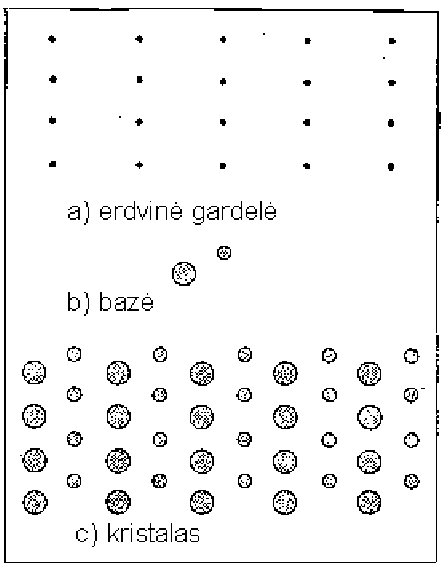
Kristalo gardelė

Nagrinėkime idealų kristalą. Jį galima įsivaizduoti kaip neribotų matmenų kūną, kurį sudaro vienodos atomų ar molekulių grupės, periodiškai išsidėsčiusios erdvėje. Visų grupių sudėtis yra tokia pati ir vienoda orientacija erdvėje. Tokia atomų grupė vadinama baze arba struktūros elementu. Struktūros elementu gali būti vienas atomas ar molekulė arba keleto atomų ar molekulių (nuo 2 iki 100000) grupė.

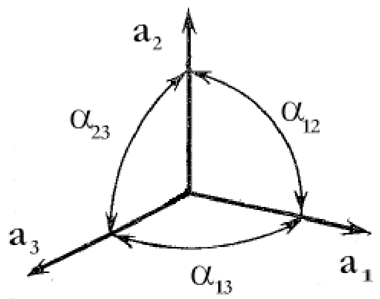
Idealus kristalas yra kūnas, kurio struktūros elementai išdėstyti erdvėje taip, kad parinkus tris neesančius vienoje plokštumoje poslinkio vektorius $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, struktūros elementai būtų išsidėstę vienodai, žiūrint iš taško $\mathbf{r}$ ir iš taško

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \qquad \textbf{(2.1)}$$



kur n_1, n_2, n_3 bet kokie sveiki skaičiai. Jei struktūros elementą vaizduosime tašku, tai tokia taškų visuma vadinama erdvine kristalo gardele arba Bravės (A. Bravais) gardele, o taškai – gardelės mazgais.

Erdvinė gardelė tai – matematinė abstrakcija, nes nieko nesakoma apie atomų išsidėstymą erdvėje. Norint tai padaryti reikia nurodyti atomų išsidėstymą bazėje. Elementarių poslinkių vektoriai $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ ir $\mathbf{a}_3$ dar vadinami pagrindiniais vektoriais arba gardelės periodais. Jų parinkimas nėra vienareikšmis. Paprastai tai būna trumpiausi vektoriai duota kryptimi. Bendru atveju jie yra vienas kitam ne statmeni.



Gretasienis, kurį sudaro $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ ir $\mathbf{a}_3$ vadinamas elementariu narveliu. Jo tūrį galima suskaičiuoti naudojantis mišria vektorių $\mathbf{a}_i$ sandauga

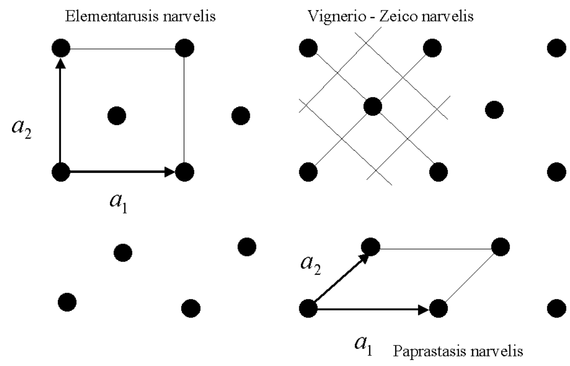
$$V = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \qquad \textbf{(2.2)}$$

