$  возникает двойник в ГЦК-решетке. Для случая, изображенного на рис. 6.3,  $\Sigma = 5$ , а ячейка решетки совпадающих узлов является тетрагональной.

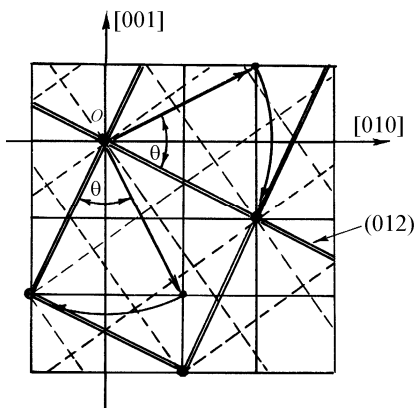


Рис. 6.3. Решетка совпадающих узлов с  $\Sigma = 5$

Для описания разворота кристаллов обычно используют угол  $\theta$  и ось разворота  $\mathbf{l}$ , а множество всевозможных разворотов можно представить в виде шара радиуса  $\pi$ . Объем пространства разворотов, как и ориентационного пространства с эйлеровскими углами, равен  $8\pi^2$ . Для описания разворота удобно использовать матрицу поворота  $\mathbf{A}_0(\mathbf{l}, \theta)$ , см. (2.6). Если кристаллическое пространство обладает элементами симметрии  $\mathbf{R}_i$ , то возникают эквивалентные описания того же самого разворота  $\mathbf{A}_i$ , причем

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{A}_0 \mathbf{R}_i^{-1}. \quad (6.2)$$



Таким образом, для описания разворота двух зерен в кубическом материале с группой симметрии  $m\bar{3}m$  существует 24 способа с 24 значениями углов разворота  $\theta_i$ . Максимально возможное значение минимального угла разворота вокруг оси  $l$  с кристаллографическими индексами  $[mnp]$  называют *предельным* углом разворота  $\theta_{пр}$  вокруг  $[mnp]$ . Если угол разворота  $\theta > \theta_{пр}$ , то возможно эквивалентное описание с углом разворота  $\theta_i < \theta$ . Предельный угол разворота для  $[100]$  равен  $45^\circ$ , для  $[110]$  –  $61^\circ$ , для  $[111]$  –  $60^\circ$ . Максимальное значение предельного угла разворота для кубических кристаллов равно  $\approx 62^\circ$  вокруг  $[221]$ .

### 6.3. Кристаллография мартенситных превращений

Мартенситные превращения являются *бездиффузионными* и *атермическими*, протекающими с очень большой скоростью.

Результаты изучения морфологии мартенситных превращений свидетельствуют о том, что рельеф – результат *однородной деформации с инвариантной плоскостью*, т.е. имеется плоскость (плоскость габитуса кристалла мартенсита), которая не искажается и не поворачивается; все смещения материала направлены в одну сторону и пропорциональны расстоянию от инвариантной плоскости.

При мартенситном превращении в сталях ГЦК-решетка аустенита (твердого раствора углерода в  $\gamma$ -Fe) переходит в объемноцентрированную тетрагональную (ОЦТ) решетку мартенсита. Первые *ориентационные соотношения Бейна* появились из рассмотрения sdвоенной ГЦК-ячейки  $\gamma$ -фазы (аустенита) и выделенной ОЦТ ячейки (рис. 6.4):

$$\begin{aligned} (001)_\gamma &\parallel (001)_\alpha, \\ [100]_\gamma &\parallel [110]_\alpha. \end{aligned}$$

которая связана с растяжением вдоль осей  $[100]_\alpha$  и  $[010]_\alpha$  на  $\approx 12\%$  и сжатием на  $\approx 17\%$  в направлении  $[001]_\alpha$ . Ориентационные соотношения Бейна наблюдаются при превращении в очень тонких пленках.

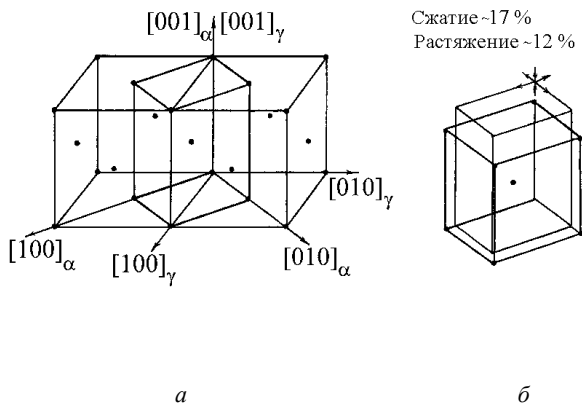


Рис. 6.4. Соответствие решеток для превращения ГЦК-аустенита в ОЦТ-мартенсит:

*a* – двояная ГЦК-ячейка с ОЦТ-тетрагональной ячейкой; *б* – деформация Бейна, переводящая ОЦТ-тетрагональную ячейку в ОЦТ-ячейку мартенсита

Для превращения выделенной ОЦТ-ячейки в ячейку мартенсита прикладывается *деформация Бейна* :

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1,12 & 0 & 0 \\ 0 & 1,12 & 0 \\ 0 & 0 & 0,83 \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

которая связана с растяжением вдоль осей  $[100]_{\alpha}$  и  $[010]_{\alpha}$  на  $\approx 12\%$  и сжатием на  $\approx 17\%$  в направлении  $[001]_{\alpha}$ . Ориентационные соотношения Бейна наблюдаются при превращении в очень тонких пленках.

В обычных (массивных) образцах стали с содержанием 0,5–1,4 массовых процента углерода выполняются *ориентационные соотношения Курдюмова–Закса*:

$$\begin{aligned} (111)_{\gamma} &\parallel (011)_{\alpha}, \\ [10\bar{1}]_{\gamma} &\parallel [11\bar{1}]_{\alpha}. \end{aligned}$$

Габитусная плоскость находится в области  $\{522\}$ – $\{952\}$ .

