

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ РСФСР

ЛЕНИНГРАДСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА И ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО
ЗНАМЕНИ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ А. А. Іданова

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО КУРСУ
"ВВЕДЕНИЕ В МАТРИЧНУЮ КРИСТАЛЛОГРАФИЮ"

Часть 3

Ленинград
1986

Утверждено на заседании кафедры кристаллографии
геологического факультета

Составитель С.К. Филатов

Подписано в печать 21.08.86. Ф-т 60x90/16.
Печ. л. 1,0. Тираж 500 экз. Заказ № 332 . Бесплатно.
ФИО ЛГУ. 199034, Ленинград, Университетская наб., 7/9.
ПМЛ ЛГУ. 199034, Ленинград, наб. Макарова, 6.

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ РСФСР

Ленинградский ордена Ленина
и ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет имени А.А. Жданова

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО КУРСУ
"ВВЕДЕНИЕ В МАТРИЧНУЮ КРИСТАЛЛОГРАФИЮ"

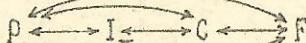
Часть 3

МАТРИЦЫ ПЕРЕХОДА

Зачастую одна кристаллическая модификация бывает описана в разных установках, т.е. различным образом выбирается базис, начало координат или то и другое одновременно. Возникает необходимость в переводе информации из одной установки в другую. Информацией являются координаты атомов, символы атомных плоскостей, граней, направлений дифракционных максимумов и т.п. Перевод удобно осуществлять с помощью матриц, характеризующих преобразование одной установки в другую - матриц перехода. Ниже рассматривается распространенный частный случай, при котором системы координат в двух установках имеют общее начало, а различаются лишь базисом, и потому перевод информации осуществляется с помощью матриц преобразования базиса.

I. Преобразования элементарных ячеек

Выведем матрицы перехода между примитивной Р, объемноцентрированной I, базоцентрированной С и гранецентрированной F ячейками



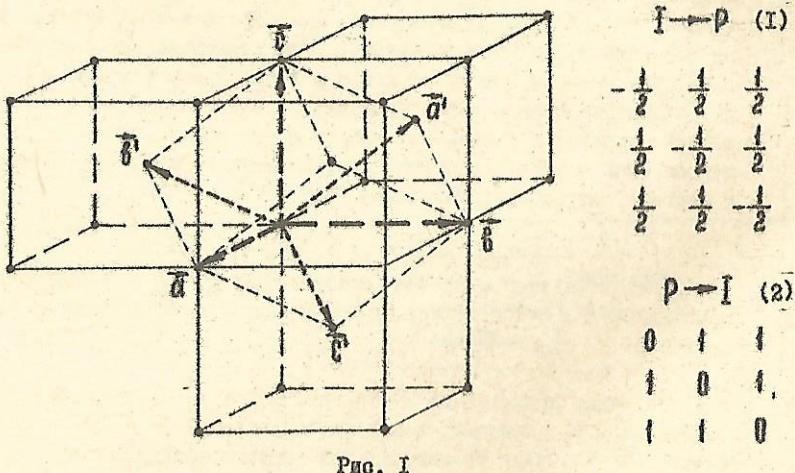
а также между примитивной гексагональной Р и центрированной гексагональной Н ячейками, между гексагональной Р и ортогоексагональной О ячейками гексагональной решетки, между гексагональной Р_{3m} и ромбоэдрической R ячейками ромбоэдрической решетки. Результаты этих выводов зависят от типа центрированности ячеек и не зависят от их метрики.

Принципы нахождения матриц преобразования базиса описаны в [1, п. I.14]. Там же показано, что матрицы переходов прямого A

(от старого базиса к новому) и обратного B (от нового базиса к старому) являются взаимно обратными $AB = BA = E$, что может быть использовано для проверки правильности вычисления матриц.

Поскольку в каждом рассматриваемом случае выбор нового базиса относительно старого оказывается неоднозначным, то неоднозначным является и вид матриц перехода. В тех случаях, когда среди матриц перехода имеется симметрическая матрица, предпочтение отдается ей.

Найдем матрицу перехода от I к P ячейке. Пусть $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ — базисные векторы объемноцентрированной ячейки. Выберем вокруг нее еще три такие же ячейки, как это показано на рис. 1. Построим примитивную ячейку на векторах $\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'$, проведенных из начала координат в узлы, центрирующие три крайние ячейки.



