

УДК 538.9

**В.А. Лионо<sup>1</sup>, Е.В. Овчинников<sup>2</sup>, Ф.А. Ситкевич,  
С.С. Секерджицкий<sup>4</sup>, И.А. Лявицук<sup>5</sup>**

<sup>1</sup>д-р физ.-мат. наук, проф., проф. каф. теоретической физики и теплотехники  
Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>2</sup>д-р тех. наук, доц., зам. декана по научной работе  
факультета инновационных технологий машиностроения  
Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>3</sup>аспирант каф. теоретической физики и теплотехники  
Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>4</sup>канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. общей и теоретической физики  
Брестского государственного университета имени А.С. Пушкина

<sup>5</sup>магистр естеств. наук, ст. преподаватель каф. информационных систем и технологий  
Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

e-mail: otf@brsu.brest.by

## СУПЕРЪЯЧЕЙКА ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ КРИСТАЛЛОВ

*Показано, что кристаллы с ячейками Бравэ I,F,C-типа в обратной решетке характеризуются суперъячейками, периоды которых в  $n$  раз больше  $a^* = a^{-1}$ , где  $a$  – период ячейки кристаллической решетки. Для сложных структур, даже если они моноэлементные, период суперъячейки обратной решетки может превышать  $a^*$  в несколько раз. Например, для алмаза  $a_S^* = 4a^*$  под суперъячейкой обратной решетки необходимо брать наименьший параллелепипед, вес всех вершинных узлов которого не равен нулю.*

### Введение

Решетка кристалла предполагает регулярность в расположении атомов (молекул) вдоль любого направления. Это означает, что при выборе двух рядом расположенных одинаковых структурно-химических (гомологичных) элементов с расстоянием между ними  $a$ , на прямой, проходящей через эти две точки, будут находиться гомологичные или точки с расстоянием  $t = na$ , где  $n$  – целое число. Величина  $t$  – трансляция, перенос кристалла на которую приводит его к самосовпадению. Три некомпланарных трансляции  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , выбранных по соответствующим требованиям, образуют параллелепипед, называемый ячейкой кристалла. Ячейка должна удовлетворять требованиям:

- точечная симметрия ячейки та же самая, что и кристалла к целому;
- число прямых углов в ячейке должно быть максимальным;
- полная поверхность ячейки должна быть наименьшей.

Эти требования позволяют в большинстве случаев из множества возможных вариантов выбрать один. В общем случае ячейка решетки кристалла – косоугольный параллелепипед с тремя линейными  $(a, b, c)$  и тремя угловыми  $(\alpha, \beta, \gamma)$  параметрами. Ячейку можно описать векторами  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , которые формируют кристаллографическую систему координат  $(kr)$  (или репер Бравэ). Координаты точки в пределах ячейки измеряются в единицах параметров  $a, b, c$ .

### Параметры прямой и обратной решеток кристалла

Любая плоскость в кристалле отсекает от кристаллографических осей координаты  $(x, y, z)_{kr}$  и обязательно имеет совокупность гомологичных ей плоскостей, межплоскостное расстояние между рядом расположенными плоскостями равно  $d$ . Пусть одна

из плоскостей проходит через точку с координатой  $x_{kr}$ . Гомологичная ей плоскость в пределах первой ячейки, находится в начале координат. Отрезок  $x_{kr} \leq a$ . Любая кристаллографическая плоскость отсекает от кристаллографической оси отрезок  $x_{kr} = \frac{a}{h}$ , где  $h$  – обязательное целое число.

В трехмерном варианте кристаллографическая плоскость проходит через точки с кристаллографическими координатами  $(x, y, z)_{kr} = \left(\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}\right)$ . Целые числа  $(h, k, l)$  называются кристаллографическими индексами. Из сказанного следует, что одна из совокупности тождественных плоскостей обязательно проходит через две, три, четыре вершины решетки.

Значение межплоскостного расстояния определяется методом дифракции рентгеновских электронных или нейтронных лучей (методы рентгено-, электроно- и нейтронографии соответственно).

Если на кристаллографическую плоскость  $I$  (рисунок 1) падает рентгеновский луч под углом скольжения  $\theta$  (луч 1) и отражается от нее, а от следующей плоскости  $II$  (луч 2), и эти лучи интерферируют, то угол дифракции равен  $2\theta$ . Угловое положение отраженного луча (рефлекса) описывается уравнением Вульфа – Бреггов:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1)$$

где  $d$  – межплоскостное расстояние,  $\lambda$  – длина волны излучения,  $n$  – целое число.