В сплавах выполняются *ориентационные соотношения Нишиямы*:

$$\begin{aligned} (111)_{\gamma} &\parallel (011)_{\alpha}, \\ [11\bar{2}]_{\gamma} &\parallel [11\bar{1}]_{\alpha}. \end{aligned}$$

Габитусная плоскость расположена около  $\{15\ 10\ 3\}$ .

Некоторые полиморфные превращения носят мартенситный характер. Так, при полиморфном превращении ОЦК-ячейки  $\beta$ -Zr в ГПУ-ячейку  $\alpha$ -Zr выполняются *ориентационные соотношения Бюргерса*:

$$\begin{aligned} \{110\}_{\beta} &\parallel \{0001\}_{\alpha}, \\ \langle 111 \rangle_{\beta} &\parallel \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle_{\alpha}. \end{aligned}$$

### **Контрольные упражнения и задачи**

6.1. Определите расстояние между дислокациями в симметричной границе наклона в Cu, если угол разворота субзерен  $\alpha = 1,5^\circ$  ( $a_{\text{Cu}} = 0,362$  нм).

6.2. Определите угол разворота субзерен, если расстояние между дислокациями в симметричной границе наклона в W равно 2,5 мкм ( $a_{\text{W}} = 0,316$  нм).

6.3. Определите кристаллографические индексы малоугловой границы кручения, состоящей из винтовых дислокаций с  $\mathbf{b}_1 = a/2[101]$ ,  $\mathbf{b}_2 = a/2[110]$ .

6.4. Определите кристаллографические индексы малоугловой симметричной границы наклона ГЦК-кристалла, состоящей из краевых дислокаций с  $\mathbf{b}_1 = a/2[1\bar{1}0]$ .

6.5. Определите кристаллографические индексы малоугловой симметричной границы наклона ОЦК-кристалла, состоящей из краевых дислокаций с  $\mathbf{b}_1 = a/2[1\bar{1}\bar{1}]$ .

6.6\*. Для разворота соседних кристаллов на угол  $25^\circ$  вокруг оси  $[1\bar{1}0]$ , определите параметры взаимного разворота из-за элемента симметрии  $C_3^{[1\bar{1}1]}$ .

6.7\*. Определите *матрицу* деформации Бейна  $\mathbf{B}$  при превращении аустенита ( $a = 0,3584$  нм) в мартенсит ( $a = 0,2850$  нм,  $c = 0,2958$  нм).

6.8\*. Определите углы между направлениями  $[101]$  и  $[11\bar{1}]$ ,  $[011]$  и  $[\bar{1}01]$  аустенита ( $a = 0,3610$  нм) после превращения в мартенсит ( $a = 0,2845$  нм,  $c = 0,3020$  нм).

6.9\*. Определите углы между плоскостями  $(\bar{1}0\bar{1})$  и  $(\bar{1}\bar{1}1)$ ,  $(0\bar{1}1)$  и  $(101)$  аустенита ( $a = 0,3610$  нм) после превращения в мартенсит ( $a = 0,2845$  нм,  $c = 0,3020$  нм).

6.10. Определите сингонию решетки совпадающих узлов, возникающей при повороте на угол  $\theta = 2 \arctg(1/2) = 36,9^\circ$  вокруг оси  $[100]$  кубического кристалла.

6.11\*. Определите индексы плоскости  $(110)$  ГЦК-аустенита после превращения в ОЦТ-мартенсит.

6.12\*. Определите индексы направления  $[111]$  ГЦК-аустенита после превращения в ОЦТ-мартенсит.

### Указания к решению задач

1.11\*. Сначала необходимо провести через точки 2 и 4 меридиан, найти точки 6 и 7 пересечения его с большим кругом, а затем повернуть вокруг одной из них, например 6, на угол  $\alpha$  до выхода точек 2 и 4 на большой круг (2' и 4'). Найти направление  $D'$  пересечения параллелей, проведенных вокруг 2' и 4' с углами  $\alpha = 50^\circ$  и  $\beta = 60^\circ$ . Искомое направление  $D$  получится после поворота направления  $D'$  вокруг 6 на угол  $\alpha$  в противоположном направлении.

1.12\*. Построить стереографическую проекцию плоскости  $P_{45}$ , т.е. провести меридиан, проходящий через точки 4 и 5, а затем найти гномостереографическую проекцию этой плоскости  $N_{45}$ . Спроектировать направления 1 и 2 на плоскость  $P_{45}$ , т.е. провести через  $N_{45}$  и точки 1 и 2 меридианы до пересечения с плоскостью  $P_{45}$  в точках 1' и 2'. Искомый угол  $\omega$  равен углу между точками 1' и 2'.

1.13\*. Искомый угол  $\eta$  равен углу между точками пересечения плоскостей  $P_{12}$  и  $P_{24}$  с плоскостью  $P_{56}$ .

1.19\*. Поскольку угол поворота вокруг любого направления отчитывается в плоскости перпендикулярной к этому направлению, необходимо провести эту плоскость  $P_4$ , нормалью к которой является направление 5. Далее находим точку 3' пересечения плоскости  $P_{34}$  с  $P_4$ . При повороте вокруг 4 по часовой стрелке на  $40^\circ$  точка 3' переходит в точку 5'. Искомое направление 5 находится в плоскости  $P_{45}$  (между точками 4 и 5'), образуя с направлением 4 угол  $\varphi$ , равный углу между точками 4 и 3.

1.20\*. Необходимо расположить точку 1 и крестик 2 на меридианах, симметрично расположенных относительно нулевого меридиана. Тогда искомым угол  $\varphi$  равен сумме углов  $\varphi_1$  (между 1 и ближайшим полюсом  $N$ ) и  $\varphi_2$  (между  $N$  и крестиком 2).

1.21\*. Необходимо расположить точку 3 и крестик 2 на меридианах, симметрично расположенных относительно нулевого меридиана. В верхней полусфере требуемая плоскость  $P_3$  изображается меридианом, проходящим через точку 3. Искомый угол является углом между плоскостью  $P_3$  и направлением 1 (см. задачу 1.7).

