

УДК 538.9

АНАЛИЗ ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ КРИСТАЛЛОВ С НЕПРИМИТИВНЫМИ ЯЧЕЙКАМИ БРАВЕ

В. А. ЛЮПО¹⁾, И. А. ЛЯВШУК²⁾

¹⁾Независимый исследователь, г. Гродно, Беларусь

²⁾Гродненский государственный университет им. Янки Купалы,
ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Беларусь

Цель исследования – доказательство независимости обратной решетки кристалла от выбора ячейки в его прямой решетке. Объектом анализа являлась взаимосвязь положения узлов ячейки обратной решетки и параметров прямой решетки на основе квадратичных формул, а также структурные амплитуды («веса» узлов обратной решетки) для кристаллов с непримитивными ячейками. При этом решались такие задачи, как выбор репера Браве с ячейкой P -типа в кристалле с ячейками I -, F - и C -типов; построение прямых и обратных метрических тензоров для центрированных ячеек прямой решетки и для ячеек P -типа кристаллических решеток; установление правила перехода от индексов HKL узлов обратной решетки при выбранной P -ячейке к индексам hkl тех же узлов для непримитивных ячеек на основе квадратичных формул; определение связи между индексами HKL и hkl с использованием метрических тензоров; анализ результатов, полученных двумя различными методами (на основе квадратичных формул и с использованием метрических тензоров); доказательство того факта, что в обратной решетке кристаллов с непримитивными ячейками узлы, которые соответствуют «погасающим» рефлексам, на самом деле отсутствуют. Результаты исследования адресованы специалистам в области кристаллофизики и представляют собой строгое доказательство, заполняющее пробел в математическом аппарате кинематической теории рассеяния на кристаллах с непримитивными ячейками Браве и позволяющее исключить из научного оборота избыточные утверждения о «погасании» части рефлексов, не регистрируемых на рентгенограммах, по причине их реального отсутствия.

Ключевые слова: прямая решетка; обратная решетка; суперъячейка; кристаллографическая система координат; кристаллофизическая система координат; метрический тензор; структурная амплитуда.

ANALYSIS OF THE RECIPROCAL LATTICE OF CRYSTALS WITH NON-PRIMITIVE BRAVAIS CELLS

V. A. LIPOV^a, I. A. LIAUSHUK^b

^aIndependent researcher, Hrodna, Belarus

^bYanka Kupala State University of Grodno, 22 Ažėška Street, Hrodna 230023, Belarus

Corresponding author: I. A. Liaushuk (ilavshuk@grsu.by)

The aim of the work was proof the independence of the reciprocal lattice of a crystal from the choice of a cell in its direct lattice. The object of analysis was the dependence of the position of reciprocal lattice cell sites and direct lattice parameters based on quadratic formulas, as well as the structural amplitudes («weights» of reciprocal lattice sites) for

Образец цитирования:

Люпо ВА, Лявшук ИА. Анализ обратной решетки кристаллов с непримитивными ячейками Браве. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2022;3:68–80. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2022-3-68-80>

For citation:

Liopo VA, Liaushuk IA. Analysis of the reciprocal lattice of crystals with non-primitive Bravais cells. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2022;3:68–80. Russian. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2022-3-68-80>

Авторы:

Валерий Александрович Люпо – доктор физико-математических наук, профессор; независимый исследователь.
Ирена Александровна Лявшук – старший преподаватель кафедры информационных систем и технологий физико-технического факультета.

Authors:

Valery A. Liopo, doctor of science (physics and mathematics), full professor; independent researcher.
Irena A. Liaushuk, senior lecturer at the department of information systems and technologies, physico-technical faculty. ilavshuk@grsu.by
<https://orcid.org/0000-0001-9539-4126>

crystals with non-primitive cells. The following tasks were solved: choice of a Bravais rapper with a P -type cell in a crystal with I -, F - and C -type cells; construction of direct and reciprocal metric tensors for centered cells of a direct lattice and for P -type cells of crystal lattices; establishment of the transition rule from the HKL indices of the nodes of the reciprocal lattice with the selected P -cell to the hkl indices of the same nodes for non-primitive cells based on quadratic formulas; determining a connection between HKL and hkl indices using metric tensors; analysis of the results obtained by two different methods (based on quadratic formulas and using metric tensors); proof, that in the reciprocal lattice of crystals with non-primitive cells, the nodes that correspond to «fading» reflections are actually absent in the reciprocal lattice. The research results are addressed to specialists in the field of crystal physics and represent a rigorous proof that fills a gap in the mathematical apparatus of the kinetic theory of scattering by crystals with non-primitive Bravais cells. It allows eliminating redundant statements about the «extinction» of part of the reflexes that are not recorded on X-rays due to their real absence from scientific circulation.

Keywords: direct lattice; reciprocal lattice; supercell; crystallographic coordinate system; crystallophysical coordinate system; metric tensor; structural amplitude.

Введение

Понятие обратной решетки играет важную роль в кристаллографии, структурной кристаллофизике, квантовой теории конденсированных сред. Без использования обратной решетки и обратного пространства в целом сложно понять ряд экспериментальных фактов и их теоретическое объяснение. Например, можно встретить утверждение, что рентгеновский рефлекс возникает при «отражении» рентгеновских лучей от атомных плоскостей [1]. Но, во-первых, из атомов, размеры которых соизмеримы с длиной волны рентгеновского излучения, невозможно создать зеркальную поверхность (случай, когда угол падения равен углу отражения), предполагаемую при выводе закона Брэгга – Вульфа, во-вторых, неясно, почему плоскости с атомами размером около $1 \text{ \AA}$ имеют межплоскостные расстояния на порядок меньше ($d \approx 0,1 \text{ \AA}$). В рамках кинематической теории рассеяния на кристаллах с непримитивной ячейкой некоторые рефлексы не проявляются. Говорится о том, что они «погасают». Переход от прямой решетки к обратной позволяет определить репер Браве обратной решетки. Именно рефлексы с индексами формы $\{100\}$ отсутствуют в эксперименте. Делается вывод, что выбор ячейки влияет на обратную решетку [2]. Но радиус-вектор узла $\vec{r}^*$ определяется из эксперимента, т. е. не может зависеть от выбора ячейки. Вместе с тем изменение параметров ячейки, например, при выборе ячеек F -типа и ячейки P -типа для того же кристалла приводит к тому, что индексы узлов для одинаковых $\vec{r}^*$ различаются. В ряде случаев, в частности для гексагональных плотноупакованных (ГПУ) систем, построить ячейку P -типа на кратчайших межатомных (некомпланарных) векторах невозможно, так как эта ячейка не будет соответствовать требованиям трехмерной трансляции. Возникают вопросы при сравнении обратных решеток для одних и тех же прямых решеток, но при разном выборе их ячеек. Эти и другие проблемы приводят к необходимости дополнительного анализа влияния выбора ячейки кристалла на особенности его обратной ячейки.