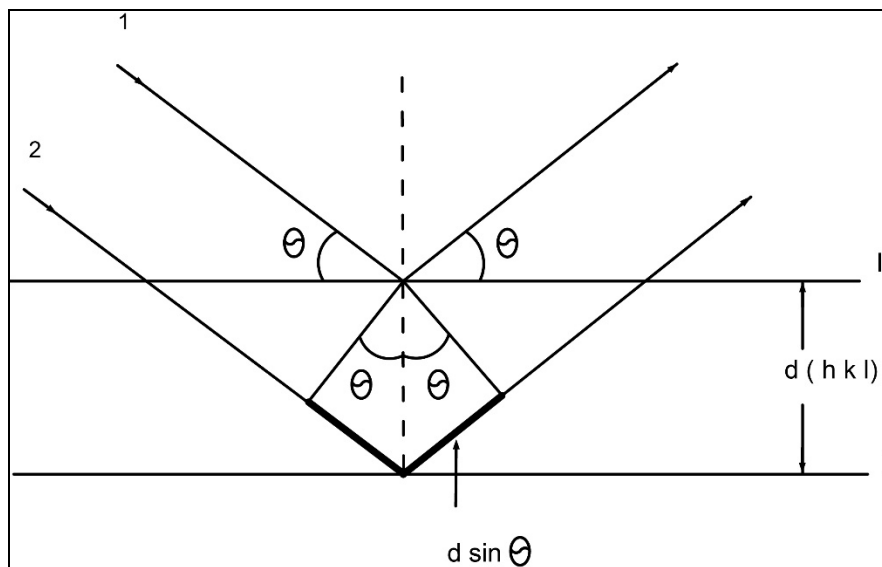


Рисунок 1. – К условию Вульфа – Бреггов

Значение  $\frac{d}{n}$  определяется из эксперимента и рассматривается как  $\frac{d}{n} \equiv d$  для соответствующих кристаллографических плоскостей. Каждая из плоскостей  $d(h, k, l)$  может быть представлена в виде точки обратного пространства (рисунок 2).

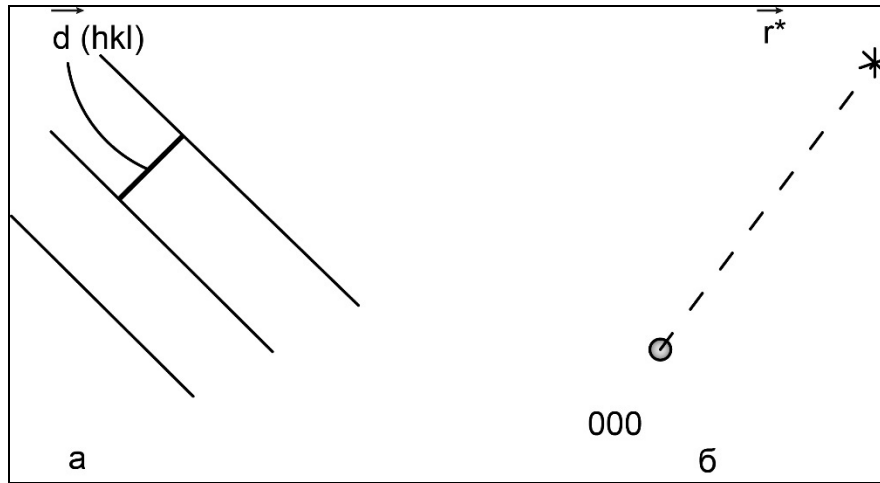


Рисунок 2 – а) – отображение плоскости  $d(h,k,l)$ , б) – в обратном пространстве

Точка (\*) является отображением плоскости  $\vec{d}(h,k,l)$  пространства кристалла. Радиус-вектор точки (\*) в обратном пространстве равен  $\vec{r}^* = \vec{d}^{(-1)}$ .

Причем  $\vec{r}^*$  параллелен  $\vec{d}$ . Очевидно, что переход от обратного пространства к прямому также легко осуществим. Каждый узел обратной решетки имеет целочисленные координаты  $(h,k,l)$  в ее кристаллической системе, которые связаны с репером Бравэ кристалла.