1.24\*. Система координат  $XYZ$  расположена так, что ось  $Z$  совпадает с центром стереографической проекции. Ось разворота  $l$  расположена на пересечении двух биссекторных плоскостей  $B_1$  и  $B_2$ . Плоскость  $B_1$  проходит через биссектрису между направлениями  $X$  и 1 и нормаль  $N_{X1}$  к плоскости, проходящей через  $X$  и 1; плоскость  $B_2$  проходит через биссектрису между направлениями  $Z$  и 3 и нормаль  $N_{Z3}$  к плоскости, проходящей через  $X$  и 1.

1.25\*. Предварительно необходимо определить положение оси поворота  $l$  для совмещения систем координат  $XYZ$  и  $123$  (см. задачу 1.24). Угол поворота  $\alpha$  находится в отсчетной плоскости  $P_l$ , нормалью к которой является ось поворота  $l$ , между направлениями 2' и 3', которые являются проекциями направлений 2 и 3 на плоскости  $P_l$ .

2.12\*. Сначала необходимо перейти от четырех индексной системы обозначений  $[u v t w]$  к трех индексной  $[U V W]$  (см. 2.1), затем вычисляют период идентичности с использованием метрической матрицы  $G_{\text{гекс}}$  в соответствии с 2.16.

2.18\*. Сначала необходимо перейти от четырех индексной системы обозначений направлений  $[u v t w]$  к трех индексной  $[U V W]$  (см. 2.1), затем вычисляют угол между направлениями с использованием метрической матрицы  $G_{\text{гекс}}$  в соответствии с 2.21.

2.22\*. Сначала необходимо перейти от четырех индексной системы обозначений плоскостей  $(hkil)$  к трех индексной  $(hkl)$ , затем вычисляют угол между плоскостями с использованием метрической матрицы  $G_{\text{гекс}}^{-1}$  в соответствии с 2.22.

2.29\*. Сначала необходимо перейти от четырехиндексной системы обозначений направлений и плоскостей к трехиндексной, затем вычисляют угол между направлением и плоскостью с использованием метрических матриц  $G_{\text{гекс}}$  и  $G_{\text{гекс}}^{-1}$  в соответствии с 2.23.

2.30\*. Сначала необходимо перейти от четырехиндексной системы обозначений плоскостей ( $hkil$ ) к трехиндексной ( $hkl$ ), затем с использованием векторного произведения  $\mathbf{R} = \mathbf{H}_1 \times \mathbf{H}_2$  найти кристаллографические индексы оси в трехиндексном обозначении, которые перевести в четырехиндексную систему.

2.31\*. Кристаллографическую систему  $XYZ$  выбирают на основе направлений  $[\bar{2}\bar{1}\bar{1}0]$ ,  $[\bar{1}\bar{2}\bar{1}0]$  и  $[0001]$ . Стереографические проекции направлений  $[10\bar{1}0]$  и  $[11\bar{2}1]$  находят как результат пересечений параллелей, определяемых направляющими углами указанных направлений, вычисляемых в соответствии с задачей 2.12\*.

2.32\*. Кристаллографическую систему  $XYZ$  выбирают на основе направлений  $[100]$ ,  $[010]$  и  $[001]$ . Стереографические проекции направлений  $[10\bar{1}]$  и  $[11\bar{2}]$  находят как результат пересечений параллелей, определяемых направляющими углами указанных направлений, вычисляемых в соответствии с 2.21 при использовании метрической матрицы для ромбического кристалла  $\mathbf{G}_{\text{ромбич.}}$ .

2.33\*. Сначала необходимо определить матрицу  $A$  перехода от гранецентрированной решетки Браве к примитивной, тогда кристаллографические индексы направлений находят как  $\mathbf{m}' = \tilde{A}^{-1} \mathbf{m}$ , а кристаллографические индексы плоскости как  $\mathbf{h}' = A\mathbf{h}$ .

2.34\*. Сначала необходимо определить матрицу  $A$  перехода от объемно-центрированной решетки Браве к примитивной, тогда кристаллографические индексы направлений находят как  $\mathbf{m}' = \tilde{A}^{-1} \mathbf{m}$ , а кристаллографические индексы плоскости как  $\mathbf{h}' = A\mathbf{h}$ .

4.5\*. Сначала необходимо определить коэффициенты податливости  $s_{ij}$  для Cu, поскольку матрицы  $c_{ij}$  и  $s_{ij}$  являются взаимно обратными. Расчет модулей Юнга для указанных направлений кубического кристалла рассчитать по (4.7).

4.6\*. Сначала необходимо определить коэффициенты податливости  $s_{ij}$  для Be, поскольку матрицы  $c_{ij}$  и  $s_{ij}$  являются взаимно обратными. Расчет модулей Юнга для указанных направлений кубического кристалла рассчитать по (4.8).

4.7\*. Если известен тензор деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}$  для винтовой дислокации в ортогональной системе координат  $xuz$ , то тензор деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}'$  в кристаллографической системе координат, в соответствии с (2.11), имеет вид  $\boldsymbol{\varepsilon}' = \mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{C}$ , где  $\mathbf{C}$  – матрица перехода из кристаллографической системы координат в ортогональную систему  $xuz$ .

4.8\*. Если известен тензор напряжений  $\boldsymbol{\sigma}$  для винтовой дислокации в ортогональной системе координат  $xuz$ , то тензор напряжений  $\boldsymbol{\sigma}'$  в кристаллографической системе координат, в соответствии с (2.11), имеет вид  $\boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{C}$ , где  $\mathbf{C}$  – матрица перехода из кристаллографической системы координат в ортогональную  $xuz$ .

4.9\*. Решение аналогично задаче 4.7\*.

4.10\*. Решение аналогично задаче 4.8\*.

