Кристаллофизика негіздері (5-6 дәріс)

- **Шекті симметрия топтары**
- **Нүктелік топтардың топшалары**
- **Кристалдарды орнықтыру**
- **Бравэның жазық және кеңістік торлары**
- **Кристалдық құрылымдардың симметрия элементтері**
- **Трансляциялық симметрия элементтерінің терулері. Олардың терулері туралы теоремалар**
- **230 кеңістік симметрия топтары. Евграф Степанович Федоров**

Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

Кристалдардың шекті симметрия топтары (кластары)

Кристалдың морфологиялық симметриясы мен олардың физикалық қасиеттерінің байланысын зерттеген кезде шекті топтардың маңызы зор болып келеді. Француз физигі **П. Кюри физикалық қасиеттерді зерттеген кезде симметрия заңдылықтарын қолдануға мүмкіндігін** талдай отырып шекті топ ұғымын енгізген.

Шексіз (∞) симметрия осьтері бар нүктелік симметрия топтары **шекті симметрия топтары немесе Кюри топтары** деп аталады.

Шекті топтарды нүктелік топтар сияқты стереографиялық проекция түрінде бейнелеуге болмайды, өйткені симметрия элементтері проекциясының шексіз санын бейнелеу анық емес. Бірақ олардың ерекшеліктерін айқындау материалдық кеңістік фигураларда оңай іске асыруға болады.

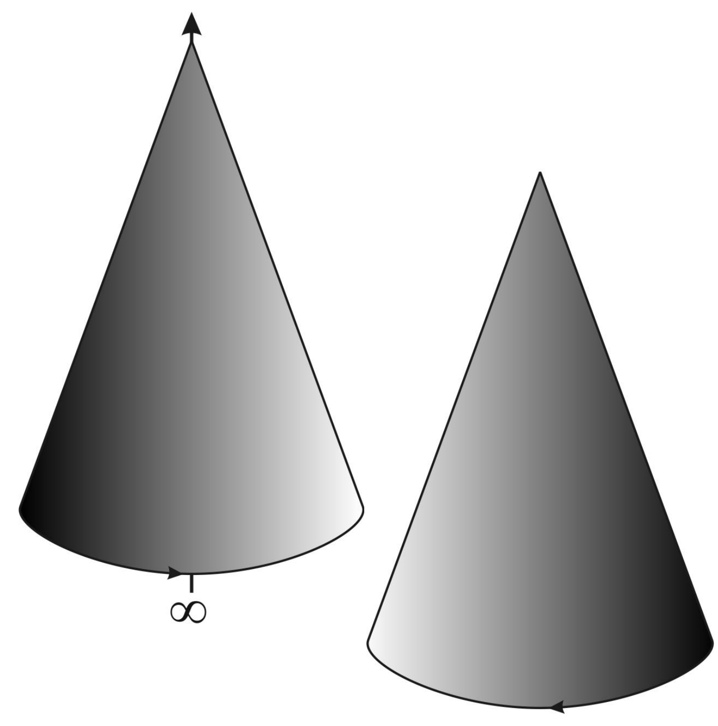
Шекті топтарды қорыту принципі нүктелік симметрия топтарын қорыту принципіне ұқсас.

Қарапайым ∞ класта ерекше бағыт бойымен өтетін реті ∞ тең айналу осі бар.

∞ шекті тобын айналатын конус көмегімен бейнелейді. Реті шексіз ось конус осін бойлай өтеді. Конус айналатын болғандықтан онда бойлық симметрия жазықтықтары болмайды.

Бұл топ полярлық топ болып табылады, өйткені ∞ осі полярлық, себебі оның екі ұшын ешқандай симметрия түрлендірулері бір біріне келтіре алмайды.