Узлы  $(h,k,l)$  в обратном пространстве формируют решетку, но в отличие от прямого пространства эта решетка определяет только положение узлов, но не является трансляционной симметрией. Каждый рентгеновский рефлекс имеет свою интенсивность  $(I)$ , которая характеризует «вес» узла обратной решетки. Чем больше  $I(h,k,l)$ , тем больше «вес» узла  $(h,k,l)$ , который обозначим  $F(h,k,l)$ .

В обратной решетке, как и в прямой, выбирается элементарный параллелепипед с параметрами  $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ , причем этот выбор зависит от ячейки прямой решетки, так как  $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma) = (a_i^0, \alpha_i^0)_{i=1,2,3}$  связан с  $(a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*) = (a_j^*, \alpha_j^*)_{j=1,2,3}$  условиями:

$$a_j^{*(0)} = \frac{a_{j+1}^{0(*)} a_{j+2}^{0(*)} \sin \alpha_j^{0(*)}}{V^{0(*)}}, \quad (2)$$

$$\cos \alpha_j^{*(0)} = \frac{\cos \alpha_{j+1}^{0(*)} \cos \alpha_{j+2}^{0(*)} - \cos \alpha_j^{0(*)}}{\sin \alpha_{j+1}^{0(*)} \sin \alpha_{j+2}^{0(*)}}, \quad (3)$$

или

$$\sin \alpha_j^{*(0)} = \frac{r^{0(*)}}{\sin \alpha_{j+1}^{*(0)} \sin \alpha_{j+2}^{*(0)}}, \quad (4)$$

где

$$r^{0(*)} = \left( 1 - \cos^2 \alpha^{0(*)} - \cos^2 \beta^{0(*)} - \cos^2 \gamma^{0(*)} + 2 \cos \alpha^{0(*)} \cos \beta^{0(*)} \cos \gamma^{0(*)} \right)^{\frac{1}{2}},$$

$V^{*(0)}$  – объемы обратной (прямой) ячеек решеток, определяемые по формуле:

$$V^{*(0)} = a^{*(0)} b^{*(0)} c^{*(0)} r^{*(0)}. \quad (5)$$

Скалярные произведения векторов репера Бравэ прямой и обратных ячеек равны  $(a_j^*, a_k^0) = \delta_{jk}$ . Из условий (2–5) следует, что решетка, обратная обратной, – это прямая решетка.

### Ячейки прямой и обратной решеток

Несмотря на то, что обратная и прямая решетки описываются формально симметричными переходами от параметров одной решетки к параметрам другой и обе эти решетки в качестве элементарной геометрической конфигурации характеризуются ячейками, эти две решетки существенно отличаются друг от друга.

В кристаллической решетке все ячейки абсолютно тождественны друг другу. Т.е. всегда выполняется правило

$$\hat{T}R(x, y, z) = R'(mx, ny, pz), \quad (6)$$

где  $\hat{T}$  – оператор трансляции. Причем точки  $(x, y, z)$  и  $(mx, ny, pz)$  гомологичные, т.е. их можно поменять местами, и никакие свойства решетки не изменятся. В узлах решетки кристалла и, следовательно, в вершинах ячейки находятся гомологичные точки. Это может быть отдельный атом, любая точка молекулы, определенная точка молекулярного радикала, центр структурного полиэдра и т.п. В ячейке обратной решетки узлами являются точки с радиусами-векторами:

$$\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*, \quad (7)$$

т.е. вершинами прямой ячейки, находящейся в октанте системы координат  $x^*, y^*, z^*$ , является параллелепипед с координатами вершин 000; 100; 010; 001; 110; 101; 011; 111.

В обратной решетке ячейки тождественны только геометрически, т.е. все они – параллелепипед с ребрами  $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ . Каждый узел обратной решетки  $r^*(hkl)$  определяет плоскость  $(hkl)$ . Структурная амплитуда рентгеновского (электронного, нейтронного) излучения  $F(h, k, l)$  определяет «вес» узла обратной решетки [2].