5.4\*. Сначала необходимо записать тензор напряжений  $\boldsymbol{\sigma}'$  в кристаллографической системе координат как  $\boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{C}$ , где  $\mathbf{C}$  – матрица перехода из кристаллографической системы координат в ортогональную систему  $xuz$ . Сдвиговое напряжения  $\tau_{hm}$  по плоскости  $h$  в направлении  $m$ , в соответствии с (5.1), имеет вид  $\tau_{hm} = \tilde{h} \boldsymbol{\sigma} m$ .

5.12\*. Сначала необходимо найти на стереографической проекции плоскость  $P$ , нормалью к которой является направление  $G$ , а затем показать в пределах стандартного стереографического треугольника компоненты плоскости  $P$ .

5.13\*. Сначала необходимо записать матрицу  $\mathbf{D}$  ортогонального преобразования от системы координат прокатки к кристаллографической системе координат. Искомое направление  $m$  будет иметь в кристаллографической системе координат компоненты  $m' = \mathbf{D} m$ . Для изображения направления  $m$  в стандартном стереографическом треугольнике необходимо нормированные компоненты  $m'$  записать так, чтобы  $|m'_1| \geq |m'_2| \geq |m'_3|$ . Тогда координаты  $m$  в стандартном стереографическом треугольнике определяются соотношением (1.1).

5.14\*. Решение аналогично задаче 5.12\*.

5.15\*. Сначала необходимо построить ППФ 100 для указанной неограниченной текстуры. Выбирая систему координат произвольного кристаллита на полученной ППФ, можно убедиться, что ФРО для неограниченной текстуры изображается прямой линией, параллельной оси  $\theta$  (аналогично рис. 5.5).

5.16\*. Решение аналогично задаче 5.15\*.

5.17\*. Сначала необходимо построить ППФ 100 для указанной аксиальной текстуры  $\langle mnp \rangle$ , вид которой аналогичен рис. 5.5. Если в системе координат  $GTF$  кристаллит (точка  $A$  на плоскости  $M$ ) имеет координаты  $(\cos \psi_1, \cos \beta, \cos \alpha_1)$ , а нормаль к плоскости  $M$  задается координатами  $(0, -\sin \alpha_3, \cos \alpha_3)$ , то из соотношения  $\cos(A \wedge M) = 0$  можно получить выражение для определения эйлеровского угла  $\psi_1$ . Искомые эйлеровские углы равны  $\theta = \alpha_3, \psi = \psi_1$ .

5.18\*. Матрица поворота  $\mathbf{R}(\varphi, \theta, \psi)$  (соотношение (2.6)) при рассмотрении ФРО является ориентационной матрицей  $\mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi)$ , обеспечивающей переход из системы координат образца  $K_A$  (НП, ПН, НН) в систему координат кристалла  $K_B$  ( $[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$ ), т.е.  $\mathbf{n}_{hkl} = \mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi) \mathbf{n}_{XYZ}$ . Обратное преобразование с помощью матрицы  $\mathbf{g}^{-1}(\varphi, \theta, \psi) = \tilde{\mathbf{g}}(\varphi, \vartheta, \psi)$  дает возможность определять компоненты  $\mathbf{n}_{hkl}$  в системе координат образца, т.е. рассчитывать прямые полюсные фигуры  $\mathbf{n}_{XYZ} = \tilde{\mathbf{g}}(\varphi, \vartheta, \psi) \mathbf{n}_{hkl}$ . Компоненты  $\mathbf{n}_{hkl}$  для  $\{100\}$  позволяют в соответствии с соотношением (1.1) найти координаты максимумов ППФ 100 на стереографической проекции.

5.19\*. Матрица поворота  $\mathbf{R}(\varphi, \theta, \psi)$  (соотношение (2.6)) при рассмотрении ФРО является ориентационной матрицей  $\mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi)$ , обеспечивающей переход из системы координат образца  $K_A$  (НП, ПН, НН) в систему координат кристалла  $K_B$  ( $[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$ ), т.е.  $\mathbf{n}_{hkl} = \mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi) \mathbf{n}_{XYZ}$ . Таким образом, матрицы-столбцы  $\mathbf{g}_{*1}, \mathbf{g}_{*2}, \mathbf{g}_{*3}$  ориентационной матрицы  $\mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi)$  определяют кристаллографические индексы главных осей системы координат образца  $K_A$  (НП, ПН, НН), что позволяет рассчитывать обратные полюсные фигуры. Компоненты матрицы-столбца  $\mathbf{g}_{*1}$ , записанные в порядке возрастания  $|g'_{11}| \geq |g'_{21}| \geq |g'_{31}|$ , задают направляющие углы  $\alpha, \beta, \gamma$ , по которым в соответствии с соотношением (1.1) определяются координаты НП в стандартном стереографическом треугольнике.

6.6\*. Сначала необходимо записать матрицу поворота  $A_0$  на угол  $\varphi$  вокруг оси  $[mnp]$  с направляющими косинусами  $l_1, l_2, l_3$  (соотношение (2.6)). Если кристаллическое пространство обладает элементом симметрии  $\mathbf{R}_i$ , то возникает эквивалентное описание того же самого разворота  $A_i = A_0 \mathbf{R}_i^{-1}$ . Угол эквивалентного разворота  $\varphi_i$  определяют из следа матрицы  $A_i$ , а кристаллографические индексы эквивалентного разворота – из собственного вектора  $A_i$ .



6.7\*. Компоненты матрицы деформации  $B_{11} = B_{22} = a_m / I_a^{[110]}$ ,  $B_{33} = c_m / a_m$ , где  $a_m$  – параметр решетки аустенита,  $a_m$  и  $c_m$  – параметры решетки мартенсита,  $I_a^{[110]}$  – период идентичности для [110] аустенита.

6.8\*. Сначала необходимо найти кристаллографические индексы направлений  $m_1$  и  $m_2$  аустенита после превращения в мартенсит  $m'_1$  и  $m'_2$  в соответствии с соотношением (2.14)  $m' = \tilde{A}^{-1} m$ , где  $A$  – матрица перехода из гранецентрированной решетки аустенита в объемно-центрированную решетку мартенсита. Углы между направлениями  $m'_1$  и  $m'_2$  определяют по соотношению (2.14) с использованием метрической матрицы  $G_{\text{тетраг}}$  для тетрагонального кристалла.