Элементы теории связи обратной и прямой решеток кристаллов с их рентгеновскими дифракционными картинками

Основной отличительной особенностью кристаллического объекта является наличие распределения гомологичных точек в соответствии с условием трансляции

$$\hat{T}\varphi(xyz) = \varphi(x + m, y + n, z + p), \quad (1)$$

где оператор трансляции $\hat{T}\varphi(xyz)$ есть совокупность свойств объекта в точке (xyz) ; m, n, p – целые числа; (xyz) – координаты в базисе $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ (кристаллографическая (КТ) система координат). На этих векторах в общем случае строится косоугольный параллелепипед с параметрами a, b, c (линейные) и α, β, γ (угловые).

Если на кристалл направить рентгеновский (электронный, нейтронный) луч так, что будет выполняться условие

$$2d\sin\theta = n\lambda, \quad (2)$$

известное как условие Брэгга – Вульфа, где d – межплоскостное расстояние для узловых кристаллографических плоскостей; n – целое число; λ – длина волны излучения, то тогда hkl есть кристаллографические индексы плоскости [3; 4], а нормаль из начала координат на плоскость (hkl) – вектор межплоскостного расстояния.

Координаты (xyz) в условии (1) заданы в КГ-системе, в которой x, y, z по направлению совпадают с $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ соответственно, а единицами их измерения являются модули параметров a_i ($i = 1, 2, 3$). Следовательно, $0 \leq x_i < 1$ с учетом условия (1). Каждому вектору $\vec{d}$ сопоставляется вектор $\vec{r}^*$ такой, что

$$(\vec{r}^* \cdot \vec{d}) = (\vec{d} \cdot \vec{r}^*) = 1. \quad (3)$$

Вектор $\vec{r}^*$ измеряется в единицах обратной длины и называется вектором узла обратной решетки, так как совокупность этих узлов для различных плоскостей характеризуется трансляционной симметрией. В данной совокупности выделяется ячейка обратной решетки с базисом $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$, причем $\vec{a}_j^*, \vec{a}_k$ связаны условием

$$(\vec{a}_j^* \cdot \vec{a}_k) = (\vec{a}_k \cdot \vec{a}_j^*) = \delta_{jk}, \quad (4)$$

где δ_{jk} (дельта-функция) обладает свойством $\delta_{jk} = 1$ (при $k = j$) и $\delta_{jk} = 0$ (при $k \neq j$). В обратной решетке определяется ячейка с параметрами a^*, b^*, c^* (линейные) и $\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ (угловые). Параметры прямой и обратной решеток взаимосвязаны условиями [5]

$$\begin{aligned} \cos \alpha_j^{0(*)} &= \frac{\cos \alpha_{j+1}^{*(0)} \cdot \cos \alpha_{j+2}^{*(0)} - \cos \alpha_j^{*(0)}}{\sin \alpha_{j+1}^{*(0)} \cdot \sin \alpha_{j+2}^{*(0)}}, \\ a_j^{0(*)} &= \frac{a_{j+1}^{*(0)} \cdot a_{j+2}^{*(0)} \cdot \sin \alpha_j^{*(0)}}{V^{*(0)}}, \end{aligned} \quad (5)$$

где цифра 0 и знак * определяют кристаллическое (прямое) и обратное пространства соответственно; V есть объем решетки (прямой или обратной); $j \equiv j + 3$. Узел обратной решетки определяется вектором $\vec{r}^*$ с координатами в единицах параметров a^*, b^*, c^* , т. е. координаты узлов $\vec{r}^*$ – это всегда целые числа, совпадающие с индексами hkl плоскости, которая отображена вектором $\vec{r}^* = \frac{\vec{d}}{d^2}$. Из условия (5) следует, что решетка, обратная к обратной решетке, – это прямая решетка. Наряду с КГ-системой координат в кристаллофизике используется стандартная декартова (кристаллофизическая (КФ)) система координат. Следовательно, любая точка в ячейке кристалла описывается двумя наборами координат – $(X)_{\text{КГ}}$ и $(X)_{\text{КФ}}$. Переход между этими координатами выполняется по правилу

$$|X_j|_{\text{КФ}} = |M| |X_k|_{\text{КГ}},$$

где $|X_k|$ – матрица-столбец координат в соответствующей системе; $|M|$ – метрический тензор, имеющий вид

$$|M| = \begin{vmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{vmatrix}. \quad (6)$$

Объем ячеек составляет величину $V^0 = a_x b_y c_z$, $V^* = (V^0)^{-1}$. Переход от $(X)_{\text{КФ}}$ к $(X)_{\text{КГ}}$ осуществляется по правилу

$$|X_j|_{\text{КГ}} = |M|^{-1} |X_k|_{\text{КФ}},$$

где $|M|^{-1}$ – обратный метрический тензор.

$$|M| |M|^{-1} = |M|^{-1} |M| = |I|,$$

здесь $|I|$ – единичная матрица с элементами $m_{ij} = \delta_{ij}$.

Если узел обратной решетки выходит на сферу отражения (сфера Эвальда), радиус которой равен $\frac{1}{\lambda}$, то по радиусу сферы пойдет отраженный рентгеновский луч, так как в данном случае будет выполняться условие (2).