Трансляция в обратной решетке с учетом  $F(h, k, l)$  отсутствует. Сам выбор ячейки связан с прямой решеткой, т.е. начало координат в обратной решетке и направление осей  $x^*, y^*, z^*$  не могут изменяться, так как зависят от  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ . В ячейке кристалла может находиться любое, в зависимости от состава, количество атомов с координатами  $(x, y, z)$ , имеющими значения в интервале  $(0 \div 1)$ . Любой точке в пространстве кристалла есть ей гомологичная в ячейке, принятой за начальную.

В ячейке обратной решетки не может быть никаких узлов этой решетки, так как их координаты в репере  $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$  целые числа. «Вес» узла обратной решетки может быть нулевым.

В этом случае необходимо по осям  $x^*, y^*, z^*$  пройти до ненулевого узла и ячейка должна быть построена так, чтобы все ее вершины были с ненулевым «весом». Периоды такой суперячейки, как и ее объем, будут кратными  $(a^*, b^*, c^*, V^*)$  (2–5).

**Суперъячейки обратной решетки кристаллов с ячейками Бравэ не примитивных типов**

«Вес» узла обратной решетки описывается значением структурной амплитуды, которая рассчитывается по формуле:

$$F(h, k, l) = \sum_{j=1}^N f_j(x, y, z) \exp\{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_k)\}, \quad (8)$$

где  $f_j$  – атомная амплитуда рассеяния  $j$ -того атома (табличная величина).  $N$  – число атомов в ячейке, объемно-центрированная ячейка решетки кристалла ( $I$ -типа). Базисом ячейки  $I$ -типа является параллелепипед, которому принадлежат узлы  $(0,0,0); \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ , т.е. любой точке (любому атому) с координатами  $(x, y, z)$  обязательно имеется гомологичная точка (атом) с координатами  $\left(x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}\right)$ .

Следовательно, структурная амплитуда (8) для  $I$ -типа решетки примет вид:

$$\begin{aligned} F(h, k, l) &= \sum_{j=1}^{N/2} f_j(x, y, z) \times \\ &\times \left( \exp 2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j) + \exp 2\pi i\left(h\left(x_j + \frac{1}{2}\right) + k\left(y_j + \frac{1}{2}\right) + l\left(z_j + \frac{1}{2}\right)\right) \right) = \quad (9) \\ &= 1 + \exp 2\pi i \frac{h+k+l}{2} \sum_{j=1}^{N/2} f_j \exp 2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j). \end{aligned}$$

Множитель, вынесенный за знак суммы, имеет вид:

$$\left[1 + e^{\pi i(h+k+l)}\right] = \left[1 + e^{i\pi C}\right]. \quad (10)$$

Постоянное целое число  $C$  может принять два значения:  $C = 2n$  (четное),  $C = 2n + 1$  (нечетное). Следовательно, все узлы обратной решетки  $I$ -типа с нечетной суммой индексов имеют нулевой «вес». Обратная решетка в таком случае имеет вид (рисунок 3).

На рисунке 3 приведены ближайшие к началу координат обратной решетки ее узлы с ненулевым «весом».

На этом же рисунке приведена ячейка с  $a^*, b^*, c^*$ , но она имеет четыре узла с ненулевым «весом» 000,110,101,011.

Суперъячейка, вершины которой имеют ненулевой «вес», имеет периоды

$$\left\{ a_s^* = 2a^* = \frac{2}{a}, b_s^* = 2b^* = \frac{2}{b}, c_s^* = 2c^* = \frac{2}{c}, V_s^* = 8V^* \right\}. \quad (11)$$

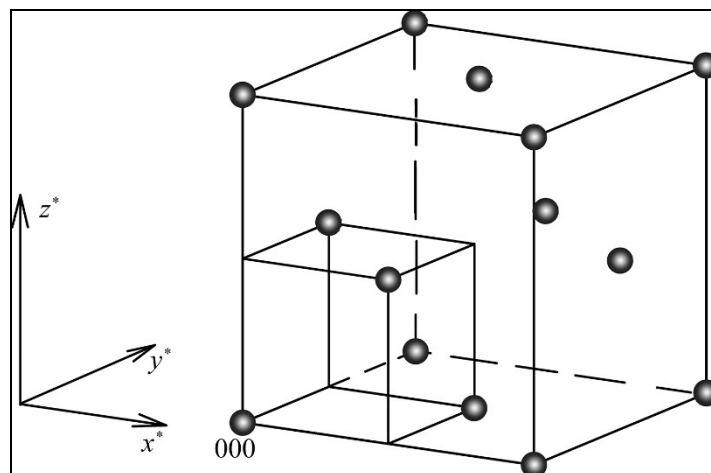


Рисунок 3. – Суперъячейка обратной решетки кристалла с решеткой I-го типа,  $\bullet$  – ненулевые узлы

Т.е., объемноцентрированная ячейка в обратном пространстве описывается границированной суперъячейкой с размерами (11).