6.9\*. Сначала необходимо найти кристаллографические индексы направлений  $h_1$  и  $h_2$  аустенита после превращения в мартенсит  $h'_1$  и  $h'_2$  в соответствии с соотношением (2.14)  $h' = Ah$ , где  $A$  – матрица перехода из гранецентрированной решетки аустенита в объемно-центрированную решетку мартенсита. Углы между плоскостями  $h'_1$  и  $h'_2$  определяют по соотношению (2.15) с использованием метрической матрицы  $G_{\text{тетраг}}^{-1}$  для тетрагонального кристалла.

6.11\*. Если  $A$  – матрица перехода из гранецентрированной решетки аустенита в объемно-центрированную решетку мартенсита, то кристаллографические индексы плоскости  $h$  аустенита переходят в индексы плоскости объемно-центрированной решетки мартенсита  $h'$  в соответствии с выражением (2.14)  $h' = Ah$ .

6.12\*. Если  $A$  – матрица перехода из гранецентрированной решетки аустенита в объемно-центрированную решетку мартенсита, то кристаллографические индексы направления  $m$  аустенита переходят в индексы направления  $m'$  объемно-центрированной решетки мартенсита в соответствии с выражением (2.14)  $m' = \tilde{A}^{-1} m$ .

**Тесты по дисциплине  
«Физическая кристаллография»**

**Основы кристаллографии**

1. Отметьте свойство, не относящееся к макроскопическим характеристикам

1.	однородность	2.	дискретность
3.	анизотропия	4.	симметрия

2. Отметьте свойство, не относящееся к микроскопическим характеристикам

1.	дискретность	2.	анизотропия
3.	однородность	4.	симметрия

3. Параллели сетки Вульфа – это

1.	стереографическая проекция множества соосных конусов, ось которых перпендикулярна плоскости проекции	2.	стереографическая проекция кристаллографической зоны с осью, лежащей в плоскости проекции
3.	гномостереографическая проекция множества соосных конусов, ось которых лежит в плоскости проекции	4.	стереографическая проекция множества соосных конусов, ось которых лежит в плоскости проекции

4. Меридианы сетки Вульфа – это

1.	стереографическая проекция множества соосных конусов, ось которых перпендикулярна плоскости проекции	2.	стереографическая проекция кристаллографической зоны с осью, лежащей в плоскости проекции
3.	гномостереографическая проекция множества соосных конусов, ось которых лежит в плоскости проекции	4.	стереографическая проекция множества соосных конусов, ось которых лежит в плоскости проекции

5. Выберите кристаллографические символы узла

1.	{123}	2.	<123>
3.	(123)	4.	[[123]]

6. Выберите кристаллографические символы узловой прямой

1.	{123}	2.	(1,2,3)
3.	(123)	4.	[123]

7. Определите сингонию Cr (Al, Au, Ni, Cu, Mo, Re,  $\alpha$ -Fe,  $\beta$ -Zr,  $\beta$ -Fe,  $\gamma$ -Fe)

1.	триклинная	2.	ромбическая
3.	гексагональная	4.	кубическая

8. Определите решетку Браве Mo (Cr,  $\alpha$ -Fe, V, W, Nb, Mo, Ta,  $\alpha$ -Zr, W)

1.	примитивная	2.	объемно-центрированная
3.	гранцентрированная	4.	В-центрированная

9. Определите решетку Браве Cu ( $\gamma$ -Fe, Al, Au, Ni)

1.	гранцентрированная	2.	объемно-центрированная
3.	А-центрированная	4.	В-центрированная

10. Определите решетку Браве Be (Re,  $\alpha$ -Zr, W)

1.	примитивная	2.	объемно-центрированная
3.	гранцентрированная	4.	В-центрированная

11. Определите множитель повторяемости для плоскостей {123} кубического кристалла)

1.	6	2.	12
3.	24	4.	48

12. Определите множитель повторяемости для плоскостей {112} кубического кристалла

1.	6	2.	8
3.	24	4.	48

13. Определите множитель повторяемости для плоскостей  $\{110\}$  кубического кристалла

1.	6	2.	8
3.	12	4.	48

14. Определите множитель повторяемости для плоскостей  $(0001)$  гексагонального кристалла

1.	2	2.	4
3.	6	4.	24

15. Определите множитель повторяемости для плоскостей  $\{2\bar{1}\bar{1}0\}$  гексагонального кристалла

1.	2	2.	4
3.	6	4.	24

16. Определите множитель повторяемости для плоскостей  $\{1\bar{1}01\}$  гексагонального кристалла

1.	2	2.	4
3.	12	4.	24

17. Определите множитель повторяемости для плоскостей  $(100)$  ромбического кристалла

1.	2	2.	4
3.	8	4.	12

18. Определите множитель повторяемости для плоскостей  $\{110\}$  ромбического кристалла

1.	2	2.	4
3.	8	4.	12

19. Определите множитель повторяемости для плоскостей  $\{111\}$  ромбического кристалла

1.	4	2.	6
3.	8	4.	12

20. Определите сингонию, в которой совпадают точки первого и второго рода (110) и [110]

1.	триклинная	2.	ромбическая
3.	тетрагональная	4.	моноклинная

21. Определите число типов решеток Браве

1.	7	2.	11
3.	14	4.	32

22. Определите сингонию с объемно-центрированной ячейкой Браве

1.	триклинная	2.	моноклинная
3.	ромбическая	4.	гексагональная

23. Определите сингонию с гранецентрированной ячейкой Браве

1.	триклинная	2.	моноклинная
3.	гексагональная	4.	ромбическая

24. Определите сингонию с базоцентрированной ячейкой Браве

1.	триклинная	2.	тригональная
3.	гексагональная	4.	моноклинная

25. Определите параметр решетки  $a^*$  в обратном пространстве, если в прямом пространстве имеется ГЦК-кристалл с параметром  $a$