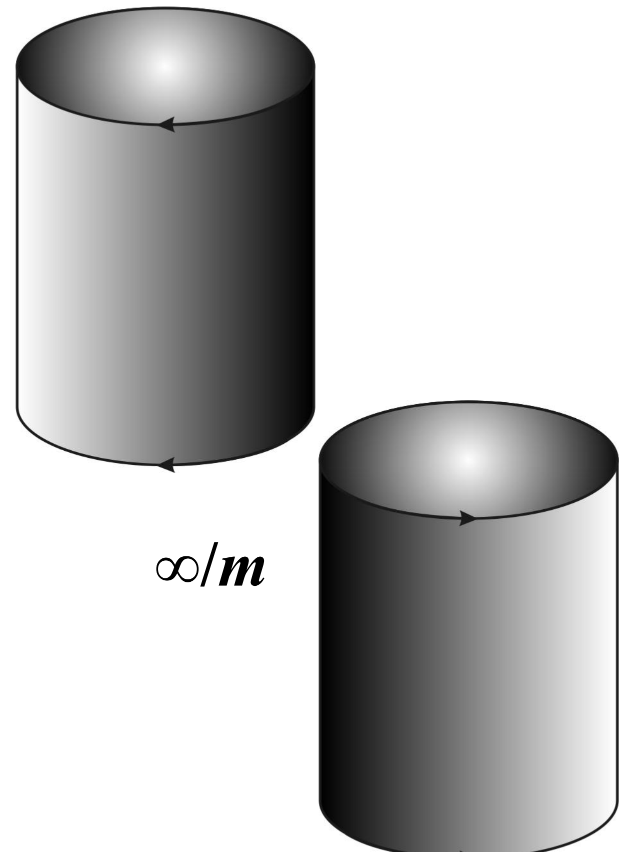
Сонымен қатар бұл топ энантиоморфты болып табылады, өйткені конус екі жаққа қарай айнала алады. Сондықтан бір конус оң, ал екінші сол деп аталуы мүмкін.



Енді проекция осінің бойымен $\bar{\infty}$ инверсиялық симметрия осін орналастырайық: сонда келесі топты табамыз $\bar{\infty} = \bar{\infty}/m = \infty/m$.

∞ айналу осіне симметрия жазықтығын қосайық. Алдымен жазықтық оське перпендикуляр орналасқан болсын. Бұл жағдайда $\infty/\boldsymbol{m}$ тобын аламыз.

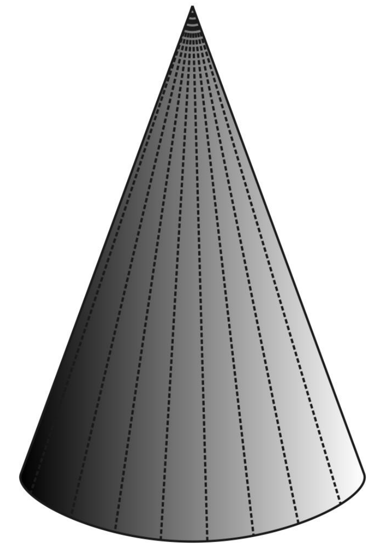
∞/m шекті тобы айналатын цилиндрде іске асады. Цилиндр айналатын болғандықтан ∞ осіне параллель симметрия жазықтықтары болмайды. Бұл оське перпендикуляр жазықтық бар және ∞ осі мен жазықтықтың қиылысқан жерінде *C* симметрия центрі болады. Симметрия жазықтығы мен симметрия центрі болғандықтан фигура полярлық болмайды. Мұндай топ аксиал деп аталады және сәйкесінше ∞ – аксиал осі деп аталады. Оның ұштарын солтүстік және оңтүстік деп шартпен белгілеуге болады.



$\infty/\boldsymbol{m}$

Енді симметрия жазықтығы оське параллель орналасқан болсын. Бұл жағдайда келесі топты табамыз: $\infty \boldsymbol{m} = \infty \boldsymbol{m}^{\infty} = \infty \boldsymbol{m}$.

