Доклады Академии Наук СССР
1947. Том LVIII, № 3

МИНЕРАЛОГИЯ

Член-корреспондент АН СССР Н. В. БЕЛОВ

ЧЕТВЕРТЫЙ ИНДЕКС В ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИСТЕМЕ

Четвертый индекс не является специфической особенностью гексагональной системы, но лишь таким методом решения обычных геометрических и кристаллографических задач, который значительно эти решения упрощает. Этот метод, обусловленный высокой симметрией гексагональных фигур, до некоторой степени аналогичен методу лишних параметров в анализе (способы Лагранжа) и потому не должен фигурировать в окончательном решении задачи.

Даны индексы hkl некоторой грани (плоскости) в гексагональной кристаллографической системе координат, т. е. при угле 120° между осями x и y и равных масштабах вдоль обеих; требуется найти индексы двух других граней, которые существуют в фигуре за счет тройной оси, перпендикулярной к x и y в точке их пересечения.

Общий аналитический метод — это поворот координатных осей на углы $\pm\alpha$, в данном частном случае на $\pm 120°$. Кристаллограф, используя симметрию фигуры, решает эту задачу, вводя четвертую ось—третью горизонтальную (u). Рассматривая ее как третью симметрическую по отношению к x, y, мы пишем индексы исходной грани $hkil$ и двух симметричных $ihkl$ и $kihl$. Для всяких расчетов (геометрические задачи, вычисление зон и т. д.) четвертая ось и четвертый индекс излишни, и мы избавляемся от него с помощью теоремы, констатирующей равенство нулю суммы трех первых индексов. И тогда окончательным решением задачи нахождения трех плоскостей, связанных тройной осью, будет: hkl; $-(h+k)$, h, l и $k, -(h+k), l$. Только эти тройки индексов нужны для всех аналитических и кристаллографических вычислений.

Это достаточно элементарная и известная вещь, пока дело касается индексов граней. Когда же мы переходим к индексам ребер (координатам точек), то встречаемся с необычайным запутыванием вопроса, определяющимся стремлением рассматривать четвертый индекс как нечто самодовлеющее (ср. наиболее подробную и все же запутанную разработку этого вопроса в курсе Доливо-Добровольского ([1]) или в последней статье Доннея ([2])), а не как прием решения конкретной геометрической задачи.

Даны координаты некоторой точки (индексы ребра) mnp (в гексагональной системе) и требуется найти координаты (индексы) двух аналогичных точек (ребер), связанных с исходной тройной осью симметрии. Вводим (для решения задачи) четвертую ось u. Очевидно (рис. 1), соответствующая координата нашей точки будет нулем и координаты (индексы) всех трех точек будут $mn0p$, $0mnp$ и $n0mp$. Однако теорема, которая позволяет нам избавиться от четвертой координаты (и индекса), сейчас будет другая, а именно: при трехкоординатном изображении точки в плоскости (с тройной симметрией) мы имеем право ко всем координатам прибавить одинаковые отрезки, не изменяя положения точки, как то явствует из рис. 1. На основании этой теоремы четвертый („лишний“ в окончательном ответе) индекс ребра всегда может быть сведен к нулю и даже вычеркнут. Для второй точки это достигается прибавлением ко всем (горизонтальным) координатам по $-n$, для третьей по $-m$. Полное решение задачи таким образом будет:

1. $mn0p$; $mn0p$; mnp.
2. $0mnp$; $-n, m-n, 0, p$; $-n, m-n, p$.
3. $n0mp$; $n-m, -m, 0, p$; $n-m, -m, p$.

Только тройки индексов, стоящие в последнем столбце, нужны для решения всех геометрических и кристаллографических задач, и только эти индексы приводятся в известных таблицах Wyckoff'a и в „Интернациональных таблицах для определения кристаллических структур“.