1.	$a$	2.	$1/a$
3.	$2/a$	4.	$4/a$

26. Определите параметр решетки  $a^*$  в обратном пространстве, если в прямом пространстве имеется ОЦК-кристалл с параметром  $a$

1.	$a$	2.	$1/a$
3.	$2/a$	4.	$4/a$

27. Определите объем ячейки  $V^*$  в обратном пространстве, если в прямом пространстве имеется ГЦК-кристалл с объемом  $V$

1.	$a^3$	2.	$a^3/2$
3.	$2/a^3$	4.	$8/a^3$

28. Определите объем ячейки  $V^*$  в обратном пространстве, если в прямом пространстве имеется ОЦК-кристалл с объемом  $V$

1.	$a^3$	2.	$1/a^3$
3.	$2/a^3$	4.	$8/a^3$

29. Зона плоскостей в обратном пространстве состоит из узлов,

1.	лежащих на радиальной прямой	2.	лежащих на прямой
3.	лежащих на сфере	4.	лежащих на плоскости

30. Определите число граней ячейки Вигнера–Зейтца в ГЦК-решетке

1.	6	2.	8
3.	12	4.	24

31. Определите число граней ячейки Вигнера–Зейтца в ОЦК-решетке

1.	6	2.	12
3.	14	4.	24

32. Определите число граней зоны Бриллюэна в ГЦК-решетке

1.	6	2.	12
3.	14	4.	24

33. Определите число граней зоны Бриллюэна в ОЦК-решетке

1.	6	2.	12
3.	14	4.	24

34. В мозаичном монокристалле узел обратной решетки испытывает

1.	смещение узла в радиальном направлении	2.	размытие узла в радиальном направлении
3.	размытие узла в тангенциальном направлении	4.	смещение узла в тангенциальном направлении

35. Совершенный монокристалл при одноосном растяжении испытывает

1.	смещение узла обратной решетки в радиальном направлении	2.	размытие узла обратной решетки в радиальном направлении
3.	размытие узла обратной решетки в $r$ и $t$ направлениях	4.	смещение узла обратной решетки в тангенциальном направлении

36. Совершенный монокристалл в поле знакопеременных упругих деформаций испытывает

1.	смещение узла обратной решетки в $t$ направлении	2.	размытие узла обратной решетки в $r$ направлении
3.	размытие узла обратной решетки в $t$ направлении	4.	смещение узла обратной решетки в $r$ направлении

### Симметрия кристаллов

37. Для инверсионной оси  $\bar{1}$  найдите соответствующую зеркально-поворотную ось

1.	$\tilde{1}$	2.	$\tilde{2}$
3.	$\tilde{4}$	4.	$\tilde{6}$

38. Для инверсионной оси  $\bar{3}$  найдите соответствующую зеркально-поворотную ось

1.	$\tilde{1}$	2.	$\tilde{3}$
3.	$\tilde{4}$	4.	$\tilde{6}$

39. Для зеркально-поворотной оси  $\tilde{1}$  найдите соответствующую инверсионную ось

1.	$\bar{1}$	2.	$\bar{2}$
3.	$\bar{4}$	4.	$\bar{6}$

40. Для зеркально-поворотной оси  $\tilde{3}$  найдите соответствующую инверсионную ось

1.	$\bar{1}$	2.	$\bar{3}$
3.	$\bar{4}$	4.	$\bar{6}$

41. Определите след матрицы поворота

1.	$1 + 2 \cos \varphi$	2.	$1 - 2 \cos \varphi$
3.	$-1 - 2 \cos \varphi$	4.	$1 + \cos \varphi$

42. Определите след матрицы инверсионного преобразования

1.	$1 + 2 \cos \varphi$	2.	$-1 + 2 \cos \varphi$
3.	$-1 - 2 \cos \varphi$	4.	$1 + \cos \varphi$

43. Определите число лауэвских классов

1.	7	2.	11
3.	21	4.	32

44. Определите число точечных групп

1.	7	2.	11
3.	21	4.	32

45. Определите число элементов симметрии в точечной группе тетраэдра  $T$

1.	4	2.	12
3.	24	4.	48

46. Определите число элементов симметрии в точечной группе октаэдра  $O$

1.	4	2.	12
3.	24	4.	48

47. Определите число элементов симметрии в точечной группе октаэдра  $O_h$

1.	4	2.	12
3.	24	4.	48

48. Определите число классов сопряженных элементов в точечной группе тетраэдра  $T$

1.	2	2.	4
3.	6	4.	10

49. Определите число классов сопряженных элементов в точечной группе октаэдра  $O$

1.	2	2.	4
3.	5	4.	10

50. Определите число классов сопряженных элементов в точечной группе октаэдра  $O_h$

1.	2	2.	4
3.	6	4.	10



51. Плоскость скользящего отражения  $a$  типа соответствует отражению в плоскости и последующей трансляции на  $t =$

1.	$a$	2.	$a/2$
3.	$(a + b)/2$	4.	$(a + b)/4$

52. Плоскость скользящего отражения  $n$  типа (клиноплоскость) соответствует отражению в плоскости и последующей трансляции на  $t =$

1.	$a$	2.	$a/2$
3.	$(a + b)/2$	4.	$(a + b)/4$

53. Плоскость скользящего отражения алмазного типа соответствует отражению в плоскости и последующей трансляции на  $t =$

1.	$a$	2.	$(a + b)$
3.	$(a + b)/2$	4.	$(a + b)/4$

### Структура кристаллов

54. Для ГЦК-структуры найдите соответствующее отношение  $n_a : n_o : n_t$ , где  $n_a$  – число атомов в ячейке,  $n_o$  – число октаэдрических пустот,  $n_t$  – число тетраэдрических пустот