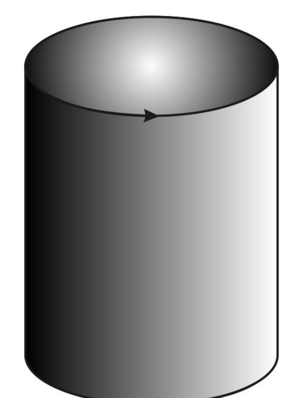
Қозғалмайтын конус ∞m топты бейнелейді. Бұл фигура полярлық болып табылады, сондықтан ∞m тобы да полярлық болады. Реті шексіз полярлық ось конус осінің бойымен өтеді. Осы оське параллель және осы осьте қиылысатын симметрия жазықтықтарының шексіз саны орналасады. Осы себептен ∞m тобы энантиоморфты болмайды.



$\infty \boldsymbol{m}$

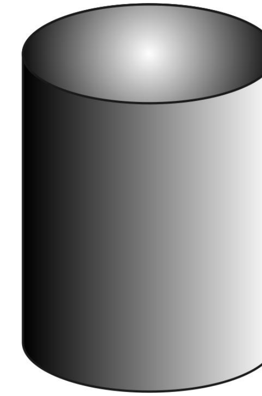
Осы оське перпендикуляр реті *2-ші* осьті қосатын болсақ келесі кластарды аламыз $\infty/\boldsymbol{2} = \infty \boldsymbol{2}^{\infty} = \infty/\boldsymbol{2}$.

$\infty/\boldsymbol{2}$



Бұралған цилиндр $\infty/2$ топты бейнелейді. Бұл фигурада цилиндр осін бойлай өтетін ∞ осіне перпендикуляр реті 2-ші осьтердің шексіз саны орналасады. ∞ осіне параллель симметрия жазықтықтары жоқ, өйткені цилиндр бұралған. Бұл топ та аксиал болады.

Енді $\bar{\infty}$ инверсиялық оське оған параллель симметрия жазықтығын қосайық. Перпендикуляр жазықтықтарды қосудың қажеті жоқ, өйткені инверсиялық осьтің өзінде ондай жазықтық бар. Бұл жағдайда келесі топты табамыз: $\bar{\infty}\boldsymbol{m} = \bar{\infty}\boldsymbol{m}^{\infty}/\boldsymbol{m} = \infty/\boldsymbol{mm}$



$\infty/\boldsymbol{mm}$

∞/mm тобын қозғалмайтын цилиндр көмегімен бейнелейді. Цилиндр осінің бойымен ∞ осі өтеді, оған параллель симметрия жазықтықтарының шексіз саны, ал оған перпендикуляр тағы бір симметрия жазықтығы пайда болады. Жазықтықтардың қиылысқан жерінде реті *2-ші* осьтердің шексіз саны, ал ∞ осі мен оған перпендикуляр симметрия жазықтығының қиылысқан жерінде *C* симметрия центрі пайда болады.

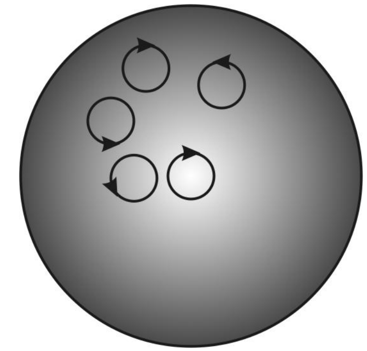
Екі қиылысатын реті шексіз симметрия остерінің қосындысы бір нүктеде қиылысатын реті шексіз симметрия осьтерінің шексіз санынан тұратын шекті симметрия тобын береді. Бұл топ ∞/∞ = ∞∞ = ∞/∞.

∞/∞ шекті топқа жалғыз симметрия жазықтығын қосқанда реті шексіз осьтер бұл жазықтықты шексіз рет көбейтеді. Оның нәтижесінде барлық мүмкін симметрия элементері бар $\infty/\infty\boldsymbol{m}$ тобын аламыз.