Из рис. 1 следует, что базисные векторы P ячейки выражаются через векторы I ячейки следующим образом:

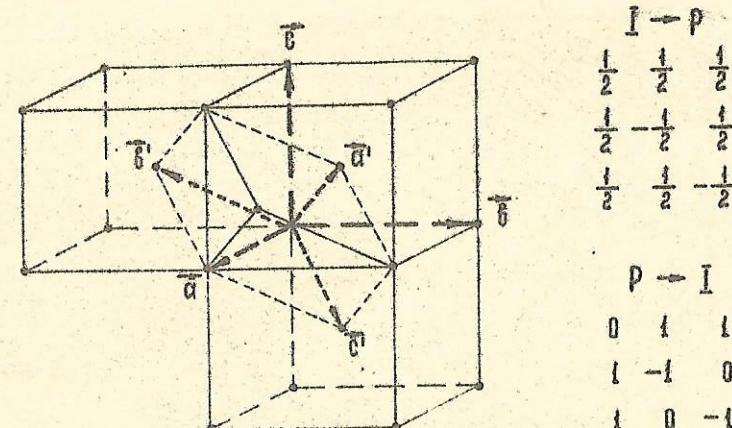
$$\vec{a}' = -\frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b} + \frac{1}{2}\vec{c}, \quad \vec{b}' = \frac{1}{2}\vec{a} - \frac{1}{2}\vec{b} + \frac{1}{2}\vec{c}, \quad \vec{c}' = \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b} - \frac{1}{2}\vec{c}.$$

Матрица коэффициентов этой системы, а следовательно, и матрица перехода от I к P ячейке имеет вид (1). Из того же рисунка следует, что матрица обратного перехода от P к I ячейке имеет вид (2). Проверим взаимную обратность полученных матриц

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

Матрицы (1) и (2) симметрические.

Существует множество иных способов выбора примитивной ячейки в объемноцентрированной решетке. В частности, P ячейки, изображенной на рис. 2, соответствуют симметрические матрицы перехода



На рис. 3-7 приводятся графические иллюстрации и матрицы перехода для других пар ячеек различной центрированности.

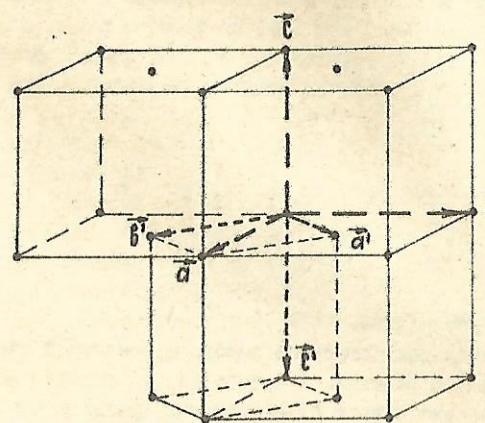


Рис.3

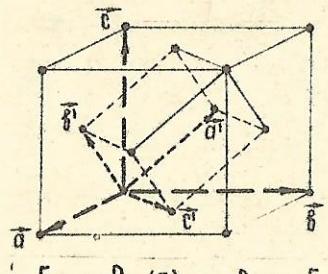


Рис.4

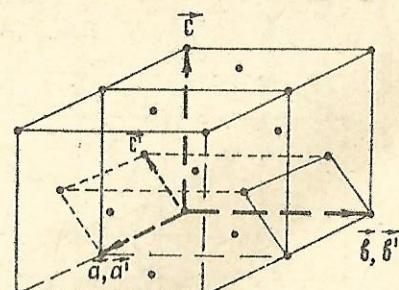


Рис.5

$$\begin{matrix} F \rightarrow C & (7) \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} C \rightarrow F & (8) \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{matrix}$$