Ячейка решетки, построенная на трех некомпланарных векторах, связывающих ближайшие гомологичные точки, может иметь различные отношения между модулями этих векторов и произвольные угловые параметры. Однако во всех случаях гомологичные точки находятся только в вершинах, а в самой ячейке подобных точек нет. Такая ячейка называется примитивной (P). Однако часто выбирают ячейку

с несколькими гомологичными точками по отношению к вершинам. В этом случае угловые параметры стараются выбирать так, чтобы в ячейке было как можно больше прямых углов. Следовательно, ячейка может быть и непримитивной, т. е. относиться к одному из типов ячеек Браве. Координаты точек, гомологичных начальной точке, образуют репер Браве. Существуют четыре типа ячеек, которые встречаются только у решеток с параметрами a, b, c ; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (решетки ромбической (орторомбической) сингонии): P – примитивная $\left[(000)\right]$; I – объемноцентрированная $\left[(000)\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)\right]$; F – гранецентрированная $\left[(000)\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)\left(\frac{1}{2}0\frac{1}{2}\right)\left(0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)\right]$; C – базоцентрированная $\left[(000)\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)\right]$. В квадратных скобках указан репер Браве R . Если в ячейке с репером Браве R имеется точка с координатами $|X_j|$ ($j = 1, 2, 3$), то координаты всех гомологичных точек $|X|_g$ определяются по правилу $|X|_g = |R|$. В научной литературе можно встретить утверждение, что выбор ячейки в решетке кристалла влияет на его обратную решетку [2; 6]. Это утверждение неверно, так как $\vec{r}^* = \frac{\vec{d}}{d^2}$, т. е. определяется только экспериментальным значением d , которое не зависит от выбора ячейки. Набор межплоскостных расстояний является имманентным свойством кристалла. Однако выбор ячейки кристалла влияет на базис ячейки его обратной решетки. Следовательно, при различных (a_j, α_j) меняются как (a_j^*, α_j^*) , так и их индексы, но абсолютные значения r^* , т. е. взаимоконфигурации узлов обратной решетки, не меняются в зависимости от выбранной модели ячейки. Один и тот же узел при различных (a_j, α_j) будет иметь разные координаты (hkl) , которые измеряются в единицах базиса $(\vec{a}_j^*)$.

«Погасание» рефлексов для кристаллов с различными ячейками Браве

Каждый рентгеновский рефлекс описывается определенным брэгговским углом, межплоскостным расстоянием и вектором обратной решетки. Все это – геометрические характеристики. Но каждый рефлекс имеет свою интенсивность, которая тоже не зависит от выбора ячейки, а является имманентным свойством кристалла. Интенсивность рентгеновского рефлекса $I(hkl) = |F|^2 \cdot PLG \cdot K$ зависит от многих факторов, среди которых главную роль играет структурный фактор $F^2(hkl)$. Величина $F(hkl)$ называется структурной амплитудой. PLG -фактор, зависящий от угла θ , включает фактор поляризации P , фактор Лоренца L и геометрический фактор G . Этот фактор выражается аналитически как функция брэгговского угла. Фактор K , включающий факторы экстинкции, поглощения, а также температурный и ряд других факторов, слабо зависит от угла дифракции и может рассматриваться как квазипостоянный множитель. Расчет $F(hkl)$ при известной структуре выполняется по формуле

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j(xyz)_j \exp 2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j), \quad (7)$$

где $(xyz)_j$ – кристаллографические координаты j -го атома; N – число атомов в ячейке; $f_j = f_j(\theta)$ – атомная амплитуда (табулированная функция).

Примитивная ячейка

В примитивной ячейке все точки различные, т. е. гомологичных точек нет. По формуле (7) можно рассчитать значение структурной амплитуды и, следовательно, структурного фактора:

$$F^2(hkl) = F(hkl) \cdot F^*(hkl).$$

Структурная амплитуда в общем случае есть функция комплексная, структурный фактор – функция действительная и всегда положительная, F^2 – это «вес» узла обратной решетки. Чем больше «вес» F^2 , тем больше интенсивность рефлекса от плоскости (hkl) при условии выхода узла $\vec{r}^*(hkl)$ на сферу отражений (сфера Эвальда). Таким образом, ближайшими к началу координат обратной решетки являются узлы с индексами 100, 010, 001 по осям x^*, y^*, z^* соответственно. Внутри этого параллелепипеда других узлов быть не может, потому что им соответствовали бы плоскости с $d > \{100\}$.

Объемноцентрированная ячейка

Предположим, что в объемноцентрированной ячейке имеется точка (например, центр атома) с координатами (xyz) и $\left(x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}\right)$. Следовательно, формула (7) примет вид

$$\begin{aligned} F(hkl) &= \sum_{j=1}^{N/2} f_j(xyz)_j \left\{ \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) + \right. \\ &+ \left. \exp 2\pi i \left[h \left(x_j + \frac{1}{2} \right) + k \left(y_j + \frac{1}{2} \right) + l \left(z_j + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} = \\ &= [1 + \exp \pi i (h + k + l)] \sum_{j=1}^{N/2} f_j(xyz)_j (hx_j + ky_j + lz_j). \end{aligned}$$

Суммирование проводится по атомам, которые не связаны репером Браве. Значения h, k, l всегда целые, поэтому и сумма $h + k + l$ – целое число, т. е.

$$1 + \exp \pi i (h + k + l) = \begin{cases} 2 & \text{при } h + k + l = 2n, \\ 0 & \text{при } h + k + l = 2n - 1. \end{cases} \quad (8)$$

Отсюда следует вывод, что получить рефлекс, например, 100 для кристаллов с ячейкой I -типа невозможно, это подтверждается экспериментом. В то же время, исходя из формулы (3), период обратной решетки равен a^* и его величина соответствует расстоянию от начала координат обратной решетки до узла $\vec{r}^* = a^*$. Согласно утвердившемуся мнению рефлекс, обусловленный выходом узла (100) на сферу Эвальда, «погасает». То есть условие (8) – это правило «погасания» рефлексов для кристаллов с ячейкой Браве I -типа. Однако вопрос о том, есть там узел или нет, остается открытым. В ряде случаев это имеет принципиальное значение. Например, в квантовой кристаллофизике при описании волновых процессов в веществе анализируется волна $\exp \pi i \vec{k} \vec{a}$, где $\vec{a}$ – период решетки; $\vec{k}$ – волновой вектор, с точностью до 2π равный периоду обратной решетки a^* . Принято считать, что a^* определяется в соответствии с условием (4).