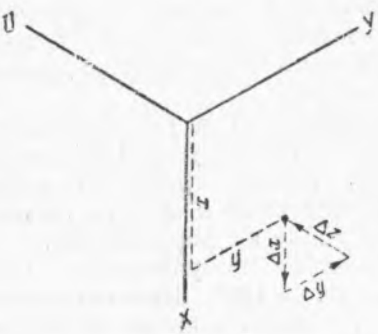

Рис. 1

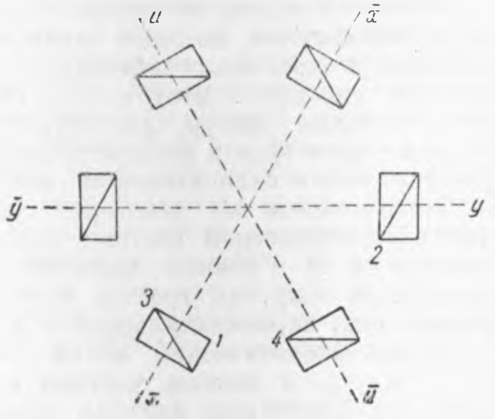

Рис. 2

В курсах кристаллографии нередко даются рецепты по такому преобразованию индексов ребер (точек), которое сделало бы сумму первых трех равной нулю. Это преобразование легко выполнить, используя только что приведенную теорему. В самом деле, если в четырехкоординатном символе $mn0p$ к каждой из первых трех координат прибавить по $-\frac{m+n}{3}$, то положение точки не изменится и будет достигнут требуемый результат. Этот результат, быть может, имеет эстетическое значение, но такие четыре координаты неработоспособны, не могут быть вставлены в обычные формулы кристаллографических вычислений, и методика обратного от них отхода в указанных курсах легко вызовет недоумение читателя.

Покажем применение четвертого индекса точки (ребра) к решению часто встречающихся в структурном анализе задач. На рис. 2 приведено расположение тетраэдров BeO_4 в гексагональной структуре берилла. Координаты точки 1 заданы: mnp. Найти координаты прочих аналогичных точек.

Проще всего найдутся они для точки 2, а именно nmp. Чтобы найти координаты точки 3 замечаем, что 1 и 3 симметричны относительно оси x, и для точки 1 сводим координату x к 0, а именно $mn0p$, $0, n-m, -m, p$. Теперь пишем координаты точки 3 в четырехчленной формуле: $0, -m, n-m, p$ и в окончательном виде (сведя третий индекс к нулю): $m-n, n, 0, p$ или $m-n, n, p$. Координаты точки 4 получаются из симметрии x и $\bar{u}$ в отношении оси $y\bar{y}$:

(1) $mn0p$; $m-n$, 0, $-n, p$; (4) n, 0, $n-m, p$ и окончательно (4) $m, m-n$, 0, p и т. д.

Во всех случаях четвертый индекс, выполнив свою служебную роль, исчезает в окончательном ответе.

Этот же метод может быть применен и для решения задач в тех случаях, когда симметрия тетрагональная или гексагональная с шестерной осью, с использованием федоровской идеи о введении такого числа горизонтальных координатных осей, какое отвечает симметрии вертикальной оси. Таким образом, в случае четверной оси координаты исходной точки вместо mnp будут: 1) $mn00p$ и для симметричных: 2) $0mn0p$, 3) $00mnp$, 4) $n00mp$. В окончательном ответе от „лишних“ индексов избавляемся при помощи очевидного свойства усложненных символов: не изменяя положения точек, всегда можно прибавлять одинаковые количества к первому индексу и к третьему и точно так же ко второму и четвертому. Окончательный результат: 1) mnp, 2) $-n, m, p$, 3) $-m, -n, p$ и 4) $n, -m, p$.

Аналогично решаются задачи в случае шестерной оси, хотя проще их решать, оперируя с тройной осью и далее с двойной.

Приводим соответствующую схему:

$mn0000p$	mnp	
$0mn000p$	$-n, m-n, p$	
$00mn00p$	$-n, 0, m, 0, 0, p$	$-m-n, -m, p$
$000mn0p$	$-m, -n, 0, 0, 0, 0, p$	$-m, -n, p$
$0000mnp$	$0, -m, -n, 0, 0, 0, p$	$n, n-m, p$
$n0000mp$	$n, 0, -m, 0, 0, 0, p$	$m-n, m, p$.

Институт кристаллографии
Академии Наук СССР

Поступило
22 VIII 1947

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] В. В. Доливо-Добровольский, Курс кристаллографии, Л., 1937, 268—270. [2] J. D. H. Donnay, Am. Mineral., 32, 52 (1947).