Границированная решетка кристалла характеризуется базисом Бравэ  $000; \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ .

Формула структурной амплитуды для таких кристаллов имеет вид (8):

$$\begin{aligned}
 F(h, k, l) &= \sum_{j=1}^{N/4} f_j(x, y, z) \times \\
 &\left( \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) + \exp 2\pi i \left( h \left( x_j + \frac{1}{2} \right) + k \left( y_j + \frac{1}{2} \right) + lz_j \right) + \right. \\
 &\times \left. + \exp 2\pi i \left( h \left( x_j + \frac{1}{2} \right) + ky_j + l \left( z_j + \frac{1}{2} \right) \right) + \right. \\
 &\left. + \exp 2\pi i \left( hx_j + k \left( y_j + \frac{1}{2} \right) + l \left( z_j + \frac{1}{2} \right) \right) \right) = (12) \\
 &= (1 + \exp \pi i (h+k) + \exp \pi i (k+l) + \exp \pi i (l+h)) \\
 &\sum_{j=1}^{N/4} f_j \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j).
 \end{aligned}$$

Множитель перед знаком суммы (четырёхчлен) равен нулю, если индексы  $(hkl)$  имеют разную четность: два четных, один нечетный, – и наоборот. Если  $(hkl)$  имеют одинаковые четности, то этот четырехчлен равен четырем.

Следовательно, узлы обратной решетки с индексами смешанной четности имеют нулевой «вес» (рисунок 4).

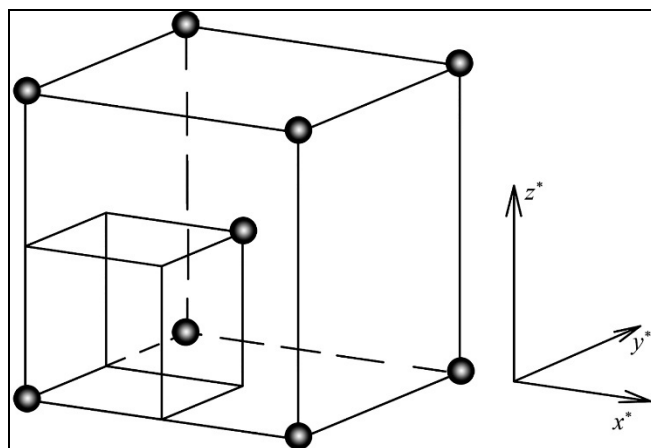


Рисунок 4. – Суперъячейка обратной решетки кристалла с ячейкой F-типа

На рисунке 4 приведена ячейка обратной решетки, у которой только два узла с ненулевым «весом»  $000,111$ . Суперъячейка имеет индексы  $000,111$ , т.е. суперъячейка относится к объемноцентрированной ячейке Бравэ. Соотношения между параметрами суперъячейки обратной решетки кристалла с решеткой  $F$ -типа и параметрами ячеек обратной и прямой решеток те же, что и в условиях (11).

Базис Бравэ ячеек  $C$ -типа имеет значение  $000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ . Следовательно, структурная амплитуда таких кристаллов имеет вид:

$$\begin{aligned}
 F(h, k, l) &= \sum_{j=1}^{N/2} f_j(x, y, z)_j \times \\
 &\times \left( \exp 2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j) + \exp 2\pi i \left( h \left( x_j + \frac{1}{2} \right) + k \left( y_j + \frac{1}{2} \right) + lz_j \right) \right) =. \quad (13) \\
 &= (1 + \exp \pi i(h+k)) \sum_{j=1}^{N/2} f_j \exp 2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j).
 \end{aligned}$$

Следовательно,  $F(hkl) \neq 0$  только для четной суммы индексов  $hk$  (на  $l$  ограничения не накладываются). Суперъячейка обратной решетки таких кристаллов приведена на рисунке 5.