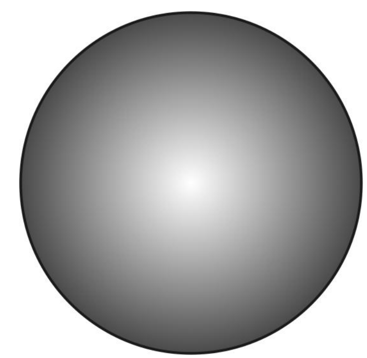
Екі шар тәрізді шекті топтар

Біріншісі – ∞/∞ – жарықтың поляризация жазықтығын айналдыратын оптикалық активті заттан жасалған шар болып табылады. Шардың центрінде қиылысатын ∞ осьтердің шексіз саны оның симметрия элементтері болады. Бірақ олар бұранда сияқты бұралған ерекше осьтер болады және сол себептен басқа симметрия элементтері болмайды.

∞/∞



Екінші шар изотроптық заттан жасалған және шардың центрінде қиылысатын ∞ осьтердің шексіз саны, осы осьтер бойымен өтетін симметрия жазықтықтарының шексіз саны және симметрия центрі оның симметрия элементтері болып табылады. Бұл топ келесі символмен белгіленеді $\infty/\infty m$.



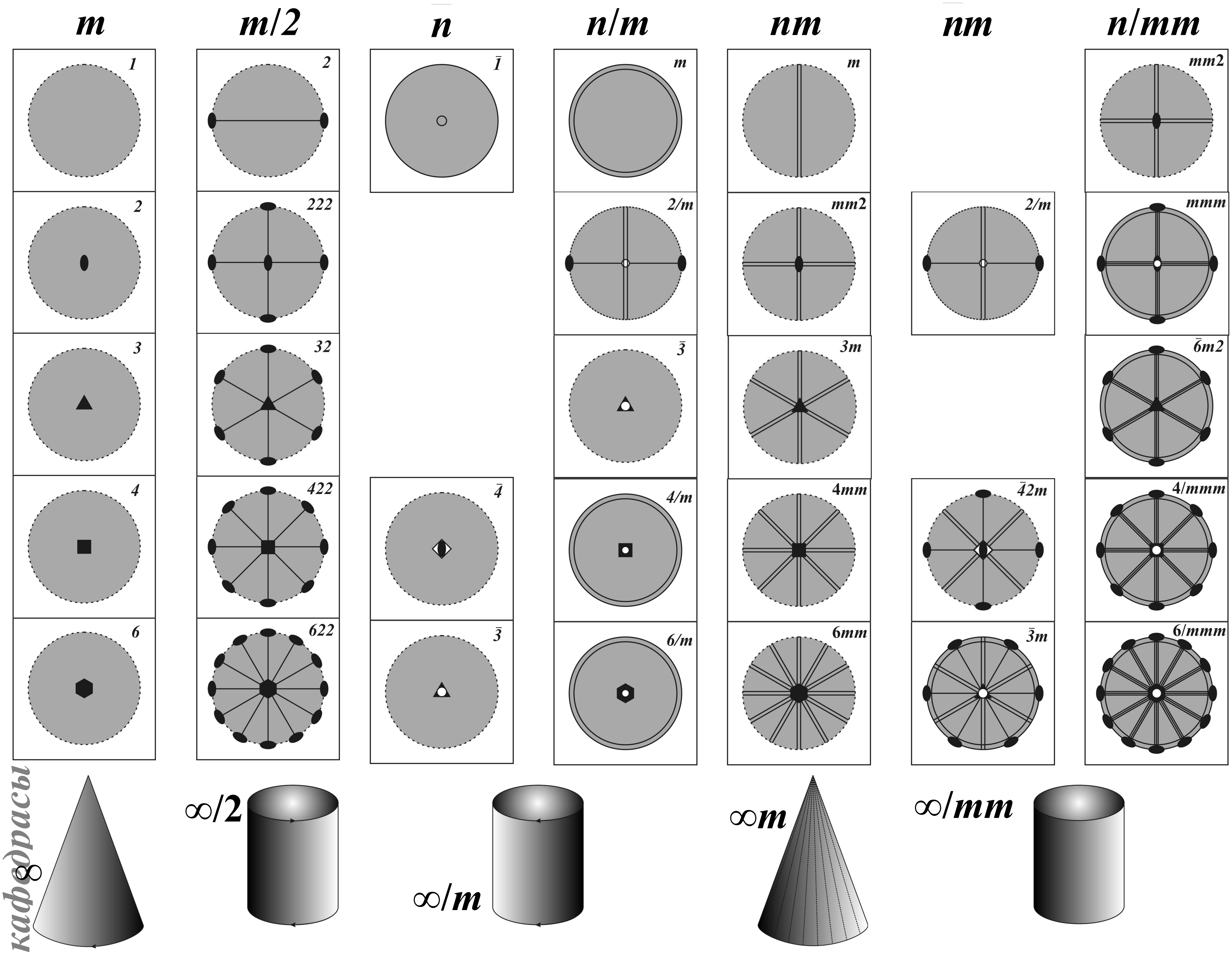
∞/∞*m*

Шекті симметрия топтарының саны **жетіге** тең: ∞, $\infty/2$, ∞/m, ∞m, ∞/mm, ∞/∞, $\infty/\infty m$. Симметрия осінің реті жоғарылаған сайын кеңістік фигуралардың барлық нүктелік симметрия топтары шексіздікте осы топтардың біреуіне ұмтылады.

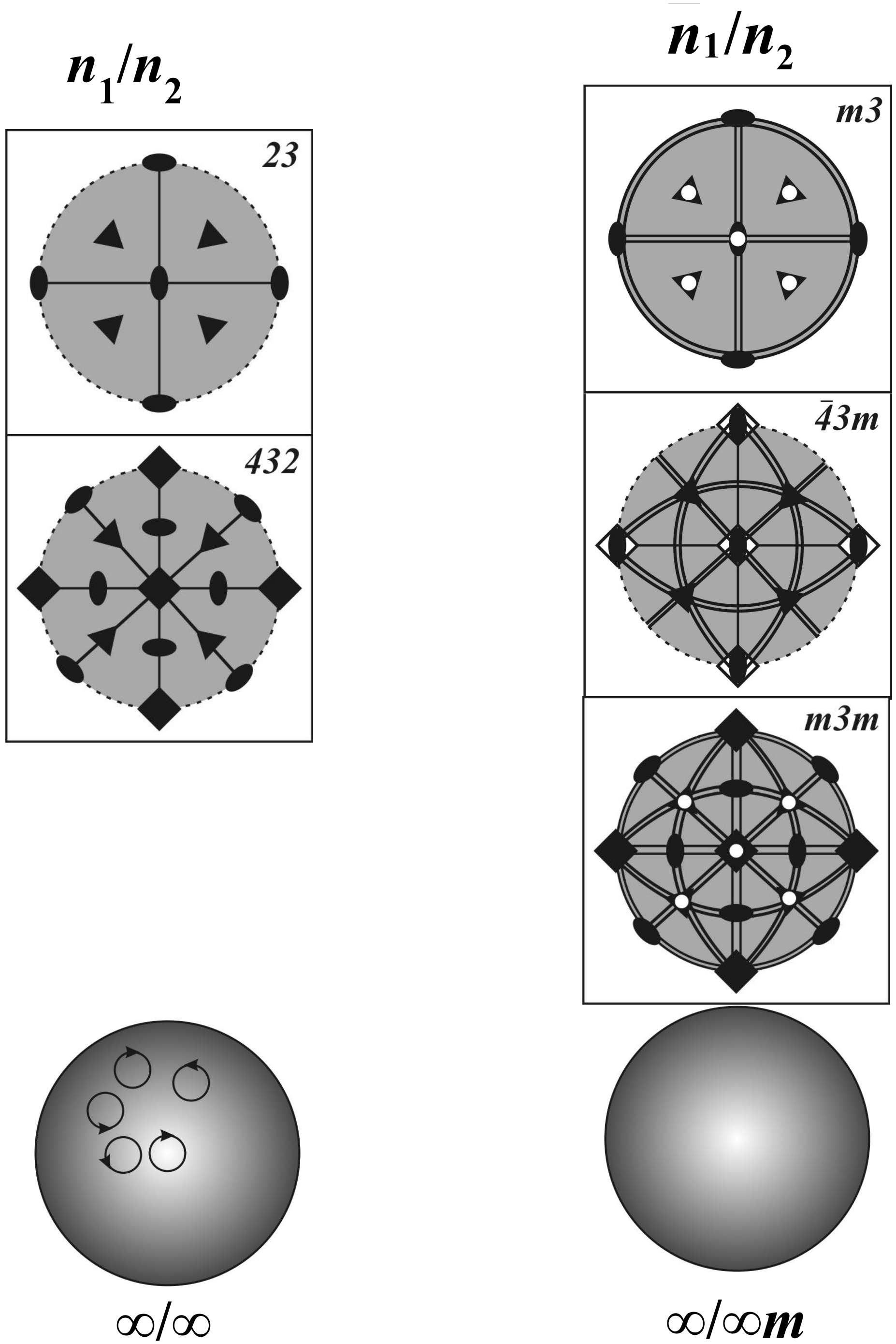
Шекті симметрия топтарын зерттеген кезде **нүктелік симметрия топтарының шағын топшалары** деп аталатын жаңа маңызды ұғым енгізіледі.