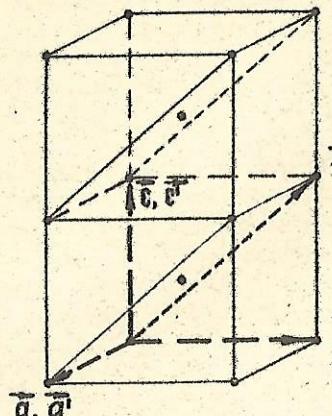


Рис.6

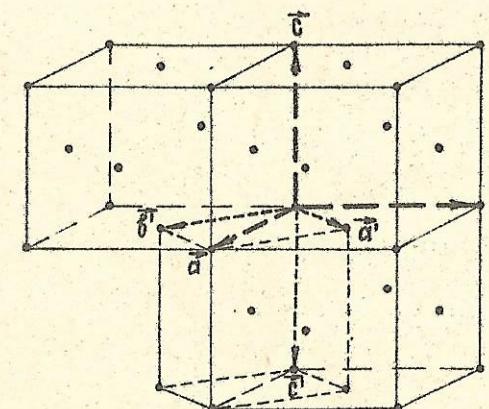


Рис.7

В гексагональной решетке выбирается Р ячейка (бывшая С ячейка), построенная на векторах \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} . Центрированная Н ячейка может быть выбрана тремя способами H_1 , H_2 и H_3 относительно примитивной ячейки. На рис. 8, а эти ячейки изображены в проекции на плоскость ab . Видно, что матрицы перехода между

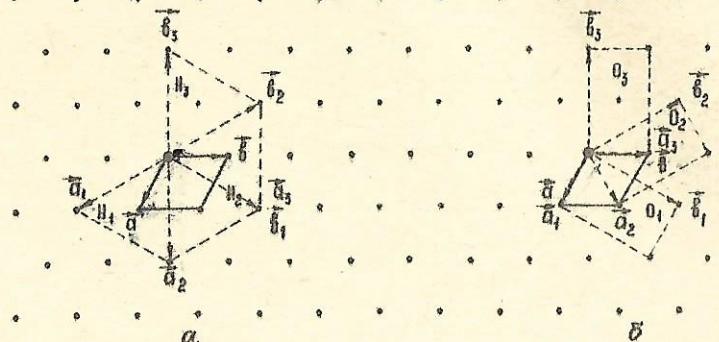


Рис. 8

ячейками Р и H_1 , H_2 , H_3 имеют следующий вид [3]:

$$H_1 \rightarrow P \begin{pmatrix} 2 & \frac{1}{3} & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (13) \quad P \rightarrow H_1 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$H_2 \rightarrow P \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (15) \quad P \rightarrow H_2 \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

$$H_3 \rightarrow P \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & 2 & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (17) \quad P \rightarrow H_3 \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

В настоящее время Н ячейка не используется [3].

Гексагональная решетка может быть также описана в ортогональных осях. Ортогексагональная ячейка О выбирается тремя способами O_1 , O_2 , O_3 относительно Р ячейки (рис. 8, б). Матрицы перехода между Р и O_1 , O_2 , O_3 ячейками, в соответствии с рисунком, имеют следующий вид [3]:

$$O_1 \rightarrow P \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (19) \quad P \rightarrow O_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$O_2 \rightarrow P \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (21) \quad P \rightarrow O_2 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$O_3 \rightarrow P \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (23) \quad P \rightarrow O_3 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

Ромбоэдрическая решетка может быть описана как в базисе \vec{a}_1 , \vec{b}_2 , \vec{c}_2 ромбоэдрической Р ячейки, так и в базисе \vec{a}_h , \vec{b}_h , \vec{c}_h гексагональной ячейки $R_{\text{гекс}}$ (рис. 9), причем Р ячейка может быть выбрана как прямая R_{np} (рис. 9, а, б), так и обратная R_{op} (рис. 9, в, г). В соответствии с рисунком, матри-

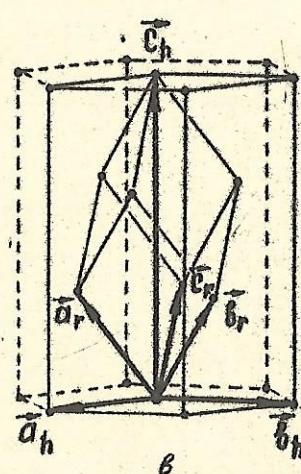
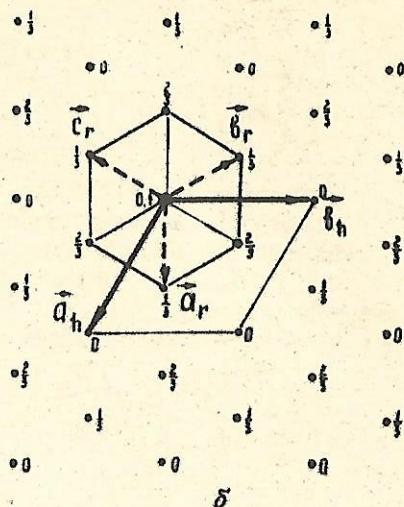
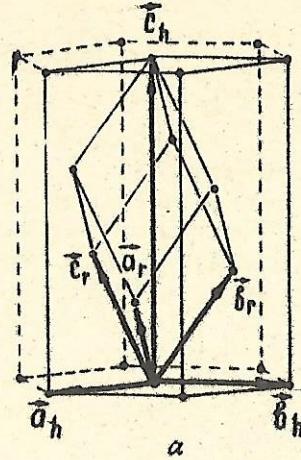