Гранецентрированная ячейка

Структурная амплитуда рефлексов для кристаллов с ячейкой F -типа имеет вид

$$\begin{aligned} F(hkl) &= \sum_{j=1}^{N/4} f_j(xyz)_j \left\{ \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) + \exp 2\pi i \left[h \left(x_j + \frac{1}{2} \right) + k \left(y_j + \frac{1}{2} \right) + lz_j \right] + \right. \\ &+ \left. \exp 2\pi i \left[h \left(x_j + \frac{1}{2} \right) + ky_j + l \left(z_j + \frac{1}{2} \right) \right] + \exp 2\pi i \left[hx_j + k \left(y_j + \frac{1}{2} \right) + l \left(z_j + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} = \\ &= [1 + \exp \pi i (h + k) + \exp \pi i (h + l) + \exp \pi i (k + l)] \sum_{j=1}^{N/4} f_j(xyz)_j \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j). \end{aligned}$$

Все координаты имеют j -индекс. Видно, что сумма двух индексов может быть четной либо нечетной. При всех четных или нечетных hkl сумма двух индексов всегда будет четной. Если индексы имеют смешанную четность, то для одной пары индексов сумма будет четной, а для остальных пар – нечетной. Следовательно, правило «погасания» для кристаллов с ячейкой F -типа имеет вид

$$1 + \exp \pi i (h + k) + \exp \pi i (h + l) + \exp \pi i (k + l) = \begin{cases} 1 & \text{при } hkl \text{ одинаковой четности,} \\ 0 & \text{при } hkl \text{ смешанной четности.} \end{cases}$$

Рефлексы таких кристаллов с индексами, например, 100, 110 не наблюдаются, т. е. «погасают», либо они не существуют в обратной решетке.

Базоцентрированная ячейка

В соответствии с формулой (7) структурная амплитуда базоцентрированной ячейки имеет вид

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{N/2} f_j(xyz)_j \left\{ \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) + \exp 2\pi i \left[h \left(x_j + \frac{1}{2} \right) + k \left(y_j + \frac{1}{2} \right) + lz_j \right] \right\} =$$

$$= [1 + \exp \pi i (h + k)] \sum_{j=1}^{N/2} f_j(xyz)_j \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j).$$

Так как

$$1 + \exp \pi i (h + k) = \begin{cases} 2 & \text{при } h + k = 2n, \\ 0 & \text{при } h + k = 2n - 1, \end{cases}$$

где n – целое число, то $F(hkl) \neq 0$ только при четной сумме $h + k$, на l ограничений нет.

Причина «погасания» рефлексов на рентгенограммах кристаллов с непримитивными ячейками

Выбор ячейки кристалла осуществляется экспериментатором, и эта ячейка никак не влияет на обратную решетку, т. е. не меняет $\vec{r}^*(hkl)$, но значения индексов узлов зависят от ячейки кристалла. Например, в кубической гранецентрированной решетке при переходе к другому базису можно получить тетрагональную объемноцентрированную ячейку (рис. 1).

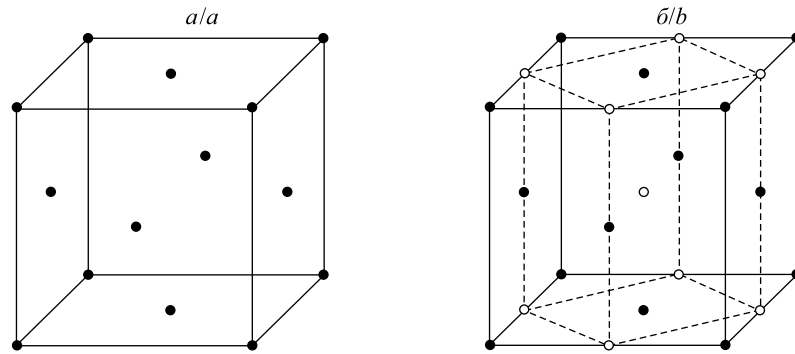


Рис. 1. Кубическая решетка с ячейкой F -типа (а) и построенная на ее основе ячейка I -типа (б)

Fig. 1. Cubic lattice with an F -type cell (a) and I -type cell built on its basis (b)

Рассмотрим особенности распределения узлов обратной решетки I -ячейки кубического кристалла. На рис. 2 приведена проекция кубической решетки на плоскость (xy).

Пусть $a = 1$, $AC = CB = 1$, $AB = \sqrt{2}$, $A = B = C = \frac{\sqrt{3}}{2}$. По теореме косинусов $\cos \alpha = \cos \beta = \frac{1}{3}$, $\cos \gamma = -\frac{1}{3}$.

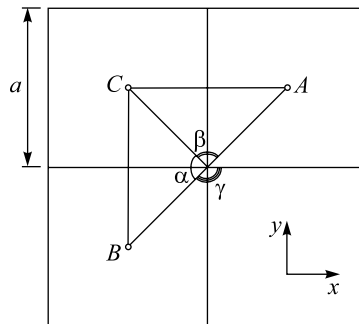


Рис. 2. Переход от ячейки I -типа к ячейке P -типа.
 $\vec{A}\vec{B}\vec{C}$ – базис ячейки P -типа

Fig. 2. Transition from I -type cell to P -type cell.
 $\vec{A}\vec{B}\vec{C}$ is the basis of the P -type cell

Квадратичная формула, связывающая d , r^* и α , β , γ , a , b , c , hkl , имеет вид

$$\frac{1}{d^2} = \frac{\begin{vmatrix} \frac{h}{a} & \cos \gamma & \cos \beta \\ \frac{h}{a} & \frac{k}{b} & 1 \\ \frac{l}{c} & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix} + \frac{k}{b} \begin{vmatrix} 1 & \frac{h}{a} & \cos \beta \\ \cos \gamma & \frac{k}{b} & \cos \alpha \\ \cos \beta & \frac{l}{c} & 1 \end{vmatrix} + \frac{l}{c} \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \frac{h}{a} \\ \cos \gamma & 1 & \frac{k}{b} \\ \cos \beta & \cos \alpha & \frac{l}{c} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ \cos \beta & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix}}. \quad (9)$$