1.	1 : 1 : 1	2.	1 : 1 : 2
3.	1 : 2 : 3	4.	1 : 3 : 6

55. Для ОЦК-структуры найдите соответствующее отношение  $n_a : n_o : n_t$ , где  $n_a$  – число атомов в ячейке,  $n_o$  – число октаэдрических пустот,  $n_t$  – число тетраэдрических пустот

1.	1 : 1 : 1	2.	1 : 1 : 2
3.	1 : 2 : 3	4.	1 : 3 : 6

56. Для ГПУ-структуры найдите соответствующее отношение  $n_a : n_o : n_t$ , где  $n_a$  – число атомов в ячейке,  $n_o$  – число октаэдрических пустот,  $n_t$  – число тетраэдрических пустот

1.	1 : 1 : 1	2.	1 : 1 : 2
3.	1 : 2 : 3	4.	1 : 3 : 6

57. Определите число октаэдрических пустот в ГЦК-ячейке

1.	4	2.	6
3.	8	4.	24

58. Определите число тетраэдрических пустот в ГЦК-ячейке

1.	4	2.	6
3.	8	4.	24

59. Определите число октаэдрических пустот в ОЦК-ячейке

1.	4	2.	6
3.	12	4.	24

60. Определите число тетраэдрических пустот в ОЦК-ячейке

1.	4	2.	8
3.	12	4.	24

61. Определите число октаэдрических пустот в ГПУ-ячейке

1.	4	2.	6
3.	12	4.	24

62. Определите число тетраэдрических пустот в ГПУ-ячейке

1.	4	2.	8
3.	12	4.	24

63. Определите плоскости плотнейшей упаковки в ГЦК-кристаллах

1.	{100}	2.	{110}
3.	{111}	4.	{321}

64. Определите плоскости плотнейшей упаковки в ОЦК-кристаллах

1.	{100}	2.	{111}
3.	{211}	4.	{321}

65. Определите координационное число в ГЦК-решетке

1.	4	2.	8
3.	12	4.	24

66. Определите координационное число в ОЦК-решетке

1.	4	2.	12
3.	14	4.	24

67. Определите координационное число для алмаза

1.	4	2.	8
3.	12	4.	24

68. Определите координационное число для третьей координационной сферы в ГЦК-решетке

1.	4	2.	12
3.	14	4.	24

69. Определите координационное число для пятой координационной сферы в ГЦК-решетке

1.	4	2.	8
3.	12	4.	24

70. Определите координационное число для Na по Cl для второй координационной сферы в NaCl

1.	4	2.	8
3.	12	4.	24

71. Определите координационное число для Ca по F для второй координационной сферы в CaF<sub>2</sub>

1.	4	2.	8
3.	14	4.	24

72. Определите сингонию сверхструктуры CuAu I

1.	триклинная	2.	ромбическая
3.	тетрагональная	4.	кубическая

73. Определите решетку Браве сверхструктуры CuAu I

1.	примитивная	2.	объемно-центрированная
3.	гранцентрированная	4.	В-центрированная

74. Определите решетку Браве сверхструктуры β-латуни

1.	примитивная	2.	объемно-центрированная
3.	гранцентрированная	4.	В-центрированная

75. Определите решетку Браве перовскита

1.	примитивная	2.	объемно-центрированная
3.	гранцентрированная	4.	A-центрированная

### Физические свойства

76. Найдите соответствие между симметрией однородного поля растягивающих напряжений и предельной группой Кюри

1.	конус вращающийся, $\infty$	2.	цилиндр закрученный, $\infty 2$
3.	цилиндр неподвижный, $\infty / m m m$	4.	шар обычный, $\infty / \infty m$

77. Найдите соответствие между симметрией полярного вектора (электрического вектора) и предельной группой Кюри

1.	конус вращающийся, $\infty$	2.	конус неподвижный, $\infty m$
3.	цилиндр неподвижный, $\infty / m m m$	4.	шар обычный, $\infty / \infty m$

78. Найдите соответствие между симметрией аксиального вектора (магнитного вектора) и предельной группой Кюри

1.	конус вращающийся, $\infty$	2.	цилиндр вращающийся, $\infty / m$
3.	цилиндр закрученный, $\infty 2$	4.	шар обычный, $\infty / \infty m$

79. Найдите соответствие между симметрией однородного поля сжимающих напряжений и предельной группой Кюри

1.	конус вращающийся, $\infty$	2.	цилиндр вращающийся, $\infty / m$
3.	цилиндр неподвижный, $\infty / m m m$	4.	шар обычный, $\infty / \infty m$

80. Найдите число степеней свободы для тензора упругой дистрикции

1.	3	2.	6
3.	8	4.	9

81. Определите число независимых компонентов симметричного тензора второго ранга, описывающего свойства кубического кристалла (например, электропроводность)

1.	1	2.	2
3.	4	4.	6

82. Определите число независимых компонентов симметричного тензора второго ранга, описывающего свойства гексагонального кристалла (например, электропроводность)

1.	1	2.	2
3.	4	4.	6

83. Определите число независимых компонентов симметричного тензора второго ранга, описывающего свойства ромбического кристалла (например, электропроводность)

1.	1	2.	2
3.	3	4.	6

84. Определите число независимых коэффициентов упругости для кубических кристаллов

1.	1	2.	2
3.	3	4.	5

85. Определите систему скольжения в ОЦК-кристаллах

1.	$\langle 100 \rangle \{110\}$	2.	$\langle 110 \rangle \{111\}$
3.	$\langle 111 \rangle \{110\}$	4.	$\langle 110 \rangle \{112\}$

86. Определите число систем скольжения в металлах с ГЦК-структурой

1.	6	2.	12
3.	24	4.	48

87. Определите призматическую систему скольжения в кристаллах с ГПУ-структурой

1.	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle \{0001\}$	2.	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle \{10\bar{1}1\}$
3.	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle \{10\bar{1}0\}$	4.	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle \{10\bar{2}2\}$

