

КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

А.С. Храмов, Р.А. Назипов

Рентгеноструктурный анализ поликристаллов

Часть V.

Краткий терминологический словарь.

(Учебно-методическое пособие)

КАЗАНЬ 2009

Составители: Храмов А.С., Назипов Р.А.

УДК 539.26:543

Печатается по решению Редакционно-издательского совета физического факультета

Храмов А.С., Назипов Р.А. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов. Часть V. Краткий терминологический словарь. Учебно-методическое пособие для студентов физического факультета. Казань. 2009.- с. 72: ил.

Методическое пособие предназначено для студентов физического факультета при изучении курса кристаллографии и рентгеноструктурного анализа. Может быть рекомендовано для студентов физического, геологического и химического факультетов, специализирующихся в области физики конденсированных сред, минералогии и химии твердого тела.

Табл. 6, илл. 13.

Рецензент: Манапов Р.А., к. ф.-м. н., доцент кафедры технической физики КГТУ (КАИ).

© Физический факультет Казанского государственного университета, 2009

Оглавление

Предварительные замечания.....	4
Список используемых сокращений.....	4
А.....	5
Б.....	9
В.....	10
Г.....	11
Д.....	13
Ж.....	15
З.....	16
И.....	17
К.....	19
Л.....	27
М.....	27
Н.....	32
О.....	35
П.....	37
Р.....	46
С.....	51
Т.....	60
У.....	61
Ф.....	63
Х.....	65
Ц.....	66
Ч.....	66
Ш.....	66
Э.....	67
Я.....	69
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	70

Предварительные замечания

Настоящий словарь предназначен студентам, изучающим основы структурной кристаллографии и рентгеноструктурного анализа, и подготовлен на основе материалов курсов лекций «Кристаллография и рентгеноструктурный анализ» и «Дифракционные методы исследования кристаллов».

Необходимость издания такого пособия связана с тем, что в рамках времени отведенного на изучение рентгеноструктурного анализа (лекции и лабораторный практикум) нет возможностей полностью объяснить смысл многочисленных терминов, используемых при обсуждении деталей структурной, физической и химической кристаллографии. Кроме того, иногда в одно и то же понятие авторами вкладывается различный смысл. Поэтому мы сочли возможным создать краткий словарь терминов и понятий, чаще всего встречающихся в литературе по структуре кристаллов в их классической интерпретации.

Словарь содержит определения и разъяснения более 300 понятий вышеназванных дисциплин, а также некоторые термины из смежных с ними разделов математики и физики.

Словарь охватывает следующие основные темы: методы исследования и описания кристаллов и их строения; точечные и пространственные группы симметрии; симметрия и геометрические характеристики кристаллов; основные законы структурной кристаллографии; связи симметрии и кристаллической структуры с составом и физическими свойствами кристаллов.

Термины расположены в алфавитном порядке. Для понятий, включающих в себя несколько слов, приводятся несколько вариантов, которые отсылают к одному и тому же комментарию. В тексте курсивом выделены термины, которым в словаре посвящена отдельная статья. Кроме того, в некоторых местах делается отсылка к лабораторным работам по рентгеноструктурному анализу поликристаллов, в которых используется и объясняется этот термин.

Данное пособие не может претендовать на исчерпывающее и полное толкование всех понятий, используемых в кристаллографии и рентгеноструктурном анализе. Поэтому, для желающих получить более углубленное представление об этих научных дисциплинах в конце пособия приведен список литературы, который использовался при подготовке «Краткого терминологического словаря», и где дается подробное изложение теории и практики кристаллографии и рентгеноструктурного анализа.

Список используемых сокращений

- ГПУ – гексагональная плотнейшая упаковка;
- ГЦК – гранецентрированная кубическая;
- КПУ – кубическая плотнейшая упаковка;
- КЧ – координационное число;
- КП – координационный полиэдр;
- ОЦК – объемноцентрированная кубическая;

ПГС – пространственная группа симметрии;
 ПСТ – правильная система точек;
 ПШУ – плотнейшая шаровая упаковка;
 РСА – рентгеноструктурный анализ;
 РТ – рентгеновская трубка;
 РФА – рентгенофазовый анализ;
 СТ – структурный тип;
 ТГС – точечная группа симметрии;
 ЭЯ – элементарная ячейка;
 a, b, c (a_1, a_2, a_3) – длины осей координат или периодов элементарной ячейки;
 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$) – базисные вектора системы координат или элементарной ячейки;
 b_1, b_2, b_3 – линейные параметры обратной решетки;
 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ – базисные вектора обратной решетки;
 d_{hkl} – межплоскостное расстояние в семействе узловых плоскостей (hkl);
 h, k, l – индексы Миллера плоскостей в кристаллической (пространственной) решетке;
 x, y, z – относительные координаты узла (атома) в элементарной ячейке;
 α, β, γ ($\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$) – углы между базисными векторами кристаллической решетки;
 $\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ ($\alpha_1^*, \alpha_2^*, \alpha_3^*$) – углы между базисными векторами обратной решетки;
 λ – длина волны рентгеновского излучения;
 μ – линейный коэффициент поглощения;
 μ_p – массовый коэффициент поглощения;
 θ – дифракционный угол рассеяния рентгеновского излучения.

А

АДДИТИВНОСТЬ АТОМНЫХ РАДИУСОВ. Свойство *атомных радиусов* воспроизводить при их суммировании длину *межатомной связи*. Основано на приблизительном постоянстве длины связи для данных КЧ и порядка связи независимо от ближайшего окружения и состава вещества. Это позволяет представлять атомы в кристалле в виде касающихся сфер. Эмпирические значения атомных радиусов позволяют оценить реальные длины связей с точностью 0,05-0,1 Å.

АКСИАЛЬНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ. ТГС, имеющие *элементы симметрии* высшего порядка одного типа. К аксиальным ТГС можно отнести все группы (всего 27), кроме ТГС *кубической сингонии*.

АЛЛОТРОПИЯ. Существование простых веществ, состоящих из атомов одного сорта, в разных кристаллических формах или молекулярных конфигурациях. В более узком смысле под аллотропией понимают *полиморфизм* про-

стых веществ. Наиболее известные примеры аллотропии — углерод (алмаз, графит, карбин, фуллерен и др.), серое и белое олово, кислород O_2 и озон O_3 .

АМОРФНОЕ ТЕЛО. Однородная конденсированная среда, находящаяся в метастабильном состоянии и характеризующаяся наличием *ближнего*, и отсутствием *дальнего порядка*. Ближний порядок в аморфных телах можно изучать спектроскопических или с помощью дифракционных методов, позволяющих построить функцию радиального распределения атомов, интервалы между максимумами которой отвечают межатомным расстояниям, а площадь пиков — среднему числу атомов на соответствующем расстоянии от данного атома. Для аморфных тел характерны *изотропия* свойств и отсутствие определенной точки плавления. Аморфные тела могут быть получены затвердеванием жидкостей или осаждением из газов и растворов в неравновесных условиях (быстрое охлаждение, закалка, высушивание и др.), облучением и пластической деформацией кристаллических веществ и т.д. В аморфное состояние могут быть переведены многие вещества с выраженной ковалентностью связи (кремний, SiO_2 , As_2Se_3 и др.), полимеры и некоторые металлы.

АНГСТРЕМ. Внесистемная единица измерения межатомных расстояний: $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м} = 0,1 \text{ нм}$.

АНИЗОТРОПИЯ. Различие свойств объекта в разных направлениях. Естественная анизотропия — характерная особенность кристаллов и некоторых органических жидкостей (жидких кристаллов).

АНИЗОТРОПНЫЕ И СКАЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА. Физические свойства, зависящие (анизотропные) и не зависящие (скалярные) от направления и симметрии кристалла. Скалярные свойства одинаковы в любом направлении кристалла (*изотропия* свойств), анизотропные — только в симметрически эквивалентных направлениях. Скалярные свойства (величины) сферически симметричны и описываются одним числом. Анизотропные свойства описывают тремя компонентами вектора (векторные свойства) или большим числом величин (тензорные свойства). Симметрия векторных свойств совпадает с симметрией конуса, симметрия тензорных свойств описывается более сложными фигурами — эллипсоидами и др. К скалярным свойствам относятся плотность, теплоемкость и др., к векторным — твердость, пироэффект и др., к тензорным — электропроводность, пьезоэффект и др.

АНОМАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ. Эффект изменения *атомного фактора рассеяния* (сдвиг его амплитуды и фазы) при длинах волн, близких к краю поглощения атома. Этот эффект более ярко выражен для тяжелых атомов. Используется для решения *фазовой проблемы*.

АНОМАЛЬНЫЙ ИЗОМОРФИЗМ. Замещение *модулей* (блоков, цепей, слоев) *модулярной структуры* на другие, аналогичные по форме и размерам, модули. В отличие от обычного изоморфного замещения, где замещаемыми частицами являются атомы, ионы или небольшие конечные атомные группы (сложные ионы, комплексы, молекулы), при аномальном изоморфизме замещаются более протяженные группировки. В зависимости от протяженности таких группировок и их взаимного расположения аномальное замещение мо-

жет носить одномерный (смешанноцепность), двумерный (смешаннослойность) и трехмерный характер (смешанноблочность). Наиболее известным проявлением аномального изоморфизма являются смешаннослойные силикаты (прежде всего глинистые), образованные за счет взаимного переслаивания пакетов отдельных минералов с различным содержанием и степенью их упорядочения, например — тальк-монтмориллонит, хлорит-вермикулит и др.

АНТИКУБ. Тетрагональная *антипризма* – многогранник из 2 квадратов и 8 равнобедренных треугольников, в котором параллельные квадратные грани повернуты на 45° относительно друг друга (рис. 1б). Симметрия правильного антикуба - D_{4d} . Свернутыми кубами называют также аналогичные полиэдры с отличными от 45° углами разворота оснований (симметрия D_4 , они хиральны) или с гранями произвольной формы.

АНТИКУБООКТАЭДР – см. *кубооктаэдр*.

АНТИПРИЗМЫ. Полуправильные многогранники, у которых две параллельные правильные n -угольные грани расположены так, что вершины одной находятся против середин сторон другой (угол поворота такой грани относительно противоположной $360^\circ/2n$); остальные $2n$ граней – правильные треугольники (рис. 1). Симметрия правильной n -угольной антипризмы D_{nd} . Антипризмами называют также аналогичные *полиэдры* с отличными от $360^\circ/2n$ углами разворота оснований (симметрия D_n) или с гранями произвольной формы.

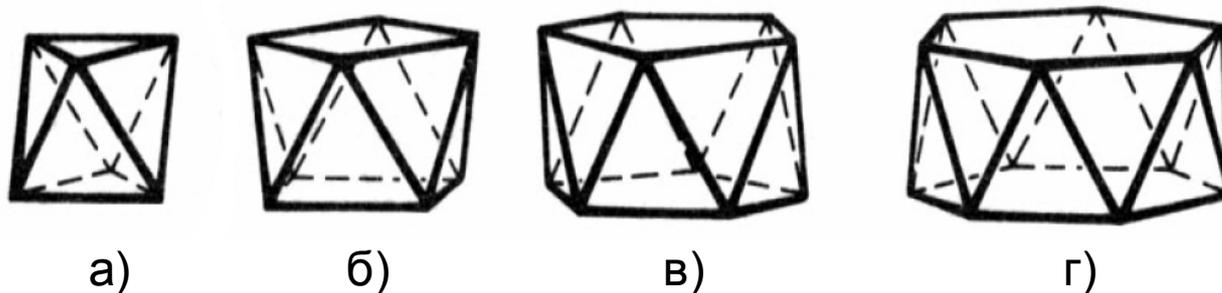


Рис. 1. Антипризмы: а) – тригональная (октаэдр); б) – тетрагональная; в) – пентагональная; г) – гексагональная.

АНТИСИММЕТРИЯ. Расширение понятия обычной симметрии путем добавления операций антисимметрии, сочетающих преобразование симметрии с изменением какого-либо свойства части симметричной фигуры (узла) на противоположное ему (плюс — минус, белое — черное и др.). В *интернациональной системе обозначений* операции антисимметрии снабжены штрихами ($2'$, m' , $1'$ и т. д.). Существует 90 точечных групп и 1421 пространственных групп антисимметрии (они включают в себя 32 ТГС и 230 ПГС). Группы антисимметрии используют для описания *двойникования, магнитной симметрии и магнитной структуры* (рис. 2).

АСИММЕТРИЧЕСКАЯ ЕДИНИЦА ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ – см. *независимая часть ячейки*.

АСИММОРФНАЯ ГРУППА. *Пространственная группа симметрии, в которой не сохранен комплекс поворотных осей сходственной ТГС. В таких ПГС (всего их 103) симметрия положения частных позиций всегда ниже симметрии сходственной ТГС, а в ряде случаев (при наличии только открытых элементов симметрии) частные позиции могут вовсе отсутствовать. Примеры асимморфных групп: $P2_1/m$, $Pbcn$, $I4_132$.*

АТОМ БАЗИСНЫЙ – см. *базисный атом.*

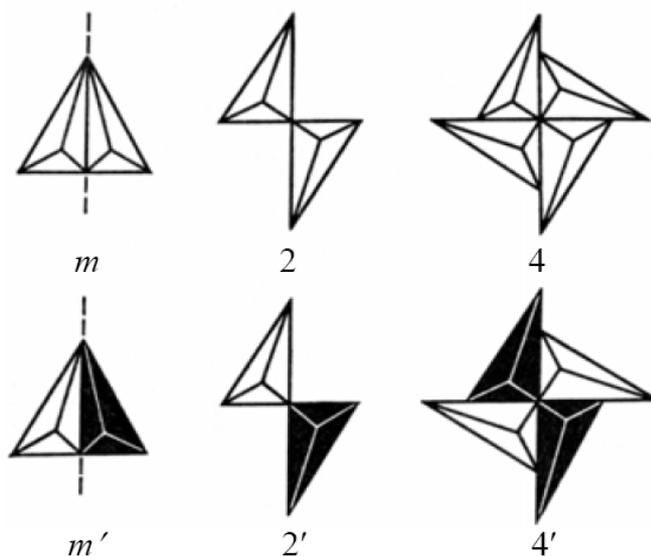


Рис. 2. Сравнение операций симметрии m , 2 , 4 (верхняя строка) и антисимметрии m' , $2'$, $4'$ (нижняя строка).

АТОМНЫЕ ПАРАМЕТРЫ. Числа, описывающие положения *базисных атомов* в ячейке Бравэ, степени их заселенности и величины тепловых колебаний. Координаты атомов измеряются в системе координат, оси которой параллельны осям ЭЯ, а численные значения соответствуют долям линейных параметров ячейки. Степень заселенности позиции указывается долей заполнения данной ПСТ одним из сортов атомов, входящих в структуру. Изотропные тепловые колебания атомов определяются одним параметром, анизотропные в общем случае – шестью параметрами.

АТОМНЫЙ РАДИУС. Эмпирические значения размеров атома в молекулах и кристаллах, представляемого в виде сферы. В зависимости от типа химической связи различают: ван-дер-ваальсовы радиусы, ионные радиусы, ковалентные радиусы, металлические радиусы.

АТОМНЫЙ ФАКТОР РАССЕЯНИЯ. Величина, характеризующая способность отдельного атома или иона когерентно рассеивать рентгеновское излучение, электроны или нейтроны. Атомный фактор представляет собой амплитуду излучения, рассеянного всеми точками атома в определенном направлении, для рентгеновского излучения — это отношение амплитуды рассеяния всех электронов атома к амплитуде рассеяния одного электрона. Он монотонно уменьшается с увеличением угла рассеяния θ , если длина волны излучения λ одного порядка с размерами атома. Абсолютная ве-

личина атомного фактора зависит от степени взаимодействия излучения с центрами рассеяния в веществе: для рентгеновского излучения – электроны, для электронов — электростатический потенциал атома, для нейтронов — ядра и магнитные моменты атомов или ионов. Амплитуда атомного рассеяния рентгеновского излучения пропорциональна числу электронов в атоме, а для дифракции электронов и нейтронов такой зависимости нет, что используют для определения положений атомов с близкими атомными номерами и легких атомов в присутствии тяжелых.

Б

БАЗИС. 1). Три некопланарных вектора, выбранных в качестве единичных векторов координатной системы. 2). Три кратчайших некопланарных (реперных) вектора кристаллической решетки. 3). Совокупность координат *базисных атомов*, полностью определяющих кристаллическую структуру.

БАЗИСНАЯ ГРАНЬ. 1). Грань ячейки решетки, которая перпендикулярна направлению элемента наивысшей симметрии (*моноклинная и средние сингонии*). 2). Любая из граней *bc*, *ac*, *ab* ЭЯ, описываемых символами (100), (010) и (001) соответственно. 3). Горизонтальная грань ячейки (обычно грань *ab*).

БАЗИСНАЯ ТОЧКА. Один из узлов правильной системы точек, выбранный как начальный для получения координат всех остальных узлов путем размножения базисной точки всеми операциями *группы симметрии*. Координаты узлов правильной системы точек выводятся из координат базисной точки с помощью матриц *операций симметрии*.

БАЗИСНЫЙ АТОМ. Атом, положение которого выбрано в качестве *базисной точки* для получения координат всех остальных симметрически эквивалентных ему атомов посредством операций группы симметрии данной молекулы или кристаллической структуры.

БАЗОЦЕНТРИРОВАННАЯ РЕШЕТКА. *Решетка Бравэ, ячейкой Бравэ* которой является *базоцентрированная ячейка*.

БАЗОЦЕНТРИРОВАННАЯ ЯЧЕЙКА. *Центрированная ЭЯ*, содержащая два узла. В базоцентрированной ячейке узлы расположены в вершинах параллелепипеда и центрах *базисных граней ab*. Базоцентрированная ячейка Бравэ обозначается символом С.

БАЗЫ ДАННЫХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ – см. *кристаллографические базы данных*.

БЕЛОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. – см. лабораторную работу №1.

БЛИЖНИЙ И ДАЛЬНИЙ ПОРЯДОК. Регулярное по расстояниям, ориентации и окружению расположение частиц вещества (атомов, ионов, молекул) в пространстве. Регулярность положения частиц в межатомных масштабах (1-10 Å) называют ближним порядком, а регулярность на неограниченно больших расстояниях – дальним порядком. Наличие ближнего и дальнего по-

рядка обусловлено взаимодействием между частицами: чем оно сильнее, тем более выражен порядок. В газе ближний и дальний порядок отсутствуют, в жидкостях и аморфных телах есть только ближний порядок, в кристаллах присутствуют оба вида порядка. В последнем случае основным признаком дальнего порядка является *трансляционная симметрия*. В *квазикристаллах* присутствует некристаллографический (нетрансляционный) дальний порядок. В *жидких кристаллах* дальний порядок наблюдается только во взаимном согласовании ориентации молекул. Дальний порядок может присутствовать и в ориентации электрических диполей (сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики) и магнитных моментов (магнитное упорядочение).

БЛОЧНАЯ СТРУКТУРА. 1). *Модулярная структура*, состоящая из конечных блоков. 2). Структура, возникшая в результате двух разных *кристаллографических сдвигов*, которую можно представить совокупностью параллельно расположенных одинаковых блоков (модулей). 3). Синоним *мозаичной структуры*.

БОКОЦЕНТРИРОВАННАЯ РЕШЕТКА. *Решетка Бравэ, ячейкой Бравэ* которой является *бокоцентрированная ячейка*.

БОКОЦЕНТРИРОВАННАЯ ЯЧЕЙКА. *Центрированная ЭЯ*, содержащая два узла. В бокоцентрированной ячейке узлы расположены в вершинах параллелепипеда и центрах граней *ac* или *bc*. Бокоцентрированная ячейка Бравэ обозначается символами *B* или *A*, соответственно. Обе разновидности эквивалентны *базоцентрированной ячейке*, но отличаются «боковым» положением центрированных граней.

БРЭГГА-ВУЛЬФА УСЛОВИЕ – см. *условие Брэгга – Вульфа*.

В

ВАКАНСИЯ. 1). Отсутствие атомов или ионов в атомной позиции данного *структурного типа* или конкретной *кристаллической структуры*. Общепринятое обозначение вакансий — символ \square . 2). Точечный *дефект* в кристалле, обусловленный отсутствием атома (иона).

ВАЛЕНТНЫЙ УГОЛ. Угол между направлениями межатомных связей в молекулах и кристаллах.

ВЕКТОР ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ. Вектор, построенный на базисных векторах обратной решетки $\mathbf{H} = u\mathbf{b}_1 + v\mathbf{b}_2 + w\mathbf{b}_3$. Если, коэффициенты *u, v, w* равны индексам плоскости *h, k, l*, то такой вектор обратной решетки является нормалью к соответствующей плоскости.

ВЕКТОР ТРАНСЛЯЦИИ. Вектор, кратный по модулю периоду идентичности: $\mathbf{t} = \sum u_i \mathbf{a}_i$, где \mathbf{a}_i – некопланарные векторы, $|\mathbf{a}_i|$ — период идентичности, u_i – целые числа.

ВЕКТОРЫ РЕШЕТКИ (ЯЧЕЙКИ). Выбранная тройка *базисных векторов пространственной решетки*, определяющих *ячейку решетки*.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОПЕРАЦИЙ СИММЕТРИИ. Последовательное

выполнение двух и более *операций симметрии*. Результатом такого взаимодействия является *равнодействующая операция симметрии*, вид которой зависит от вида и порядка последовательности преобразований симметрии (или от взаимного расположения и порядка действия элементов симметрии). Матрица равнодействующего симметрического преобразования равна произведению матриц всех преобразований, поставленных справа налево в порядке их выполнения.

ВИД СИММЕТРИИ. Совокупность *закрытых элементов симметрии*, отвечающих *точечной группе симметрии*. В кристаллографии вид симметрии – наиболее часто используемый синоним *кристаллографического класса*.

ВИНТОВАЯ ОСЬ. *Открытый элемент симметрии* — прямая, вокруг которой осуществляется поворот на угол $360^\circ/n$ (n – порядок винтовой оси) и последующий сдвиг вдоль параллельной ей трансляции t на величину $\tau = (k/n)t$ ($1 \leq k \leq (n-1)$). В интернациональной системе обозначений винтовые оси обозначаются символом n_k . Винтовые оси высших порядков ($n = 3, 4, 6$) могут быть *энантиоморфными (правыми и левыми)*. Энантиоморфными являются оси 3_1 и 3_2 , 4_1 и 4_3 , 6_1 и 6_5 , 6_2 и 6_3 (правые оси указаны первыми), оси 4_2 и 6_3 *нейтральные*.

ВНЕДРЕНИЕ. Заполнение свободных позиций в кристалле атомами (ионами, молекулами) – процесс, обратный *вычитанию*. Может происходить с изменением валентного состояния атомов, с *изоморфным замещением* части атомов структуры или без таковых (гидратация). В более широком смысле внедрение – образование новой структуры, отличающейся от структуры - прототипа наличием дополнительных атомных позиций при сохранении исходного относительного расположения атомов.

ВУЛЬФА – БРЭГГА УСЛОВИЕ – см. *условие Брэгга – Вульфа*.

ВЫСШАЯ СИНГОНИЯ. Высшей сингонией (сингонией наивысшей симметрии) является *кубическая сингония*.

ВЫЧИТАНИЕ. Образование *вакансий* в кристалле за счет удаления атомов (ионов, молекул) – процесс, обратный *внедрению*. Может происходить с изменением валентного состояния атомов, с *изоморфным замещением* части атомов структуры или без таковых (обезвоживание). В более широком смысле вычитание – образование *дефектной структуры* на основе структуры - прототипа с полностью занятыми позициями при сохранении исходного относительного расположения атомов.

Г

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ СИНГОНИЯ – см. *сингония*.

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ УСТАНОВКА – см. *ромбоэдрическая ячейка*.

ГЕМИСИММОРФНАЯ ГРУППА. *Пространственная группа симметрии*, в которой сохранены поворотные оси сходственной ТГС. В таких ПГС (их всего 54) *симметрия положения* частных позиций всегда ниже симмет-

рии сходственной ТГС. Примеры гемисимморфных групп: Cc , $Ibam$, I^4c2 .

ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ. Раздел кристаллографии, занимающийся исследованием геометрии внешней формы и внутреннего строения кристаллов.

ГЕТЕРОДЕСМИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА. *Кристаллическая структура*, в которой атомы связаны химическими связями различного типа и (или) длины. Гетеродесмические структуры характерны для соединений сложного состава и структуры (более двух сортов атомов) с различными типами химических связей и в них можно выделить структурные фрагменты из наиболее прочно связанных атомов – *структурные единицы* кристалла, конфигурация и взаимное расположение которых определяет общую организацию структуры – *мотив структуры*.

ГЕТЕРОТИПИЯ. Принадлежность сравниваемых кристаллических структур к различным *структурным типам*.

ГОЛОЭДРИЧЕСКИЙ КЛАСС СИММЕТРИИ – см. *класс симметрии кристалла*.