Kartojant tokį narvelį išilgai vektoriaus

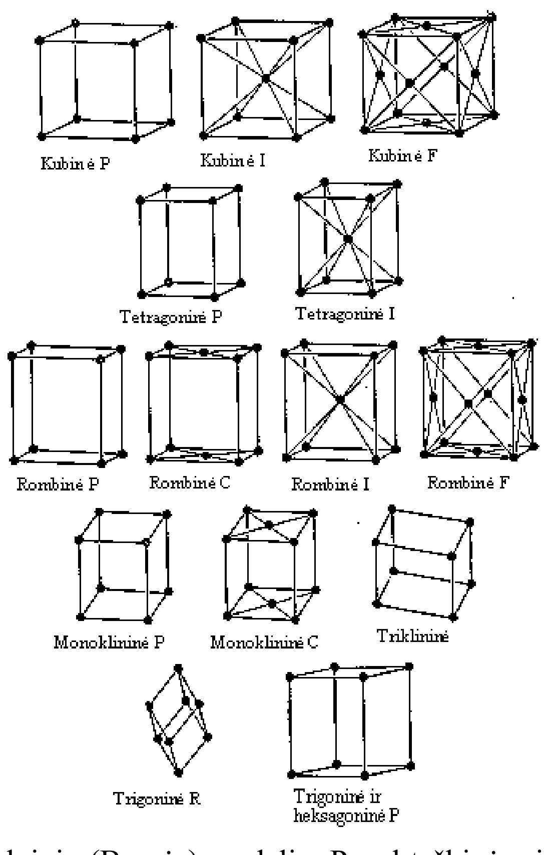
$$\mathbf{n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \qquad \textbf{(2.3)}$$

galima užpildyti visą erdvę. Vektorius $\mathbf{n}$ vadinamas gardelės transliacijos arba postūmio vektoriumi.

Jei elentariajam narveliui tenka tik vienas mazgas, tai toks narvelis vadinamas paprastuoju arba primityviuoju, o gardelė paprastaja arba primityviaja. Kiekvienam paprastajam narveliui mazgus galima išdėstyti viršūnėse (bet nebūtinai) ir jo tūris yra mažiausias. Kartais būna patogiau aprašyti kristalą naudojantis ne paprastuoju narveliu, o sudėtingu, kuriame mazgai yra ne tik viršūnėse, bet dar ir kitur. Į sudėtingas gardeles galima žiūrėti kaip į kelias paprastas (dvi ar daugiau) sunertas viena į kitą.



Paprastojo narvelio forma taip pat gali būti įvairi, bet jį visada galima pasirinkti taip, kad jo simetrija būtų tokia pati kaip ir visos gardeles. Pavyzdys yra Vignerio (E. P. Wigner) ir Zeitso (F. Seitz) narvelis. Jis sudaromas taip: vienas mazgas sujungiamas su artimiausiais mazgais tiesės atkarpomis; po to šios tiesės atkarpos dalinamos pusiau joms statmenomis plokštumomis. Šios plokštumos susikirsdamos išpjauna paprastąjį Vignerio ir Zeitso narvelį.

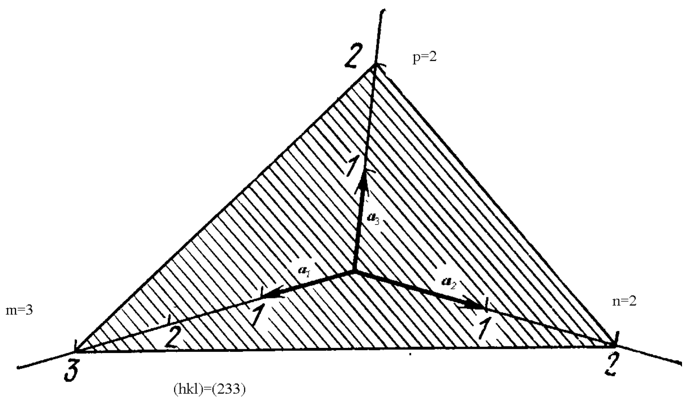


Bravės (erdvinės) gardelės pasižymi įvairiomis simetrijomis – tai taškinės simetrijos (sukimai tam tikrais kampais, atspindžiai, inversija, veidrodiniai sukimai, inversiniai sukimai) ir kaip minėjome poslinkio arba transliacijos simetrijos. Kai kristalas turi bazę, dar gali būti taip vadinamų mikroskopinių simetrijos elementų – sraigtinis sukimas ir veidrodinis slydimas, kurie yra taškinės ir transliacinės simetrijos kombinacija.

Bravė parodė, kad egzistuoja 14 skirtingų erdvinių (Bravės) gardelių. Pagal taškinės simetrijos elementus jos skirstomos į grupes – singonijas (arba sistemas). Vienai singonijai gali priklausyti kelios Bravės gardelės. Singonija parenkama pagal maksimalų simetrijos elementų skaičių.