Для рассматриваемых ячеек формула (9) в случае кубического кристалла примет вид

$$\frac{1}{d_k^2} = (r^*)^2_k = h^2 + k^2 + l^2.$$

Для примитивной ячейки с учетом значений параметров A , B , C , α , β , γ и индексов HKL

$$\frac{1}{d_P^2} = |r^*|_P^2 = \frac{\frac{4}{3}H \begin{vmatrix} H & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ K & 1 & \frac{1}{3} \\ L & \frac{1}{3} & 1 \end{vmatrix} + \frac{4}{3}K \begin{vmatrix} 1 & H & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & K & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & L & 1 \end{vmatrix} + \frac{4}{3}L \begin{vmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & H \\ -\frac{1}{3} & 1 & K \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & L \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1 & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 1 \end{vmatrix}}.$$

После преобразований получим $\frac{1}{d_P^2} = |r^*|_P^2 = 2(H^2 + K^2 + L^2 + HK - HL - KL)$. Следовательно, для одного и того же узла обратной решетки соотношение между индексами ячеек P - и I -типов имеет вид

$$h^2 + k^2 + l^2 = 2(H^2 + K^2 + L^2 + HK - HL - KL). \quad (10)$$

На индексы HKL никаких ограничений не накладывается, но сумма $h^2 + k^2 + l^2$ обязательно четная (цифра 2 в правой части формулы (10)); H и K входят симметрично, т. е. $\bar{H}KL = H\bar{K}L$, однако $HKL \neq H\bar{K}\bar{L}$. Физическая модель, связывающая ячейки P - и I -типов одной решетки, приводит к выводу, что выражение $a^2 + b^2 + c^2 + ab - ac - bc$ при целых a , b , c всегда можно представить в виде суммы квадратов трех целых чисел. На основании изложенного следует сделать вывод, что рефлексы со смешанными индексами для ячеек I -типа не «погасают», они отсутствуют в решетке. Для таких случаев в обратном пространстве необходимо рассматривать не ячейку, а суперячейку с параметрами $a^* = b^* = c^* = \frac{2}{a}$ [7]. Идея о существовании суперячеек в обратной решетке кристаллов в 1972 г. высказана академиком Б. К. Вайнштейном. Переход от HKL к hkl можно выполнить на основе метрических тензоров ячейки с параметрами a , b , c ; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$:

$$|M|_P = \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \\ \frac{b}{2} & \frac{b}{2} & -\frac{b}{2} \\ \frac{c}{2} & \frac{c}{2} & \frac{c}{2} \end{vmatrix}, \quad |M|_P^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & 0 & \frac{1}{a} \\ -\frac{1}{b} & \frac{1}{b} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{c} & \frac{1}{c} \end{vmatrix},$$

$$|M|_I = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix}, |M|_I^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{vmatrix},$$

где P – индекс примитивной ячейки; I – индекс объемноцентрированной ячейки. Переход от HKL к hkl выполняется по формуле

$$\begin{vmatrix} h \\ k \\ l \end{vmatrix} = |M|_P^{-1} \cdot |M|_I \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix}.$$

Легко убедиться, что оба метода перехода от HKL к hkl тождественны, но метод, основанный на использовании метрических тензоров, позволяет определить не только $h^2 + k^2 + l^2$, но и h, k, l по отдельности.

В качестве реперных линий для построения ячейки P -типа возьмем векторы, связывающие начало координат с узлами в центре граней, совпадающих с координатными плоскостями (рис. 3).

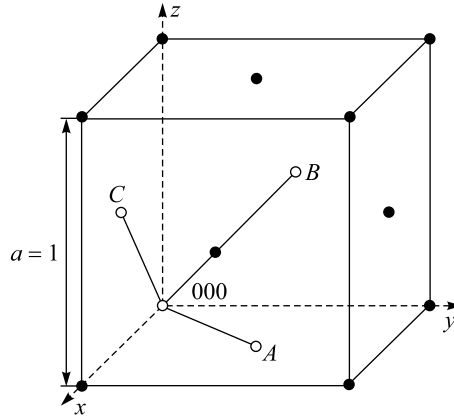


Рис. 3. Построение ячейки P -типа в кубической гранецентрированной ячейке

Fig. 3. Construction of a P -type cell in an face-centered cubic cell

Как и в случае с I -ячейкой, возьмем F -ячейку кубической решетки. Пусть ребро ячейки $a = 1$, тогда параметры примитивной ячейки $A = B = C = \frac{\sqrt{2}}{2}$, $\cos \alpha = \cos \beta = \cos \gamma = \frac{1}{2}$. Квадратичная формула для ячейки P -типа с указанными параметрами (в единицах параметра $a = 1$) примет вид

$$\frac{1}{d^2} = |r^*|^2 = \frac{2H \begin{vmatrix} H & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ K & 1 & \frac{1}{2} \\ L & \frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix} + 2K \begin{vmatrix} 1 & H & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & K & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & L & 1 \end{vmatrix} + 2L \begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} & H \\ \frac{1}{2} & 1 & K \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & L \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix}}.$$

После расчета определителей это уравнение приводится к виду $|r^*|^2 = \frac{1}{d^2} = 3(H^2 + K^2 + L^2) - 2(HK + HL + KL) = (h^2 + k^2 + l^2) \frac{1}{d^2}$ при условии, что анализируется один и тот же рефлекс в моделях ячеек P - и F -типов кристалла кубической сингонии. Сравним две группы индексов – индексы узлов обратной решетки в модели P -ячейки и индексы тех же узлов в модели F -ячейки (табл. 1).