Нүктелік топтың барлық симметрия элементтері бастапқы симметрия тобында табылатын болса, онда оны нүктелік топтың шағын топшасы деп атайды.

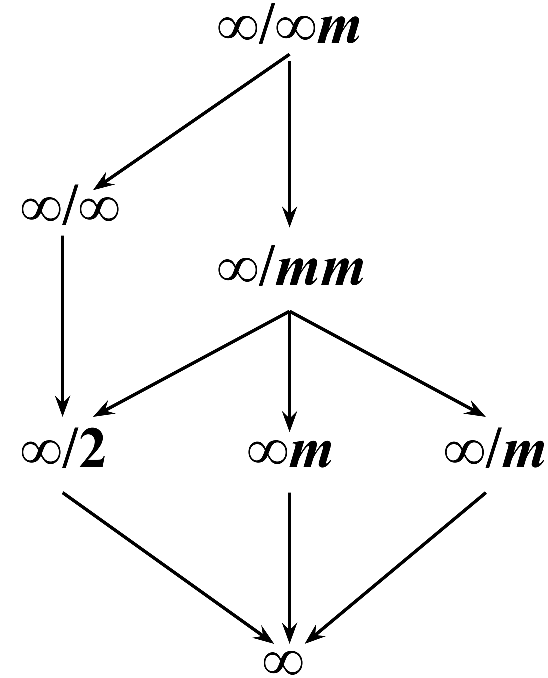
Осы анықтама бойынша жоғарыда қарастырылған кеңістік фигуралардың барлық **нүктелік топтары симметрия осьтерінің реті жоғарылағанда** ұмтылатын **өз шекті топтарының топшалары болып табылады**.



m
m/2
n̄
n/m
nm
n̄m
n/mm
1
2
1̄
m
m
mm2
2
222
2/m
mm2
2/m
mmm
3
32
3̄
3m
6̄m2
4
422
4̄
4/m
4mm
4̄2m
4/mmm
6
622
3̄
6/m
6mm
3̄m
6/mmm
∞
∞/2
∞/m
∞m
∞/mm


n_1/n_2
23
432
∞/∞
n_1/n_2
$m3$
$\bar{4}3m$
$m3m$
$\infty/\infty m$

Шекті топтар өзара топтар және топшалар арасындағы қатынастармен байланысады.