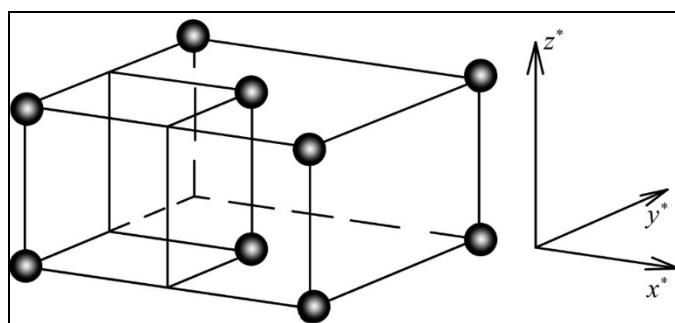


Рисунок 5. – Суперъячейка обратной решетки кристалла с ячейкой C-типа

Из приведенного рисунка 5 видно, что ячейка обратной решетки в своих вершинах имеет узлы с нулевым «весом». Соотношения между параметрами суперъчейки и параметрами ячеек обратной и прямой решеток имеют вид:

$$\left\{ a_s^* = 2a^* = \frac{2}{a}, b_s^* = 2b^* = \frac{2}{b}, c_s^* = c^* = \frac{1}{c}, V^* = 4V^* \right. . \quad (14)$$

Очевидно, что ячейки  $P$ -типа прямой решетки в обратной решетке характеризуются также ячейкой  $P$ -типа, так как при расчете  $F(hkl)$  на индексы никаких ограничений не накладываемся.

Для более сложных структур эти соотношения между ячейками кристалла и суперъчейками обратной решетки могут нарушаться. Это можно проиллюстрировать на примере алмаза.

### Суперъчейка обратной решетки алмаза

Кристаллы алмаза описываются пространственной группой  $Fd3m$ . На рисунке б(а) приведена полиэдрическая модель структуры алмаза как сочленение тетраэдров и ячейка его кристаллической решетки:

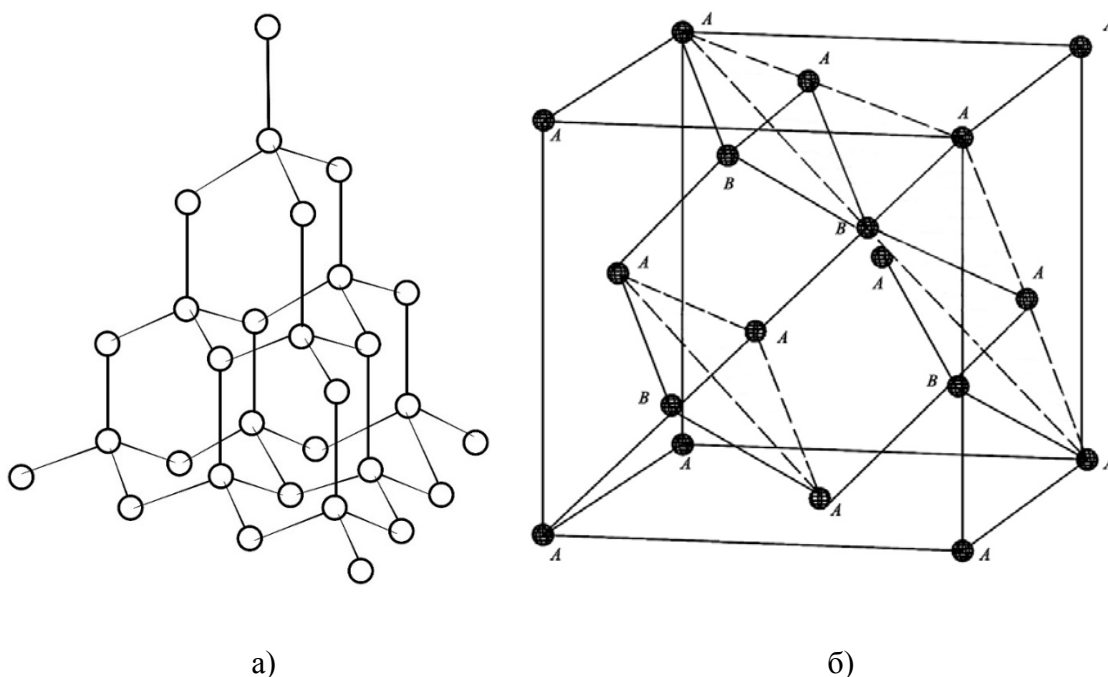


Рисунок 6. – а) схема сочленения углеродных тетраэдров;  
б) ячейка решетки кристалла алмаза

Ячейка алмаза представляет собой два гранцентрированных куба, сдвинутых друг относительно друга по главной диагонали куба на трансляцию  $\left( \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4} \right)$ . Координаты атомов углерода в ячейке алмаза приведены в таблице 1.