ГОЛОЭДРИЯ. ТГС наивысшего порядка, возможная для данной сингонии, соответствующая ТГС ее *кристаллической решетки*.

ГОМЕОТИПИЯ. Сходство взаимного расположения атомов в сравниваемых *кристаллических структурах*, принадлежащих к разным *структурным типам*. Как правило, различия между гомеотипными структурами сводятся к небольшим нарушениям требований *изотипности*. Примеры гомеотипных структур: α -кварц и β -кварц, алмаз и сфалерит ZnS .

ГОМОДЕСМИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА. *Кристаллическая структура*, в которой все атомы связаны химическими связями одного типа (обычно близкой длины). Как правило, в таких кристаллах присутствуют симметрично эквивалентные атомы одного или двух сортов, составляющие *координационную структуру* (например, алмаз, $NaCl$, SiO_2).

ГОМОЛОГИЧЕСКИЙ РЯД. Последовательность родственных по строению молекул или кристаллов, каждая из которых отличается от предыдущей величиной однотипного структурного фрагмента. В неорганической (немолекулярной) кристаллохимии гомологическим обычно называют ряд структур, образованных из исходных структур - родоначальников за счет упорядочения дефектов, по типу *кристаллографического сдвига* или структур (фаз) прорастания. Примеры гомологических рядов: молекулы предельных углеводородов C_nH_{2n+2} , упорядочение кислородных дефектов в СТ флюорита CaF_2 (Pr_nO_{2n-2}), фазы кристаллографического сдвига на основе СТ ReO_3 (Mo_nO_{3n-1}).

ГОНИОМЕТР. Прибор для измерения углов между гранями *кристалла*.

ГОНИОМЕТРИЧЕСКОЕ УСТРОЙСТВО РЕНТГЕНОВСКОЕ (ГУР). Механическое электронно-оптическое устройство для синхронизации и определения взаимного расположения РТ, образца и *детектора*. Является составной частью многих моделей *дифрактометров*.

ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННАЯ РЕШЕТКА. *Решетка Бравэ, ячейкой Бравэ* которой является *гранецентрированная ячейка*.

ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННАЯ ЯЧЕЙКА. *Центрированная ЭЯ*, содержащая четыре узла. В гранецентрированной ячейке узлы расположены в вершинах параллелепипеда и в центрах всех граней. Гранецентрированная ячейка Бравэ обозначается символом F.

ГРАНЬ БАЗИСНАЯ – см. *базисная грань*.

ГРУППА СИММЕТРИИ. Полная совокупность *операций симметрии*, совмещающих данную фигуру с ней самой. В кристаллографии и смежных дисциплинах используются *точечные группы симметрии* и *пространственные группы симметрии*. Число элементов симметрии, входящих в данную группу, называют порядком группы симметрии. Подмножества операций симметрии данной группы, также образующие группы симметрии, называют *подгруппами*. Порядок подгруппы является делителем порядка группы. Группы симметрии делят на *категории*, а *кристаллографические группы симметрии* – на *сингонии*. Симметрию коллинеарных магнетиков и двойников описывают группами *антисимметрии*.

Д

ДВОЙНИКОВАНИЕ. Срастание в единое образование (двойник) макроскопических областей с различной ориентацией одной *кристаллической структуры*, связанных между собой операцией точечной симметрии (поворот, отражение). Двойникование может происходить при кристаллизации, механической деформации, фазовом переходе. В одном кристалле могут присутствовать два и более монокристаллических компонента (двойники, тройники, четверики и пр.), сросшихся или проросших друг в друга (двойники срастания и двойники прорастания) по определенным кристаллографическим плоскостям или направлениям. Многократно сдвойникованный кристалл называют полисинтетическим двойником.

ДЕТЕКТОРЫ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ. Приборы для регистрации жесткого электромагнитного излучения (рентгеновское, гамма) и частиц, образующихся (участвующих) в ядерных процессах (электроны, протоны, нейтроны, α -частицы и т.д.). В РСА используют газонаполненные детекторы (счетчик Гейгера-Мюллера, пропорциональный счетчик, позиционно-чувствительный детектор) и сцинтилляционные счетчики.

ДЕФЕКТ. Любое отклонение от *идеальной структуры*. Могут быть присущи самой кристаллической структуре (*дефектная структура*) или образовываться в процессе кристаллизации, при введении примесей или под влиянием тепловых, механических, радиационных, электрических, магнитных и прочих воздействий. Различают точечные, линейные, поверхностные (плоские) и объемные дефекты. Точечные дефекты – *вакансии*, примесные и межузельные атомы; линейные дефекты – *дислокации* и плоскости *кристаллографического сдвига*; поверхностные дефекты – дефекты упаковки, границы двойников, доменов; объемные дефекты – скопления вакансий, поры, при-

месные включения.

ДЕФЕКТНАЯ ПОЗИЦИЯ. Позиция, частично занятая атомами или ионами. Такие позиции характерны для *дефектных структур* и структур с ориентационной *разупорядоченностью*.

ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА. *Кристаллическая структура*, в которой имеются *дефектные* (содержащие *вакансии*) *позиции*. Дефектные структуры характерны для *нестехиометрических фаз* и *твердых растворов* типа *внедрения* или *вычитания*, а также твердых электролитов.

ДЕФОРМАЦИОННАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ПЛОТНОСТЬ. Разность между *электронной плотностью* $\rho(x,y,z)$ кристалла и *электронной плотностью* составляющих его несвязанных, сферически симметричных атомов. Первую находят из данных РСА, а последнюю рассчитывают по радиальному распределению *электронной плотности* в изолированных атомах структуры, а также координат и тепловых параметров их ядер, найденных из нейтронографического исследования этого же кристалла. Деформационная электронная плотность дает информацию о перераспределении $\rho(x,y,z)$ по химическим связям и позволяет оценить эффективные заряды атомов в кристалле.

ДИАГОНАЛЬНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ. Кристаллографические направления, проходящие вдоль диагоналей *базисных граней*. В *тригональной* и *гексагональной сингониях* диагональным считается направление длинной диагонали ромба.

ДИСЛОКАЦИЯ. *Дефекты кристаллической решетки*, искажающие правильное расположение *кристаллографических плоскостей*. Дислокации отличаются от других дефектов в кристаллах тем, что значительное нарушение регулярного чередования атомов сосредоточено в малой окрестности некоторой линии пронизывающей *кристалл*. Простейшими видами дислокаций являются винтовая и краевая. Между предельными типами краевой и винтовой дислокации возможны любые промежуточные, в которых линия дислокации не обязательно прямая: она может представлять собой произвольную плоскую или пространственную кривую.

ДИССИММЕТРИЯ. Более низкая симметрия кристаллической решетки, обусловленная отсутствием ряда элементов симметрии по сравнению с полносимметричными объектами. Это характерно для *подгрупп группы симметрии* по отношению к исходной *группе симметрии*. Диссимметричными являются все неполносимметричные ТГС кристаллов (*мероэдрии*) по отношению к *голоэдрии*. Понятие диссимметрии чаще всего используют применительно к *нецентросимметричным* и *хиральным* структурам по сравнению с *центросимметричными*.

ДИФРАКТОГРАММА. Зарегистрированная картина рассеяния (дифракции) излучения от различных объектов, показывающая зависимость интенсивности рассеянного излучения от угла дифракции. Чаще всего термин «дифрактограмма» применяется к *рентгенограмме*, полученной на *дифрактометре*. См. лабораторные работы №1, 6.

ДИФРАКТОМЕТР. Прибор для измерения интенсивности дифрагирован-

ного излучения в зависимости от угла дифракции. Рентгеновские дифрактометры – см. лабораторные работы №1, 6.

ДИФРАКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ. Методы исследования структуры вещества, основанные на изучении углового распределения интенсивности рассеянного (дифрагированного) им излучения. Условие дифракции – соизмеримость длины волны излучения λ с расстояниями между центрами рассеяния (атомами), т. е. в РСА - $\sim 1 \text{ \AA}$. Расположение дифракционных максимумов и их интенсивность однозначно связаны со структурой вещества и его химическим составом. Основными дифракционными методами являются *рентгенография, электронография и нейтронография*. Рентгеновские лучи рассеиваются электронами, электроны – электростатическим потенциалом кристалла, нейтроны – ядрами и магнитными моментами атомов. Интенсивность рассеяния для рентгеновского излучения пропорциональна числу электронов в атоме, а для дифракции электронов и нейтронов такой зависимости нет, что используют для определения положений атомов с близкими атомными номерами и легких атомов в присутствии тяжелых. Электроны в 10^6 и 10^8 раз сильнее взаимодействуют с веществом по сравнению с рентгеновскими лучами и нейтронами, соответственно, поэтому их в основном применяют для исследования газов, тонких пленок и поверхностей. Объемные моно- и поликристаллические образцы (размером 0,01-10 мм) изучают рентгено- и нейтронографически. Наличие у нейтрона магнитного момента позволяет исследовать *магнитную структуру* кристаллов.

ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ. Неупругое рассеяние излучения, обусловленное тепловыми колебаниями атомов, *дефектами* и другими структурными несовершенствами. На *рентгенограммах* диффузное рассеяние проявляется в виде диффузных гало или дополнительных размытых отражений вокруг брэгговских *рефлексов*. Анализ интенсивности диффузного рассеяния используется для исследования структурной *разупорядоченности* в *кристаллах, аморфных телах и жидких кристаллах*.

ДОМЕН ДИРИХЛЕ – ВОРОНОГО – см. *многогранник Дирихле - вороного*.

Ж

ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ (АНИЗОТРОПНЫЕ ЖИДКОСТИ, МЕЗОФАЗЫ). Особое состояние некоторых органических веществ, сочетающее присущую жидкости текучесть с *анизотропией* некоторых свойств, характерной для *кристаллов*. Жидкокристаллическое состояние может существовать в разных формах, образующихся при изменении температуры (термотропные жидкие кристаллы) или в растворах (лиотропные жидкие кристаллы). Причина образования жидких кристаллов – анизотропная форма его молекул (цепочечная или плоская), что определяет приблизительную параллельность их укладки. Различают три основных типа жидких кристаллов: смектические,

нематические, холестерические (рис. 3), в последнее время выделяют и дискотические фазы. Жидкокристаллическая упорядоченность наблюдается в областях размером 10^{-2} - 10^{-1} мм, которые можно изменять воздействием электрического или магнитного полей.

3

ЗАКОН ПОСТОЯНСТВА ДВУГРАННЫХ УГЛОВ. Эмпирический закон *геометрической кристаллографии*: углы между соответствующими гранями кристаллов одного и того же вещества постоянны при данных температуре и давлении.

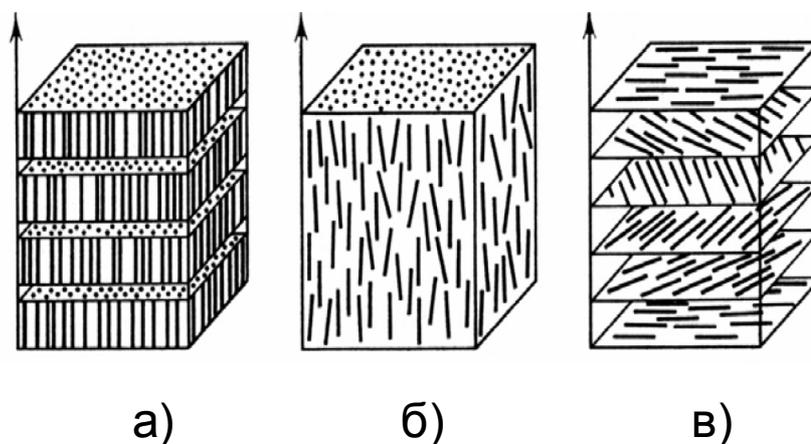


Рис. 3. Виды жидких кристаллов: а) смектические, б) нематические, в) холестерические.

ЗАКОН РАЦИОНАЛЬНЫХ ОТНОШЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ (закон целых чисел). Эмпирический закон *геометрической кристаллографии*: отношения отрезков, отсекаемых двумя любыми гранями кристалла на трех пересекающихся его ребрах, равны отношению целых чисел.

ЗАКОН СИММЕТРИИ. Эмпирический закон *геометрической кристаллографии*: в кристалле могут быть операции симметрии только первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков.

ЗАКОН ФРИДЕЛЯ. Закон centrosymmetry diffractive picture: углы дифракции и интенсивности рефлексов от плоскостей с индексами hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ равны между собой. Может нарушаться вблизи края поглощения атомов из-за аномального рассеяния.

ЗАКРЫТАЯ ОПЕРАЦИЯ СИММЕТРИИ. Операция симметрии, оставляющая неподвижной хотя бы одну (особую, инвариантную) точку ПСТ. Неподвижными точками по отношению к данной операции симметрии являются все точки, лежащие на рассматриваемом элементе симметрии. К закрытым операциям симметрии I рода относятся поворотные оси, а закрытыми операциями симметрии II рода являются инверсионные и зеркально - поворотные оси симметрии.

ЗАКРЫТЫЙ ЭЛЕМЕНТ СИММЕТРИИ. *Элемент симметрии, отвечающий закрытой операции симметрии.*

ЗЕРКАЛЬНО-ПОВОРОТНАЯ ОСЬ СИММЕТРИИ. *Закрытый элемент симметрии - прямая, вокруг которой осуществляется поворот на угол $\varphi = 360^\circ/n$ (n – порядок зеркально-поворотной оси) с последующим отражением в плоскости, перпендикулярной оси поворота. Любой зеркально-поворотной оси с элементарным углом поворота φ эквивалентна соответствующая *инверсионная ось симметрии* с углом поворота $(360^\circ - \varphi)$, поэтому оба этих вида сложных осей симметрии взаимозаменяемы.*

И

ИДЕАЛЬНАЯ СТРУКТУРА. Математическое выражение усредненного по времени и пространству регулярного расположения атомов в кристалле, отвечающее среднестатистическим максимумам электронной (ядерной) плотности в кристалле и описанное одной из 230 ПГС. Разные аспекты идеальной структуры рассматривают в рамках различных *моделей структуры*. Локальные отклонения от идеальной структуры отвечают *реальной структуре*. Экспериментально идеальную структуру определяют методами *структурного анализа*.

ИЗОМЕТРИЧЕСКОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ. Геометрическое преобразование пространства, сохраняющее неизменным расстояния между его точками. Изометрическое преобразование характеризуется *ортогональной матрицей*. Все *операции симметрии в пространственной решетке* относятся к изометрическим преобразованиям.

ИЗОМОРФИЗМ. 1). Сходство кристаллических форм. 2). Способность *изоструктурных* веществ образовывать неограниченные (совершенный изоморфизм) или ограниченные (несовершенный изоморфизм) *твердые растворы*. 3). Способность одних атомов (ионов, молекул) замещаться другими в кристаллических структурах (*изоморфное замещение*). 4). Способность веществ образовывать смешанные кристаллы с той или иной степенью упорядочения компонентов (*твердые растворы*, аномальный изоморфизм и пр.).

ИЗОМОРФНОЕ ЗАМЕЩЕНИЕ. Способность атомов (ионов, молекул) замещаться другими атомами (ионами, молекулами) в *кристаллических структурах* с образованием *твердых растворов*. Замещаемые и замещающие частицы всегда располагаются по одним и тем же ПСТ статистически с вероятностью равной степени заполнения позиции, отвечающей составу кристалла. Обычно разница между радиусами замещающих друг друга атомов (ионов) не превышает 15 % от меньшей величины. Если замещающие друг друга атомы (ионы) имеют одинаковую валентность, говорят об *изовалентном замещении* (изовалентном изоморфизме), в противном случае – о *гетеровалентном замещении* (гетеровалентном изоморфизме), происходящем при условии соблюдения электронейтральности. Оба этих случая относятся к за-

мещению с сохранением числа атомов в ячейке, но возможны и более сложные варианты, когда число атомов в ячейке изменяется: 1) замещения с *вычитанием* (образованием *вакансий*); 2) замещения с внедрением (изоморфизм с заполнением пространства). Оба вида замещения сочетаются в твердом растворе AgBr-CuBr, где при замене $Ag^+ \rightarrow Cu^+$ происходит вычитание Ag^+ из *октаэдрических пустот* с параллельным внедрением Cu^+ в *тетраэдрические пустоты* КПУ ионов Br (разделительное замещение). Замещение многоатомных фрагментов (блоков, цепей, слоев) относят к *аномальному* (блочному) *изоморфизму*, встречающемуся в силикатах.

ИЗОСТРУКТУРНОСТЬ. Принадлежность сравниваемых *кристаллических структур* к одному СТ при близости типа химической связи (как правило, возможно, образование между ними *твердых растворов*). Изоструктурные простые вещества или химические соединения составляют изоструктурный ряд. Примеры: твердые Ne, Ar, Kr, Xe образуют ГЦК изоструктурный ряд; галогениды щелочных металлов (исключая CsCl, CsBr, CsI) образуют изоструктурный ряд СТ NaCl; карбонаты MSO_3 ($M = Mg, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Ca, Cd$) дают изоструктурный ряд СТ кальцита $CaCO_3$.

ИЗОТИПИЯ. Принадлежность сравниваемых *кристаллических структур* к одному СТ при существенном различии в них степеней окисления атомов или вида химической связи. Изотипными (но не *изоструктурными*) будут, например, твердый Xe и Cu, NaCl и TiC (ГЦК структура).

ИЗОТРОПИЯ. Одинаковость свойств объекта в разных направлениях. Изотропия любых свойств характерна для газов, жидкостей, *аморфных тел* и *поликристаллов*. Кристалл может проявлять изотропию в отношении *скалярных свойств* или благодаря особенностям его симметрии. Так, кубические кристаллы обладают изотропией электро- и теплопроводности, теплового расширения, оптической изотропией.

ИНВАРИАНТНАЯ ТОЧКА - см. *особая точка*.

ИНВЕРСИОННАЯ ОСЬ СИММЕТРИИ. *Закрытый элемент симметрии* - прямая, вокруг которой осуществляется поворот на угол $\varphi = 360^\circ/n$ (n - порядок инверсионной оси) с последующей инверсией в *особой точке* прямой. Инверсионной оси с элементарным углом поворота φ эквивалентна *зеркально-поворотная ось* с углом поворота $360^\circ - \varphi$, поэтому оба этих вида сложных осей симметрии взаимозаменяемы.

ИНВЕРСИЯ. *Закрытая операция симметрии* – отражение в точке. Преобразует точку с координатами x, y, z в точку с координатами $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$. *Особая точка* этого преобразования (начало координат) называется *центром инверсии* или *центром симметрии*.

ИНДЕКСЫ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ – см. *кристаллографические индексы*.

ИНДЕКСЫ ПЛОСКОСТИ (ИНДЕКСЫ МИЛЛЕРА). Обозначение грани кристалла, *кристаллографической плоскости* тройкой целых чисел h, k, l , входящих в уравнение плоскости (семейства плоскостей) в *кристаллографической системе координат*: $hx + ky + lz = N$. С другой стороны, индексы

плоскости – это тройка целых чисел определяющих вектор обратной решетки, нормальный к данному семейству плоскостей: $\mathbf{H} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$. Символ плоскости записывается как (hkl) , в случае отрицательного индекса минус ставят не перед его числовым значением, а над ним - $(\bar{h}, \bar{k}, \bar{l})$. Семейство параллельных плоскостей (hkl) делит ребра ячейки a, b, c на h, k, l частей, соответственно. Нулевой индекс означает параллельность плоскости соответствующему ребру. Для гексагональной и тригональной сингоний иногда символы узловых сеток записывают четырьмя индексами $(hkil)$, причем $i = -h - k$, что отвечает четырехосной системе координат с тремя эквивалентными осями, расположенными в *базисной грани* под углом 120° друг к другу.

ИНДИЦИРОВАНИЕ. Определение *индексов плоскостей*, от которых зарегистрированы дифракционные максимумы на *дифрактограмме*. См. лабораторную работу №2.

ИНТЕГРАЛЬНАЯ ИНТЕНСИВНОСТЬ РАССЕЯННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ. Энергия рентгеновского излучения, рассеянного кристаллом в единицу времени в точке наблюдения. Интегральная интенсивность дифрагированного излучения зависит от: 1) интенсивности первичного пучка; 2) угла рассеяния и метода съемки (*геометрический фактор, поляризационный фактор*); 3) числа симметрически эквивалентных отражений, дающих вклад в данный дифракционный луч (*фактор повторяемости*); 4) поглощения первичного и вторичного излучения в кристалле (*фактор поглощения*); 5) степени совершенства кристалла (*экстинкция*); 6) строения кристалла (*структурный фактор*); 7) температуры кристалла (*температурный фактор*).

ИНТЕРНАЦИОНАЛЬНЫЕ СИМВОЛЫ ГРУПП СИММЕТРИИ – см. *символы элементов симметрии, символы пространственных групп симметрии*.

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ ЛАУЭ. Функция, определяющая условия наблюдения дифракционных максимумов при рассеянии излучения *кристаллической решеткой*, состоящей из *узлов* одного сорта.

К

КАРКАСНАЯ СТРУКТУРА. *Гетеродесмическая структура*, в которой основной *структурной единицей* является трехмерная сетка (каркас) наиболее прочно связанных атомов. Каркасные структуры обычно содержат внекаркасные атомы или атомные группы (перовскит CaTiO_3 , цеолиты), а при отсутствии таковых строятся из неравноценных химических связей (AlPO_4 , обычный лед).

КАРТА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ. Графическое представление *синтезов Фурье электронной плотности* или ее производных в разных точках структуры. Обычно такие карты являются проекциями или двухмерными сечениями электронной плотности, параллельными одной из *граней ячейки*

Бравэ, и изображаются семейством линий одинаковых значений плотности электронов.

КАТЕГОРИЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ. Наиболее крупное объединение ПГС по *старшим элементам симметрии*. Различают высшую (четыре тройных оси), среднюю (одна ось высшего порядка) и низшую (элементы симметрии не выше второго порядка) категории. Кристаллографические категории подразделяются на *сингонии*: *кубическую* (высшая категория), *гексагональную*, *тригональную*, *тетрагональную* (средняя категория), *ромбическую*, *моноклинную* и *триклинную* (низшая категория).

КВАДРАТИЧНАЯ ФОРМА. Квадратичное выражение, связывающее *индексы плоскости* (hkl) кристалла, *межплоскостное расстояние* d_{hkl} и *параметры прямой* или *обратной решетки*.

КВАЗИКРИСТАЛЛЫ. Твердые тела (обычно сплавы) с высокой симметрией, не обладающие кристаллической решеткой. Квазикристаллы имеют высокую степень упорядоченности с некристаллографическими осями симметрии 5, 8, 10, 12 и других порядков, но не обладают трехмерной периодичностью. Квазикристаллы могут рассматриваться как высокосимметричные *несоразмерные структуры*, описываемые трехмерными проекциями шестимерных решеток.

КЛАСС СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ. *Точечная группа симметрии*, к которой сводятся ПГС, если принять *трансляцию* равной нулю. Таким образом, 230 ПГС делятся на 32 класса симметрии, которые распределены по семи *сингониям*. Класс симметрии, имеющий в данной сингонии наивысшую симметрию, называется *голоэдрическим*.

КЛАССИФИКАЦИЯ СТРУКТУР. Систематизация структур по сходству геометрических, химических, симметричных, термодинамических и других признаков. Наиболее часто встречающиеся классификации: 1) по топологии *структурных единиц* кристалла и *мотивам структур*; 2) по типам химической связи; 3) по стехиометрии; 4) по группам симметрии (ТГС, ПГС); 5) по КЧ и КП атомов; 6) структурно-генетические классификации (типы *шаровых упаковок*, виды *родственности структур*); 7) на основе сетей *полиморфных* и *морфотропных переходов*; 8) по классам химических соединений.

КЛАССЫ СИММЕТРИИ ЛАУЭ - см. *лауэвские классы симметрии*.

КОВАРИАНТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ. Линейное преобразование величин, связанное с преобразованием системы координат, при котором матрица преобразования совпадает с матрицей перехода от старых координатных осей к новым. По ковариантному закону преобразуются оси ЭЯ и *индексы плоскости*.

КОГЕРЕНТНОСТЬ. 1). Совпадение рассеянных волн по фазе или отличие их на целое число длин волн. При дифракции излучения на кристалле когерентность рассеяния наблюдается в пределах одного блока *мозаичной структуры* кристалла. 2). Структурное или кристаллографическое соответствие фрагментов (блоков, *модулей*) двух разных веществ, являющееся необходимым условием их срастания в единое тело, что наблюдается при образо-

вании *фрагментарных структур, аномальном изоморфизме, эпитаксии*, топотактических реакциях и т. д.

КОНГРУЭНТНЫЙ. Признак, относящийся к фигурам, которые можно совместить перемещением в пространстве (наложением).

КОНТРАВАРИАНТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ. Линейное преобразование величин, связанное с преобразованием системы координат, при котором матрица преобразования является транспонированной обратной матрицей перехода от старых координатных осей к новым. По контравариантному закону преобразуются *кристаллографические индексы* узлов, рядов.

КООРДИНАТНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ. Направления, параллельные осям *кристаллографической координатной системы*.

КООРДИНАТЫ АТОМА. Тройка чисел x, y, z , выраженных в долях ребер ЭЯ a, b, c и определяющих положение радиус-вектора точки M – центра атома: $r_{om} = xa + yb + zc$. Если $0 \leq x, y, z \leq 1$, то точка M находится в пределах ЭЯ. Координаты точек *частных ПСТ* выражают рациональными дробями ($1/2, 1/3, 3/4, 5/8$ и др.).

КООРДИНАЦИОННАЯ СТРУКТУРА. *Кристаллическая структура*, в которой все атомы связаны сеткой *межатомных связей* практически равной длины. Обычно структурные единицы таких кристаллов – симметрично эквивалентные атомы одного или двух сортов, составляющие *гомодесмическую структуру*. Примеры: алмаз, NaCl, SiO₂.

КООРДИНАЦИОННАЯ СФЕРА. Атомы, окружающие центральный атом на определенном интервале расстояний от него. Самые близкие соседи входят в первую (внутреннюю) координационную сферу (их количество определяет *координационное число*), следующие по дальности – во вторую координационную сферу и т. д. (внешние координационные сферы). Различают два типа координационных сфер – открытые (при числе ближайших соседей не более трех, а также в случае их компланарного или одностороннего расположения относительно центрального атома) и закрытые (представляемые *координационным полиэдром*). Компланарную конфигурацию первой координационной сферы называют плоской, а одностороннюю – зонтичной или пирамидальной.

КООРДИНАЦИОННОЕ ЧИСЛО. Число ближайших к центральному атому соседних атомов (лигандов) в кристаллической или молекулярной структуре. Совокупность таких соседей образует первую *координационную сферу*. Значение КЧ может колебаться в интервале от 1 до 18 (иногда и более). Понятие среднего КЧ (необязательно целочисленное) используется при описании структур жидкостей и *аморфных тел*.

КООРДИНАЦИОННЫЙ ПОЛИЭДР. Многогранник, вершинами которого являются ближайшие к центральному атому соседние атомы (лиганды) в кристаллической или молекулярной структуре. Число вершин КП равно КЧ центрального атома. Такой полиэдр может образоваться, если число ближайших атомов не менее четырех, и они не расположены в одной плоскости с центральным атомом или по одну сторону от него. В противном случае ли-

ганды образуют незамкнутую фигуру (открытую *координационную сферу*). Наиболее распространенные КП имеют треугольные или четырехугольные грани.

КОЭФФИЦИЕНТ ПОГЛОЩЕНИЯ ЛИНЕЙНЫЙ – см. *линейный коэффициент поглощения*.

КОЭФФИЦИЕНТ ПРИВЕДЕНИЯ К АБСОЛЮТНОЙ ШКАЛЕ. Коэффициент пропорциональности между экспериментальными и вычисленными величинами *структурных амплитуд* или *структурных факторов*. Определяется в процессе *уточнения структуры*, играя роль одного из *структурных параметров*.

КОЭФФИЦИЕНТ УПАКОВКИ. Доля пространства, занятая частицами (атомами, ионами, молекулами) в объеме ЭЯ: $k = N \cdot V_{\text{част}} / V_{\text{эя}}$ (N – число частиц в ЭЯ, $V_{\text{част}}$ – объем частицы, $V_{\text{эя}}$ – объем элементарной ячейки). Объем частицы определяют, как объем сферы ограниченной одним из видов *атомных радиусов*.

КРАТНОСТЬ ПРАВИЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ТОЧЕК. Число точек, которые преобразуются друг в друга всеми *операциями симметрии* данной *группы симметрии*. Различают кратность *частных ПСТ* и *общей ПСТ*. Кратность общей ПСТ равна *порядку группы симметрии*, кратность частных ПСТ равна делителю порядка группы симметрии.

КРИСТАЛЛ. Твердое тело, отличающееся присутствием как *ближнего*, так и *дальнего порядка*. Для кристаллов характерны *анизотропия* свойств и способность самоограняться при своем образовании. Основные свойства кристаллов являются выражением его периодической структуры, построенной на основе *кристаллической (пространственной) решетки*.

КРИСТАЛЛИТЫ. Мелкие монокристаллические зерна (обычно размерами 10.6-10.2 мкм), составляющие металлические слитки, горные породы, минералы, поликристаллы и другие кристаллические образования.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА. Периодическое расположение *узлов* (атомов, ионов, молекул) в трехмерном пространстве. Фундаментальным свойством кристаллической решетки является наличие *трансляционной симметрии*.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА. Реальное пространственное расположение атомов в кристалле. Как правило, это расположение усреднено по времени и пространству и отвечает среднестатистическим максимумам *электронной* или *ядерной плотности кристалла*. Идеализированная форма расположения атомов в *кристалле*, описанная набором *атомных позиций* в рамках *кристаллической решетки* и одной из 230 ПГС, соответствует *идеальной структуре*. Различают *упорядоченные структуры*, в которых каждая атомная позиция целиком заселена атомами одного сорта, и *разупорядоченные структуры*, где присутствуют атомные позиции, не полностью заселенные односортными атомами. Разные аспекты *кристаллической структуры* рассматривают в рамках различных *моделей структуры*. Локальные особенности *микроструктуры* кристалла отвечают *реальной структуре*. Кристалл-

лическую структуру определяют методами *структурного анализа*.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ ГРУППА СИММЕТРИИ. *Группа симметрии*, совместимая с симметрией *кристаллической решетки*. В соответствии с этим в кристаллографической группе могут присутствовать только *элементы симметрии 1, 2, 3, 4, 6 порядков*. Кристаллографические группы симметрии делятся на ТГС (группы симметрии внешней формы кристаллов) и ПГС.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ КООРДИНАТНАЯ СИСТЕМА. 1) Система координат, направления осей которой совпадают с максимально симметричными направлениями в кристалле, а единичные длины осей равны (пропорциональны) длинам ребер соответствующей *ячейки Бравэ*. Начало координат, как правило, выбирается в *центре инверсии* или в *особой точке*. Углы и длины осей таких координатных систем определяют *сингонию кристалла*. 2) Система координат, связанная с выбором *элементарной ячейки решетки* и ее *установки (ячейки Бравэ)*.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ ОПЕРАЦИЯ СИММЕТРИИ. *Операция симметрии*, совместимая с симметрией *кристаллической решетки*. То есть, к кристаллографическим операциям симметрии относятся операции симметрии, соответствующие *трансляциям, инверсии, отражениям в плоскости* и поворотам вокруг *простых, инверсионных (зеркально-поворотных) и винтовых осей симметрии 2,3,4,6 порядков*.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ ПОЗИЦИЯ. Позиция узла относительно элементов симметрии *кристаллографической группы симметрии*.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ СИММЕТРИЯ. Симметрия, удовлетворяющая требованиям *кристаллической решетки*. В соответствии с этим, в рамках кристаллографической симметрии рассматриваются операции симметрии, описывающие *трансляцию, отражение и поворот*. См. *симметрия кристаллографическая*.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ (КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ) СИСТЕМА – см. *сингония*.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ БАЗЫ ДАННЫХ. Международная база данных, содержащая кристаллографические, структурные и рентгенодифракционные характеристики соединений. База данных разбита на группы - CRYSTMET (металлы и сплавы, ~70 000 структур), ICSD (неорганические соединения и минералы, ~60 000 структур), CSD (органические и металлоорганические соединения, >260 000 структур), PDB (белки, > 17 000 структур), NDB (нуклеиновые кислоты, ~1500 структур), MINCRYST (минералы, > 6 000 структур). *Структурные типы* неорганических соединений (> 40 000 СТ) представлены в базе TYPX, а стандартные *дифрактограммы* поликристаллических соединений (> 280 000 фаз) приведены в базе данных ICDD.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ. Тройка рациональных чисел, определяющая положения *узлов, узловых рядов и плоскостей кристаллической решетки* относительно осей *кристаллографической координатной системы*. Для *гексагональной и тригональной сингоний* иногда символы узлов,

рядов и плоскостей записывают четырьмя индексами (hki) , где $h+k+i=0$, что отвечает четырехосной системе координат с тремя осями, расположенными под углом 120° друг к другу в *базисной плоскости*.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЕКЦИИ. Проекция *кристаллической структуры* или ее элементов на сферу или плоскость. Кристаллическую структуру, условно представленную в КП, атомных сетках, *картами электронной плотности* и т. п., обычно проецируют на кристаллографическую плоскость или вдоль кристаллографического направления (грань *ячейки Бравэ* или ее ребро). В случае кристалла или ТГС центр кристалла или *особую точку* помещают в центр сферы, ряды и плоскости – параллельным переносом совмещают с центром сферы, тогда пересечения рядов с поверхностью сферы дадут точки, а пересечение плоскостей – окружности большого круга (сферическая проекция). Для получения плоской проекции один из полюсов S большого круга соединяют лучами со сферическими проекциями рядов или плоскостей, тогда точки пересечения лучей с экваториальной плоскостью дадут стереографическую проекцию, где направления выразятся точками, а плоскости – дугами (рис. 4). Стереографическую проекцию, где грани кристалла заменены направлениями их нормалей (*векторами обратной решетки*), называют гномостереографической проекцией. ПГС изображают в виде проекции вдоль оси c условной *ячейки Бравэ* вместе с нанесенными на ней символами *элементов симметрии*.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ КЛАСС СИММЕТРИИ – см. *класс симметрии кристалла*.

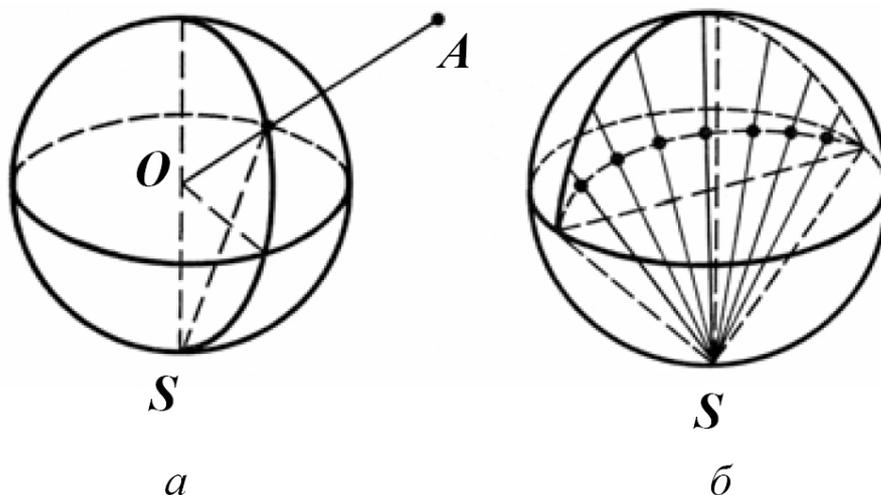


Рис. 4. Стереографическая проекция: а) - изображение прямой; б) – изображение плоскости.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ СДВИГ. Разрыв и смещение двухмерных блоков *каркасной структуры* параллельно некоторым кристаллографическим плоскостям (плоскостям кристаллографического сдвига) с образованием новой структуры. Такое преобразование может быть формальной структурно-генетической операцией или может возникать реально из-за «скальва-

ния» структуры по ее плоским дефектам – местам концентрации анионных *вакансий*, что превращает дефектную структуру в полностью упорядоченную структуру кристаллографического сдвига. В ряде случаев исходная структура претерпевает два разных (обычно приблизительно перпендикулярных) кристаллографических сдвига, что приводит к так называемым *блочным структурам*. Формулы фаз кристаллографического сдвига зависят от состава и структуры исходной фазы, *индексов плоскости* и направления сдвига, а также величины блоков-модулей. При постоянстве плоскостей сдвига и изменении размеров сдвигаемых блоков возникают *гомологические ряды* структур (фаз) кристаллографического сдвига.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЕ НАПРАВЛЕНИЕ. Направление в кристалле, параллельное одному из *узловых рядов* и, поэтому, имеющее тождественные этой прямой индексы.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ. Наука о кристаллах, их образовании, морфологии, строении, симметрии, физических и химических свойствах. Кристаллография решает следующие задачи: 1) исследование геометрии внешней формы и внутреннего строения кристаллов; 2) изучение процессов зарождения, роста, растворения и дефектообразования в кристаллах; 3) изучение взаимосвязей между геометрией внешней формы кристаллов, их внутреннего строения и симметрии с физическими и химическими свойствами кристаллов. Кристаллографию, как научную дисциплину, условно подразделяют на *геометрическую кристаллографию*, кристаллогенезис, *структурную кристаллографию*, физическую кристаллографию (*кристаллофизику*), химическую кристаллографию (*кристаллохимию*). Математический аппарат кристаллографии – *кристаллическая решетка*, термодинамика, теория групп симметрии, матричное (тензорное) исчисление. Основные экспериментальные инструменты кристаллографии – *дифракционные* и спектроскопические *методы*, методы исследования дефектов роста, *полиморфных превращений*, механических, оптических, акустических и др. свойств. В рамках кристаллографии исследуются различные формы существования конденсированных сред (*монокристаллы*, *поликристаллы*, керамики, полимеры, *жидкие кристаллы*, *квазикристаллы*, стекла, жидкости и др.).

КРИСТАЛЛОФИЗИКА. Раздел *кристаллографии* изучающий взаимосвязи геометрии внешней формы кристаллов, их внутреннего строения, анизотропии, симметрии с физическими свойствами кристаллов. В кристаллофизике *кристалл* рассматривается как однородная анизотропная среда, свойства которой одинаковы в различных точках и симметрически эквивалентных направлениях. Симметрия любого свойства кристалла не может быть ниже его ТГС (*принцип Неймана*). Для описания физических свойств в кристаллофизике используется матричное (тензорное) исчисление и теория групп. Кристаллофизика изучает также изменения свойств кристаллов при изменении его *симметрии*, *структуры* и термодинамических условий (в том числе при фазовых переходах), исследует *дефекты* кристаллов и их влияние на его свойства.

КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА – см. *структурная формула*.

КРИСТАЛЛОХИМИЯ. Раздел кристаллографии, изучающий закономерности пространственного расположения и химического взаимодействия атомов в кристаллах, взаимосвязи их состава и свойств со строением. Кристаллохимия решает следующие задачи: 1) установление атомного строения кристаллов, описание типов химической связи в них, систематика структур; 2) выяснение причин устойчивости структур, законов и правил их образования; 3) изучение связей между физико-химическими свойствами кристаллов, их строением и характером химической связи; 4) моделирование и прогнозирование структур. Кристаллохимия базируется на теории групп, термодинамике и теории химической связи. В кристаллохимии широко используется геометрический подход (*кристаллическая решетка, атомные радиусы, плотнейшая упаковка атомов* и др.).

КРИТЕРИИ ПРАВИЛЬНОСТИ СТРУКТУРЫ. Набор признаков, косвенно подтверждающих правдоподобность модели структуры: 1) согласие между наблюдаемыми и вычисленными *структурными амплитудами* в пределах экспериментальной ошибки; 2) экстремумы заключительной разностной *карты электронной плотности* не должны превышать ожидаемых погрешностей определения *электронной плотности* (как правило, не более половины максимума пика самого легкого атома структуры); 3) отсутствие аномалий в *атомных параметрах*, межатомной геометрии, химическом составе, соответствие измеренной и вычисленной плотностей кристалла.

КРИТЕРИИ УСТОЙЧИВОСТИ СТРУКТУРЫ. Полуэмпирические правила, выведенные главным образом для неорганических ионных кристаллов и касающиеся допустимых вариантов взаимного расположения катионов и анионов. Наиболее важные критерии устойчивости ионных кристаллов: 1) расстояние катион-анион в КП определяется суммой ионных радиусов, а КЧ – их отношением; 2) сумма валентных усилий катионов, сходящихся на анионе, равна валентности аниона; 3) распределение катионов и анионов в структуре максимально равномерно и характеризуется наибольшим возможным объемом. Следует иметь в виду, что эти правила применимы лишь к ограниченному кругу относительно простых структур (в основном оксидов и фторидов).

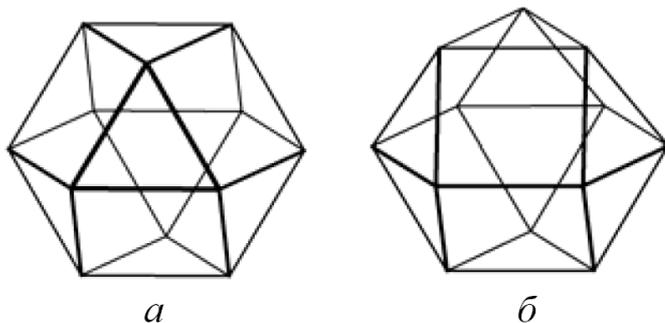


Рис.5. Кубооктаэдры: а) – кубооктаэдр; б) – гексагональный кубооктаэдр.

КУБИЧЕСКАЯ СИНГОНΙΑ (КУБИЧЕСКАЯ СИСТЕМА) – см. сингония.

КУБООКТАЭДР. 1) Полуправильный многогранник, являющийся комбинацией куба и октаэдра и имеющий 8 равносторонних треугольных и 6 квадратных граней, 24 ребра и 12 вершин (рис. 5а). Симметрия кубооктаэдра - O_h ($m\bar{3}m$). Кубооктаэдр –

КП кубической *плотнейшей упаковки*. 2) Производный от предыдущего многогранника полиэдр с тем же количеством граней, ребер и вершин – гексагональный кубооктаэдр, отличающийся от первого поворотом вокруг тройной оси на 60° верхней половины полиэдра относительно нижней (рис. 5б). Симметрия гексагонального кубооктаэдра - $D_{3h} (\bar{6}m2)$. Гексагональный кубооктаэдр (*антикубооктаэдр*) – КП гексагональной плотнейшей упаковки.

Л

ЛАУЭ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ – см. *интерференционная функция Лауэ*.

ЛАУЭ МЕТОД – см. *метод Лауэ*.

ЛАУЭ УСЛОВИЕ – см. *условие Лауэ*.

ЛАУЭВСКИЕ КЛАССЫ СИММЕТРИИ. Классы симметрии дифракционной картины, определяемые *кристаллографическим классом* (ТГС кристалла) и *законом Фриделя* (законом центросимметричности дифракционной картины). Существует 11 лауэвских классов симметрии: $1, 2, m, 2m, 3, 3m, 4, 6, 6m, 3m, 4m$.

ЛАУЭГРАММА. *Рентгенограмма*, полученная *методом Лауэ*, то есть с неподвижного *монокристалла* при прохождении через него *полихроматического рентгеновского излучения*.

ЛЕНТА. Бесконечная в одном измерении совокупность связанных атомов, состоящая из двух и более параллельных полимерных цепей, соединенных между собой поперечными мостиковыми связями.

ЛИНЕЙНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ПОГЛОЩЕНИЯ. Величина μ , обратная расстоянию, на котором монохроматическое излучение ослабляется в e раз. Интенсивность излучения I , прошедшего слой вещества толщиной s , связана с интенсивностью падающего излучения I_0 законом Ламберта-Бугера $I = I_0 \cdot \exp(-\mu s)$.

М

МАГНИТНАЯ СИММЕТРИЯ. Симметрия магнитно упорядоченного кристалла или симметрия пространственного расположения магнитных моментов атомов (ионов) в кристалле. В простейших случаях магнитного упорядочения с коллинеарным расположением магнитных моментов симметрия складывается из обычных групп симметрии, дополненных операциями *антисимметрии* обращения магнитного момента. Существует 122 точечных и 1651 пространственных групп магнитной симметрии (включая обычные 32 ТГС и 230 ПГС). Для описания магнитной симметрии неколлинеарных магнетиков используется более сложный симметричный аппарат (цветная симметрия, многомерная симметрия и т. д.).

МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА. Пространственное расположение магнитных моментов атомов (ионов) в кристалле с *магнитным упорядочением*. Она описывается кристаллической структурой, дополненной взаимным расположением магнитных моментов атомов. В целом магнитная структура описывается *магнитной ячейкой* и *магнитной симметрией*.

МАГНИТНАЯ ЯЧЕЙКА. Ячейка решетки, описывающей расположение магнитных моментов атомов в *магнитной структуре* кристалла. В простейших случаях *кристаллографическая* и *магнитная ячейки* совпадают. Однако при некоторых видах *магнитного упорядочения* трансляционно эквивалентные атомы становятся магнитно неэквивалентными, и соответствующая магнитная ячейка будет кратно увеличенной (модулированной) по сравнению с кристаллографической. В наиболее сложных случаях периоды магнитной и кристаллической структур не кратны друг другу; и тогда говорят о *магнитно несоразмерных структурах*. Магнитную ячейку определяют с помощью нейтронографии.

МАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ. Упорядочение магнитных моментов атомов (ионов) в структуре магнитного кристалла. По типу упорядочения различают ферромагнетики, антиферромагнетики, ферримагнетики, неколлинеарные магнетики, спиральные магнетики и другие магнитно упорядоченные кристаллы. Пространственное расположение магнитных моментов атомов в магнитно упорядоченных кристаллах называют *магнитной структурой*.

МАКРОМОЛЕКУЛА. Молекула с большим (более 10^3) числом атомов. Такие молекулы характерны для полимеров, супрамолекулярных соединений и биологических веществ. Периоды кристаллических решеток таких соединений составляют 50-1000 Å и больше.

МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ. Рассеяние *рентгеновского излучения*, нейтронов или электронов под малыми углами ($\theta < 1^\circ$), обусловленное микронеоднородностями ($\sim 50-2000$ Å) в твердом теле. Малоугловое рассеяние используют для определения размеров и формы макромолекул, их агрегатов (полимеров, белков, вирусов); для изучения субмикропористых и мелкодисперсных объектов, распада твердых растворов и др.

МАССОВЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ПОГЛОЩЕНИЯ. Коэффициент ослабления веществом пучка излучения единичного сечения при прохождении единичной массы: $\mu_p = \mu/\rho$, где μ – *линейный коэффициент поглощения*, ρ – плотность вещества. Массовый коэффициент поглощения зависит только от длины волны излучения.

МАТРИЦА ВРАЩЕНИЯ. *Ортогональная матрица* R , описывающая поворот вокруг прямой на фиксированный угол φ , $\det R = \pm 1$. Диагональные члены матрицы равны $\cos\varphi$, ± 1 ; недиагональные - $\pm \sin\varphi$, 0 .

МЕЖАТОМНАЯ ФУНКЦИЯ – см. *функция Паттерсона*.

МЕЖАТОМНОЕ РАССТОЯНИЕ. Расстояние между максимумами электронной или ядерной плотности, принимаемых за центры атомов.

МЕЖДУНАРОДНЫЕ СИМВОЛЫ ГРУПП СИММЕТРИИ – см. *ин-*

тернациональные символы групп симметрии.

МЕЖПЛОСКОСТНОЕ РАССТОЯНИЕ. Расстояние d_{hkl} между двумя соседними плоскостями семейства *узловых сеток* кристалла. Обратный квадрат межплоскостного расстояния равен квадрату *вектора обратной решетки*:

$$d_{hkl}^{-2} = (\mathbf{H}_{hkl})^2.$$

МЕРОЭДРИЯ. Противоположность *голоэдри* – более низкая по сравнению с ней симметрия. Мероэдрия свойственна всем неголоэдрическим ТГС данной *сингонии*. Каждая мероэдрическая ТГС является подгруппой голоэдрической ТГС.

МЕТОД ВРАЩЕНИЯ. Один из экспериментальных методов наблюдения дифракции *рентгеновского излучения* в кристалле. Рентгенограмма регистрируется от вращающегося (качающегося) *монокристалла*, облучаемого монохроматическим излучением. Основной метод РСА при определении координат атомов (ионов) в кристаллической решетке.

МЕТОД ДЕБАЯ-ШЕРРРЕРА. Метод исследования *поликристаллов* (порошков) с помощью дифракции *рентгеновского излучения*. Согласно методу тонкий пучок *монохроматического излучения*, дифрагируя на образце, рассеивается им по образующим соосных конусов с углом полураствора 2θ . Рефлексы наблюдаются от *кристаллитов*, ориентация которых относительно падающего излучения удовлетворяет *условию Вульфа – Брэгга*. Для того чтобы все кристаллиты попали в отражающее положение, образец равномерно вращают перпендикулярно первичному пучку. Метод Дебая-Шеррера используют для *рентгенофазового анализа*, определения *параметров решетки*, несовершенств и размеров кристаллитов, анализа *текстуры*, изучения фазовых диаграмм, *полиморфных превращений*, термического расширения, определения *кристаллической структуры* и других целей.