Таблица 1

Индексы HKL узлов обратной решетки в моделях ячеек P - и F -типов

Table 1

HKL indices of reciprocal lattice sites in P - and F -type cell models

Ячейка P -типа			Ячейка F -типа		
HKL	$h^2 + k^2 + l^2$	hkl	HKL	$h^2 + k^2 + l^2$	hkl
100	3	111	201	11	311
110	4	200	210	11	311
$1\bar{1}0$	8	220	$2\bar{1}0$	19	331
101	4	200	211	8	220
$10\bar{1}$	8	220	$2\bar{1}1$	16	400
$1\bar{1}\bar{1}$	4	200	$21\bar{1}$	19	331
200	12	222	$2\bar{1}\bar{1}$	24	422

Рассмотрим переход от HKL к hkl для ромбической ячейки F -типа на основе анализа метрических тензоров

$$|M|_I = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix}, |M|_I^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{vmatrix},$$

$$|M|_P = \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{b}{2} & \frac{b}{2} & 0 \\ 0 & \frac{c}{2} & \frac{c}{2} \end{vmatrix}, |M|_P^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & \frac{1}{b} & -\frac{1}{c} \\ -\frac{1}{a} & \frac{1}{b} & \frac{1}{c} \\ \frac{1}{a} & -\frac{1}{b} & \frac{1}{c} \end{vmatrix}.$$

Как и в случае I -ячейки, переход от HKL к hkl выполняется по условию

$$\begin{vmatrix} h \\ k \\ l \end{vmatrix} = |M|_P^{-1} \cdot |M|_I \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \bar{1} \\ \bar{1} & 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix}.$$

В отличие от метода, основанного на квадратичной формуле, метод с использованием метрических тензоров позволяет определить hkl для различного выбора параметров a, b, c .

Соотношение между индексами в репере Браве и ортогональной системе координат

Рассмотрим C -ячейку ромбической решетки на рис. 4. Приведена проекция этой ячейки на плоскость (xy). КГ-система задана векторами репера Браве: $a_{\text{КГ}} = A = O\vec{A}$, $b_{\text{КГ}} = B = O\vec{B}$, $C_{\text{КГ}} = C_{\text{КФ}}$.

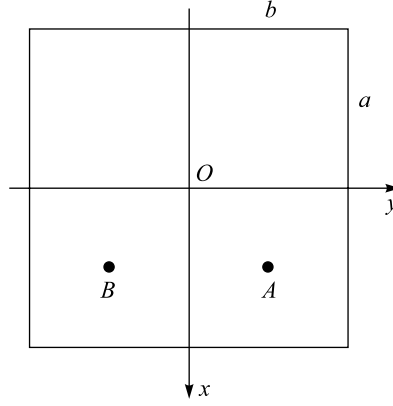


Рис. 4. КГ-система (OA, OB, C) и КФ-система (xyz)

Fig. 4. Crystallographic system (OA, OB, C) and crystallophysical system (xyz)

Метрические тензоры КГ-системы имеют вид (см. формулу (6))

$$M_{\text{КГ}} = \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ \frac{b}{2} & -\frac{b}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, M_{\text{КГ}}^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & \frac{1}{b} & 0 \\ \frac{1}{a} & -\frac{1}{b} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{vmatrix}.$$

Соответственно, метрические тензоры КФ-системы (или M_C, M_C^{-1}) определяются по формуле

$$M_C = M_{\text{КФ}} = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix}, M_{\text{КФ}}^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{vmatrix}.$$

Пусть в КФ-системе (P -ячейка) имеется точка в обратном пространстве с координатами (HKL). Для перехода к индексам в КФ-системе следует воспользоваться условием

$$\begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix}_{\text{КФ}} = M_{\text{КГ}}^{-1} \cdot M_{\text{КФ}} \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} H + K \\ H - K \\ L \end{vmatrix}.$$

Из этого условия видно, что $l = L$. Значения hkl для различных значений HKL приведены в табл. 2.

Таблица 2

Значения индексов hkl для заданных значений индексов HKL в случае C -ячейки

Table 2

Values of hkl indices for given values of HKL indices in case of C -cell

HKL	hkl	HKL	hkl	HKL	hkl
$10l$	$11l$	$21l$	$31l$	$23l$	$5\bar{1}l$
$01l$	$1\bar{1}l$	$12l$	$3\bar{1}l$	$41l$	$53l$
$1\bar{1}l$	$02l$	$32l$	$51l$	$43l$	$71l$
$\bar{1}1l$	$0\bar{2}l$	$22l$	$40l$	$\bar{4}\bar{3}l$	$\bar{7}\bar{1}l$
$20l$	$22l$	$23l$	$5\bar{1}l$	$41l$	$53l$

Как и следовало ожидать, сумма индексов $h + k$ для C -ячейки является четной независимо от индексов hkl , которые могут иметь различную четность, так как относятся к P -ячейке.

Обсуждение результатов

Существуют представления о том, что на рентгенограммах (электронограммах и нейтронограммах) кристаллов с ячейками I -, F - и C -типов (A -, B -подтипов) ряд рефлексов не определяются экспериментально. Они «погасают», как этого «требуется» формула структурной амплитуды для выбранной ячейки. Если репер ячейки задан векторами $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, причем эти параметры превышают кратчайшие межатомные расстояния R , то речь идет о структурно-тождественных атомах. В этом случае параметры ячейки $\vec{a}_j > R$. Параллелепипед, построенный на трех R_j , играет роль примитивной ячейки с параметрами $A_j \leq a_j$ ($j = 1, 2, 3$). Обратная решетка, задаваемая $|\vec{r}^*| = \frac{1}{d} = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$, не зависит от ячейки, так как определяется экспериментально без каких-либо начальных условий. Предположим, что параметры примитивной ячейки $|A_j|$. Они не могут быть больше a_j для ячеек Браве I -, F - и C -типов. Но $(\vec{a}_j^* \cdot \vec{a}_j) = 1$, $(\vec{A}_j^* \cdot \vec{A}_j) = 1$. Так как $A_j \leq a_j$ ($j = 1, 2, 3$), то всегда $\vec{A}_j^* \geq \vec{a}_j^*$. Другими словами, в обратной решетке с ячейкой P -типа базисные узлы (100), (010), (001) расположены на минимально возможных расстояниях от начала координат. Если $a_j \geq A_j$, то $\vec{a}_j^* \leq \vec{A}_j^*$, что противоречит условию A_j . Отсюда следует, что, например, рефлексы 100, 010, 001 на рентгенограммах кристаллов с ячейками I - и F -типов не «погасают», а отсутствуют, так как в обратной ячейке не существуют соответствующие им узлы. В этом случае следует говорить не о ячейке в обратной решетке, а о суперъячейке. Очевидно, что для подтверждения данного вывода в кристаллах указанных типов необходимо построить P -ячейку (ее параметры определяются с учетом квадратичной формулы $\frac{1}{d^2}(HKL)$, где HKL – индексы узлов при выборе P -ячейки) и записать квадратичную формулу для центрированных ячеек. Взяв одинаковые $d_{I, F, C}$ и d_P , можно определить связи между индексами HKL и hkl . Далее необходимо задать последовательно числовые значения индексам HKL , а затем определить значения индексов hkl . Показано, что при $HKL = \{100\}$ невозможно получить индексы hkl того же типа. Метод, основанный на использовании квадратичной формулы, позволяет получить индексы кристаллографического кластера, т. е. узлов с одинаковыми $|\vec{r}^*|^2$.