Рис. 9

чи перехода между ячейками $R_{\text{гекс}}$, R_{np} , и $R_{\text{одр}}$ имеют следующий вид [3]:

$$R_{\text{гекс}} \rightarrow R_{\text{np}} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 3 \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad (25) \quad R_{\text{np}} \rightarrow R_{\text{гекс}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (26)$$

$$R_{\text{гекс}} \rightarrow R_{\text{одр}} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad (27) \quad R_{\text{одр}} \rightarrow R_{\text{гекс}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (28)$$

Задание. Решить задачи из [1]: 466, 468–470, 477, 478, 480–482, 484, 485, 492, 500.

2. Преобразование индексов атомных плоскостей

Пусть старый базис образован тройкой векторов \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , новый базис – тройкой \vec{a}' , \vec{b}' , \vec{c}' , базисы имеют общее начало (рис. 10). И пусть некоторая атомная плоскость (грань) имеет в старом базисе символ (hkl) . Найдем ее символ $(h'k'l')$ в новом базисе.

Согласно определению индексов атомной плоскости (см. часть I, п. 2.1), параллельная серия плоскостей (hkl) делит вектор \vec{a} на h частей, вектор \vec{b} – на k частей, вектор \vec{c} – на l частей. В частности, для плоскостей, изображенных на рис. 10, $h = 1$, $k = 2$, $l = 3$. Задача определения новых индексов h' , k' , l' сводится к установлению количества час-

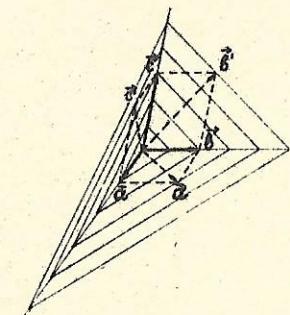


Рис. 10

тей, на которое делятся этими плоскостями векторы нового базиса \vec{a}' , \vec{b}' , \vec{c}' .

Выразим векторы нового базиса через старый базис:

$$\begin{aligned}\vec{a}' &= \alpha_{11}\vec{a} + \alpha_{12}\vec{b} + \alpha_{13}\vec{c}, \\ \vec{b}' &= \alpha_{21}\vec{a} + \alpha_{22}\vec{b} + \alpha_{23}\vec{c}, \\ \vec{c}' &= \alpha_{31}\vec{a} + \alpha_{32}\vec{b} + \alpha_{33}\vec{c}.\end{aligned}\quad (29)$$

Вектор \vec{a}' делится плоскостями (hkl) на $\alpha_{11}h + \alpha_{12}k + \alpha_{13}l$ частей (индекс h'). Аналогично находим индекс k' и l' :

$$\begin{aligned}h' &= \alpha_{11}h + \alpha_{12}k + \alpha_{13}l, \\ k' &= \alpha_{21}h + \alpha_{22}k + \alpha_{23}l, \\ l' &= \alpha_{31}h + \alpha_{32}k + \alpha_{33}l.\end{aligned}\quad (30)$$

Системы (29) и (30) имеют одинаковые коэффициенты, и следовательно, им соответствует одна матрица

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Это значит, что в результате изменения базиса индексы атомных плоскостей также изменяются, и эти изменения описываются матрицей перехода от старого базиса к новому. Согласно (30) столбец новых индексов равен произведению матрицы перехода A на столбец старых индексов:

$$\begin{pmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Умножив обе части равенства (32) на матрицу A^{-1} слева, получаем

$$\begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Преобразования типа (32) и (33) называют **ковариантными**.

