10. Ćwiczenia w określaniu typu sieci Bravais, klasy Lauego oraz grupy przestrzennej na podstawie warstwic sieci odwrotnej

Opracowanie: ***dr hab. inż. Jarosław Chojnacki Politechnika Gdańska, Gdańsk 2017***

Podstawy teoretyczne

Ocenę symetrii sieci krystalicznej dokonujemy na podstawie symetrii warstwic sieci odwrotnej oraz wygaszeń systematycznych. Właściwie wystarcza analiza dwóch warstwic, *np.* *hk*0 i *hk*1, w każdym kierunku krystalograficznym w przestrzeni. Na warstwicach szukamy elementów symetrii: płaszczyzn i osi 2, 3, 4 i 6. Warstwice, będące tworami dwuwymiarowymi, mogą tworzyć 10 typów (grup) symetrii: 1, 2, 3, 4, 6, *m*, 2*mm*, 3*m*, 4*mm* lub 6*mm*. Analizując symetrię warstwic określamy klasę dyfrakcyjną Lauego kryształu (*np.* $\bar{1}$, 2/*m*, 4/*m*, *mmm* itd.), co powoduje przypisanie do określonego układu krystalograficznego.
W dalszej kolejności szukamy wygaszeń systematycznych. Jeżeli są one obecne w obrębie całej sieci to nazywamy je ***wygaszeniami sieciowymi***. Na tej podstawie przypisujemy typ centrowania sieci (typ Bravais). Jeżeli wygaszenia występują tylko w obrębie jednej warstwicy, to nazywa się je ***wygaszeniami pasowymi***. Na ich podstawie wnioskujemy o obecności płaszczyzn poślizgu. Wygaszenia występujące jedynie wzdłuż pewnego kierunku nazywamy ***wygaszeniami seryjnymi***. Występują one na skutek istnienia w strukturze śrubowych osi obrotu.

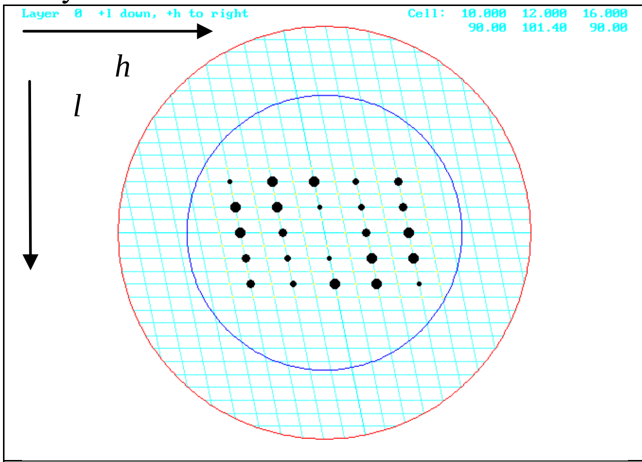
Podsumowanie ważniejszych typów wygaszeń podaje poniższa tabela.

Typ wygaszenia	Określa	Warunek wystąpienia refleksu	Element struktury
sieciowe	centrowanie sieci	$h + k = 2n$	*C*
		$k + l = 2n$	*A*
		$h + l = 2n$	*B*
		$h + k + l = 2n$	*I*
		h, *k*, *l* wszystkie parzyste lub *h*, *k*, *l* nieparzyste	*F*
pasowe	płaszczyzny ślizgowe ⊥**a**	$(0kl)$, $k = 2n$ $(0kl)$, $l = 2n$ $(0kl)$, $k + l = 2n$	*b* *c* *n*
	płaszczyzny ślizgowe ⊥**b**	$(h0l)$, $h = 2n$ $(h0l)$, $l = 2n$ $(h0l)$, $h + l = 2n$	*a* *c* *n*
	płaszczyzny ślizgowe ⊥**c**	$(hk0)$, $h = 2n$ $(hk0)$, $k = 2n$ $(hk0)$, $h + k = 2n$	*a* *b* *n*
osiowe	oś ‖ **a**	$[h00]$, $h = 2n$	2_1
	oś ‖ **b**	$[0k0]$, $k = 2n$	2_1
	oś ‖ **c**	$[00l]$, $l = 2n$	2_1 lub 4_2, 6_3
	oś ‖ **c**	$[00l]$, $l = 3n$	3_1 lub 3_2, 6_2, 6_4
	oś ‖ **c**	$[00l]$, $l = 4n$	4_1 lub 4_3
	oś ‖ **c**	$[00l]$, $l = 6n$	6_1 lub 6_5

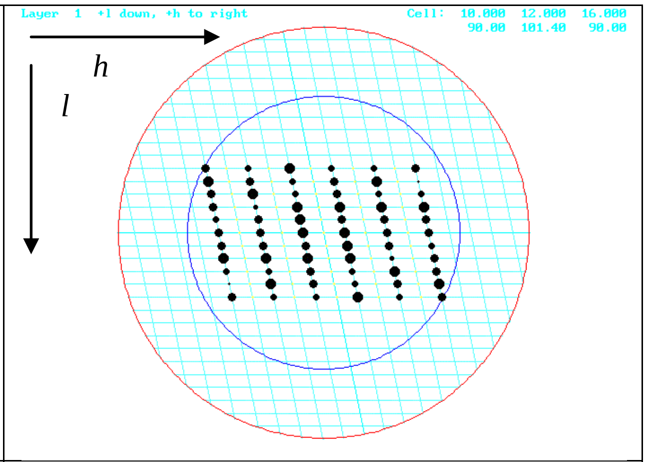
Uwagi praktyczne.