Способ, основанный на применении метрических тензоров, позволяет найти аналоги индексов HKL в решетке с учетом типа ячейки Браве. Однако может оказаться, что при таком переходе узел (HKL) не гомологичен узлу (hkl), именно поэтому были рассмотрены оба метода.

При выборе ячеек I -, F - и C -типов в обратной решетке возникает суперъячейка с параметрами $\vec{a}^* = \frac{2\vec{a}}{a^2}$, $\vec{b}^* = \frac{2\vec{b}}{b^2}$, $\vec{c}^* = \frac{2\vec{c}}{c^2}$ (для C -ячейки $\vec{a}^* = \frac{2\vec{a}}{a^2}$, $\vec{b}^* = \frac{2\vec{b}}{b^2}$, $\vec{c}^* = \vec{c}$). В суперъячейке обратной решетки могут находиться другие узлы. Например, в суперъячейке для F -ячейки прямой решетки будет находиться узел (111), для I -ячейки – узлы (110), (101), (011), для C -ячейки – узел (110). Положение этих узлов формально соответствует условию (4). Но фактически говорить о том, что они есть, только их «вес» ($F(hkl)$) равен нулю, нельзя. При квантово-механических расчетах, например с учетом оператора трансляции, вопрос о том, какой волновой вектор надо брать для построения волновой функции $\exp \pi i \vec{k} \vec{a}$, требует дополнительного анализа. Если в ячейке кристалла находятся два и более атома в одинаковых структурно-химических позициях (гомологичных), то отдельные рефлексы будут «погасать», так как соответствующие им узлы в обратной решетке отсутствуют. Необходим переход к суперъячейке. Для определения наличия того или иного узла в обратной решетке выполняется переход к P -ячейке. Однако это не всегда возможно. Например, в ГПУ-ячейке, созданной на основе двухслойной плотнейшей упаковки, примитивная ячейка с периодом, равным диаметру атома, и $\alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$ таковой не является [8]. Если два ребра лежат в плоскости плотнейшей упаковки, то для них выполняется двухмерная трансляционная симметрия. Для третьей оси трансляция отсутствует. В ГПУ-системе $\vec{c}^* = \frac{2}{c}$, $\vec{a}^* = \vec{b}^* = \frac{1}{a}$. Параметры $a = b = d$ (диаметр шара), параметр c^* равен удвоенной высоте тетраэдра. Следовательно, узлы (00 l) при нечетном l в обратной решетке отсутствуют.

В алмазе и лонсдейлите кратчайшее расстояние соответствует расстоянию от центра тетраэдра до его вершины. Построить на таких векторах решетку не представляется возможным. Для ГПУ-систем

невозможно построить P -ячейку. В стандартной ячейке находятся два атома. Индексирование по принципу $(\vec{c}^* \cdot \vec{c}) = 1$ приведет к узлу (001). Но такого узла в обратной решетке нет. Суперъячейка имеет параметр c_s^* , который соответствует условию $(\vec{c}_s^* \cdot \vec{c}) = 2$. В ГПУ-системе $\vec{c}_s^* = \frac{2}{a}$. Период обратной суперъячейки алмаза в 4 раза больше, чем $a_i^* = \frac{1}{a_i}$ [9]. Построить P -ячейку алмаза с одним атомом углерода также невозможно. Отсюда следует, что выбор ячейки может повлиять на индексы узла, так как они зависят от параметров $\vec{a}_j^*$, определяемых значением $\vec{a}_j$, но не влияет на $\vec{r}_j^*$, т. е. на обратную решетку, которая является имманентным свойством решетки кристалла.

Заключение

В научной литературе можно встретить утверждения, что ячейка кристалла влияет на ее обратную решетку. Кроме того, из уравнения расчета структурной амплитуды следует, что для ячеек кристаллов с непримитивными ячейками Браве отдельные рефлексы на рентгеновских дифрактограммах не обнаруживаются. Так, для I -ячеек не обнаруживаются рефлексы с нечетной суммой индексов, для F -ячеек – рефлексы со смешанными индексами, для C -ячеек – рефлексы $h + k = 2n - 1$. Поскольку параметры обратной и прямой решеток ($\vec{a}_j^*$ и $\vec{a}_k$ соответственно) связаны условием (4), то при выборе ячейки по квадратичной формуле легко рассчитывается положение узлов (100), (010), (001) в обратной решетке, но в эксперименте данные узлы не обнаруживаются. Говорят, что они «погасают», потому что их «вес» (структурная амплитуда) равен нулю. На самом деле эти узлы отсутствуют в обратном пространстве, что видно из использования ячеек P -типа для центрированных обратных решеток. В данном исследовании для решеток с непримитивными ячейками Браве были взяты наименьшие некопланарные векторы, на которых строились P -ячейки.

