
FIZYKA MATERII SKONDENSOWANEJ

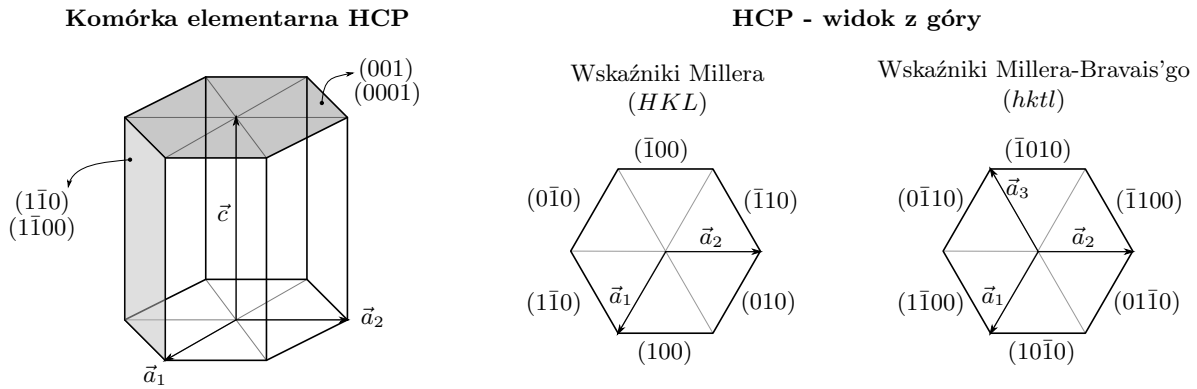
Wskaźniki Millera-Bravais'go dla struktury HCP

28 marca 2018

Kierunki krystalograficzne oraz oznaczenie płaszczyzn w strukturze heksagonalnej gęstego upakowania (HCP) wygodnie jest przedstawić w tzw. notacji czterowskaźnikowej zwanej również wskaźnikami Millera-Bravais'go. Wykorzystanie tej notacji ułatwia ocenę, które płaszczyzny lub kierunki należą do tej samej rodziny (są równoznaczne w strukturze HCP).

Oznaczenie płaszczyzn krystalograficznych

Na rysunku 1 zaznaczono w komórce elementarnej HCP podstawowe wektory translacji \vec{a}_1 , \vec{a}_2 oraz \vec{c} . Wektory \vec{a}_1 oraz \vec{a}_2 leżą na tej samej płaszczyźnie natomiast kąt między nimi wynosi 120° . Dla ustalenia uwagi w komórce elementarnej zaznaczono płaszczyzny o wskaźnikach Millera (001) oraz (1 $\bar{1}$ 0). W celu lepszej przejrzystości te, oraz inne ściany zostały podpisane na środkowym schemacie, który przedstawia widok z góry na komórkę HCP. Można łatwo zauważyć, że mimo, że wszystkie ściany charakteryzują się tą samą symetrią to ich wskaźniki (H oraz K) są złożone z permutacji liczb 1, 0 lub -1 , 1. Z tego powodu trudno dostrzec ich podobieństwo.



Rysunek 1: Oznaczenie płaszczyzn w notacji Millera oraz Millera-Bravais'go dla struktury HCP.

Dla podkreślenia symetrii struktury można wprowadzić dodatkowy wektor translacji $\vec{a}_3 = -(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$. Wówczas pojawi się dodatkowy wskaźnik t , którego wartość wyznaczymy z relacji $t = -(H + K)$. Zastosowanie notacji czterowskaźnikowej ułatwia dostrzeżenie podobieństwa między poszczególnymi płaszczyznami. Widzimy, że w powyższym przypadku (prawy schemat na rys. 1) wszystkie ściany są opisane przez permutację liczb: 1, -1 , 0 (mowa jest o pierwszych trzech liczbach: h , k , t).

Przejęcie z notacji trójwskaźnikowej (HKL) do notacji czterowskaźnikowej ($hkil$) można wykonać przy pomocy poniższych wzorów:

$$h = H \tag{1}$$

$$k = K \tag{2}$$

$$t = -(H + K) \tag{3}$$

$$l = L \tag{4}$$

Przykład. Dla płaszczyzny (100) mamy:

$$(100) \rightarrow (1, 0, -(1+0), 0) \rightarrow (10\bar{1}0). \tag{5}$$

Oznaczenie kierunków krystalograficznych

Opis kierunków krystalograficznych przy pomocy notacji Millera-Bravais'go jest nieco bardziej złożony. W celu zamiany wskaźników $[UVH]$ na notację Millera-Bravais'go $[uvw]$ należy zastosować poniższe relacje:

$$u = \frac{1}{3}(2U - V) \quad (6)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U) \quad (7)$$

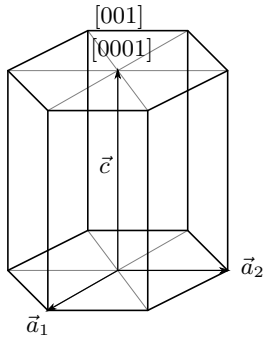
$$t = -\frac{1}{3}(V + U) \quad (8)$$

$$w = W \quad (9)$$

Jeśli w wyniku obliczeń wartości u , v oraz t uzyskamy wartości ułamkowe to należy pomnożyć wszystkie wskaźniki przez możliwie małą liczbę całkowitą.

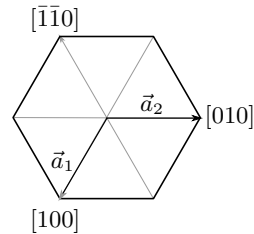
Rysunek 2 przedstawia przykładowe kierunki wzdłuż wektorów prostych zapisane przy pomocy obu notacji.

Komórka elementarna HCP

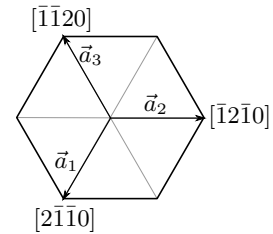


HCP - widok z góry

Wskaźniki Millera
[UVW]



Wskaźniki Millera-Bravais'go
[uvw]



Rysunek 2: Oznaczenie kierunków w notacji Millera oraz Millera-Bravais'go dla struktury HCP.

Przykład. Dla kierunku wzdłuż wektora \vec{a}_1 oznaczonego przez wskaźniki Millera jako $[100]$ dokonujemy następujących przeliczeń:

$$[100] \rightarrow \left[\left(\frac{1}{3}(2 - 0) \right), \left(\frac{1}{3}(0 - 1) \right), \left(-\frac{1}{3}(1 + 0) \right), 0 \right] \rightarrow \left[\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 0 \right] \rightarrow [2\bar{1}\bar{1}0] \quad (10)$$