Po ustaleniu grupy dyfrakcyjnej Lauego, wskazane jest zachować kolejność ustalania poszczególnych typów wygaszeń. Wygaszeń sieciowych należy szukać na wyższych warstwicach (np. 1*kl*, *h*1*l*, *hk*1), gdyż na nich nie występują wygaszenia niższego rzędu: pasowe ani seryjne. Po identyfikacji sieci Bravais przechodzimy do warstwic zerowych i szukamy takich wygaszeń pasowych, które nie wynikają ze znalezionego typu centrowania sieciowego. Na końcu sprawdzamy, czy pozostały jakieś niewyjaśnione wygaszenia osiowe.

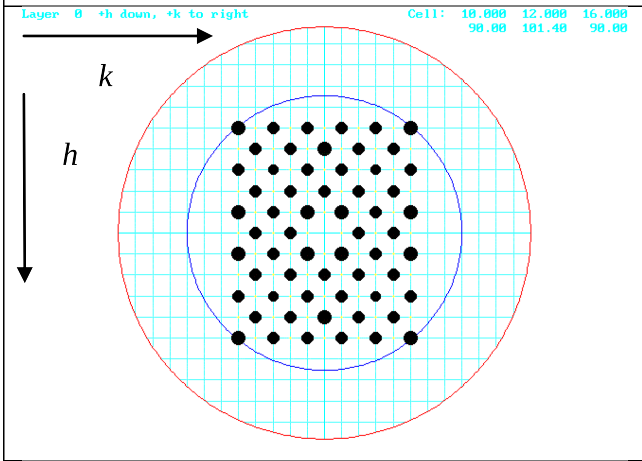
Przykład:



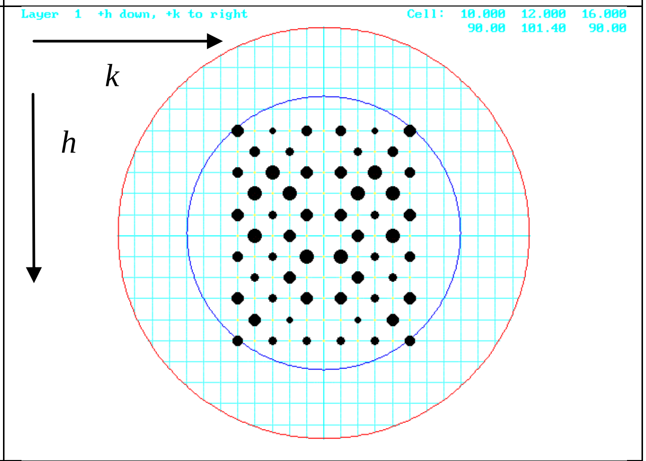
*h*0*l*



*h*1*l*



*hk*0



*hk*1

Parametry sieciowe wskazują na układ jednoskośny. Warstwice $h0l$ i $h1l$ mają symetrię 2, a warstwice $hk0$ i $hk1$ symetrię płaszczyzny *m*, prostopadłej do osi indeksów *k*, świadczy to o grupie dyfrakcyjnej Lauego $2/m$.
Na warstwicy $h1l$ warunek wystąpienia refleksu wynosi $h + 1 = 2n$, dla $hk1$ $h + k = 2n$. Świadczy to o centrowaniu sieci typu *C*. W warstwicy $h0l$ szukamy wygaszeń pasowych świadczących o obecności płaszczyzny ślizgowej prostopadłej do osi **b**. Ponieważ $k = 0$, z wygaszeń sieciowych wynika brak refleksów z parzystymi wartościami *h*. Brak jest jednak również refleksów dla parzystych wartości *l*, czyli spełniających warunek $l = 2n$. Świadczy to o obecności płaszczyzny ślizgowej *c*. Na warstwicy hk0 widać tylko wygaszenia wynikające z centrowania sieciowego *C*. Wnioskujemy więc, że symetria kryształów należy do grupy *Cc* lub $C2/c$.

Zadania:

1. Na podanych warstwicach odnaleźć poszczególne elementy symetrii i przypisać do danej struktury układ krystalograficzny oraz klasę Lauego. Przeanalizować wszelkie rodzaje wygaszeń systematycznych i zaproponować spójną z tym schematem wygaszeń grupę przestrzenną (lub grupy, jeśli ten sam schemat wygaszeń może być realizowany przez kilka grup przestrzennych).

2. Uzasadnić na podstawie ogólnego wzoru na czynnik struktury $F_{hkl} = \sum_j f_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$, że obecność osi śrubowej 3_1 (lub 4_1) powoduje wygaszenie refleksów typu 00*l* z wyjątkiem *l* = 3*n* (*l* = 4*n*), gdzie *n* jest liczbą całkowitą. Operacje symetrii: 3_1 = (–y , x – y, 1/3 + z), 4_1 = (–y , x, ¼ + z).