МЕТОД ИЗОМОРФНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ. Метод приближенного определения фазовых углов *структурных факторов* в *рентгеноструктурном анализе*, основанный на сравнении интенсивностей *рефлексов* исходного кристалла и изоструктурных или близких по строению производных, обычно содержащих тяжелые атомы. В модифицированном методе изоморфного замещения используют также эффект *аномального рассеяния*, что позволяет получить нужные данные на одном кристалле, но на разных излучениях.

МЕТОД ЛАУЭ. Метод исследования монокристаллов в РСА. Тонкий пучок рентгеновского излучения *сплошного спектра* падает на неподвижный *монокристалл*. Рассеянное излучение регистрируется на фотопленку или *детектором*. Метод Лауэ применяется для пространственной ориентации монокристаллов, определения ТГС кристаллов, исследования *реальной структуры* и совершенства внутреннего строения монокристаллов. Этот метод используется также для исследования процессов старения и распада в метастабильных фазах, перестройки *кристаллической структуры* под действием температуры, облучения нейтронами, γ -излучением, а также неупругих когерентных процессов рассеяния рентгеновского излучения и других проблем.

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ (МНК). Статистический метод

подгонки параметров теоретического уравнения к результатам наблюдений, заключающийся в минимизации суммы квадратов разностей вычисленных и наблюдаемых величин. МНК используют для уточнения структуры, чтобы получить значения *структурных параметров*, дающие наилучшее согласие экспериментальных и вычисленных *структурных амплитуд*. В РСА монокристаллов отношение числа наблюдаемых рефлексов к числу определяемых из МНК структурных параметров обычно составляет 5-10. При РСА сложных соединений (белков и др.) и поликристаллов это отношение значительно меньше, что снижает точность определения структуры.

МЕТОД ПОРОШКА – см. *метод Дебая-Шерера*.

МЕТОД РИТВЕЛЬДА. Метод *уточнения структуры* по нейтроно- или рентгенографическим данным дифракции на поликристаллах, основанный на подгонке расчетного профиля *рефлексов дифрактограммы* к экспериментальным. Вклад в интенсивность рассеянного излучения вносят: 1) структурно-температурный фактор, *коэффициент приведения к абсолютной шкале и параметры решетки*; 2) функция формы пика; 3) функция фона; 4) поправки на асимметрию пика, *текстуру* и др. Уточняемые параметры делятся на профильные (влияющие на положение пиков и профиль рефлексов) и структурные (*атомные параметры*). Метод обычно использует *структурные модели* и позволяет проводить уточнение структуры при наличии в образце нескольких фаз; наиболее эффективен для уточнения структур неорганических соединений.

МЕТОД ТЯЖЕЛОГО АТОМА. Метод приближенного определения фазовых углов *структурных факторов* в РСА, основанный на доминирующем вкладе в интенсивность рассеянного излучения атомов структуры с наиболее высокими атомными номерами (тяжелые атомы). Фазы, вычисленные по положению тяжелых атомов (их определяют одним из методов *расшифровки структуры*), используют для расчета приближенной *карты электронной плотности*, на которой могут проявиться недостающие, более легкие, атомы. Метод наиболее эффективен для определения структур неорганических и координационных соединений.

МЕТРИЧЕСКИЙ ТЕНЗОР – см. *фундаментальный метрический тензор*.

МИКРОСТРУКТУРА. 1) Зернистое строение металла, сплава, минерала, крупного кристалла. Размеры зерен обычно 10^{-6} - 10^{-2} мм, углы их разориентации составляют несколько градусов. Микроструктура выявляется с помощью оптического или электронного микроскопа, позволяющего определить форму, ориентировку, а иногда фазовый состав зерен (*кристаллитов*). 2) Субкристаллитное (масштаба 10 — 1000 Å) строение вещества, отражающее его *реальную* или *идеальную структуру*. Изучается с помощью электронной микроскопии высокого разрешения или *дифракционными методами*.

МИЛЛЕРА ИНДЕКСЫ – см. синоним *индексы плоскости*.

МНОГОГРАННИК ДИРИХЛЕ-ВОРОНОГО. Выпуклая совокупность точек, каждая из которых ближе к данному атому, чем к другим. Грани такого полиэдра принадлежат плоскостям, перпендикулярным и делящим попо-

лам отрезки, соединяющие данный атом с соседними атомами. Многогранники Дирихле-Вороного заполняют пространство структуры без пропусков. Каждой грани такого многогранника соответствует вершина КП, а вершине – структурная пустота.

МНОЖИТЕЛЬ ЛОРЕНЦА – см. *фактор Лоренца*.

МОДЕЛЬ СТРУКТУРЫ. 1). Математическая модель *идеальной структуры*, построенной с использованием *кристаллической решетки*, ПГС и *атомных параметров*. 2). Условное представление расположения атомов в кристалле статической моделью в виде графов, шаров, стержней, сеток, КП и других *структурных единиц*, а также контурных *карт электронной плотности* и им подобных. 3). Динамическая модель структуры, дополняющая статическую модель учетом тепловых колебаний, повышенного молекулярного и ионного движения и других смещений атомов. 4). Часто употребляемый синоним *пробной структуры*.

МОДУЛИ. Наиболее крупные фрагменты (блоки) *модулярной структуры*, повторением которых можно воспроизвести *мотив структуры* или ее всю целиком. В структуре может присутствовать несколько модулей, стыкующихся друг с другом по геометрическим и симметричным правилам.

МОДУЛИРОВАННЫЕ СТРУКТУРЫ. *Сверхструктуры*, характеризующиеся увеличением одной, двух или трех *трансляций* исходной ячейки за счет возникновения волны сдвига или поворота атомных групп (модуляции). Для модулированных структур характерно появление слабых дополнительных (сателлитных) рефлексов на рентгенограмме. Модуляция обычно возникает при *полиморфном превращении* типа смещения или порядок - беспорядок, а также при частичном упорядочении в *нестехиометрических соединениях*, интеркалировании или срастании фаз. Модуляция кристаллографической ячейки за счет *магнитного упорядочения* характерна для некоторых *магнитных структур*. Модулированные структуры разделяют на соразмерные (периоды ячейки возрастают в целое число раз), несоразмерные (периоды ячейки возрастают в нецелое число раз) и композитные (срастание двух структур с несоразмерными периодами ячеек).

МОДУЛЯРНЫЕ СТРУКТУРЫ. Сложные структуры, которые можно представить комбинацией отдельных фрагментов или структурных блоков (*модулей*). Модулями могут быть конечные блоки, цепи (*ленты*, ряды) или слои. В случае если модули представляют собой фрагменты более простых структур, составленную из них модулярную структуру называют *фрагментарной структурой*. Если модулярные структуры отличаются только способами сочленения идентичных модулей, то такие структуры относят к одно-модульным (частный случай — *политипизм*), а если имеется несколько видов модулей, то их относят к многомодульным структурам (частный случай — *фазы прорастания, смешаннослойные структуры*). Для образования модулярных структур из протяженных модулей необходимо, как правило, хорошее геометрическое соответствие между поверхностями различных модулей. Для смешаннослойных и других структур со слабыми связями между моду-

лями такое соответствие может быть необязательным.

МОЗАИЧНАЯ СТРУКТУРА. Разбиение кристалла на монокристаллические области (блоки), слабо разориентированных ($\sim 0,1^\circ$) друг относительно друга. При больших углах разориентации (градусы и десятки градусов) монокристаллические блоки считают зернами или *кристаллитами*, определяющими *микроструктуру* объекта. Мозаичная структура ответственна за эффекты *экстинкции*.

МОНОКЛИННАЯ СИНГОНИЯ – см. *сингония*.

МОНОКРИСТАЛЛ. Крупный ($\sim 10^2$ - 10^3 мм) и часто хорошо ограниченный кристалл с однородной и регулярной внутренней структурой. По степени совершенства монокристаллы подразделяют на немозаичные (обладающие практически идеальной структурой) и кристаллы с *мозаичной структурой*.

МОНОХРОМАТИЧЕСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. Электромагнитное излучение, спектр которого включает в себя только кванты с одинаковой длиной волны.

МОРФОТРОПИЯ. Резкое изменение *кристаллической структуры* при постепенном изменении состава. Обычно морфотропию связывают со структурными изменениями в ряду изоформульных соединений (морфотропном ряду) или твердых растворов. Например, в ряду хлоридов щелочных металлов MCl ($M = Li, Na, K, Rb, Cs$) переход от $RbCl$ к $CsCl$ сопровождается сменой СТ $NaCl$ ($KЧ = 6$) на СТ $CsCl$ ($KЧ = 8$). Морфотропный переход может происходить и без изменения состава, у какого-то одного соединения, существующего в двух структурных формах (автоморфотропия). Так, в ряду карбонатов MSO_3 ($M = Mg, Ca, Sr, Ba$) увеличение ионного радиуса M^{2+} приводит к смене СТ кальцита с $KЧ(M^{2+}) = 6$ на СТ арагонита с $KЧ(M^{2+}) = 9$, происходящем у $CaCO_3$, кристаллизующегося в обеих формах.

МОТИВ СТРУКТУРЫ. Общая организация *кристаллической структуры*, определяемая конфигурацией *структурных единиц* кристалла и их взаимным расположением. Выделяют пять основных структурных мотивов: 1) бесконечная сетка практически одинаковых связей (*координационные структуры*); 2) с отдельными конечными группировками – молекулами, ионами, комплексами и пр. (*островные структуры*); 3) полимерные цепи или ленты (*цепочечные структуры*); 4) бесконечные слои (*слоистые структуры*); 5) бесконечная трехмерная сетка связей части атомов структуры (*каркасные структуры*). Возможны также промежуточные и гибридные мотивы структуры (смешаннослойные, ленточно-цепочечные и т.д.), наиболее известные среди силикатов.

Н

НАПРАВЛЕНИЕ. Вектор, соединяющий две точки симметричной фигуры. Симметрически эквивалентные направления, как и ПСТ, могут быть общими и частными, их можно характеризовать кратностью и симметрией по-

ложения. Направление с кратностью равной 1 называют единичным. Направление, не преобразующееся в противоположное при действии *операций симметрии*, является полярным. Направление, параллельное *узловому ряду* решетки, называется кристаллографическим. Направление, параллельное *оси симметрии* или нормали к *плоскости симметрии*, называется особым.

НЕЗАВИСИМАЯ ЧАСТЬ ЯЧЕЙКИ. Минимальная часть ЭЯ, размножением которой элементами ПГС можно воссоздать всю ячейку.

НЕЙТРОНОГРАФИЯ. Дифракционный метод исследования строения вещества, позволяющий получать сведения об атомной и *магнитной структуре* кристаллов с помощью рассеяния тепловых нейтронов на ядрах и магнитных моментах атомов. Нейтронография уступает РСА по доступности, стоимости, разрешающей способности, требует больших размеров образца. В то же время малое поглощение нейтронов, отсутствие систематической зависимости рассеяния от атомного номера дают возможность более надежного определения положений атомов с близкими атомными номерами и легких атомов в присутствии тяжелых. Магнитная нейтронография позволяет изучать *магнитную структуру* кристаллов, величины магнитных моментов, магнитные фазовые переходы, распределение спиновой плотности и т. д.

НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ СИММЕТРИЯ. Симметрия, которой присущи элементы симметрии пятого, седьмого и более высоких порядков. Такая симметрия несовместима с *кристаллической решеткой* и отсутствует у кристаллов, для которых характерна кристаллографическая симметрия. Примеры некристаллографической симметрии: ферроцен $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$, фуллерен C_{60} , *квазикристаллы*, некоторые *магнитные структуры*. Под некристаллографической симметрией иногда понимают более высокую топологическую или локальную симметрию (*псевдосимметрию*), характерную для некоторых структур или молекул, состоящих из практически одинаковых фрагментов (например, структуры семейства перовскита CaTiO_3).

НЕНАБЛЮДАЕМЫЕ ОТРАЖЕНИЯ. Рефлексы, не относящиеся к *систематическим погасаниям*, интенсивности которых меньше стандартного отклонения для фона. Как правило, такие отражения исключают из анализа при расшифровке и уточнении структуры.

НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ – см. *сплошной спектр рентгеновского излучения*.

НЕПРИМИТИВНАЯ ЯЧЕЙКА. ЭЯ, у которой кроме узлов решетки в вершинах параллелепипеда присутствуют дополнительные узлы на ребрах, гранях или в объеме ячейки. При подсчете числа узлов в ЭЯ узлы, находящиеся в вершинах, на ребрах, гранях и в объеме ячейки берутся с весом 1/8, 1/4, 1/2 и 1, соответственно. Непримитивными ячейками, удовлетворяющими условиям Бравэ (*ячейками Бравэ*), являются *базоцентрированная, бокоцентрированная, объемноцентрированная, ромбоэдрическая, гранецентрированная ячейки*.

НЕСИММОРФНАЯ ГРУППА. ПГС, сходственная ТГС, но которая не является ее подгруппой. В таких ПГС (всего 157) симметрия положения част-

ных позиций всегда ниже симметрии сходственной ТГС, а в ряде случаев (при наличии только открытых элементов симметрии) частные позиции могут вовсе отсутствовать. Несимморфные группы делятся на *гемисимморфные группы* (сохранены поворотные оси сходственной ТГС) и *асимморфные группы* (нет комплекса поворотных осей сходственной ТГС). Например, $Pm\bar{2}$, $R\bar{3}$ - гемисимморфные группы; $Pcca$, $F4_132$ - асимморфные группы.

НЕСОРАЗМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ. Модулированные структуры с увеличенными в некратное число раз *трансляциями* исходной ЭЯ, что вызвано несоизмеримостью *периодов ячейки* и волны модуляции. Несоразмерная модуляция сопровождается появлением дополнительных слабых сателлитных рефлексов на *рентгенограммах*, не укладывающихся в кратно увеличенную ЭЯ, и обычно возникает при *полиморфном превращении* типа смещения или порядок-беспорядок, а также при частичном упорядочении в *нестехиометрических соединениях*, интеркалировании или срастании фаз. Несоразмерные структуры описывают в рамках формализма (3+d)-мерных сверхпространственных *групп симметрии*, где d – число несоизмерно модулированных периодов ячейки. Примеры несоизмерных фаз (приведены температурные границы существования): K_2SeO_4 (93-129,5 К), $Hg_{3-x}AsF_6$ (< 120 К).

НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ. Твердые фазы переменного состава (*твердые растворы*), образующиеся в двух- и многокомпонентных системах, и отличающиеся от компонентов по составу (интервалу области гомогенности) и структуре. Такие фазы можно разделить на два типа: 1) дальтони́ды, характеризующиеся наличием максимума на диаграмме состав - свойство в точке рационального состава в пределах их интервала гомогенности; 2) бертолли́ды, в интервале гомогенности которых рациональная точка максимума свойств отсутствует. По Г. Б. Бокию, в бертоллиде во всем интервале составов имеются либо дефектные позиции, либо позиции, заполненные изоморфной смесью атомов – компонентов; в то время как в дальтониде при достижении точки рационального состава такие позиции полностью освобождаются или нацело заселяются одним сортом атомов (с полным или частичным упорядочиванием структуры). В некоторых случаях (например, при изменении состава, температуры или давления) можно наблюдать переход от бертоллидных к дальтонидным фазам. Так, в системе Fe-Ni-Sb при 600 °С у фазы со СТ NiAs наблюдается постепенный переход от дальтониды Ni_xSb_{1-x} (48-53 ат. % Sb) к бертоллиду типа внедрения Fe_xSb_{1-x} (43-46 ат. % Sb); вюстит $Fe_{1-x}O$ ($0,05 \leq x \leq 0,15$) под давлением можно получить стехиометрическим.

НЕУПОРЯДОЧЕННАЯ СТРУКТУРА – см. *разупорядоченная структура*.

НИЗШИЕ СИНГОНИИ. Сингонии (*триклинная, моноклинная, ромбическая*), в которых элементом симметрии высшего порядка является ось симметрии (поворотная, инверсионная, зеркально-поворотная) второго порядка.

О

ОБЛАСТЬ КОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ. Участок *кристалла* с правильным периодическим расположением атомов или с такими небольшими отклонениями от этого строения, которые не нарушают *когерентности* рассеяния рентгеновских лучей. Область когерентного рассеяния может быть меньше размеров кристаллических частиц или *кристаллитов*.

ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА. Решетка, построенная в обратном пространстве. Базисные вектора обратной решетки \mathbf{b}_j однозначно связаны с базисом соответствующей прямой решетки \mathbf{a}_i ($i, j = 1, 2, 3$): $(\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j) = \lambda \delta_{ij}$, где λ – константа (может быть равна 1, 2π , длине волны рентгеновского излучения), δ_{ij} – символ Кронекера. Базисные векторы обратной решетки равны $\mathbf{b}_i = [\mathbf{a}_j \mathbf{a}_k] / V$, где $V = (\mathbf{a}[\mathbf{b}\mathbf{c}])$ – объем ячейки прямой решетки. Направления векторов таковы, что вектор \mathbf{b}_i перпендикулярен \mathbf{a}_j и \mathbf{a}_k . Узловые ряды прямой решетки направлены по нормальям к *узловым плоскостям* обратной решетки, и наоборот. Каждому семейству плоскостей (hkl) прямой решетки соответствует перпендикулярный ему вектор обратной решетки $\mathbf{H} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$, длина которого равна *межплоскостному расстоянию*. Для любого кристалла прямая и обратная решетки имеют одинаковую ТГС. Обратная решетка соответствует геометрии дифракционной картины и используется для ее описания в *дифракционных методах*.

ОБРЫВ РЯДА. Отбрасывание малых членов бесконечного сходящегося ряда при его суммировании. Ошибка обрыва ряда тем меньше, чем больше первых членов ряда в оставшейся сумме. В РСА ограничение экспериментальных дифракционных данных по углу отражения θ приводит к потере информации о высокоугловых *структурных факторах* – коэффициентах ряда Фурье распределения *электронной плотности кристалла*. Из-за обрыва ряда вблизи центров атомов $\rho(xyz)$ спадает не монотонно, а по закону затухающих колебаний, что приводит к сдвигу атомов из истинных положений и появлению ложных максимумов. Наиболее выражен эффект обрыва ряда $\rho(xyz)$ в структурах с тяжелыми атомами, для которых часто характерны ложные максимумы $\rho(xyz)$ на расстояниях менее 2 \AA от центров тяжелых атомов и затрудненность фиксации положения легких атомов. Уменьшить ошибки обрыва ряда можно, перейдя на излучение с меньшей длиной волны или используя низкотемпературную съемку, что способствует увеличению объема дифракционных данных.

ОБЩАЯ ПОЗИЦИЯ. Произвольное положение *базисной точки* ПСТ вне какого-либо *закрытого элемента симметрии*, когда ее координаты независимы друг от друга.

ОБЩАЯ ПРАВИЛЬНАЯ СИСТЕМА ТОЧЕК – см. *правильная система точек*.

ОБЪЕМ ЯЧЕЙКИ. Объем ЭЯ решетки, равный смешанному произведению *базисных векторов ячейки*.

ОБЪЕМНОЦЕНТРИРОВАННАЯ РЕШЕТКА. Решетка Бравэ, ячейкой Бравэ которой является объемноцентрированная ячейка.

ОБЪЕМНОЦЕНТРИРОВАННАЯ ЯЧЕЙКА. Непримитивная ЭЯ, на пересечении телесных диагоналей которой находится узел решетки. Содержит два узла. Объемноцентрированная ячейка Бравэ обозначается символом I .

ОПЕРАЦИЯ СИММЕТРИИ. Отображение геометрической фигуры самой в себя при *изометрическом преобразовании* пространства. Любую операцию симметрии можно представить как линейное преобразование координат точки, перешедшей в новое, симметрически эквивалентное положение: $r' = r_0 + Ur$, где r_0 – постоянный для данного преобразования вектор, r, r' – исходный и преобразованный радиус-векторы соответственно, U – *ортогональная матрица*, описывающая операцию симметрии ($\det U = \pm 1$). В зависимости от знака детерминанта различают: 1) операции симметрии I рода ($\det U = 1$), которые связывают *конгруэнтные* фигуры, 2) операции симметрии II рода ($\det U = -1$), которые связывают *энантиоморфные* фигуры. Показатель степени n в уравнении $U^n = E$ (E – единичная матрица) называют порядком операции симметрии. Если операция симметрии оставляет неподвижной хотя бы одну точку фигуры, то ее называют *закрытой операцией симметрии*, в противном случае это *открытая операция симметрии*. Открытые операции симметрии характерны только для бесконечных фигур.

ОРТОГЕКСАГОНАЛЬНАЯ ЯЧЕЙКА. Ромбическая *базоцентрированная ячейка* (С-ячейка) минимального объема, которую можно выбрать в *гексагональной решетке*. Векторы a, b, c *гексагональной ЭЯ* и a', b', c' ортогексагональной ячейки связаны соотношением $a' = a, b' = a + 2b, c' = c$. Отсюда, $b' = \sqrt{3}a$, а объем ортогексагональной ячейки вдвое больше гексагональной.

ОРТОГОНАЛЬНАЯ МАТРИЦА. Квадратная матрица, обратная матрица которой совпадает с ее транспонированной матрицей: $A^{-1} = A^T$ или $A^T A = A A^T = E$, где E – единичная матрица.

ОРТОГОНАЛЬНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ. Преобразование пространства, характеризующееся *ортогональной матрицей*; является *изометрическим преобразованием*. Все обычные *операции симметрии* относятся к ортогональным преобразованиям.

ОСОБАЯ ТОЧКА. 1). Точка, остающаяся неподвижной после выполнения всех операций ТГС. 2). Точка, остающаяся неподвижной при выполнении данной операции симметрии. 3). Точка *инверсионной оси симметрии*, в которой происходит инверсия.

ОСОБОЕ НАПРАВЛЕНИЕ. *Направление* в кристалле, параллельное оси симметрии n -ого ($n \geq 2$) порядка или нормали к плоскости симметрии. Параллельно особым направлениям располагают оси *кристаллографических координатных систем* и ребра *ячеек Бравэ*.

ОСТРОВНАЯ СТРУКТУРА. *Гетеродесмическая структура*, в которой *структурными единицами* являются атомы (ионы) и (или) конечные группы-

ровки (молекулы, сложные ионы, комплексы).

ОСЬ СИММЕТРИИ. Прямая, вокруг которой происходит поворот на угол $360^\circ/n$, где n — порядок оси. *Поворотная ось симметрии* осуществляет одну операцию симметрии – поворот. Сложные оси симметрии включают в себя дополнительную операцию симметрии: *инверсию (инверсионная ось)*, отражение в перпендикулярной оси плоскости (*зеркально-поворотная ось*), сдвиг вдоль оси на дробную часть трансляции решетки (*винтовая ось*). Положительным направлением поворота принимается поворот против часовой стрелки.

ОТКРЫТАЯ ОПЕРАЦИЯ СИММЕТРИИ. *Операция симметрии*, не оставляющая неподвижной ни одной точки фигуры. К открытым операциям симметрии I рода относятся повороты вокруг *винтовых осей*, а *открытыми элементами симметрии* II рода являются *плоскости скользящего отражения*.

ОТКРЫТЫЙ ЭЛЕМЕНТ СИММЕТРИИ. Элемент симметрии, отвечающий *открытой операции симметрии*.

II

ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕД ПОВТОРЯЕМОСТИ – см. *ячейка решетки*.

ПАРАЛЛЕЛОЭДР. Выпуклый многогранник, параллельным переносом которого можно без пропусков заполнить пространство. Параллелоэдры имеют попарно равные параллельные грани в виде centrosymmetричных четырех- и шестиугольников. Существует пять топологически различных типов параллелоэдров (рис. 6).

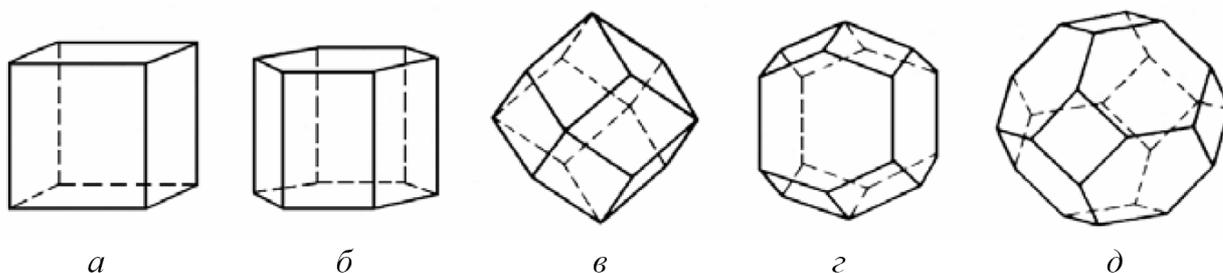


Рис. 6. Типы параллелоэдров: а) – параллелепипед; б) – гексагональная призма; в) – параллелограмматический додекаэдр; г) – удлиненный параллелограмматический додекаэдр; д) – усеченный октаэдр.

Параллелоэдр выражает собой форму и величину области пространства, ближайшей к данному узлу решетки.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС – см. *трансляция*.