∞/∞*m* шекті тобы ең жоғары топ болып табылады .

∞/∞ және ∞/*mm* оның бірінші топшалары болады. ∞/2 тобы олардың жалпы топшасы, ал ∞ тобы оның топшасы болып табылады.

∞/*mm* тобының екі топшасы бар – ∞*m* және ∞/*m*. Бұл топтардың жалпы топшасы ∞ тобы болады.

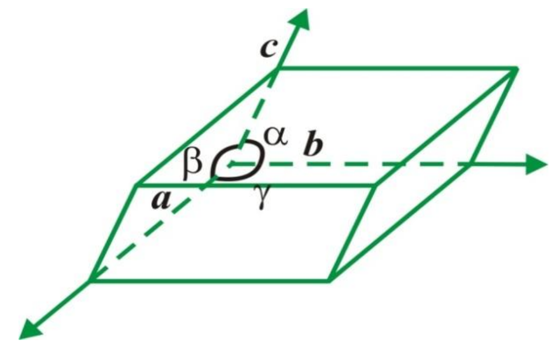
Топша ұғымын кеңістік фигуралардың барлық нүктелік топтарына қолдануға болады.

Мысалы, 422 нүктелік тобының 1, 2, 222 және 4 топшалары бар. Осындай жолмен барлық нүктелік топтардың топшаларын көрсетуге болады.

Кристалдарды орнықтыру

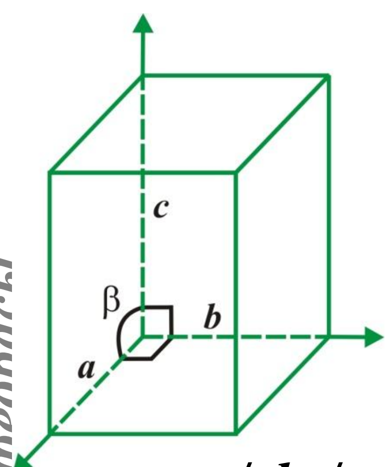
Кристалдың кристаллографиялық параметрлері мен физикалық қасиеттерінің әртүрлі лабораторияларда жасалған өлшеулерін салыстыру үшін **кристалдардың орнықтыруы** туралы, б.а. **кристалдың симметрия элементтеріне байланысты координат жүйесін таңдау** туралы келісу қажет.

Үшклиндық сингония – *X*, *Y*, *Z* осьтері кристалдың накты немесе мүмкін болатын қырларына параллель болады. *Z* осі ең дамыған белдеудің осіне параллель болғандықтан вертикал орнықтырылады.



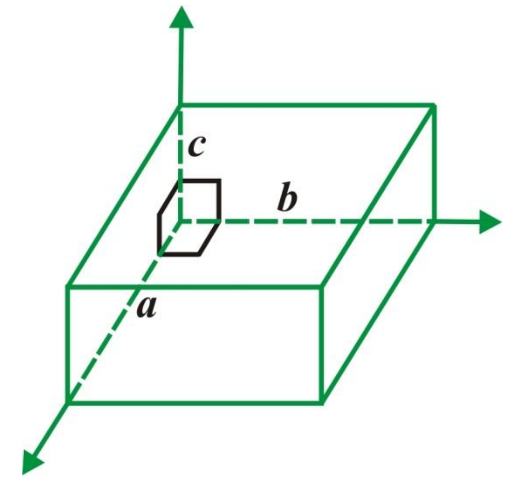
$a \neq b \neq c,\ \alpha \neq \gamma \neq \beta \neq 90°$

Моноклиндық сингония – *Y* осі реті *2-ші* осьтың бойымен немесе *m* жазықтыққа нормаль бойымен орнықтырылады. *X*, *Z* осьтері кристалдың накты немесе мүмкін болатын қырларына параллель, *Y* осіне перпендикуляр жазықтықта орнықтырылады. *Z* осі вертикаль болады.