Kristalografinė sistema (singonija)	Gardelių skaičius singonijoje	Gardelės tipas (ir simbolis)	Elementaraus narvelio charakteristikos
Triklininė	1	Paprastoji (P)	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$
Monoklininė	2	Paprastoji (P) Centruotų pagrindų (C)	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{31} \neq \alpha_{12} = \alpha_{23} = 90^0$
Rombinė (ortogonalioji)	4	Paprastoji (P) Centruotų pagrindų (C) Centruoto tūrio (I) Centruotų paviršių (F)	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^0$
Tetragoninė (kvadratinė)	2	Paprastoji (P) Centruoto tūrio (I)	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^0$
Kubinė	3	Paprastoji (P) Centruoto tūrio (I) Centruotų paviršių (F)	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^0$
Trigoninė (romboedrinė)	1	Paprastoji (R)	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} \neq 90^0 < 120^0$
Heksagoninė	1	Paprastoji (P)	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^0$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^0$

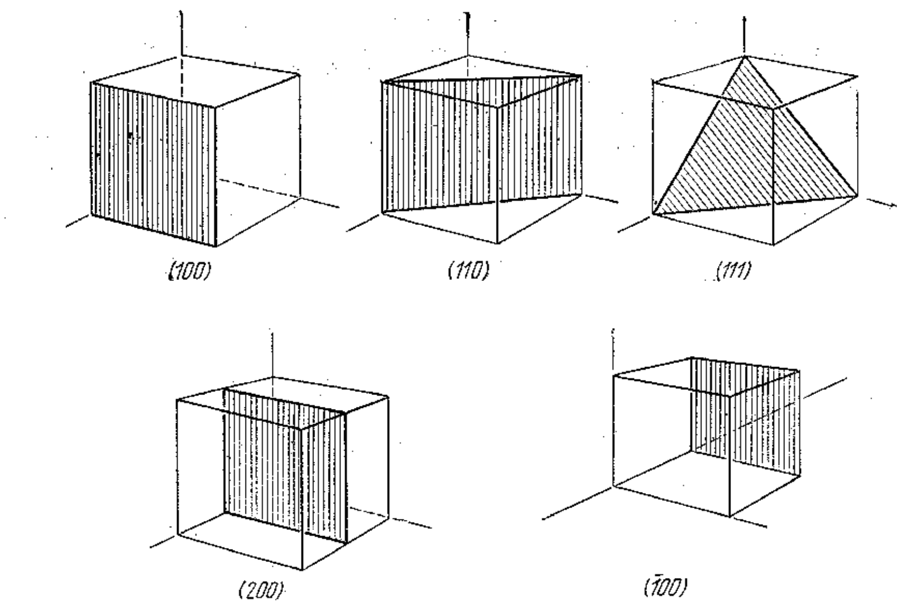
Prie Bravės gardelės pridėjus bazę simetrija gali sumažėti – t.y. nauja simetrija bus erdvinės gardelės simetrijos grupės pogrupis. Iš visų taškinių grupių pogrupius galima išrinkti 32 būdais, todėl kristalai skirstomi į 32 klases. Klasė nusako tikrą (gardelės su baze) kristalo simetriją.



Jei prie taškinių simetrijų pridėsime dar ir mikroskopines (taškinių ir poslinkio simetrijų kombinacijas) simetrijas – sraigtinio poslinkio ašis ir slenkamojo atspindžio plokštumas, tai tokie elementai susideda į erdvines grupes. Jų gali būti net 230.

Milerio indeksai. Kristalografijoje plokštumoms ir kryptims charakterizuoti naudojami taip vadinami Milerio indeksai. Tegul ploštuma ašyse kerta atkarpas ma_1, na_2, pa_3, tai mažiausi sveiki skaičiai h, k ir l tokie, kad $h : k : l = \frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p}$, charakterizuoja plokštumą ir vadinami plokštumos Milerio indeksais. Žymima (hkl). Neigiamam indeksui brūkšnelis (minusas) dedamas viršuje, o ne priekyje. Simetrijos požiūriu visos lygiavertės plokštumos žymimos $\{hkl\}$.

Krypties Milerio indeksai apibrėžiami panašiai: tegul vektorius (išeinantis iš koordinačių pradžios) turi projekcijas n_1a_1, n_2a_2, n_3a_3 kristalografinėse ašyse. Tada mažiausi sveiki skaičiai u, v, w tokie, kad $u : v : w = n_1 : n_2 : n_3$ apibrėžia duotą kryptį (vektorių) ir vadinami krypties Milerio indeksais. Kad nesimaišytų su plokštumos indeksais žymima laužtiniuose skliaustuose $[uvw]$. Lygiavertės kryptys žymimos taip $< uvw >$.



Kubinio kristalo svarbesnių plokštumų Milerio indeksai
Plokštumos (200) ir (100) yra lygiagrečios