ПАРАМЕТРЫ РЕШЕТКИ. Скалярные величины, описывающие ЭЯ или *ячейку Бравэ* и определяющие тем самым *кристаллическую решетку*: модули некопланарных трансляций a , b , c и углы между их направлениями $\alpha = \arccos (bc)$, $\beta = \arccos (ac)$, $\gamma = \arccos (ab)$.

ПАРАМЕТРЫ ЯЧЕЙКИ. Скалярные величины, определяющие вид ЭЯ: модули некопланарных векторов ячейки \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} и углы между их направлениями $\alpha = \arccos(\mathbf{bc})$, $\beta = \arccos(\mathbf{ac})$, $\gamma = \arccos(\mathbf{ab})$.

ПЕРИОД ИДЕНТИЧНОСТИ. Наименьший модуль вектора трансляции решетки.

ПЛОСКОСТЬ ЗЕРКАЛЬНОГО ОТРАЖЕНИЯ – см. плоскость симметрии.

ПЛОСКОСТЬ СИММЕТРИИ. *Закрытый элемент симметрии*, для которого операцией симметрии является отражение точки относительно некоторой плоскости. Обозначается m (интернациональная система обозначений) или σ (по Шенфлису). Эквивалентна перпендикулярным к ней зеркально-поворотной оси первого порядка S_1 и инверсионной оси второго порядка $\bar{2}$.

ПЛОСКОСТЬ СКОЛЬЗЯЩЕГО ОТРАЖЕНИЯ. *Открытый элемент симметрии* – плоскость, относительно которой происходит отражение точки с дальнейшим ее переносом на величину, равную половине трансляции вдоль отражающей плоскости. В кристалле скольжение может быть параллельно одному из ребер ячейки Бравэ (в соответствии с этим обозначаются a , b , c), вдоль телесной диагонали (d) или диагонали грани (n).

ПЛОТНЕЙШИЕ УПАКОВКИ. 1). Расположение тел в пространстве с максимальной плотностью, при котором каждое тело касается ближайших соседей. 2). Расположения равновеликих шаров в пространстве (*шаровые упаковки*), при которых каждый шар касается 12 соседних шаров. По типу КП каждого шара различают икосаэдрические (все они некристаллографические) и кубооктаэдрические шаровые упаковки. 3). Наиболее часто под плотнейшей упаковкой понимается одна из кубооктаэдрических шаровых упаковок (ПШУ). Они построены из гексагональных плотноупакованных слоев, которые накладываются друг на друга так, что каждый шар касается трех шаров соседнего слоя. Число слоев, приходящихся на период ПШУ, перпендикулярный слою, называют слойностью упаковки. Наиболее важные кубооктаэдрические упаковки – двухслойная гексагональная плотнейшая упаковка (ГПУ) и трехслойная кубическая плотнейшая упаковка (КПУ). Коэффициент упаковки любой из ПШУ составляет $\frac{\pi}{3} \cdot \sqrt{2} \approx 0,7405$. Во всех ПШУ присутствуют пустоты двух типов: окруженные 4 шарами (тетраэдрические) и 6 шарами (октаэдрические). На один шар ПШУ приходятся две тетраэдрических пустоты и одна октаэдрическая. ПШУ – часто используемый способ описания структур инертных газов, металлов и неорганических соединений. Например, в структуре Mg реализуется ГПУ, а в структуре NaCl – КПУ атомов Cl, где атомы Na занимают все октаэдрические пустоты.

ПЛОТНОСТЬ УПАКОВКИ - см. коэффициент упаковки.

ПЛОТНОУПАКОВАННЫЕ СТРУКТУРЫ. Структуры, в которых атомы (или часть атомов) расположены по закону одной из ПШУ, а остальные атомы – в ее тетраэдрических и (или) октаэдрических пустотах.

ПЛОТНЫЕ УПАКОВКИ. Расположения равновеликих шаров в про-

странстве (*шаровые упаковки*), при котором каждый шар касается от 6 до 11 соседних шаров. Из бесконечного множества таких упаковок наиболее важными являются: 1) простая кубическая упаковка (центры шаров в вершинах кубической ячейки) с КЧ = 6, кубическими пустотами и коэффициентом упаковки $\pi/6 \approx 0,5236$; 2) простая гексагональная упаковка (центры шаров в вершинах гексагональной ячейки с $a/c = 1$) с КЧ = 8, тригонально — призматическими пустотами и коэффициентом упаковки $\frac{\pi}{3} \cdot \sqrt{3} \approx 0,6046$; 3) объемноцентрированная кубическая упаковка (ОЦК) с КЧ = 8, неправильными тетраэдрическими пустотами и коэффициентом упаковки $\frac{\pi}{8} \cdot \sqrt{3} \approx 0,6802$. Плотные упаковки – часто используемый модельный способ описания структур металлов и неорганических соединений.

ПОВОРОТНАЯ ОСЬ. Закрытый элемент симметрии, вокруг которого осуществляется поворот точки на угол $\varphi = 360^\circ/n$, где n – порядок поворотной оси. Обозначается n (интернациональная система обозначений) или C_n (по Шенфлису).

ПОГЛОЩЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ. Уменьшение интенсивности излучения, проходящего через вещество, за счет передачи части энергии атомам. Интенсивность излучения I , прошедшего слой вещества толщиной s , связана с интенсивностью падающего излучения I_0 соотношением $I = I_0 \exp(-\mu s)$, где μ – коэффициент поглощения. Степень ослабления рентгеновского излучения зависит от μ и пути рентгеновского луча в объеме кристалла. В целом поглощение излучения зависит от длины волны λ , атомных номеров элементов в составе кристалла, его плотности, размеров и формы. Поправку на поглощение обычно вводят путем: 1) вычисления ослабления интенсивности каждого рефлекса hkl по точным измерениям формы кристалла и направлений падающего и отраженного лучей; 2) сравнения интенсивностей эквивалентных по симметрии отражений; 3) экспериментального определения поглощения по изменению интенсивностей нескольких отражений hkl при вращении кристалла вокруг нормалей к отражающим плоскостям.

ПОДГРУППА ГРУППЫ СИММЕТРИИ – см. *группа симметрии*.

ПОДРЕШЕТКА. 1) Подмножество узлов *решетки*, также образующее решетку; 2) Условное название части *атомных позиций* кристаллической структуры (часто безотносительно к тому, образуют они решетку или нет), обычно занятых одним сортом атомов. Кристаллическую структуру иногда представляют суперпозицией таких подрешеток.

ПОЗИЦИОННАЯ СИММЕТРИЯ – см. *симметрия положения*.

ПОЗИЦИЯ. Положение, которая одна из точек ПСТ может занимать относительно элементов симметрии. Различают позиции, расположенные на закрытых элементах симметрии (частные позиции) и вне таковых (общие позиции). Общие и частные позиции характеризуют двумя основными параметрами: кратностью (число точек ПСТ) и симметрией положения. Последнюю можно выразить определенной ТГС, являющейся подгруппой данной ПГС, а также числом точек, на которые разделится базисная точка при выводе ее из

частного положения в общее (величина симметрии). Для ТГС справедливо соотношение: (кратность ПСТ) \times (величина симметрии) = (порядок ТГС). Для *особых точек* ТГС кратность равна 1, а их величина симметрии и симметрия положения максимальны и совпадают с порядком группы и символом ТГС. Для ПГС кратность ПСТ и порядок группы симметрии относят к *ячейке Бравэ*. Связь между ПГС и сходственной ей ТГС дается соотношением: (кратность общей позиции ПГС) = (порядок сходственной ТГС) \times (число узлов ячейки Бравэ).

ПОЗИЦИЯ ДЕФЕКТНАЯ – см. *дефектная позиция*.

ПОЛИКРИСТАЛЛ. Агрегат из множества мелких монокристаллических зерен (*кристаллитов*) размерами 10^{-9} - 10^{-5} м, сцепленных межатомными или межмолекулярными силами и обычно произвольно ориентированных друг к другу. В ряде случаев может возникать преобладающая взаимная ориентация кристаллитов (*текстура*), чаще всего связанная с их резко анизотропной формой. Для поликристаллов (но не текстур) обычно характерна *изотропия* их свойств.

ПОЛИМОРФИЗМ. Способность твердых веществ и *жидких кристаллов* существовать в нескольких формах (полиморфных модификациях), различающихся своим строением при постоянстве химического состава. Полиморфизм простых веществ называют также *аллотропией*. Обычно разные полиморфные модификации стабильны в определенных интервалах температур и давлений и связаны между собой *полиморфными превращениями*, однако некоторые из них можно перевести в метастабильное состояние, например, резким снижением температуры (закалка). Некоторые метастабильные модификации могут существовать при обычных условиях неограниченно долго. Структурные различия полиморфных форм колеблются от незначительных (сдвиги атомов, повороты ионов или молекул) до существенных (изменение КЧ, *мотива структуры*). Разновидностью полиморфизма, связанного с образованием семейств родственных структур, отличающихся укладкой плоских слоев, является *политипия*. Примеры полиморфизма: углерод (алмаз, графит, карбин, фуллерен и др. формы), SiO₂ (кварц, тридимит, кристобалит, стишовит и др.).

ПОЛИМОРФНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ. Изменение строения и физико-химических свойств твердого тела или *жидкого кристалла* под влиянием изменения внешних условий (температуры, давления и пр.). С термодинамической точки зрения различают обратимые полиморфные превращения между равновесными фазами (энантиотропные превращения) и необратимые превращения метастабильной фазы в равновесную (монотропные превращения). Энантиотропные переходы I рода происходят с поглощением или выделением тепла и сопровождаются скачком первых производных свободной энергии G (энтропия, объем), а переходы II рода происходят без теплового эффекта и характеризуются скачком вторых производных G (теплоемкость, коэффициенты термического расширения и сжимаемости). Полиморфные превращения обычно сопровождаются сменой СТ и могут происходить с раз-

рывом химических связей и перестройкой структуры (реконструктивные переходы) или практически без разрыва химических связей, с небольшой деформацией структуры (дисторсионные переходы). Переходы II рода относятся к дисторсионным превращениям. Полиморфные превращения могут сопровождаться: 1) изменением КЧ; 2) изменением второй *координационной сферы*; 3) нарушением упорядоченности по типу замещения или вращения; 4) магнитными или электронными переходами с изменением или без изменения структуры. Дисторсионные превращения делятся на переходы типа смещения или порядок-беспорядок и могут происходить без изменения числа атомов в ячейке, при этом симметрия одной из фаз (обычно низкотемпературной) является подгруппой другой. Высокотемпературные фазы обычно имеют более симметричные, равномерные и разупорядоченные структуры по сравнению с низкотемпературными формами. Фазы высокого давления имеют большую плотность и часто обладают большим КЧ и упорядоченностью по отношению к фазам обычного давления.

ПОЛИТИПИЗМ. Разновидность *полиморфизма*, связанная со способностью вещества кристаллизоваться в нескольких модификациях, отличающихся порядком чередования или поворотом одинаковых слоев (*модулей*). Политипизм возникает из-за различных способов наложения одного или более структурно совместимых модулей. Политипные формы имеют равные параметры решеток в пределах слоя и разные – перпендикулярно слою, которые пропорциональны числу слоев в периоде. Характерен для слоистых веществ (графит, глины и др.) и *плотноупакованных структур* (SiC, ZnS и др.). Большое структурное сходство с политипами показывают смешаннослойные соединения и структуры прораствания, состоящие из двух и более типов модулей и иногда называемые гетерополитипами.

ПОЛИХРОМАТИЧЕСКОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ – см. *сплошное рентгеновское излучение*.

ПОЛИЭДР. То же, что многогранник.

ПОЛИЭДР КООРДИНАЦИОННЫЙ – см. *координационный полиэдр*.

ПОЛНОПРОФИЛЬНЫЙ АНАЛИЗ – см. *метод Ритвельда*.

ПОЛУПРАВИЛЬНЫЕ МНОГОГРАННИКИ. Выпуклые многогранники, грани которых являются правильными, но не одинаковыми, многоугольниками и многогранные углы равны между собой. Всего известно 16 полуправильных многогранников: два бесконечных ряда (призмы и *антипризмы*) и 14 отдельных *полиэдров*. Наибольший кристаллохимический интерес представляют призма, *антипризма*, *кубооктаэдр* и *усеченный октаэдр*.

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ФАКТОР. Множитель, учитывающий поляризацию рассеянного рентгеновского излучения в зависимости от угла рассеяния θ : $P = (1 + \cos^2\theta)/2$.

ПОЛЯРНАЯ ГРУППА СИММЕТРИИ. *Группа симметрии* фигуры, имеющей *полярное* единичное направление, совпадающее с направлением единственной *поворотной* или *винтовой оси* (в группе с одной *плоскостью симметрии* — любое направление, лежащее в ней). Такие группы (точечные

или пространственные) относятся к *семействам точечных групп* вращающегося или неподвижного конуса. Наличие полярной группы симметрии – необходимое условие существования дипольного момента молекулы или пирозлектрических свойств кристалла.

ПОЛЯРНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ. Направление, не преобразующееся в противоположное при действии операций симметрии группы симметрии. Полярные направления возможны только у фигур, не обладающих *центром симметрии*.

ПОРЯДОК ГРУППЫ СИММЕТРИИ. Число элементов симметрии, входящих в данную группу симметрии.

ПОРЯДОК ОПЕРАЦИИ СИММЕТРИИ. Максимальное число эквивалентных точек, размножаемых симметрическими преобразованиями. Различают операции и *элементы симметрии* низшего порядка (не более второго) и высшего порядка (третьего и более).

ПОРЯДОК ЭЛЕМЕНТА СИММЕТРИИ. Численно равен *порядку операции симметрии*.

ПОСТОЯННАЯ МАДЕЛУНГА. Безразмерная константа, равная сумме бесконечного знакопеременного ряда, возникающего при подсчете вклада в энергию ионной решетки кулоновского взаимодействия данного иона со всеми ионами кристалла. Для приведенного случая постоянная Маделунга зависит только от СТ, но не зависит от масштаба структуры. Для более сложных случаев эта постоянная будет зависеть как от параметров решетки, так и от координат ионов.

ПРАВИЛА ПОГАСАНИЯ – см. *систематические погасания*.

ПРАВИЛО ВЕГАРДА. Линейная зависимость *параметров решетки нестехиометрического соединения* или *твердого раствора* двух веществ от состава.

ПРАВИЛО РЕТГЕРСА. Линейная зависимость объема ячейки или мольного объема *твердого раствора* двух веществ от состава.

ПРАВИЛЬНАЯ СИСТЕМА ТОЧЕК. Совокупность точек, которые преобразуются друг в друга всеми *операциями симметрии* данной *группы симметрии*. ПСТ можно получить из одной исходной точки, называемой *базисной*, размножая ее всеми операциями симметрии группы. Координаты каждой точки правильной системы выводятся из координат базисной точки с помощью матриц операций симметрии. В зависимости от положения базисной точки различают ПСТ, расположенные на *закрытых элементах симметрии* (*частные ПСТ*) и вне таковых (*общие ПСТ*). Общие и частные ПСТ характеризуют двумя основными параметрами: числом точек ПСТ (кратность ПСТ) и симметрией положения. Последнюю можно выразить определенной ТГС, являющейся подгруппой данной группы симметрии, а также числом точек, на которые разделится базисная точка при ее смещении из частного положения в общее (величина симметрии). Кратность общей ПСТ равна порядку группы симметрии. Кратность частных ПСТ является делителем кратности общей ПСТ.

ПРАВИЛЬНЫЕ МНОГОГРАННИКИ. Выпуклые многогранники, грани которых являются равными правильными многоугольниками и все многогранные углы равны между собой. Известно пять правильных многогранников - тетраэдр, куб, октаэдр, додекаэдр, икосаэдр (табл. 1, рис. 7).

Табл. 1.

Полиэдр	Граней	Ребер	Вершин	Симметрия
Тетраэдр	4 треугольных	6	4 трехгранных	$\bar{4} 3 m (T_d)$
Куб	6 квадратных	12	8 трехгранных	$m \bar{3} m (O_h)$
Октаэдр	8 треугольных	12	6 четырехгранных	$m \bar{3} m (O_h)$
Додекаэдр	12 пятиугольных	30	20 трехгранных	$m \bar{5} m (I_h)$
Икосаэдр	20 треугольных	30	12 пятигранных	$m \bar{5} m (I_h)$

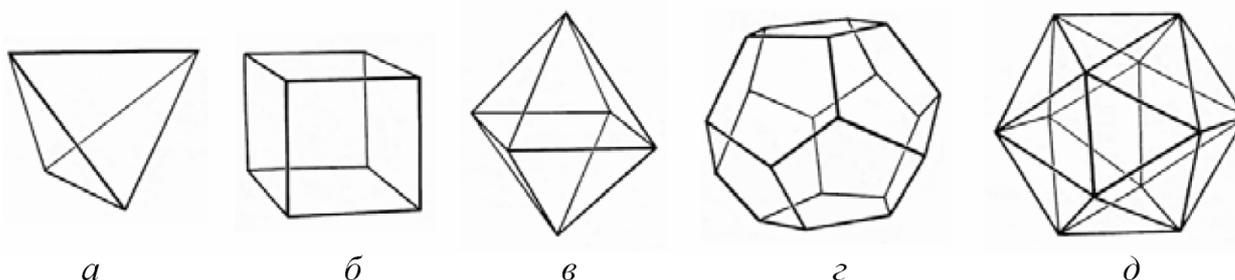


Рис. 7. Правильные многогранники: а) – тетраэдр; б) – куб; в) – октаэдр; г) – додекаэдр; д) – икосаэдр.

ПРЕДЕЛЬНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ (ГРУППЫ КЮРИ). ТГС с поворотными осями бесконечного порядка. Группы Кюри являются предельными обобщениями конечных ТГС при неограниченном возрастании порядка их осей симметрии, т.е. каждая предельная группа является надгруппой бесконечного множества ТГС. В трехмерном пространстве существуют семь групп Кюри (три из них являются *хиральными*), симметрия которых наглядно изображается семью телами вращения (рис. 8). Им соответствуют (даны обозначения групп по Шенфлису, в скобках – международные): 1) хиральная группа вращающегося конуса $C_\infty (\infty)$; 2) группа неподвижного конуса $C_{\infty v} (\infty m)$; 3) группа вращающегося цилиндра $C_{\infty h} = S_\infty (\infty / m = \bar{\infty})$; 4) хиральная группа скрученного цилиндра $D_\infty (\infty 2)$; 5) группа неподвижного цилиндра $D_{\infty h} (\infty / m m = \bar{\infty} m)$; 6) хиральная группа шара с вращающимися точками поверхности $K (2\infty)$; 7) группа неподвижного шара $K_h (\bar{\infty} m)$. В соответствии с группами Кюри проводят классификацию ТГС, выделяя семь семейств точечных групп.

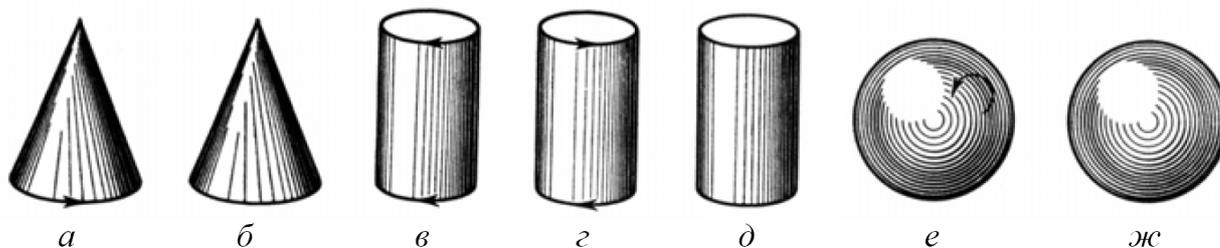


Рис. 8. Тела вращения, символизирующие группы Кюри: а) – вращающийся конус; б) – неподвижный конус; в) – вращающийся цилиндр; г) – скрученный цилиндр; д) – неподвижный цилиндр; е) – шар с вращающимися точками поверхности; ж) – неподвижный шар.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ КООРДИНАТНЫХ СИСТЕМ. Переход от одной кристаллографической координатной системы (или ячейки решетки) к другой. Такой переход можно представить как линейное преобразование (без сдвига начала) старого репера a_1, a_2, a_3 к новому реперу a'_1, a'_2, a'_3 и наоборот: $a' = \alpha a$, $a = \beta a'$, где α – матрица прямого преобразования, $\beta = \alpha^{-1}$ – матрица обратного преобразования. Детерминант $\det(\alpha) = 1/\det(\beta) = \pm V'/V$, где V' и V – объемы новой и старой ячеек соответственно, а знак зависит от того, меняется (-) или нет (+) ориентация тройки векторов при преобразовании. Координаты точек x, y, z преобразуются транспонированной обратной матрицей $\beta_{ji} = \beta_{ij}^T$ (контравариантное преобразование). Индексы узлов и узловых рядов решетки также преобразуются по контравариантному закону. Индексы плоскостей преобразуются той же матрицей прямого преобразования α , что и оси ячейки (ковариантное преобразование).

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ СИММЕТРИИ - см. операция симметрии.

ПРИВЕДЕННАЯ ЯЧЕЙКА. ЭЯ решетки данной структуры, выбранная для удобства сопоставления с ячейкой другой структуры или переведенная в стандартную установку.

ПРИМИТИВНАЯ ЯЧЕЙКА. Ячейка решетки, у которой узлы решетки находятся только в вершинах. Примитивная ячейка Бравэ обозначается символом P , содержит один узел.

ПРИНЦИП КЮРИ. Положения, связанные с симметрическими взаимоотношениями причин и следствий (воздействий и явлений): а) элементы симметрии причин проявляются в элементах симметрии следствий; б) при наложении нескольких явлений сохраняются лишь общие для них элементы симметрии. Первая часть принципа Кюри есть симметрическое выражение принципа причинности, а вторую часть называют принципом суперпозиции Кюри, который является обобщением принципа Неймана.

ПРИНЦИП МАКСИМАЛЬНОЙ РАВНОМЕРНОСТИ. 1). Один из структурообразующих факторов, связанный с взаимным расположением катионов и анионов в ионных кристаллах: распределение катионов и анионов в ионных структурах максимально равномерно и характеризуется наибольшим

возможным объемом. Обосновывается с точки зрения минимизации сил отталкивания одноименно заряженных ионов. 2). Обобщение вышеприведенного принципа на кристаллы с ненаправленными связями (ионными, металлическими и ван-дер-ваальсовыми): атомы и атомные группировки, между которыми действуют связи ненаправленного характера, стремятся к максимально равномерному расположению их центров тяжести в пространстве.

ПРИНЦИП НЕЙМАНА. Основной постулат *кристаллофизики*, устанавливающий связь симметрии кристалла и его физических свойств: группа симметрии физического свойства кристалла включает в себя ТГС кристалла. Иными словами, ТГС кристалла является подгруппой ТГС физического свойства кристалла.

ПРИНЦИП ПЛОТНОЙ УПАКОВКИ. Один из главных *структурообразующих факторов* в *кристаллохимии*. Структура представляется совокупностью касающихся шаров-атомов с различными *кристаллохимическими радиусами*: материальные частицы кристалла (атомы, ионы, молекулы) стремятся к максимально плотному расположению в пространстве. Обосновывается минимизацией потенциальной энергии системы шаров. Использование этого принципа дает также наглядное описание ряда простейших структур на основе ПШУ. Альтернативный принципу плотной упаковки кристаллохимический подход (но приводящий к практически одинаковым геометрическим последствиям) – *принцип максимальной равномерности*.

ПРОБНАЯ СТРУКТУРА. Совокупность атомов и соответствующих *структурных параметров*, полученная в результате *расшифровки структуры* или на основании косвенных соображений и используемая на промежуточном этапе *уточнения структуры*. В процессе уточнения пробная структура становится более полной и точной, приобретая на заключительном этапе вид одной из *моделей структуры*.

ПРОСТАЯ ФОРМА. Совокупность симметрично эквивалентных граней кристалла. Различают закрытые (образующие замкнутый многогранник) и открытые простые формы, а также общие (не лежащие на каком-либо элементе симметрии) и частные формы. Всего насчитывается 47 геометрически различных простых форм, из них 25 – в *кубической сингонии*. Все грани простой формы объединяются символом $\{hkl\}$.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ГРУППА СИММЕТРИИ. Полный набор *операций симметрии* бесконечной трехмерной периодической фигуры, например, *кристаллической структуры*. ПГС всегда содержат *трансляции* и допускают только *кристаллографические операции симметрии*. Всего имеется 230 ПГС, которые делят на 32 *кристаллографических класса*, 7 *сингоний*, 3 *категории*. Из них абстрактно различными являются 218 групп, поскольку есть 11 пар *энантиоморфных групп симметрии*. ПГС подразделяют также на *симморфные* (включают в качестве подгруппы сходственную ТГС) и *несимморфные группы*, в которых часть (или все) *закрытых элементов симметрии* сходственной ТГС заменены открытыми. ПГС обычно обозначают *интернациональными символами*, состоящими в общем случае из 4 позиций: в первой

указывают тип *ячейки Бравэ*, а в остальных – *оси симметрии* и перпендикулярные им *плоскости симметрии*, ориентация которых совпадает с соответствующими *координатными* и *диагональными направлениями*.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ РЕШЕТКА – см. *кристаллическая решетка*.

ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ РАСШИФРОВКИ СТРУКТУРЫ. Методы *расшифровки структуры*, основанные на различных (статистические, тригонометрические и др.) математических соотношениях между фазами *структурных факторов*. При этом учитывается неотрицательность *электронной плотности*, дискретность атомов и т. д. Прямые методы – наиболее часто используемый способ компьютерной расшифровки структур средней сложности, содержащих сотни и тысячи атомов в ячейке.

ПСЕВДОСИММЕТРИЯ. Взаимное расположение точек, близкое к более симметричному. Обычно группа симметрии такой системы точек является подгруппой группы симметрии идеализированного расположения. Псевдосимметрия характерна для *кристаллических структур*, производных от высокосимметричных СТ или относящихся к *плотнупакованным структурам*, а также присуща *двойникам*, *сверхструктурам* и фазам, возникающим при *полиморфных превращениях* дисторсионного типа. Локальной псевдосимметрией (*некристаллографической симметрией*) обладают некоторые макромолекулы, составленные из идентичных субъединиц (глобулярные белки, фуллерены и др.).

Р

РАВНОДЕЙСТВУЮЩАЯ ОПЕРАЦИЯ СИММЕТРИИ. *Операция симметрии*, эквивалентная по действию нескольким последовательно выполненным операциям симметрии. Матрица равнодействующего симметрического преобразования равна произведению матриц всех преобразований, поставленных справа налево в порядке их выполнения.

РАДИУС АТОМНЫЙ – см. *атомный радиус*.

РАЗНОСТНЫЙ СИНТЕЗ. Разность между экспериментальной и теоретической электронной плотностью, вычисляемая в виде *синтеза Фурье*, коэффициентами которого являются разности между измеренными и вычисленными *структурными факторами* $F^2(hkl)$. Обычно измеренным $F^2(hkl)$ приписывают фазы, вычисленные по *пробной структуре*. На картах разностных синтезов, построенных в ходе *уточнения структуры*, недостающие в пробной структуре атомы проявляются в виде максимумов, а ложные «атомы» – в виде минимумов.

РАЗУПОРЯДОЧЕННАЯ СТРУКТУРА. Кристаллическая структура, не являющаяся *упорядоченной структурой* и отличающаяся одним или несколькими видами *разупорядоченности*. В такой структуре имеет место *статистическое распределение* всех или части атомов по кристаллографическим позициям. Значения заселенности разупорядоченных позиций связаны с ве-

роятностью того или иного положения соответствующих атомов в *ячейке решетки* кристалла. Разупорядоченные структуры характерны для *нестехиометрических фаз, твердых растворов*, твердых электролитов (позиционный беспорядок), высокотемпературных модификаций веществ с симметричным расположением молекул или конечных сложных ионов (ориентационный беспорядок), парамагнетиков (магнитная неупорядоченность), а также *жидких кристаллов*.

РАЗУПОРЯДОЧЕННОСТЬ. В широком смысле слова – нарушение *ближнего* или *дальнего порядка*. В более узком смысле разупорядоченность – любое отклонение от *упорядоченной структуры* кристалла, в которой каждая атомная позиция полностью заселена атомами одного сорта. В этом случае различают два вида разупорядоченности: 1) позиционный беспорядок, когда атомная позиция заселена не полностью (*дефектная структура*) или в ней присутствуют атомы нескольких сортов; 2) ориентационный беспорядок, когда молекулы имеют несколько ориентаций (в предельном случае - вращение) относительно положения их центра тяжести в кристалле. В случае *магнитной структуры* говорят о магнитной неупорядоченности – неупорядоченности направлений спинов неспаренных электронов в парамагнетиках. Иногда говорят о динамической или статической неупорядоченности в зависимости от того, происходят ли реальные переходы атомов (ионов, молекул) из одного положения в другое или таких переходов нет. При любой разупорядоченности структура имеет статистический характер, т. е. значения заселенности разупорядоченных кристаллографических позиций связаны с вероятностью того или иного положения соответствующих атомов (ионов, молекул) в ячейке решетки кристалла. Степень разупорядоченности структуры характеризуют числом разупорядоченных позиций или количеством различных ориентаций молекулы (сложного иона).

РАСШИФРОВКА СТРУКТУРЫ. Определение, как правило, по данным *дифракционных методов* модели структуры. Расшифровка связана с решением или обходом *фазовой проблемы* для нахождения первоначальной *пробной структуры*, являющейся исходной для *уточнения структуры*. Наибольшее распространение получили такие методы расшифровки структуры как метод *функции Паттерсона*, метод *изоморфного замещения*, *прямые методы*.

РЕАЛЬНАЯ СТРУКТУРА. Конкретное расположение атомов в данной области кристалла. Чаще всего под реальной структурой понимают локальные или глобальные нарушения *идеальной структуры* в масштабах всего кристалла: внедрение примесных атомов или фрагментов других фаз, *дефекты*, дислокации, неравномерность распределения атомов, неупорядоченность и т. д. Реальную структуру изучают с помощью рентгенографии, электронной дифракции, электронной микроскопии высокого разрешения и других методов.

РЕНТГЕНОАМОΡФНЫЙ. Образцы, которые не дают отдельных рефлексов. Так проявляют себя аморфные тела или поликристаллы с размером кристаллитов меньше области когерентного рассеяния ($< 10^{-9}$ м).

РЕНТГЕНОВСКАЯ ПЛОТНОСТЬ. Плотность, вычисленная из рентгенографических данных по объему ячейки, молекулярной массе и числу формульных единиц в ячейке. Рентгеновская плотность больше измеренной из-за несовершенства реальных кристаллов.

РЕНТГЕНОВСКАЯ ТРУБКА. Основной лабораторный источник рентгеновского излучения. См. лабораторные работы № 1,6.

РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ – см. лабораторную работу № 1.

РЕНТГЕНОГРАММА. Картина рассеяния (дифракции) рентгеновского излучения от различных объектов, полученная фотографически или с помощью детекторов ионизирующего излучения (*дифрактограмма*). Обычно рентгенограмма является двумерной и выражает зависимость интенсивности рассеянного излучения от угла рассеяния.

РЕНТГЕНОГРАФИЯ. Совокупность методов исследования фазового состава и строения вещества с помощью рассеяния моно- или полихроматического рентгеновского излучения. Объектами рентгенографического исследования могут быть *монокристаллы, поликристаллы, пленки, полимеры, аморфные тела, жидкие кристаллы, жидкости, газы*. Анализ *рентгенограммы* позволяет получить сведения о *симметрии, параметрах решетки, строении, несовершенствах и дефектах структуры, фазовом составе, размерах и ориентации частиц вещества, процессах упорядочения, фазовых переходах, ближнем порядке в разупорядоченных кристаллах, аморфных телах и жидкостях* и т. д. Основные рентгенографические методы: 1) дифракционные методы изучения симметрии и строения кристаллов (РСА); 2) дифракционные методы исследования поликристаллов (*метод Дебая-Шеррера*); 3) методы изучения *реальной структуры* (исследование текстуры, рентгеновская топография, малоугловое рассеяние и т. д.); 4) специальные методы (прецизионное измерение параметров решетки, исследование радиального распределения в аморфных и жидких веществах, диффузное рассеяние и др.).

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ. Самый распространенный *дифракционный метод* изучения симметрии и строения вещества (в основном кристаллов) с помощью дифракции рентгеновского излучения. РСА – наиболее удобный, доступный и универсальный метод *структурного анализа*. С его помощью определяют более 99 % кристаллических структур. Основные практические особенности РСА – небольшие размеры образца (0,01-0,5 мм), пропорциональность *атомного фактора* атомному номеру. Последнее обуславливает основной недостаток РСА – фактическую неразличимость атомов с близкими атомными номерами и трудность фиксации легких атомов на фоне тяжелых. Основные методы РСА: 1) *метод Лауэ* - регистрация дифракционной картины с неподвижного монокристалла на полихроматическом излучении (используется для ориентировки, выявления симметрии и качества кристалла); 2) *метод вращения* - регистрация дифракционных отражений на монокристаллическом излучении с монокристалла, вращающегося (качающегося) вокруг кристаллографической оси (используется для определения периодов решетки и симметрии кристалла); 3) регистрация интегральных интен-

сивностей и углов дифракции монокроматического излучения на монокристалльном *дифрактометре* (используется для *расшифровки* и *уточнения структуры*, расчетов распределения *электронной плотности* в кристалле). Некоторые задачи определения симметрии и строения кристаллов для относительно простых случаев можно решать по данным, полученных на поликристаллах (*метод порошка*). Специальные методы РСА применяют для установления строения *жидких кристаллов*, полимеров, аморфных тел, жидкостей и газов.

РЕНТГЕНОФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ. Качественное и количественное определение фазового состава поликристаллических образцов на основе данных, полученных *методом Дебая-Шеррера*. РФА основан на различии интенсивностей и углов дифракции для разных фаз. Дифрактограмма многофазного образца является суперпозицией дифракционных картин отдельных фаз, что позволяет их идентифицировать (качественный РФА) и находить относительное содержание каждой из них (количественный РФА). Минимальный предел обнаружения фазы составляет $\sim 1\%$ и зависит от условий съемки, состава смеси, симметрии фаз, коэффициентов их поглощения и других факторов. По соотношению интенсивностей фаз в анализируемом образце можно определить их концентрацию с погрешностью 1-3 %.

РЕТИКУЛЯРНАЯ ПЛОТНОСТЬ. Число узлов, приходящееся на единицу площади плоскости *пространственной решетки*. Ретикулярная плотность – величина, обратная площади примитивной ЭЯ: $S = a_i a_j \sin \alpha_k$ (a_i, a_j – ребра ЭЯ ячейки сетки; α_k – угол между ребрами; $i, j, k = 1, 2, 3$).

РЕФЛЕКС. Дифракционный максимум, наблюдаемый на *рентгенограмме* или *дифрактограмме*.

РЕШЕТКА - см. *кристаллическая решетка*.

РЕШЕТКА БАЗОЦЕНТРИРОВАННАЯ – см. *базоцентрированная решетка*.

РЕШЕТКА БОКОЦЕНТРИРОВАННАЯ – см. *бокоцентрированная решетка*.

РЕШЕТКА ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННАЯ – см. *гранеццентрированная решетка*.

РЕШЕТКА ОБЪЕМОЦЕНТРИРОВАННАЯ – см. *объемноцентрированная решетка*.

РЕШЕТКА РОМБОЭДРИЧЕСКАЯ – см. *ромбоэдрическая решетка*.

РЕШЕТКИ БРАВЭ. Типы *кристаллических решеток*, классифицированные по симметрии. Каждая из них характеризуется *параллелепипедом повторяемости* наивысшей симметрии и наименьшего объема (*ячейкой Бравэ*). Выделяют 14 видов решеток Бравэ, которые делят на 7 примитивных (узлы только в вершинах ячейки) и 7 непримитивных. Непримитивными или центрированными решетками Бравэ являются *базоцентрированная, объемноцентрированная, ромбоэдрическая и гранеццентрированная решетки*. Примитивные решетки Бравэ характерны для любой *сингонии*, а центрированные решетки используются в случае моноклинной, ромбической, тригональной, тет-

рагональной и кубической сингоний. Решетки Бравэ являются стандартными при описании структуры кристаллов.

РОДСТВЕННОСТЬ СТРУКТУР. Сходство расположения атомов или структурных фрагментов в сравниваемых *кристаллических структурах*, принадлежащих к разным СТ. Родство структур чаще всего связано с одним или несколькими видами *структурно-генетических операций*. Одним из простейших видов родственности структур является *гомеотипия*. Родственные структуры могут образовывать *структурные семейства*, *сверхструктуры* и *гомологические ряды* структур.

РОМБИЧЕСКАЯ СИНГОНИЯ – см. *сингония*.



Рис.9. Ромбододекаэдр.

РОМБОДОДЕКАЭДР. Двенадцатигранник с 24 ребрами и 14 вершинами, все грани которого – равные ромбы с тетраэдрическим углом $109,47^\circ$ (рис. 9). Имеет 6 вершин, в которых сходятся острые углы 4 граней и 8 вершин, в которых сходятся тупые углы 3 граней. Может быть получен из куба присоединением к нему центров 8 прилегающих к нему кубов. Симметрия ромбододекаэдра $m\bar{3}m$ (O_h).

РОМБОЭДР. Параллелепипед, все грани которого – равные ромбы. Ромбоэдр можно получить сжатием (тупой ромбоэдр) или растяжением (острый ромбоэдр) куба вдоль его телесной диагонали (рис. 10). Симметрия ромбоэдра $\bar{3}m$ (D_{3d}).

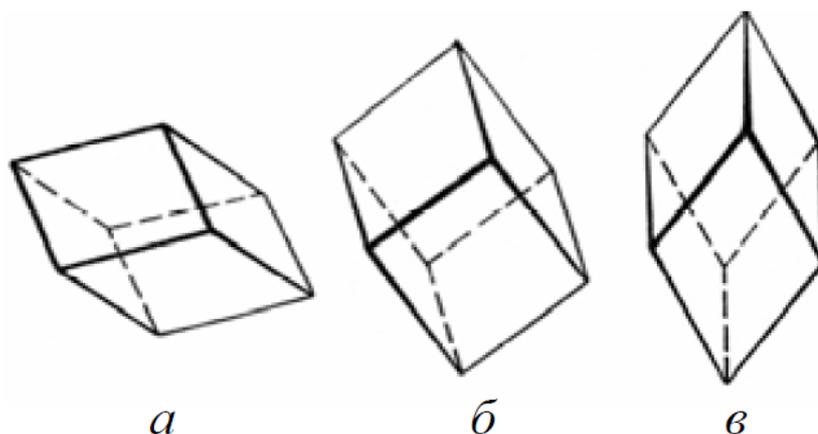


Рис. 10. Ромбоэдры: а) – тупой; б) - прямой (куб); в) - острый.

РОМБОЭДРИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА. Решетка Бравэ, ячейкой Бравэ которой является *ромбоэдрическая ячейка*.

РОМБОЭДРИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА. ЭЯ кристалла, относящегося к *тригональной сингонии*, в виде *ромбоэдра* (обозначается символом R) с параметрами $a_R = b_R = c_R$, $\alpha_R = \beta_R = \gamma_R \neq 90^\circ$. Ячейка Бравэ этого кристалла в *гексагональной установке* (два дополнительных узла, делящих длинную телесную

диагональ ячейки на три равные части), есть дважды центрированная гексагональная ячейка, обозначаемая символом R. Ее параметры $a_H = b_H \neq c_H$, $\alpha_H = \beta_H = 90^\circ$, $\gamma_H = 120^\circ$. Связь между векторами обеих ячеек (рис. 11): $a_H = a_R - b_R$, $b_H = b_R - c_R$, $c_H = a_R + b_R + c_R$.

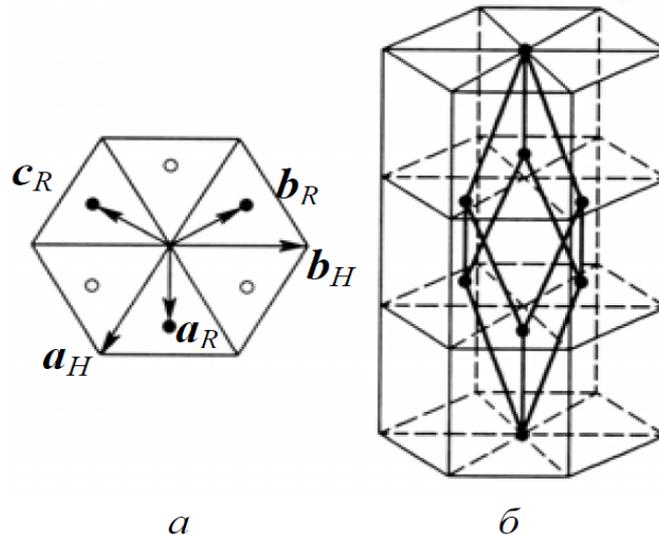


Рис. 11. Связь между примитивной ромбоэдрической и дважды центрированной гексагональной ячейками: а) – план; б) – аксонометрия.

РЯД ФУРЬЕ. Тригонометрический (гармонический) конечный или бесконечный ряд, которым можно представить любую периодическую функцию: $f(t) = f(t + T) = a_0 + \Sigma[a_n \cos(2\pi nt/T) + b_n \sin(2\pi nt/T)] = \Sigma c_n \exp[2\pi i(nt/T)]$ (T – период функции). Коэффициенты a_n , b_n и c_n называются коэффициентами Фурье функции $f(t)$. Поскольку кристалл имеет трехмерно-периодическую структуру, его электронную плотность можно представить в виде тройного ряда Фурье: $\rho(xyz) = (1/V) \Sigma \Sigma \Sigma F(hkl) \cdot \exp[-2\pi i(hx + ky + lz)]$, где V – объем ячейки. Таким образом, коэффициентами Фурье функции электронной плотности являются структурные амплитуды.

С

СВЕРНУТЫЙ КУБ - см. антикуб.

СВЕРХСТРУКТУРА. 1). Структура фазы, образовавшейся в результате фазового превращения и аналогичная исходной фазе по расположению атомов, но отличающаяся более низкой симметрией и, обычно, кратно увеличенной ЭЯ. Сопровождается появлением слабых дополнительных сверхструктурных рефлексов на рентгенограмме и возникает в процессе низкотемпературного упорядочения твердого раствора, либо полиморфного превращения типа смещения или порядок-беспорядок. Сверхструктуры с увеличением одного, двух или трех периодов исходной ЭЯ, образующиеся при полиморфных превращениях типа смещения, обычно относят к модулированным структурам.

рам. В случае если исходная ячейка Бравэ центрирована, объем ячейки сверхструктуры может уменьшиться, как это имеет место у кристобалита SiO₂ при переходе от высокотемпературной β-формы ($Fd\bar{3}m$, $Z = 8$) к низкотемпературной α-фазе ($P4_122$, $Z = 4$). 2). Структура, которая отличается от прототипа размещением двух и более сортов атомов (или вакансий) в разных ПСТ, ранее составлявших одну ПСТ исходной структуры. Такие сверхструктуры – одно из наиболее часто встречающихся проявлений *родственности структур*, обычно сопровождающееся понижением симметрии, изменением формы или кратным увеличением объема ЭЯ по отношению к структуре-прототипу. Эти характеристики могут не меняться, если в исходной структуре есть две или более занятых одинаковыми атомами ПСТ, которые заполняются разными сортами атомов в сверхструктуре.

СВЕРХЪЯЧЕЙКА. Ячейка Бравэ сверхструктуры по отношению к ячейке исходной структуры в случае, если первая имеет больший (обычно кратно увеличенный) объем.

СВОЙСТВА СКАЛЯРНЫЕ – см. *анизотропные и скалярные свойства*.

СЕМЕЙСТВА ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП СИММЕТРИИ. Объединения ТГС по сочетаниям *элементов симметрии* (табл. 2). Семейства ТГС называют по телам вращения (рис. 8), симметрия которых отвечает одной из *предельных групп симметрии* Кюри.

Табл. 2.

Семейство ТГС	Элементы симметрии	Обозначения по Шенфлису (интернациональные)
Вращающийся конус $C_\infty(\infty)$	Поворотная ось C_n	$C_n(n)$
Неподвижный конус $C_{\infty v}(\infty m)$	$n \sigma_v \parallel C_n$	$C_s = C_{1v}$, C_{nv} (nm и nmm для нечетных и четных n соотв.)
Вращающийся цилиндр $C_{\infty h} = S_\infty$ ($\infty/m = \infty$)	1) ось S_{2n} ; 2) $\sigma_h \perp C_n$	1) $C_i = S_2$, S_{2n} (\bar{n} и $\bar{2}\bar{n}$ для нечетных и четных n соотв.); 2) C_{nh} ($\bar{2}\bar{n}$ и n/m для нечетных и четных n соотв.)
Скрученный цилиндр $D_\infty(\infty 2)$	n осей $C_2 \perp C_n$	$D_n(n2$ или $n22$ для нечетных и четных n соотв.)
Неподвижный цилиндр $D_{\infty h}(\infty/mmm = \infty m)$	1) $n \sigma_v \parallel S_{2n}(\perp n C_2)$, C_2 и σ_v не совпадают; 2) $n \sigma_v \parallel C_n \perp \sigma_h (C_n \perp n C_2)$, C_2 и σ_v совпадают	1) D_{nd} ($\bar{n}m$ или $\bar{2}\bar{n}2m$ для нечетных и четных n соотв.); 2) D_{nh} ($\bar{2}\bar{n}m2$ или n/mmm для нечетных и четных n соотв.)
Шар с вращающимися точками поверхности $K(2\infty)$	1) $4C_3 + 3C_2$; 2) $3C_4 + 4C_3 + 6C_2$; 3) $6C_5 + 10C_3 + 15C_2$	1) $T(23)$; 2) $O(432)$; 3) $I(235)$
Неподвижный шар $K_h(m\infty)$	1) $4C_3 + 3C_2 + 3\sigma_2 + i$; 2) $3S_4 + 4C_3 + 6\sigma_3$; 3) $C_4 + 4C_3 + 6C_2 + 9\sigma_4 + i$; 4) $6C_5 + 10C_3 + 15C_2 + 15\sigma_5 + i$	1) $T_h(m\bar{3})$; 2) $T_d(4\bar{3}m)$; 3) $O_h(m\bar{3}m)$; 4) $I_h(m\bar{3}5)$

СИМВОЛЫ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП СИММЕТРИИ. Буквенно-цифровая система обозначений ПГС. Первый строчный символ (P , C (A), F , I) обозначает тип *ячейки Бравэ*. Цифровые и буквенные обозначения указывают *элементы симметрии*, направления которых совпадают с *особыми направлениями*. В *моноклинной сингонии* – [010]; *ромбической сингонии* – первая позиция - [100], вторая позиция - [010], третья позиция - [001]; *ромбоэдрической (тригональной) сингонии* – 1-ая позиция - [001], вторая - [100]; *тетрагональной сингонии* – 1-ая позиция - [001], 2-ая - [100], 3-я - [100]; *гексагональной сингонии* – 1-ая позиция - [001], 2-ая - [100], 3-я - $[1\bar{1}0]$; *кубической сингонии* – 1-ая позиция - [001], 2-ая - [111], 3-я - [110]. Дробный символ n/t говорит о том, что перпендикулярно оси n -ого порядка расположена плоскость симметрии t .

СИМВОЛЫ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ. Буквенные, цифровые и графические обозначения *элементов симметрии* и *групп симметрии*. Наиболее распространены две системы обозначений: 1) Шёнфлиса; 2) интернациональная. Символика *закрытых элементов симметрии* по этим системам дана в табл.3. *Открытые элементы симметрии, ячейки Бравэ* и ПГС обозначают международными символами: $2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$ – винтовые оси; P – примитивная ячейка, A, B, C – бокоцентрированная ячейка, I – объемноцентрированная ячейка, R – ромбоэдрическая ячейка, F – гранецентрированная ячейка; a, b, c, n, d – плоскости скользящего отражения. При обозначении групп симметрии символика Шёнфлиса акцентирует внимание на осях высшего порядка, а интернациональная – на расположении элементов симметрии относительно осей координат. Графические обозначения кристаллографических элементов симметрии даны на рис. 12.

Табл. 3.

Элемент симметрии	Поворотная ось	Инверсионная ось	Зеркальная ось	Центр инверсии	Зеркальная плоскость
Шёнфлис	C_n	\square	S_n	i	σ
Интернационал.	n	\bar{n}	\square	$\bar{1}$	m

СИММЕТРИЯ. В физике, преобразованием симметрии называется такая операция, при которой состояние системы не меняется в результате этого преобразования. В этом случае говорят, что система обладает симметрией относительно данного преобразования.

СИММЕТРИЯ АТОМНОЙ ГРУППИРОВКИ. Обычно относится к кристаллографической ТГС конечной *структурной единицы* кристалла (молекулы, комплекса, сложного иона). Определяется по симметрии положения центра масс атомной группировки, которая является подгруппой максимальной ТГС этой группировки и ПГС кристалла.

СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ (ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ). *Симметрия* относительно эвклидовых преобразований: а) перенос в пространстве (*трансляция*); б) поворот на фиксированный угол; в) отражение. Свойство фигуры при *изометрическом преобразовании* пространства приобретать новое положение, неотличимое от исходного. В зависимости от

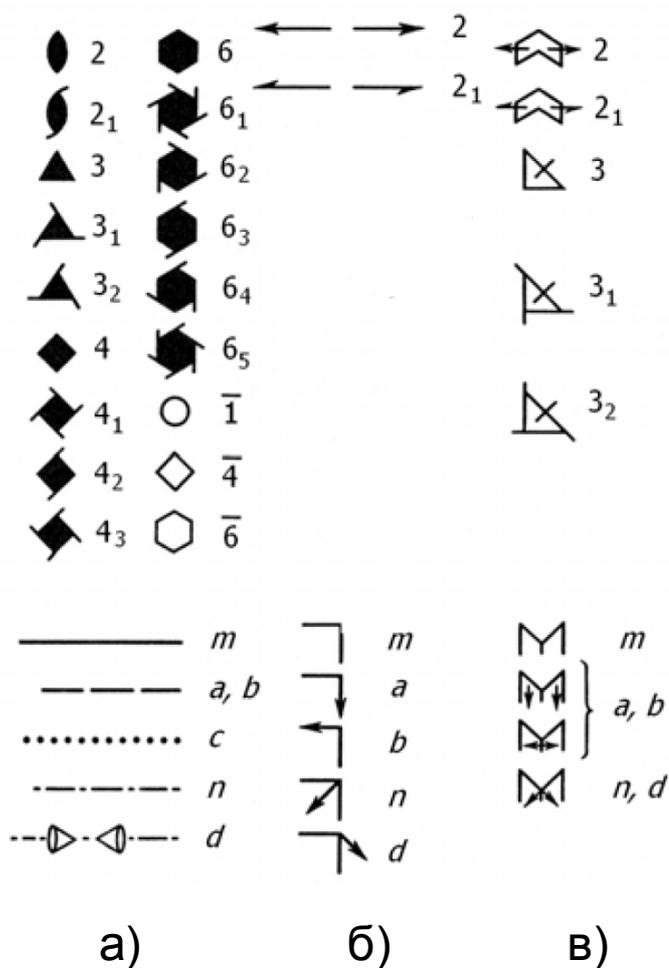


Рис. 12. Графические обозначения элементов симметрии; элемент симметрии расположен – а) перпендикулярно плоскости чертежа; б) параллельно плоскости чертежа; в) параллельно телесной диагонали.

операции симметрии выделяют центральную симметрию (*центр инверсии*), осевую симметрию (*ось симметрии*), центрально-осевую симметрию (*инверсионная ось*), зеркальную симметрию (*плоскость симметрии*), зеркально-осевую симметрию (*зеркально-поворотная ось*), трансляционную симметрию (*трансляция*) и их комбинации (*винтовые оси, плоскости скользящего отражения*). В кристаллографии различают кристаллографическую симметрию (характерную для кристаллических структур) и некристаллографическую симметрию, включающую элементы симметрии пятого, седьмого и более высоких порядков.

СИММЕТРИЯ ПОЛОЖЕНИЯ. Совокупность закрытых элементов симметрии, проходящих через данную точку и описываемых определенной ТГС, особой точкой которой является данная позиция.

СИММОРФНАЯ ГРУППА. ПГС, включающая в себя в качестве подгруппы сходственную ТГС. Такие ПГС (73 группы) содержат частные позиции с симметрией положения, равной сходственной ТГС, а также другие частные позиции, соответствующие по симметрии всем ее подгруппам. Примеры симморфных групп: $P2$, $Im\bar{2}$, $P\bar{4}2m$.

СИНГОНИЯ. Кристаллографический тип структуры, характеризуемый определенным набором старших элементов симметрии его ТГС и ячейкой Бравэ. Различают семь сингоний (табл. 4) - триклинная, моноклинная, ромбическая (низшие сингонии); тригональная, тетрагональная, гексагональная (средние сингонии); кубическая (высшая сингония). Ввиду совпадения формы ячейки Бравэ для тригональных (ромбоэдрических) и гексагональных кристаллов их иногда относят к одной сингонии – гексагональной, выделяя тригональную и гексагональную подсингонии. Каждая из сингоний подразделяется на кристаллографические классы симметрии и ПГС.

Табл.4.

Сингония	Оси симметрии ТГС	Параметры ячейки
Триклинная	Ось 1-го порядка	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Моноклинная	Ось 2 и (или) $\bar{2} \perp b$	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ромбическая	Три \perp оси 2 и (или) $\bar{2} \parallel a, b, c$	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригональная (ромбоэдрическая)	Ось 3 и (или) $\bar{3} \parallel c$ (ось 3 и (или) $\bar{3}$ по телесной диагонали ромбоэдра)	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ (a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ)$
Тетрагональная	Ось 4 и (или) $\bar{4} \parallel c$	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гексагональная	Ось 6 и (или) $\bar{6} \parallel c$	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Кубическая	Четыре оси 3 или $\bar{3}$ вдоль телесных диагоналей куба; оси 4 или $\bar{4} \parallel a, b, c$	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

СИНТЕЗ ФУРЬЕ. Суммирование ряда Фурье, соответствующее функции распределения электронной плотности кристалла или ее производных. Коэффициенты такого ряда определенным образом связаны с измеренными и (или) вычисленными структурными факторами. Обычно используют четыре варианта: 1) синтез экспериментальной электронной плотности $\rho(xyz)$, построенный по измеренным структурным амплитудам и фазам, вычисленным из модели структуры; 2) синтез вычисленной электронной плотности, построенный по модели структуры (по пробной структуре); 3) синтез разностной электронной плотности (разностный синтез), являющийся разностью первых двух; 4) синтез деформационной электронной плотности, в котором из экспериментальной $\rho(xyz)$ вычитают электронную плотность валентно несвязанных атомов.

СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. Магнитотормозное излучение, испускаемое релятивистскими заряженными частицами в однородном магнитном поле. Оно обусловлено ускорением частиц при искривлении их траектории в магнитном поле. Синхротронное излучение используется для получения интенсивных пучков поляризованного электромагнитного излучения в ультрафиолетовой и рентгеновской области спектра и применяется в РСА, рентгеновской, мессбауэровской спектроскопии и др.

СИСТЕМАТИЧЕСКИЕ ПОГАСАНИЯ. Закономерное отсутствие дифракционных максимумов, обусловленное присутствием в структуре центрирующих трансляций в ячейке Бравэ (интегральные погасания) и открытых элементов симметрии (зональные погасания). Из 230 ПГС по правилам погасаний можно определить однозначно 59 групп.

СКАЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА – см. анизотропные и скалярные свойства.

СЛОИСТАЯ СТРУКТУРА. Гетеродесмическая структура, в которой основными структурными единицами являются бесконечные слои из наиболее прочно связанных атомов, например - графит, слюда.

СМЕШАННОСЛОЙНЫЕ СТРУКТУРЫ. Слоистые структуры, состоящие из двух и более структурно или химически различных слоев (модулей), слабо связанных друг с другом. Наиболее часто смешаннослойные структуры встречаются среди глинистых минералов и других слоистых силикатов.

СМЕШАННЫЕ КРИСТАЛЛЫ. Макроскопически однородные многокомпонентные образования с той или иной степенью упорядочения компонентов. Смешанные кристаллы могут обладать единой однородной кристаллической структурой (*твердые растворы, нестехиометрические соединения*) или состоять из когерентно сросшихся чередующихся участков разных структур (*фрагментарные структуры, аномальный изоморфизм*).

СПАЙНОСТЬ. Свойство кристалла раскалываться по определенным кристаллографическим плоскостям (плоскостям спайности), поперечно которым находятся более слабые химические связи.

СПЛОШНОЙ СПЕКТР РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ – см. лабораторную работу №1.

СРЕДНИЕ СИНГОНИИ. *Сингонии*, включающие в себя ПГС, в которых высшие элементы симметрии только одного порядка (*аксиальные группы симметрии*) – *тригональная* (оси 3-его порядка), *тетрагональная* (оси 4-ого порядка), *гексагональная* (оси 6-ого порядка).

СТАРШИЙ ЭЛЕМЕНТ СИММЕТРИИ. *Элемент симметрии* высшего порядка, входящий в данную *группу симметрии*.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ. Статистически усредненное заполнение кристаллографических позиций, характерное для *неупорядоченных структур*. Наблюдаемая заселенность каждой позиции связана с вероятностью ее заполнения соответствующим атомом (ионом, молекулой) в ячейке решетки кристалла. Разупорядоченные позиции могут быть заселены изоморфной смесью атомов (*изоморфное замещение*) или быть не полностью занятыми (*дефектные структуры*).

СТЕПЕНИ СВОБОДЫ. Число независимо варьируемых (без изменения симметрии) координат точки, принадлежащей ПСТ. Точка в общей позиции ТГС или ПГС имеет три степени свободы, в частных положениях число степеней свободы меньше: на плоскости симметрии – две; на поворотной оси – одна; в центре инверсии, в особой точке *инверсионной оси* или на пересечении *закрытых элементов симметрии* точка не имеет степеней свободы.

СТЕРЕОХИМИЯ. Наука, изучающая зависимость химических и физических свойств вещества от пространственного строения молекул. Стереохимия включает три основных раздела: 1) статическую (конфигурационную) стереохимию, которая изучает пространственное строение молекул, их изомерию и влияние структуры молекул на их свойства; 2) конформационный анализ, изучающий зависимость свойств от конформаций молекул; 3) динамическую стереохимию, которая изучает стереохимически нежесткие молекулы и стерический ход химических реакций. Базовыми понятиями стереохимии являются *хиральность*, конфигурация, конформация. Теоретический аппарат стереохимии – теория групп, топология, теория графов, квантовая химия, молекулярная механика, термодинамика. Основные экспериментальные методы – спектрополяриметрия, колебательная и ЯМР - спектроскопия, *дифракционные методы*.

СТРУКТУРА БЛОЧНАЯ – см. *блочная структура*.

СТРУКТУРА ДЕФЕКТНАЯ – см. *дефектная структура*.

СТРУКТУРНАЯ АМПЛИТУДА РЕНТГЕНОВСКАЯ. Амплитуда *рентгеновского излучения* рассеянного от плоскости (hkl). Определяется как отношение амплитуды рассеяния всеми электронами *ячейки решетки* к амплитуде рассеяния одним электроном: $F(hkl) = \sum f_r \{ \cos 2\pi[(hm_{1r} + km_{2r} + lm_{3r}) + i \sin[2\pi(hm_{1r} + km_{2r} + lm_{3r})]] \}$, где f_r – *атомный фактор*, m_{1r}, m_{2r}, m_{3r} – координаты r -ого атома в ЭЯ. *Интегральная интенсивность* дифракционного отражения пропорциональна квадрату структурной амплитуды – *структурному фактору*.

СТРУКТУРНАЯ ЕДИНИЦА. Стабильный обособленный единичный фрагмент структуры. В качестве структурной единицы могут выступать – атом, ион, молекула, полимерная цепь, слой, каркас и пр.

СТРУКТУРНАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ. Раздел кристаллографии, изучающий внутреннее строение и пространственную симметрию кристаллов. Основная теоретическая база структурной кристаллографии – *кристаллическая решетка* и ПГС, основные экспериментальные методы – *дифракционные методы* и *структурный анализ*.

СТРУКТУРНАЯ ФОРМУЛА. Запись химической формулы кристаллического соединения, в которой отражены его структурные особенности. Единые формы записи структурной формулы не выработаны, но чаще всего указывают: 1) координацию или КЧ (верхний индекс в квадратных скобках или без них); 2) *структурные единицы* кристалла (в квадратных скобках) и их размерность (над- или подстрочными индексами $1\infty, 2\infty, 3\infty$); 3) содержание *атомных позиций* (отмечают виды и (или) доли каждого сорта атомов в круглых скобках, *вакансии* обозначают символом \square); 4) степень поделенности вершин *координационного полиэдра* с другими КП (нижний индекс, выраженный дробью КЧ/степень поделенности КП). Примеры: сульфат бария $\text{Ba}^{[12]}\text{S}^{[4]}\text{O}_4^{[S+2\text{Ba}]}$, перовскит $\text{Ca}^{\text{XII}}[\text{Ti}^{\text{VI}}\text{O}_3]_{3\infty}$, пирротин $(\text{Fe}^{2+}_{1-3x}\text{Fe}^{3+}_{2x}\square_x)\text{S}$, хлорид натрия $\text{Na}_{6/6}\text{Cl}_{6/6}$.

СТРУКТУРНО-ГЕНЕТИЧЕСКАЯ ОПЕРАЦИЯ. Преобразование одного или нескольких СТ в новый тип структуры. Основные структурно - генетические операции: 1) деформация исходной структуры; 2) упорядоченное кратное замещение; 3) внедрение или вычитание; 4) замена простых *структурных единиц* на более сложные; 5) варьирование способов наложения одинаковых или разных по структуре слоев (*политипия, фазы прорастания*); 6) кристаллографический сдвиг. СТ, связанные одной или несколькими видами структурно-генетических операций, могут образовывать *структурные семейства, сверхструктуры* и *гомологические ряды структур*.

СТРУКТУРНОЕ СЕМЕЙСТВО. Совокупность гомеотипных структур (*гомеотипия*), связанных видами *родственности структур* с одной или несколькими более простыми структурами-родоначальниками. Чаще всего семейство именуют по структуре-родоначальнику - семейство NaCl, семейство перовскита и т. п. Семейство структур, состоящих из переменного

числа фрагментов двух и более исходных структур-родоначальников, называют *гомологическим рядом структур*.

СТРУКТУРНО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ. Физико-химические свойства, зависящие от структуры кристалла. К ним относятся морфология кристаллов, *двойникование, спайность*, двулучепреломление, оптическая активность, люминесценция, пиро-, пьезо- и сегнетоэлектрические свойства, ионная проводимость и др. Такие свойства как плотность, электропроводность, растворимость, реакционная способность, термическая стабильность – в основном зависят от электронного строения атомов и типа химической связи. Промежуточное положение занимают магнитные свойства, окраска кристаллов, твердость, прочность, сжимаемость, термическое расширение, теплопроводность.

СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ. Величины, являющиеся параметрами *модели структуры*, большинство которых определяют в ходе *уточнения структуры* с помощью *метода наименьших квадратов*. Основные структурные параметры в РСА: 1) параметры *ячейки Бравэ* и ПГС; 2) *фактор приведения к абсолютной шкале*; 3) *атомные параметры*; 3) поправки на *поглощение, экстинкцию, двойникование* и др.

СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ. 1). В широком смысле – совокупность методов исследования пространственного строения вещества, как правило, связанных с изучением строения молекул, а также *микроструктуры, идеальной или реальной структуры* кристаллов. Методами прямого структурного анализа являются *дифракционные методы* и *электронная микроскопия*. К косвенным методам относятся оптическая микроскопия, спектроскопические и резонансные методы, а также квантово-химические и термодинамические расчеты. 2). В узком смысле – процесс идентификации СТ или определения атомного строения (*расшифровки* и *уточнения структуры*) кристалла или молекулы дифракционными методами. Предполагает последовательное решение следующих задач: а) получение дифракционных данных; б) определение формы, размеров и типа *ячейки Бравэ*; в) определение симметрии кристалла; г) определение расположения атомов.

СТРУКТУРНЫЙ ТИП. Вид относительного взаимного расположения атомов в кристалле, который характеризуется: 1) ПГС и формой *ячейки Бравэ*; 2) набором ПСТ; 3) КЧ, формой и взаимным расположением КП. СТ обычно называют по первому изученному представителю данного СТ или известному минералу такого строения (СТ NaCl, СТ перовскита).

СТРУКТУРНЫЙ ФАКТОР РЕНТГЕНОВСКИЙ. Квадрат *структурной амплитуды* $F(hkl)$.

СТРУКТУРООБРАЗУЮЩИЕ ФАКТОРЫ. Основные факторы, определяющие геометрию взаимного расположения частиц, образующих кристалл, т. е. его *кристаллическую структуру*. Наиболее общими структурообразующими факторами являются: 1) стехиометрия (валентности атомов); 2) природа связей между атомами; 3) относительные размеры и форма *структурных единиц* кристалла.

жении при данной ориентации кристалла относительно первичного излучения.

СХОДСТВЕННЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ. Совокупность ПГС одного *кристаллографического класса симметрии* или ПГС и ТГС одного класса. Для перехода от ПГС к сходственной ТГС нужно, отвлекаясь от типа *ячейки Бравэ*, заменить все *открытые элементы симметрии* на сходственные закрытые и перенести их параллельно до пересечения в одной точке (при наличии параллельных осей разных порядков в ПГС в ТГС останется ось высшего порядка). Такая процедура полезна для решения вопроса о том, является ли ПГС нецентросимметричной, *полярной* или *хиральной*, т.к. ее сходственная ТГС будет такой же.

СХОДСТВЕННЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. *Операции симметрии (элементы симметрии)*, у которых матрица симметрического преобразования (*матрица вращения*) одинакова. Сходственными будут параллельные *поворотные* и *винтовые оси* одного порядка и параллельные *плоскости симметрии*.

Т

ТВЕРДЫЕ РАСТВОРЫ. Кристаллические фазы переменного состава, наиболее распространенная разновидность *смешанных кристаллов*. Классификация твердых растворов: 1) твердые растворы замещения (твердые растворы первого рода) — изоморфное замещение частиц (атомов, ионов, молекул) в одной или нескольких ПСТ на равное количество других частиц; 2) твердые растворы вычитания — замещение частиц в одной или нескольких ПСТ на меньшее количество других частиц с образованием вакансий хотя бы в одной из ПСТ; 3) твердые растворы внедрения (твердые растворы второго рода) - замещение частиц в одной или нескольких ПСТ на большее количество других частиц или внедрение дополнительных атомов (ионов, молекул) в структуру с размещением избыточных частиц в новых ПСТ. Твердый раствор между двумя веществами может быть непрерывным (неограниченным) по составу или ограниченным, в последнем случае область твердого раствора называют областью гомогенности. Непрерывные твердые растворы могут быть только между изоструктурными соединениями. Примеры твердых растворов: $Ag_{1-x}Cu_x$ типа ГЦК (неограниченные твердые растворы замещения), $(Mg_{1-x}Li_x \square_x)Cl_2$ с КПУ атомов Cl (ограниченные твердые растворы вычитания), аустенит $\gamma-FeC_x$ (твердый раствор внедрения C в $\gamma-Fe$ типа ГЦК).

ТЕКСТУРА. Преимущественная ориентация *кристаллитов* или молекул в поликристаллическом, полимерном, жидкокристаллическом образце в некотором направлении. Текстура характерна для кристаллитов и молекул анизотропной формы (вытянутых или уплощенных). Текстурированным материалам обычно присуща *анизотропия* свойств.

ТЕМПЕРАТУРНЫЙ ФАКТОР. Поправка (в виде сомножителя) к атомному фактору, связанная с уменьшением рассеяния излучения атомом вследствие его тепловых колебаний и зависящая от их амплитуды.

ТЕОРЕМА ЭЙЛЕРА. Осевая теорема механики: твердое тело, закрепленное в одной точке, может быть переведено из одного положения в любое другое одним поворотом на некоторый угол вокруг оси, проходящей через неподвижную точку. В теории симметрии эту теорему интерпретируют следующим образом: поворот вокруг двух пересекающихся осей симметрии (простых или инверсионных) эквивалентен повороту вокруг проходящей через точку их пересечения третьей оси. Если исходные оси одноименные (обе простые или инверсионные), то равнодействующей будет простая ось, если разноименные – результатом будет инверсионная ось. Исходные оси n_1 , n_2 и результирующая ось n_3 с элементарными углами поворота $\alpha = 2\pi/n_1$, $\beta = 2\pi/n_2$ и $\gamma = 2\pi/n_3$ соответственно «высекают» на сфере с центром в точке их пересечения сферический треугольник. По свойству сферического треугольника $\alpha/2 + \beta/2 + \gamma/2 > \pi$ или $1/n_1 + 1/n_2 + 1/n_3 > 1$.

ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ СИНГОНИЯ – см. *сингония*.

ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ – см. *белое рентгеновское излучение*.

ТОЧЕЧНАЯ ГРУППА СИММЕТРИИ. Группа симметрии, составленная из *закрытых операций симметрии* (поворот и отражение), оставляющих неподвижной хотя бы одну *инвариантную точку* ПСТ. Если *особая точка* – единственная, в ней пересекаются все элементы симметрии ТГС. В зависимости от сочетаний элементов симметрии 32 ТГС делят на семь *семейств точечных групп*, объединяемых в три *категории*. ТГС обычно обозначают символами Шенфлиса, которые акцентируют внимание на главной оси симметрии и перпендикулярных ей элементах симметрии.

ТОЧКА БАЗИСНАЯ – см. *базисная точка*.

ТРАНСЛЯЦИЯ. 1). *Операция симметрии*, заключающаяся в переносе точки на вектор определенной длины. 2). Вектор, соединяющий любые два узла *кристаллической решетки* (трансляция решетки). 3). Часть *открытой операции симметрии*, заключающаяся в переносе точки параллельно *открытому элементу симметрии* (винтовой оси или плоскости скользящего отражения) на величину, равную дробной доле трансляции решетки.

ТРИГОНАЛЬНАЯ СИНГОНИЯ – см. *сингония*.

ТРИКЛИННАЯ СИНГОНИЯ – см. *сингония*.

У

УГОЛ ВАЛЕНТНЫЙ – см. *валентный угол*.

УЗЕЛ РЕШЕТКИ. Одна из точек *пространственной решетки*, эквивалентных (гомологичных) произвольно выбранной точке кристалла. Взаимное расположение таких точек определяется *вектором трансляции* $t = ta + nb +$

pc , где \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} – векторы решетки, m , n , p – целые числа, называемые индексами узла решетки. Эти числа, записанные в форме $[[mnp]]$, называют символом узла. Для *гексагональной и тригональной сингоний* иногда символы узлов записывают четырьмя индексами $[[mnpq]]$, где $q = -m - n$, что отвечает четырехосной системе координат с 3 эквивалентными и расположенными под углом 120° друг к другу осями в *базисной плоскости*.

УЗЛОВАЯ ПЛОСКОСТЬ. Совокупность узлов решетки, расположенных в одной плоскости. Положение узловой сетки можно определить уравнением $hx + ky + lz = N$, где h , k , l – взаимно простые целые числа, называемые *индексами Миллера*, x , y , z – координаты точки плоскости, выраженные в долях ребер ячейки решетки \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} . Индексы плоскости, заключенные в круглые скобки, называют символом узловой сетки (hkl), который отвечает семейству параллельных плоскостей, проведенных через узлы решетки и отличающихся целочисленной постоянной N . Каждое семейство (hkl) характеризуется расстоянием между соседними плоскостями – *межплоскостным расстоянием* d_{hkl} . Семейству узловых сеток (hkl) соответствует перпендикулярный ему вектор обратной решетки $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$, длина которого равна $1/d_{hkl}$. Форма узловой сетки полностью задается двумя лежащими в ней и пересекающимися узловыми рядами с кратчайшими трансляциями \mathbf{a} и \mathbf{b} . Последние определяют примитивный параллелограмм (ЭЯ сетки). Совокупность симметрически эквивалентных плоскостей (граней кристалла) обозначают символом $\{hkl\}$. Для *гексагональной и тригональной сингоний* символы узловых сеток записывают иногда четырьмя индексами ($hkil$), где $i = -h - k$, что отвечает четырехосной системе координат с 3 эквивалентными и расположенными под углом 120° друг к другу осями в *базисной плоскости*.

УЗЛОВАЯ СЕТКА - см. *узловая плоскость*.

УЗЛОВОЙ РЯД (УЗЛОВАЯ ПРЯМАЯ). Совокупность узлов решетки, расположенных на одной прямой. Характеризуется радиус-вектором, соединяющим два соседних узла ряда и перенесенным в начало координат: $\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$, где \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} – векторы решетки, m , n , p – целые числа, называемые индексами ряда. Индексы ряда, заключенные в квадратные скобки, называют символом узлового ряда $[mnp]$, который отвечает семейству параллельных узловых рядов. Для упрощения записи символа принято выбирать ближайший к началу координат узел $[[mnp]]$, поэтому индексы ряда – взаимно простые целые числа. Совокупность симметрически эквивалентных узловых рядов (*кристаллографических направлений*) обозначают символом $\langle mnp \rangle$. Для *гексагональной и тригональной сингоний* символы узловых рядов записывают иногда четырьмя индексами $[mnpq]$, причем $q = -m - n$, что отвечает четырехосной системе координат с тремя эквивалентными и расположенными под углом 120° друг к другу осями в *базисной плоскости*.

УМНОЖЕНИЕ ОПЕРАЦИЙ СИММЕТРИИ – см. *взаимодействие операций симметрии*.

УПАКОВКА. Расположение тел в пространстве, при котором каждое тело касается ближайших соседей.

УПОРЯДОЧЕНИЕ. Уменьшение степени *разупорядоченности* структуры вещества при *полиморфном превращении* типа порядок-беспорядок. Обычно происходит при понижении температуры или повышении давления за счет снижения числа разупорядоченных позиций или количества различных ориентаций молекулы (сложного иона), что может сопровождаться снижением симметрии структуры и (или) образованием *сверхструктуры*. Упорядочение может быть полным или частичным. Процессы низкотемпературного упорядочения характерны для структур *нестехиометрических фаз, твердых растворов, твердых электролитов, сегнетоэлектриков, сегнетоэластиков* и других веществ.