Так как экспериментальное значение межплоскостного расстояния зависит от длины волны излучения и угла дифракции, являясь имманентной характеристикой кристалла, то оно одинаково при любом выборе ячейки конкретного кристалла. Отсюда однозначно следует вывод, что выбор ячейки не влияет на взаимоконфигурацию узлов обратной решетки, т. е. на модули $\vec{r}^*$, но кристаллографические индексы узлов обратной решетки зависят от выбора ячейки. На основе квадратичных формул для P -ячейки и непримитивных ячеек установлена связь между индексами узлов. Для I -ячеек $h^2 + k^2 + l^2 = 2(H^2 + K^2 + L^2 + HK - HL - KL)$, если $\vec{a} = \vec{r}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$, $\vec{b} = \vec{r}\left(-\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$, $\vec{c} = \vec{r}\left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$. Для F -ячейки $h^2 + k^2 + l^2 = 3(H^2 + K^2 + L^2) - 2(HK + HL + KL)$, если $\vec{a} = \vec{r}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right)$, $\vec{b} = \vec{r}\left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$, $\vec{c} = \vec{r}\left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right)$. Однако этот метод позволяет найти только $\vec{r}^*$. Для перехода от индексов HKL непосредственно к отдельным индексам hkl разработан метод с использованием метрических тензоров $|M|$:

$$|h_j| = M_P^{-1} \cdot M |H_k| = |M_0|(H).$$

$$\text{Для } I\text{-ячейки } \begin{vmatrix} h \\ k \\ l \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix}, \text{ для } F\text{-ячейки } \begin{vmatrix} h \\ k \\ l \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \bar{1} \\ \bar{1} & 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix}, \text{ для } C\text{-ячейки } \begin{vmatrix} h \\ k \\ l \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} H \\ K \\ L \end{vmatrix}.$$

Однако этот метод требует доказательства, что индексы hkl и HKL действительно соответствуют одному и тому же $\vec{r}^*$. По этой причине необходимо сочетание двух разработанных методов. Из выполненного анализа следует, что никаких «погасаний» нет. При выборе ячейки непримитивного типа появляется межатомный вектор, по модулю меньший базисного вектора ячейки. В обратном пространстве узлы (100), (010), (001) исчезают. Результаты исследований могут представлять интерес для специалистов в области кристаллофизики.

Библиографические ссылки

1. Cao Guozhong, Wang Ying. *Nanostructures and nanomaterials: synthesis, properties, and applications*. 2nd edition. Singapore: World Scientific Publishing; 2011. XIII, 581 p. (World Scientific series in nanoscience and nanotechnology; volume 2).
2. Ladd M, Palmer R. *Structure determination by X-ray crystallography: analysis by X-rays and neutrons*. 5th edition. New York: Springer; 2013. XXXV, 756 p. DOI: 10.1007/978-1-4614-3954-7.

3. Вайнштейн БК. *Современная кристаллография. Том 1. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии*. Москва: Наука; 1979. 384 с.
4. Mitin VV, Sementsov DI, Vagidov NZ. *Quantum mechanics for nanostructures*. Cambridge: Cambridge University Press; 2010. XV, 431 p.
5. Лиопо ВА. *Матричная кристаллография*. Гродно: Гродненский государственный университет имени Янки Купалы; 1998. 78 с.
6. Glazer AM. *Crystallography: a very short introduction*. Oxford: Oxford University Press; 2016. 168 p.
7. Лиопо ВА, Овчинников ЕВ, Ситкевич ФА, Секержицкий СС, Лявшук ИА. Суперъячейка обратной решетки кристаллов. *Вестник Брэсцкага ўніверсітэта. Серыя 4. Фізіка. Матэматыка*. 2017;2:47–57.
8. Лиопо ВА, Лявшук ИА, Секержицкий СС, Сабуть АВ. Плотнейшая двухслойная шаровая упаковка – модель ГПУ. *Вестник Брэсцкага ўніверсітэта. Серыя 4. Фізіка. Матэматыка*. 2021;1:5–13.
9. Liopo V, Liaushuk I, Auchynnikau Y, Sabutz A, Sarokin V, Yankov E. Analysis of the point group of diamond crystal. *Industry 4.0*. 2018;3(6):319–322.

References

1. Cao Guozhong, Wang Ying. *Nanostructures and nanomaterials: synthesis, properties, and applications*. 2nd edition. Singapore: World Scientific Publishing; 2011. XIII, 581 p. (World Scientific series in nanoscience and nanotechnology; volume 2).
2. Ladd M, Palmer R. *Structure determination by X-ray crystallography: analysis by X-rays and neutrons*. 5th edition. New York: Springer; 2013. XXXV, 756 p. DOI: 10.1007/978-1-4614-3954-7.
3. Vainshtein BK. *Sovremennaya kristallografiya. Tom 1. Simmetriya kristallov. Metody strukturnoi kristallografii* [Modern crystallography. Volume 1. Symmetry of crystals. Methods of structural crystallography]. Moscow: Nauka; 1979. 384 p. Russian.
4. Mitin VV, Sementsov DI, Vagidov NZ. *Quantum mechanics for nanostructures*. Cambridge: Cambridge University Press; 2010. XV, 431 p.
5. Liopo VA. *Matrichnaya kristallografiya* [Matrix crystallography]. Grodno: Yanka Kupala State University of Grodno; 1998. 78 p. Russian.
6. Glazer AM. *Crystallography: a very short introduction*. Oxford: Oxford University Press; 2016. 168 p.
7. Liopo VA, Auchynnikau YV, Sitkevich FA, Sekerzhitsky SS, Liaushuk IA. Super cell of the reciprocal lattice of crystals. *Vesnik of Brest University. Series 4. Physics. Mathematics*. 2017;2:47–57. Russian.
8. Liopo VA, Liaushuk IA, Sekerzhitsky SS, Sabutz AV. Dense two-layer ball packaging – HDP model. *Vesnik of Brest University. Series 4. Physics. Mathematics*. 2021;1:5–13. Russian.
9. Liopo V, Liaushuk I, Auchynnikau Y, Sabutz A, Sarokin V, Yankov E. Analysis of the point group of diamond crystal. *Industry 4.0*. 2018;3(6):319–322.

Получена 03.08.2022 / исправлена 29.08.2022 / принята 29.08.2022.
Received 03.08.2022 / revised 29.08.2022 / accepted 29.08.2022.