Примеры: I. Для случая, изображенного на рис. 10,

$$\begin{aligned}\vec{a}' &= \vec{a} + \vec{b}, \\ \vec{b}' &= \vec{b} + \vec{c}, \\ \vec{c}' &= \vec{a} + \vec{c},\end{aligned} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Плоскости, которые в старом базисе \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} имели символ (123), в новом базисе \vec{a}' , \vec{b}' , \vec{c}' приобретают символ (354).

2. Атомная плоскость в Р-ячейке имеет индекс (110). Найдем ее индекс в С-ячейке. Решение дается формулой (32), матрица перехода $P \rightarrow C$ — выражением (4):

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow 0:2:0 \rightarrow 0:1:0 \rightarrow (010).$$

Новые индексы плоскости равны (010).

Задание. В Р-установке атомные плоскости имеют символы (100), (010), (001), (110), (101), (011) и (111). Найти их символы в С-, Г- и F-установках в соответствии с рис. I-4.

Решить задачи 464, 471, 474, 476, 479, 483, 486, 491, 493 из [1].

3. Преобразование индексов интерференции

Индексы интерференции (индексы дифракционных максимумов) $H = nh$, $K = nk$, $L = nl$ отличаются от индексов атомных плоскостей h , k , l множителем n — порядком "отражения" параллельного пучка лучей от плоскостей (hkl) . Если бы в кристалле существовали атомные плоскости с индексами H , K , L , то они располагались бы в n раз чаще, чем плоскости (hkl) , и делили бы базисные векторы в n раз большее число частей. Для этих условных плоскостей $NHKL$ справедливы положения, рассмотренные в предыдущем разделе. А это значит, что индексы интерференции преобразуются по тем же формулам (32) и (33), что и индексы атомных плоскостей. Осуществляются эти преобразования с использованием матриц перехода между различными ячейками, например: (2) — (28).

Задание. В \mathcal{C} -установке дифракционные максимумы имеют символы 100, 040, 007, 330, 101, 022, 111. Найти их символы в \mathcal{P} , I- и F-установках в соответствии с рис. 3, 6, 5.

4. Погасания дифракционных максимумов, вызванные центрированностью ячеек

Если дифракционная картина, создаваемая кристаллом, описывается при помощи центрированной ячейки (содержащей узлы не только в вершинах), то наблюдается систематическое отсутствие дифракционных максимумов с определенными типами индексов. В таких случаях говорят о погасании максимумов [2]. Матрицы перехода от центрированных ячеек к примитивной (I), (3), (5) позволяют вывести законы погасания для ячеек различной центрированности.

Система уравнений (30) выражает зависимость индексов h' , k' , l' дифракционного максимума для примитивной ячейки через его индексы h , k , l для центрированной ячейки. Коэффициенты α_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) для различных ячеек даются матрицами (I), (3), (5). В частности, для I ячейки, согласно (I), $h' = -\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l$ или $2h' = -h + k + l$. Поскольку h' — целое число, то последнее равенство можно записать так:

$$h + k + l = 2n, \quad (34)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$. То есть сумма индексов интерференции в случае объемноцентрированной ячейки является четной. Выражение (34) называют условием погасания, имея в виду, что максимумы, удовлетворяющие этому условию, имеют вообще ненулевую интенсивность, в то время как максимумы, не удовлетворяющие этому условию, отсутствуют в дифракционной картине, описанной в I установке. Если ту же дифракционную картину описать в \mathcal{P} ячейке, то погасания, возникающие за счет центрированности ячейки, устраниются. Однако \mathcal{P} ячейка не всегда удовлетворяет условиям Браве.

Аналогичный анализ второго и третьего уравнений системы (30) не приводит к новым законам погасания для I ячейки.

Для C ячейки, согласно (3),

$$h + k = 2n, \quad (35)$$

т.е. присутствуют лишь максимумы, для которых сумма индексов h и k является четной. Второе и третье уравнения не дают новых условий погасания.

Для F ячейки, согласно (5),

$$h + k = 2n, \quad h + l = 2n, \quad k + l = 2n. \quad (36)$$

Иными словами, индексы h , k , l имеют одинаковую четность (все четные или все нечетные).

Для H ячейки гексагональной решетки, согласно (13), (15) или (17)

$$h - k = 3n. \quad (37)$$

То есть разность индексов h и k кратна трем.

Для O ячейки гексагональной решетки, согласно (19), (21) или (23),

$$h + k = 2n, \quad (38)$$

или, что то же самое, $h - k = 2n$.