88. Определите систему двойникования в ГЦК-металлах

1.	$\langle 110 \rangle \{111\}$	2.	$\langle 111 \rangle \{211\}$
3.	$\langle 211 \rangle \{111\}$	4.	$\langle 321 \rangle \{111\}$

89. Определите системы двойникования в ОЦК-металлах

1.	$\langle 110 \rangle \{111\}$	2.	$\langle 111 \rangle \{110\}$
3.	$\langle 111 \rangle \{211\}$	4.	$\langle 321 \rangle \{111\}$

### Кристаллография границ зерен и мартенситных превращений

90. Найдите соответствие между решеткой РСУ – решеткой совпадающих узлов – и множеством узлов  $L_1$  и  $L_2$  двух решеток

1.	$L_1 \cap L_2$	2.	$L_1 \equiv L_2$
3.	$L_1 \leq L_2$	4.	$L_1 \cup L_2$

91. Найдите соответствие между решеткой ПРН – полной решеткой наложения – и множеством узлов  $L_1$  и  $L_2$  двух решеток

1.	$L_1 \cap L_2$	2.	$L_1 \leq L_2$
3.	$L_1 \geq L_2$	4.	$L_1 \cup L_2$

92. Определите тип ячейки в результате мартенситного превращения аустенита

1.	примитивная кубическая	2.	примитивная тетрагональная
3.	объемно-центрированная тетрагональная	4.	объемно-центрированная ромбическая

93. Определите кристаллографические индексы симметричной границы наклона в ГЦК-металлах

1.	$\{100\}$	2.	$\{110\}$
3.	$\{111\}$	4.	$\{123\}$

94. Определите кристаллографические индексы симметричной границы наклона в ОЦК-металлах

1.	$\{100\}$	2.	$\{110\}$
3.	$\{111\}$	4.	$\{123\}$

95. Малоугловая симметричная граница наклона состоит из

1.	стенки параллельных краевых дислокаций	2.	стенки параллельных винтовых дислокаций
3.	сетки краевых дислокаций	4.	сетки краевых и винтовых дислокаций

96. Малоугловая граница кручения состоит из

1.	стенки параллельных краевых дислокаций	2.	стенки параллельных винтовых дислокаций
3.	сетки винтовых дислокаций	4.	сетки краевых и винтовых дислокаций

97. Определите ориентационные соотношения Бейна

1.	$(001)_\gamma \parallel (001)_\alpha$ $[100]_\gamma \parallel [110]_\alpha$	2.	$(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$ $[10\bar{1}]_\gamma \parallel [11\bar{1}]_\alpha$
3.	$(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$ $[11\bar{2}]_\gamma \parallel [11\bar{1}]_\alpha$	4.	$(110)_\beta \parallel (0001)_\alpha$ $\langle 100 \rangle_\gamma \parallel \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle_\alpha$

98. Определите ориентационные соотношения Курдюмова–Закса

1.	$(001)_\gamma \parallel (001)_\alpha$ $[100]_\gamma \parallel [110]_\alpha$	2.	$(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$ $[10\bar{1}]_\gamma \parallel [11\bar{1}]_\alpha$
3.	$(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$ $[11\bar{2}]_\gamma \parallel [11\bar{1}]_\alpha$	4.	$(110)_\beta \parallel (0001)_\alpha$ $\langle 100 \rangle_\gamma \parallel \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle_\alpha$

99. Определите ориентационные соотношения Нишиямы

1.	$(001)_\gamma \parallel (001)_\alpha$ $[100]_\gamma \parallel [110]_\alpha$	2.	$(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$ $[10\bar{1}]_\gamma \parallel [11\bar{1}]_\alpha$
3.	$(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$ $[11\bar{2}]_\gamma \parallel [11\bar{1}]_\alpha$	4.	$(110)_\beta \parallel (0001)_\alpha$ $\langle 100 \rangle_\gamma \parallel \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle_\alpha$

100. Определите число независимых компонентов коэффициентов упругости для кубических кристаллов

1.	$(001)_\gamma \parallel (001)_\alpha$ $[100]_\gamma \parallel [110]_\alpha$	2.	$(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$ $[10\bar{1}]_\gamma \parallel [11\bar{1}]_\alpha$
3.	$(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$ $[11\bar{2}]_\gamma \parallel [11\bar{1}]_\alpha$	4.	$(110)_\beta \parallel (0001)_\alpha$ $\langle 100 \rangle_\gamma \parallel \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle_\alpha$

## Список рекомендуемой литературы

### Основная

Физическое материаловедение: *Учебник для вузов*: В 6 т./ Под общей ред. Б. А. Калина. М.: МИФИ, 2007. Т. 1. Физика твердого тела / Г.Н. Елманов, А. Г. Залужный, В.И. Скрытный, Е.А. Смирнов, В.Н. Яльцев. Гл. 1. Физическая кристаллография. М.: МИФИ, 2007. – 636 с.

### Дополнительная

1. Современная кристаллография (в 4 т.). Т. 1. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии./ Б.К. Вайнштейн. М.: Наука, 1979. – 384 с.

2. *Кристиан Дж.* Теория превращений в металлах и сплавах. Ч. 1. Термодинамика и общая кинетическая теория /Пер. с англ. М.: Мир, 1978. – 806 с.

3. *Васильев Д.М.* Физическая кристаллография. М.: Metallургия, 1972. – 280 с.

4. *Васильев Д.М.* Физическая кристаллография. – 2-е изд., пер. и доп. М.: Metallургия, 1981. – 256 с.

5. *Чупрунов Е.В., Хохлов А., Фаддеев М.А.* Основы кристаллографии. М.: Физматлит, 2004. – 500 с.

6. *Шаскольская М.П.* Кристаллография. М.: Высш. школа, 1976. – 391 с.

7. *Келли А., Гровс Г.* Кристаллография и дефекты в кристаллах/ Пер. с англ. М.: Мир, 1974. – 496 с.

8. *Вустер У.* Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов /Пер. с англ. М.: Мир, 1977. – 384 с.