ПРИМИТИВНАЯ ЯЧЕЙКА

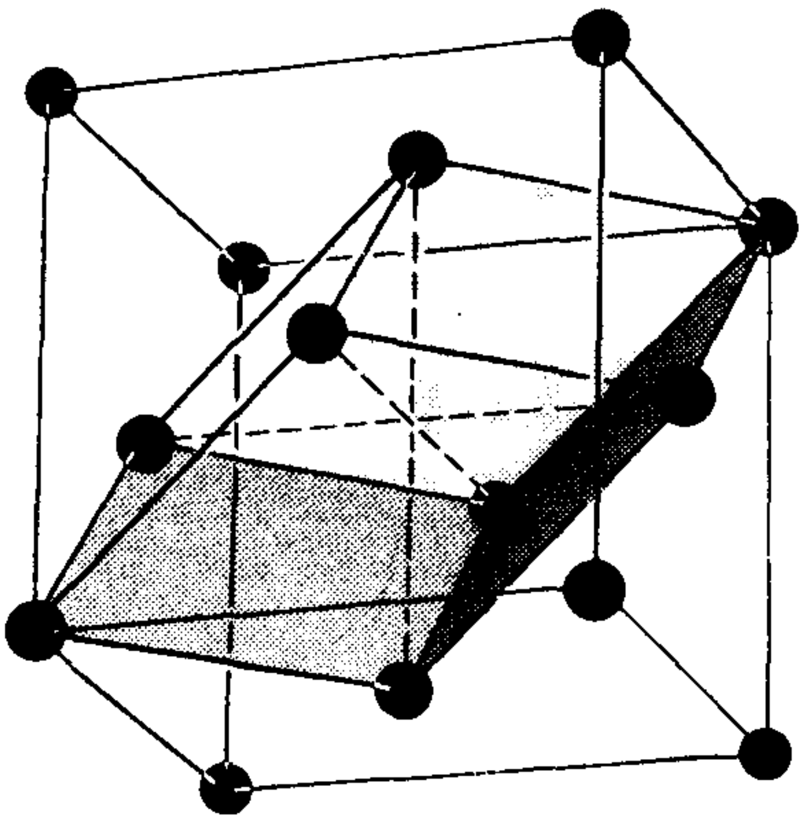
Рассмотрим объем пространства, который, будучи подвергнут всем трансляциям, образующим решетку Бравэ, заполняет все пространство, нигде не перекрываясь сам с собой и не оставляя промежутков. Такой объем называется *примитивной ячейкой* или *примитивной элементарной ячейкой* решетки [1, 2]. Для решетки Бравэ не существует однозначного способа выбора примитивной ячейки. Несколько возможных способов выбора примитивных ячеек для дву-

Примитивная ячейка должна содержать только одну точку решетки (если она выбрана таким образом, что не содержит точек на поверхности). Следовательно, если n — плотность точек в решетке [3], а v — объем примитивной ячейки, то $nv = 1$. Поэтому $v = 1/n$. Поскольку этот результат справедлив для любой примитивной ячейки, ее объем не зависит от способа выбора.

Очевидно, что каждой тройке основных векторов можно сопоставить некоторую примитивную ячейку, образованную всеми точками **r** вида

$$\mathbf{r} = x_1\mathbf{a}_1 + x_2\mathbf{a}_2 + x_3\mathbf{a}_3, \tag{4.6}$$

где x_i изменяется непрерывно от 0 до 1; она представляет собой параллелепипед, построенный на трех векторах $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ и $\mathbf{a}_3$. Недостаток такого выбора примитивной ячейки заключается в том, что он не отражает полной симметрии решетки Бравэ. Например, если выбрать примитивную ячейку в г. ц. к. решетке Бравэ



Условная ячейка — большой куб. Примитивная ячейка—параллелепипед с шестью гранями, имеющими форму параллелограммов. Она обладает объемом, равным $^1/_4$ объема куба, и имеет более низкую симметрию.

УСЛОВНАЯ ЭЛЕМЕНТАРНАЯ ЯЧЕЙКА

Все пространство можно заполнить непримитивными элементарными ячейками (их называют *условными элементарными ячейками*). Элементарная ячейка представляет собой такую область, которая заполняет все пространство без перекрытия, если ее подвергнуть трансляциям, принадлежащим некоторому *подмножеству* всех трансляций, образующих решетку Бравэ. Условную элементарную ячейку обычно выбирают так, чтобы она была больше примитивной и обладала требуемой симметрией. Например, для описания о. ц. к. решетки часто используют кубическую условную ячейку (фиг. 4.13), которая в два раза больше соответствующей примитивной ячейки, а для описания г. ц. к. решетки — кубическую условную ячейку (см. фиг. 4.12), которая в четыре раза превосходит по объему примитивную г. ц. к.

условные ячейки в два и четыре раза больше примитивных; для этого достаточно подсчитать, сколько точек решетки будет содержать условная кубическая ячейка, расположенная так, чтобы на ее поверхности не было точек.) Величины, определяющие размер элементарной ячейки (для кубических кристаллов — это одна величина a), называют *постоянными решетки*.