УПОРЯДОЧЕННАЯ СТРУКТУРА. *Кристаллическая структура*, в которой каждая *атомная позиция* полностью заселена атомами одного сорта. В случае *магнитной структуры* говорят о магнитной упорядоченности – упорядоченности ориентаций магнитных моментов атомов.

УСЕЧЕННЫЙ ОКТАЭДР. Полуправильный многогранник с 14 гранями, 36 ребрами и 24 вершинами, который можно получить усечением вершин правильного октаэдра (рис. 6д). Имеет 6 квадратных и 8 правильных шестиугольных граней, причем в каждой вершине сходятся один квадрат и два шестиугольника. Симметрия усеченного октаэдра $m\bar{3}m (O_h)$.

УСЛОВИЕ БРЭГГА-ВУЛЬФА. Определяет направления дифракционных лучей в кристалле, отраженных от серии узловых сеток (hkl): $2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$, где d_{hkl} – межплоскостное расстояние, θ – угол падения и отражения излучения от плоскости (hkl), n – порядок отражения, λ – длина волны излучения. Справедливо для дифракции рентгеновского и γ - излучения, электронов и нейтронов.

УСТАНОВКА. Одна из *кристаллографических координатных систем*, принятая для описания *кристаллической структуры*. Различают стандартные установки, табулированные для каждой сингонии и ПГС, и нестандартные установки, которые могут использоваться в целях сравнения кристаллов (структур), их более удобного описания и т. д. В *моноклинной сингонии* применяют две стандартные установки: классическую минералогическую (*особое направление* параллельно оси b) и рациональную (*особое направление* вдоль оси c).

УТОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ. Процедура получения наилучшего согласия между вычисленными и экспериментальными *структурными амплитудами* путем последовательного добавления и улучшения *атомных параметров* пробной модели структуры. Процедура уточнения многоэтапная и использует, как правило, сочетание *метода наименьших квадратов* и разностных карт *электронной плотности*.

Ф

ФАЗОВАЯ ПРОБЛЕМА. Проблема определения фазового угла *струк-*

турного фактора, не измеряемого непосредственно из *интегральной интенсивности* дифракционного отражения. Способы решения (обхода) этой проблемы составляют суть методов *расшифровки структуры*.

ФАЗЫ ВНЕДРЕНИЯ – см. *структуры внедрения*.

ФАЗЫ ПРОРАСТАНИЯ – см. *структуры прорастания*.

ФАКТОР АБСОЛЮТИРОВАНИЯ – см. *коэффициент приведения к абсолютной шкале*.

ФАКТОР АТОМНОГО РАССЕЯНИЯ - см. *атомный фактор рассеяния*.

ФАКТОР ЛОРЕНЦА. Множитель в интенсивности рентгеновского рассеянного излучения, учитывающий конечность размеров кристаллов. При конечных размерах кристалла узлы *обратной решетки* не являются геометрическими точками – они размыты. Это приводит к зависимости *интегральной интенсивности* от угла дифракции θ : $L = 1/\sin 2\theta$.

ФАКТОР НЕДОСТОВЕРНОСТИ (R-ФАКТОР). Величина, определяемая как $R = \Sigma \{|F_{\text{изм}}| - |F_{\text{выч}}|\} / \Sigma |F_{\text{изм}}|$, которая является интегральной мерой несогласия измеренных и вычисленных *структурных амплитуд*. Используется в процессе уточнения структуры и как один из *критериев правильности структуры*.

ФАКТОР ПОВТОРЯЕМОСТИ. Число симметрически эквивалентных отражений, дающих вклад в данный дифракционный максимум на *рентгенограмме* (*дифрактограмме*) поликристалла. Фактор повторяемости зависит от метода съемки и симметрии кристалла.

ФАКТОР ПОЛЯРИЗАЦИИ – см. *поляризационный фактор*.

ФЕДОРОВСКАЯ ГРУППА СИММЕТРИИ – см. *пространственная группа симметрии*.

ФИЗИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ - см. *кристаллофизика*.

ФОРМУЛА БРЭГГА-ВУЛЬФА – см. *условие Брэгга – Вульфа*.

ФОРМУЛА ЭЙЛЕРА. Основная формула теории многогранников: в выпуклом *полиэдре* сумма числа вершин (V) и числа граней (Γ) больше числа ребер (P) на два: $V + \Gamma = P + 2$.

ФОРМУЛЬНАЯ ЕДИНИЦА. Совокупность атомов, входящих в состав стабильного структурного фрагмента (например, молекулы) или принятой химической формулы вещества.

ФОРМУЛЬНАЯ МАССА. Масса *формульной единицы* вещества, выраженная в абсолютных или относительных единицах – обобщение понятия молекулярной массы.

ФОРМ-ФАКТОР – см. *атомный фактор рассеяния*.

ФРАГМЕНТАРНЫЕ СТРУКТУРЫ. Сложные структуры, разбивающиеся на отдельные фрагменты или структурные блоки (*модули*) более простых структур. Являются частным случаем *модулярных структур*. Отдельными модулями могут быть конечные блоки, цепи (ленты, ряды), слои. Если разные фрагментарные структуры отличаются только способами наложения идентичных слоев - модулей, то говорят о проявлении *политипизма*, а если имеется несколько типов слоев, то их относят к *фазам прорастания* или сме-

шаннослойным структурам. Для образования фрагментарных структур из протяженных модулей необходимо, как правило, хорошее геометрическое соответствие (*когерентность*) между поверхностями различных модулей. Для смешаннослойных и других структур со слабыми связями между модулями такое соответствие может быть необязательным. Явление замещения во фрагментарных структурах одних структурных модулей на другие относят к *аномальному (блочному) изоморфизму.*

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЙ МЕТРИЧЕСКИЙ ТЕНЗОР. Тензор, описывающий метрические свойства пространства, заданного базисными векторами \mathbf{a}_i . Его представлением является квадратная матрица, члены которой равны скалярному произведению базисных векторов: $g_{ik} = (\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_k)$. Отсюда, длины векторов $|\mathbf{a}_i| = \sqrt{g_{ii}}$, углы между векторами $\cos \alpha_i = g_{jk} / \sqrt{g_{ii} g_{kk}}$, объем ЭЯ $V = \sqrt{\det g}$. Аналогично можно ввести метрический тензор обратного пространства p , однозначно связанный с метрическим тензором прямого пространства: $p = \lambda^2 g^{-1}$.

ФУНКЦИЯ ПАТТЕРСОНА. Трехмерный ряд Фурье, коэффициентами которого являются *структурные факторы* и представляющий собой свертку функции *электронной плотности*:

$$P(uvw) = (1/V_0) \sum \sum \sum |F_{hkl}|^2 \cdot \exp[-2\pi i(hu + kv + lw)] = \\ = \iiint \rho(x, y, z) \rho(x+u, y+v, z+w) dV$$

Поскольку значения структурных факторов можно определить из интенсивностей дифракционных отражений, вычисление функции Паттерсона не требует решения *фазовой проблемы*. Положения пиков функции Паттерсона соответствуют концам межатомных векторов структуры, сведенных к общему началу, а величины максимумов примерно пропорциональны произведениям соответствующих атомных номеров. Эти свойства позволяют использовать функцию Паттерсона для *расшифровки структуры*, в первую очередь – для определения положений тяжелых атомов.

ФУНКЦИЯ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМОВ. Функция, равная вероятности наличия данного межатомного расстояния в веществе. Максимумы функции отвечают наиболее вероятным межатомным расстояниям, а площадь пиков пропорциональна числу атомов на таких расстояниях от данного атома. Функцию можно определить из радиальной зависимости интенсивности рассеяния рентгеновского излучения, электронов или нейтронов. Функцию радиального распределения используют для определения межатомных расстояний и КЧ в жидкостях, аморфных телах и газах.

X

ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ – см. лабораторную работу № 1.

ХИМИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ – см. *кристаллохимия*.

ХИРАЛЬНАЯ ГРУППА СИММЕТРИИ. Группа симметрии симметричной фигуры, проявляющей *хиральность*. Такие группы (точечные или пространственные) не содержат *элементов симметрии* II рода (*центра инверсии, плоскостей симметрии* или *инверсионных осей*) и относятся к семействам ТГС вращающегося конуса, скрученного цилиндра или шара с вращающимися точками поверхности.

ХИРАЛЬНОСТЬ. Свойство фигуры существовать в двух зеркально равных и не совмещающихся между собой (правой и левой) формах; то же, что и *энантиоморфизм*.

Ц

ЦЕНТР ИНВЕРСИИ (ЦЕНТР СИММЕТРИИ). Точка, в которой происходит *инверсия* пространства.

ЦЕНТРИРОВАННАЯ ЯЧЕЙКА - см. *непримитивная ячейка*.

ЦЕПОЧЕЧНАЯ СТРУКТУРА. *Гетеродесмическая структура*, в которой основными *структурными единицами* являются полимерные цепи (ленты) из наиболее прочно связанных атомов. Примеры: полиэтилен, пироксен $MgSiO_3$ (цепи из SiO_4 -тетраэдров, соединенных вершинами), $PdCl_2$ (квадраты $PdCl_4$, связанные в ленты по противоположным сторонам).

ЦИКЛИЧЕСКАЯ ГРУППА СИММЕТРИИ. Группа симметрии, где все элементы являются степенями одного элемента.

Ч

ЧАСТНАЯ ПОЗИЦИЯ. Положение *базисной точки* ПСТ на каком-либо *закрытом элементе симметрии*. Координаты базисной точки связаны между собой или фиксированы.

ЧАСТНАЯ ПРАВИЛЬНАЯ СИСТЕМА ТОЧЕК – см. *правильная система точек*.

ЧЕРНО-БЕЛАЯ СИММЕТРИЯ – см. *антисимметрия*.

ЧИСЛО КООРДИНАЦИОННОЕ – см. *координационное число*.

Ш

ШАРОВЫЕ УПАКОВКИ. Расположения шаров в пространстве, при которых каждый шар касается не менее четырех других шаров. Наиболее важными являются упаковки равновеликих шаров. Среди них различают *неплотные* (число соседей меньше 6), *плотные упаковки* (число соседей 6-11) и *плотнейшие упаковки* (число соседей равно 12). Наибольшее значение в кристаллохимии имеют объемноцентрированная кубическая упаковка (ОЦК) с

плотностью упаковки $=\pi\sqrt{3}/8$ и ПШУ. Плотные упаковки равных и неравновеликих шаров встречаются в структурах металлов и интерметаллидов. Многие другие структуры, состоящие из приблизительно сферических структурных единиц, могут быть описаны в терминах шаровых упаковок.

Э

ЭВАЛЬДА СФЕРА – см. *сфера Эвальда*.

ЭКВИВАЛЕНТНЫЕ ПОЗИЦИИ. Положения, которые заняты ПСТ. Различают позиции ПСТ на *закрытых элементах симметрии* (частные позиции) и вне таковых (общие позиции).

ЭКСТИНКЦИЯ. Ослабление интенсивности дифрагированного излучения в кристалле с *мозаичной структурой* из-за эффекта повторной внутренней дифракции. Последняя может происходить в пределах одного блока с идеальной структурой (первичная экстинкция) или между разными блоками (вторичная экстинкция).

ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ. Метод получения изображений микрообъектов (микроструктуры) с помощью сфокусированного пучка ускоренных электронов. В зависимости от метода съемки различают просвечивающие и сканирующие электронные микроскопы. В просвечивающем микроскопе изучают образцы толщиной 100-500 Å с разрешающей способностью до 2-10 Å, что позволяет непосредственно наблюдать положения атомов в образце. Сканирующие микроскопы позволяют изучать микроморфологию поверхности, наблюдать дефекты и включения в массивных образцах, порошках, пленках с разрешением до 100 Å. Электронная микроскопия обычно используется для изучения микроструктуры и реальной структуры вещества (дефекты упаковки, дислокации, включения, *сверхструктуры*, срастания, полимеры, микронеоднородности и др.).

ЭЛЕКТРОННАЯ ПЛОТНОСТЬ КРИСТАЛЛА. Плотность вероятности $\rho(x,y,z)$ нахождения электрона в данной точке *ячейки решетки*. Так как $\rho(x,y,z)$ – периодическая функция в трех измерениях, она разлагается в трехмерный ряд Фурье: $\rho(x,y,z) = (1/V)\sum\sum\sum F(hkl)\exp[-2\pi i(hx+ky+lz)] = (1/V)\sum\sum\sum |F(hkl)| \cdot \exp[-2\pi i(hx+ky+lz) + i\varphi(hkl)]$, где V – объем ячейки кристалла, $F(hkl)$, $\varphi(hkl)$ – соответственно, структурная амплитуда и фазовый угол дифракционного отражения от плоскости (hkl) , а суммирование ведется в пределах $-\infty < h, k, l < +\infty$. Из данных *дифракционных методов* (чаще всего РСА) по интегральным интенсивностям отражений можно определить только модули структурных амплитуд, а фазовые углы – нельзя. Это составляет суть *фазовой проблемы*, решаемой в рамках *методов расшифровки структуры*, за которыми следует *уточнение структуры*. Полученная после уточнения модель структуры дает фазовые углы, по которым вычисляется распределение $\rho(x,y,z)$ в *кристаллической структуре*. Наряду с $\rho(x,y,z)$ рассматривают ее различные производные (разностная электронная плотность, *деформационная* элек-

тронная плотность и др.), вычисляемые с помощью *синтезов Фурье*.

ЭЛЕКТРОНОГРАФИЯ. Один из *дифракционных методов* исследования строения вещества, основанный на изучении дифракции монохроматических электронов электростатическим потенциалом атомов кристалла. Сильное взаимодействие электронов с веществом, малая длина волны электронов ($\sim 10^{-1} - 10^{-2}$ Å), слабая зависимость рассеяния от атомного номера позволяют исследовать методом электронографии малые кристаллы, мелкодисперсные образцы, тонкие пленки и поверхности; определять положения легких атомов в присутствии тяжелых. Электронографию используют также для исследования строения газов, жидкостей и *аморфных тел*.

ЭЛЕМЕНТ СИММЕТРИИ. Геометрический образ *операции симметрии*, самосовмещающийся при ее выполнении. В трехмерном пространстве элементы симметрии представляют собой точки (*центр инверсии, особые точки инверсионных осей*), прямые (*оси симметрии*) или плоскости (*плоскости симметрии*). Аналогично соответствующим операциям симметрии различают: 1) элементы симметрии I рода, которые связывают *конгруэнтные* фигуры, 2) элементы симметрии II рода, которые связывают *энантиоморфные* фигуры. *Порядок элемента симметрии* равен порядку соответствующей операции симметрии. Если элемент симметрии оставляет неподвижной хотя бы одну точку симметричной фигуры, то его называют закрытым элементом симметрии, в противном случае это открытый элемент симметрии. Открытые элементы симметрии характерны только для бесконечных фигур.

ЭЛЕМЕНТАРНАЯ ЯЧЕЙКА. 1). *Ячейка решетки*, выбранная в качестве базисной. 2). Ячейка решетки, построенная на трех кратчайших некопланарных векторах *кристаллической решетки*. Такая ячейка всегда является примитивной.

ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ТРАНСЛЯЦИИ. Кратчайшие некопланарные *трансляции решетки*.

ЭНАНТИОМЕР (ЭНАНТИОМОРФ). Правая или левая форма *хиральной* фигуры, например, молекулы или кристалла.

ЭНАНТИОМОРФИЗМ. Свойство фигуры существовать в двух зеркально равных, но не совместимых наложением (правой и левой) формах, то же, что и *хиральность*. Необходимое условие энантиоморфизма – отсутствие у фигуры элементов симметрии II рода.

ЭНАНТИОМОРФНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ. ПГС, отличающиеся набором энантиоморфных (правых и левых) *винтовых осей* и отвечающие симметрии *хиральных* (энантиоморфных) кристаллических структур. Известно 11 пар энантиоморфных ПГС: $P3_1$ и $P3_2$, $P3_112$ и $P3_212$, $P3_12$ и $P3_22$, $P4_1$ и $P4_3$, $P4_122$ и $P4_322$, $P4_12_12$ и $P4_32_12$, $P6_1$ и $P6_5$, $P6_2$ и $P6_4$, $P6_122$ и $P6_522$, $P6_22$ и $P6_422$, $P4_132$ и $P4_332$.

ЭПИТАКСИЯ. Ориентированное нарастание слоя одной кристаллической фазы на граничной поверхности другой, обусловленное геометрическим соответствием ЭЯ сопрягающихся узловых сеток слоя и подложки (обычно раз-

ница не более 15 % по линейным размерам и 10° по углам).

ЭТАЛОН. Кристаллическое вещество с параметрами решетки известными с высокой точностью, положения *рефлексов* которого используют для устранения систематических ошибок при измерении углов отражения 2θ на порошковой *рентгенограмме*. Стандартное вещество либо снимают отдельно от исследуемого образца (внешний эталон), либо добавляют в сам образец (внутренний эталон). Для эталонов используют химически стойкие вещества с высокой температурой плавления, большой рассеивающей способностью и высокосимметричной структурой. Наиболее часто в качестве эталонов используют высокочистые Si, Ge, α -Al₂O₃ (корунд), α -SiO₂ (кварц), а также некоторые металлы.

Я

ЯЧЕЙКА БАЗОЦЕНТРИРОВАННАЯ – см. *базоцентрированная ячейка*.

ЯЧЕЙКА БОКОЦЕНТРИРОВАННАЯ – см. *бокоцентрированная ячейка*.

ЯЧЕЙКА БРАВЭ. *Ячейка решетки*, выбранная согласно правилам Бравэ: ячейка должна отвечать симметрии решетки, иметь максимальное число прямых углов и минимальный объем. Всего выделяют 14 ячеек Бравэ, из которых 6 являются примитивными, а 8 – непримитивными (центрированными). Ребра ячейки Бравэ параллельны *особым направлениям* кристалла; таким образом, форма такой ячейки отвечает *сингонии* кристалла (табл. 5, 6).

Табл. 5.

Типы центрировок ячеек Бравэ

Тип ячейки	Число узлов в ячейке	Координаты узлов	Обозначение
Примитивная	1	0 0 0	P
Базоцентрированная (бокоцентрированная)	2	0 0 0; 1/2 1/2 0 (0 1/2 1/2, 1/2 0 1/2)	C (A, B)
Объемноцентрированная	2	0 0 0; 1/2 1/2 1/2	I
Ромбоэдрическая	3	0 0 0; 1/3 2/3 2/3; 2/3 1/3 1/3	R
Гранецентрированная	4	0 0 0; 0 1/2 1/2; 1/2 0 1/2; 1/2 1/2 0	F

ЯЧЕЙКА ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННАЯ – см. *гранецентрированная ячейка*.

ЯЧЕЙКА ОБЪЕМНОЦЕНТРИРОВАННАЯ – см. *объемноцентрированная ячейка*.

ЯЧЕЙКА РЕШЕТКИ. Параллелепипед, построенный на трех некопланарных векторах решетки. Для любой решетки существует бесконечное число способов выбора таких параллелепипедов, которые делятся на два типа: примитивные ячейки (узлы решетки находятся только в его вершинах) и не-

примитивные ячейки (с дополнительными узлами). Наиболее часто в качестве базисных ячеек решетки выбирают примитивные ячейки, построенные на трех кратчайших некопланарных векторах (ЭЯ) или ячейки наименьшего объема, соответствующей симметрии решетки (*ячейка Бравэ*).

Табл. 6.

Распределение ячеек Бравэ по сингониям

Сингония	Оси симметрии высшего порядка	Ячейки Бравэ	Параметры ячейки
Триклинная	Ось 1-го порядка	P	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Моноклинная	Ось второго порядка $\perp b$	P, C	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ромбическая	Три \perp оси второго порядка $\parallel a, b, c$	P, I, C (A), F	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тетрагональная	Ось четвертого порядка $\parallel c$	P, I	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гексагональная Тригональная (ромбоэдрическая)	Ось шестого порядка $\parallel c$ Ось третьего порядка $\parallel c$	P P, R (R)	$a = b \neq c,$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ ($a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$)
Кубическая	Ось 4-ого порядка $\parallel c$ и ось 3-его порядка вдоль телесной диагонали куба	P, I, F	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Белов Н. В. Очерки по структурной кристаллографии и федоровским группам симметрии. М.: Наука, 1986.
2. Бокий Г. Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.
3. Бокий Г. Б., Порай-Кошиц М. А. Рентгеноструктурный анализ. Т. I (2-е изд.). М.: Изд-во МГУ, 1964.
4. Бондарев В. П. Основы минералогии и кристаллографии. М.: Высшая школа, 1978.
5. Бюргер М. Структура кристаллов и векторное пространство. М.: Изд-во иностр. Лит-ры, 1961.
6. Васильев Д.М. Физическая кристаллография. М.: Наука, 1972.
7. Вернадский В. И. Избранные труды. Кристаллография. М.: Наука, 1988.
8. Галиулин Р. В. Кристаллографическая геометрия. М.: Наука, 1984.
9. Гласкер Дж., Трублад К. Анализ кристаллической структуры. М.: Мир, 1974.
10. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П., Загальская Ю. Г. Кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1992.
11. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г.П. Теория симметрии кристаллов. М.: ГЕОС, 2000.
12. Жидков Н. П., Щедрин Б. М. Геометрия кристаллического пространства. М.: Изд-во МГУ, 1988.
13. Земан И. Кристаллохимия. М.: Мир, 1969.
14. Зоркий П. М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: Изд-во МГУ, 1986.

15. Лейтвейн Ф., Зоммер-Кулачевски Ш. Кристаллография. М.: Высш. шк., 1968.
16. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. М.: Наука, 1974.
17. Мильбурн Г. Рентгеновская кристаллография. М.: Мир, 1975.
18. Минералогическая энциклопедия. / Под ред. К. Фрея. Л.: Недра, 1985.
19. Органова Н. И. Кристаллохимия несоизмерных и модулированных смешаннослойных минералов. М.: Наука, 1989.
20. Ормонт Б. Ф. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников / 2-е изд. М.: Высшая школа, 1973.
21. Парсонидж Н., Стейвли Л. Беспорядок в кристаллах: В 2-х т. М.: Мир, 1982.
22. Партэ Э. Некоторые главы структурной неорганической химии. М.: Мир, 1993.
23. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии. Л.: Химия, 1974.
24. Пинес Б. Я. Лекции по структурному анализу. Харьков: Изд-во Харьковск. Ун-та, 1967.
25. Поваренных А. С. Кристаллохимическая классификация минеральных видов. Киев: Наукова думка, 1966.
26. Порай-Кошиц М. А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высш. шк., 1982.
27. Порай-Кошиц М. А. Практический курс рентгеноструктурного анализа. Т. II. М.: Изд-во МГУ, 1960.
28. Пушаровский Д. Ю. Рентгенография минералов. М.: ЗАО «Геоинформ-марк», 2000.
29. Пушаровский Д. Ю. Структура и свойства кристаллов. М.: Изд-во МГУ, 1982.
30. Розин К. М., Гусев Э. Б. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических структур. М.: Металлургия, 1985.
31. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов / Под ред. В. А. Франк-Каменецкого. Л.: Недра, 1975.
32. Русаков А.А. Рентгенография металлов. М.: Атомиздат, 1977.
33. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975.
34. Современная кристаллография: В 4-х т. / Под ред. Б. К. Вайнштейна. М.: Наука, 1979.
35. Соколов В. И. Введение в теоретическую стереохимию. М.: Наука, 1979.
36. Солодовников С.Ф. Основные термины и понятия структурной кристаллографии и кристаллохимии. Словарь-пособие. Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2005.
37. Уманский Я. С., Скаков Ю. А., Иванов А. Н., Расторгуев Л. Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия,

- 1982.
38. Урусов В. С. Теоретическая кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ, 1987.
 39. Уэллс А. Структурная неорганическая химия: В 3-х т. М.: Мир, 1987.
 40. Физика твердого тела (энциклопедический словарь): В 2-х т. / Под ред. В. Г. Барьяхтара. Киев: Наукова думка, 1996.
 41. Физический энциклопедический словарь / Под. ред. А. М. Прохорова. М.: Советская энциклопедия, 1983.
 42. Химический энциклопедический словарь / Под. ред. И. Л. Кнунянца. М.: Советская энциклопедия, 1983.
 43. Чупрунов Е. В., Хохлов А. Ф., Фаддеев М. А. Кристаллография. М.: Изд-во физ.-мат. лит., 2000.
 44. Шаскольская М. П. Кристаллография / 2-е изд. М.: Высш. шк., 1984.
 45. Энциклопедия неорганических материалов: В 2-х т. / Отв. ред. И. М. Федрченко. Киев: Гл. ред. укр. сов. энциклопедии, 1977.