Для гексагональной ячейки ромбоэдрической решетки, согласно (25) или (27), имеем соответственно

$$-h + k + l = 3n \text{ или } h - k + l = 3n. \quad (39)$$

Задание. Вывести законы погасания для A и B ячеек.

5. Преобразование координат атомов

A — матрица перехода от старого базиса ($\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$) к новому ($\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'$), т.е.

$$\begin{pmatrix} \vec{a}' \\ \vec{b}' \\ \vec{c}' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Точка M в старом базисе имеет координаты (xyz). Найдем ее координаты ($x'y'z'$) в новом базисе.

Проведем вектор \vec{M} из начала координат в точку M (рис. II). Его разложения по новому и старому базисам, естественно, равны между собой

$$\begin{aligned} x'\vec{a}' + y'\vec{b}' + z'\vec{c}' &= \\ &= x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}, \end{aligned}$$

или в матричной форме

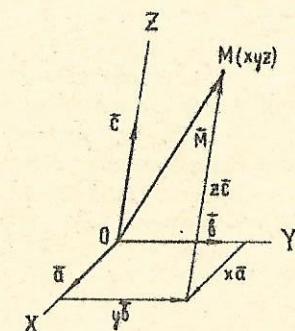


Рис. II

$$(x'y'z') \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} = (xyz) \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix}.$$

Согласно (40)

$$(x'y'z') A \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} = (xyz) \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix}.$$

Сократим последнее равенство на столбец векторов старого базиса (что возможно в силу линейной независимости базисных векторов):

$$(x'y'z') A = (xyz), \quad (41)$$

и умножим обе части равенства на A^{-1} справа

$$(x'y'z') = (xyz) A^{-1}. \quad (42)$$

Транспонируя обе части равенства (42), получаем

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = (A^{-1})^T \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (43)$$

Транспонируя обе части равенства (41), получаем выражение старых координат точки через новые:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = A^T \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}. \quad (44)$$

Преобразования типа (43) и (44) называют **контрвариантными**.

Пример. Атом в Г ячейке имеет координаты $(1/2, 1/4, 1)$. Найдем его координаты в F ячейке. Решение дается формулой (43), матрица перехода $G \rightarrow F$ – выражением (12), обратная ей матрица – выражением (II). Транспонируем матрицу (II) и подставляем полученную матрицу $(A^{-1})^T$ в (43):

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 8 \\ 1 \\ 8 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Новые координаты атома равны $(3/8, 1/8, -1)$.

Задание. Решить задачи II3, II4, I22, I23 из [I].

6. Преобразование индексов атомных рядов

Индексы атомного ряда (ребра) определяются через координаты произвольной точки этого ряда (см. часть I, п. 2.1) и, следовательно, преобразуются по тем же законам, что и координаты точек. Так если z, s, t – индексы атомного ряда в старом базисе, z', s', t' – его индексы в новом базисе, A – матрица перехода от старого базиса к новому, то согласно формулам (43) и (44)

$$\begin{pmatrix} z' \\ s' \\ t' \end{pmatrix} = (A^{-1})^T \begin{pmatrix} z \\ s \\ t \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} z \\ s \\ t \end{pmatrix} = A^T \begin{pmatrix} z' \\ s' \\ t' \end{pmatrix}.$$

Задание. I. Найти индексы направлений базисных векторов, диагоналей граней и телесной диагонали F ячейки в Р-, С- и Г- установках в соответствии с рис. 4, 5 и 7. 2. Решить задачи 463, 465, 467, 472, 473, 475, 481, 487–490 из [I].

Рекомендуемая литература

1. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. Геометрическая кристаллография. М., 1973.
2. Бокий Г.Б., Порай-Кошиц М.А. Рентгеноструктурный анализ. Т. I. М., 1964.
3. International Table for X-ray Crystallography. Vol. 1, Birmingham, 1959.

СОДЕРЖАНИЕ

МАТРИЦЫ ПЕРЕХОДА	I
1. Преобразование элементарных ячеек	-
2. Преобразование индексов атомных плоскостей	9
3. Преобразование индексов интерференции	II
4. Погасания дифракционных максимумов, вызванные центрированностью ячеек	I2
5. Преобразование координат атомов	I3
6. Преобразование индексов атомных рядов	I5
Рекомендуемая литература	-