Таблица 1. – Кристаллографические координаты атомов в ячейке алмаза (номера как на рисунке 6б)

№	1	2	3	4
$x y z$	000	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$	$\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$	$0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
№	5	6	7	8
$x y z$	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$	$\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$	$\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}$	$\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$

Период кристаллической решетки алмаза и минимальное межатомное расстояние имеют значения:  $a = 3,57 \text{ \AA}$ ,  $(r_{C-C}) = 1,54 \text{ \AA}$  [3].

Структурная амплитуда (8) с учетом координат атомов (таблица 1) после преобразования примет вид:

$$F(hkl) = f_c \left[ 1 + \exp \pi i (h+k) + \exp \pi i (k+l) + \exp \pi i (l+h) \right] \times \left[ 1 + \exp \frac{\pi i (h+k+l)}{2} \right]. \quad (15)$$

Первая скобка в этом выражении не равна нулю для индексов с одинаковой четностью. Если индексы четные, но их сумма равна  $4n + 2$ , то  $F(hkl) = 0$ . Следовательно, первые ненулевые узлы для суперъячейки алмаза следующие: 400;040;004. Если индексы  $(hkl)$  в координатной системе  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  все нечетные, то  $F(hkl) \neq 0$ . Если индексы четные, то их сумма должна делиться на 4 без остатка.

Суперъячейка кубической обратной решетки алмаза имеет период  $a_s^* = 4a^* = \frac{4}{a}$ .

Все грани центрированы: 220;202;022.

Узлы обратной решетки со всеми нечетными индексами находятся внутри суперъячейки и имеют индексы: 111;311;131;331;113;313;133;333. Узлы с нечетными индексами образуют куб с ребром  $(a')^{(*)} = 2a^* = \frac{2}{a}$ , который находится внутри суперъячейки обратной решетки алмаза (рисунок 7):

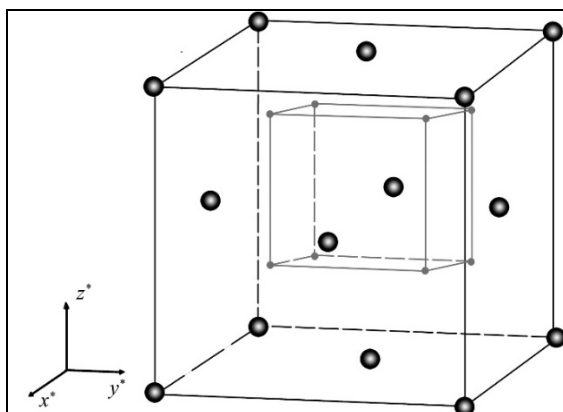


Рисунок 7. – Суперъячейка кубической обратной решетки алмаза

Если в качестве структурного элемента выбрать тройки узлов обратной решетки  $(x^* y^* z^*)_l$  и учесть трансляцию  $x_l^* = x_1^* + 4$ , то получим распределение узлов, приведенное в таблице 2.

Таблица 2. – Приведение суперъячейки обратной решетки алмаза к суперъячейке  $F$ -типа

$(x^* y^* z^*)_l$	000 111 $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	220 331 $\bar{3}\bar{3}\bar{1}$	202 313 $\bar{3}\bar{1}\bar{3}$	022 133 $\bar{1}\bar{3}\bar{3}$
$(x^* y^* z^*)_t$	000 111 333	220 331 113	202 313 131	022 133 311

Каждый вершинный узел находится в центре тетраэдра из узлов обратной решетки. Узел 000 лежит в тетраэдре из узлов  $\bar{1}\bar{1}\bar{1} \equiv 333$ ,  $1\bar{1}\bar{1} \equiv 133$ ,  $\bar{1}1\bar{1} \equiv 313$ . Остальные узлы первой суперъячейки координированы узлами с нечетными индексами по аналогичной схеме. Узлы с нечетными индексами также находятся в тетраэдрах, вершинами которых являются узлы в вершинах суперъячейки и трех узлов, координирующих грани.

Тетраэдр, координирующий узлы с четными индексами, может рассматриваться как «некий суперузел» обратной решетки. В этом случае очевидно, что суперъячейка алмаза относится к  $F$ -типу.

### Заключение

Обратная решетка кристалла играет важную роль в теории дифракции излучения и при анализе проблем, связанных с исследованием свойств кристаллов [4–6]. При изучении дифракции рентгеновских лучей исходят из того, что при попадании узла обратной решетки на сферу Эвальда по радиус-вектору узла этой сферы пойдет отраженный луч (рефлекс), интенсивность рефлекса определяет «вес» узла, равный структурной амплитуде. В зависимости от типа ячейки Бравэ решетки кристалла некоторые узлы обратной решетки имеют нулевой вес. Ячейка обратной решетки имеет периоды  $a_i^*$  ( $i=1,2,3$ ) такие, что  $a_j^* a_k^* = a_k^* a_j^* = \delta_{jk}$ . В вершинах ячейки обратной решетки должны быть узлы с  $F(hkl) \neq 0$ . Это условие выполняется только для решетки  $P$ -типа. Ячейка обратной решетки строится на репере  $a^* = r^*(100)$ ,  $b^* = r^*(010)$ ,  $c^* = r^*(001)$ . Такая ячейка не может включать в себя узлы решетки, так как их индексы имели бы дробные значения. Утверждение о том, что ячейка  $F$ -типа решетки кристалла характеризуется ячейкой  $I$ -типа в обратной решетке, неверное. Такие типы в обратной решетке относятся к суперъячейкам с параметрами, в целое число раз превышающими  $a_j^*$ .

Понятие обратной решетки используется при анализе механических, оптических, термодинамических и квантовых свойств кристалла [4–6]. Для анализа кристаллов с непримитивными ячейками необходимо использовать понятие суперъячейки.

Показано на примере алмаза, что для ячейки решетки  $F$ -типа в обратном пространстве суперъячейка относится тоже к  $F$ -типу. Суперъячейки обратной решетки кристаллов с ячейками Бравэ для кристаллов с решеткой  $C$ -типа имеют объем  $V_S^* = 4V^*$ , для  $F$ - и  $I$ -типа  $V_S^* = 8V^*$ , для алмаза  $V_S^* = 64V^*$ , где  $V^*$  – объем ячейки обратной решетки с параметрами  $a^* b^* c^*$ .

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вайнштейн, Б. Современная кристаллография / Б. Вайнштейн. – М. : Наука, 1979. – Т. 1. – 384 с.
2. Ladd, M. Structure Determination by X-ray Crystallography / M. Ladd, R. Palmer. – Berlin : Springer, 2013. – 756 p.
3. Брегг, У. Кристаллическая структура минералов / У. Брегг, Г. Кларинбул. – М. : Мир, 1967. – 389 с.
4. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М. : Мир, 1979. – Т. 1. – 458 с.
5. Киттель, Ч. Квантовая теория твердых тел / Ч. Киттель. – М. : Наука, 1967. – 492 с.
6. Mitin, V. Quantum Mechanics for Nanostructures / V. Mitin, D. Sementsov, N. Vagidov ; ed. by V. Mitin. – Cambridge : University Press, 2010. – 431 p.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 01.06.2017

***Liopo V.A., Auchynnikau Y.V., Sitkevich A.V., Sekerzhitsky S.S., Liaushuk I.A. Super Cell of the Reciprocal Lattice of Crystals***

*It has been demonstrated that crystals with Bravais cells of types I, F, C in the reciprocal lattice are characterized by super cells, the periods of which are  $n$  times larger  $a = a^{-1}$  where  $a$  is the period of a lattice cell. For complex structures, even if they contain one element only, the period of super cell in the reciprocal lattice can exceed  $a^*$  more times. For example, for diamond  $a_s^* = 4a^*$ . The smallest parallelepiped, with the weight of all its points not equal to zero, should be taken as a super cell.*