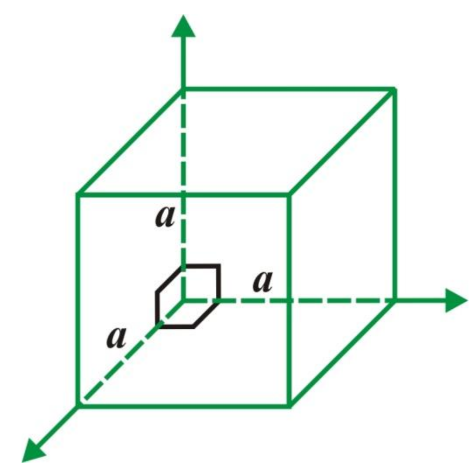
$a \neq b \neq c,\ \alpha = \gamma = 90° \neq \beta$

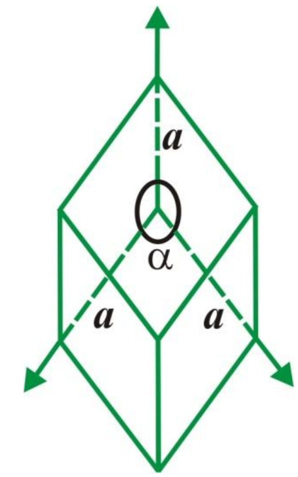
Ромбтық немесе орторомбтық сингония – *X*, *Y*, *Z* осьтері кристалдың ерекше бағыттарына дәл келіп реті *2* үш осьтермен немесе реті *2* (вертикал) осьпен және *m* жазықтықтарға нормаль бойымен бірлеседі.



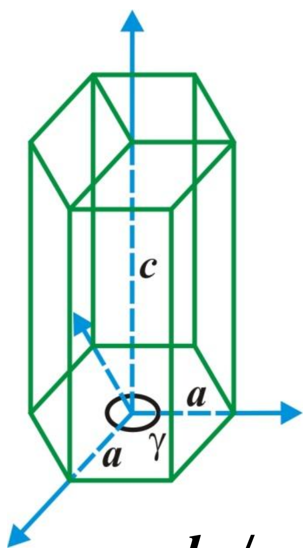
$$\boldsymbol{a \neq b \neq c,\ \alpha = \gamma = \beta = 90^\circ}$$

Кубтық сингония – реті ең жоғары симметрия осі *Z* осі болып қабылданады.





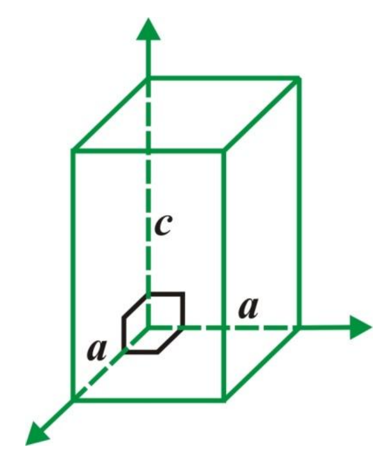
Тригоналдық* (*Ромбоэдрлық*) *сингония – негізгі симметрия осі 3 немесе $\bar{3}$ Z осі болып қабылданады.
$\boldsymbol{a = b = c,\ \alpha = \beta = \gamma \neq 90°}$.



$\boldsymbol{a = b = c,\ \alpha = \beta = \gamma \neq 90°}$

Гексагоналдық сингония – негізгі симметрия осі 6 немесе $\bar{6}$ Z осі болып қабылданады. $\boldsymbol{a = b \neq c,\ \alpha = \beta = 90°,\ \gamma = 120°}$

$\boldsymbol{a = b \neq c,\ \alpha = \beta = 90°,\ \gamma = 120°}$

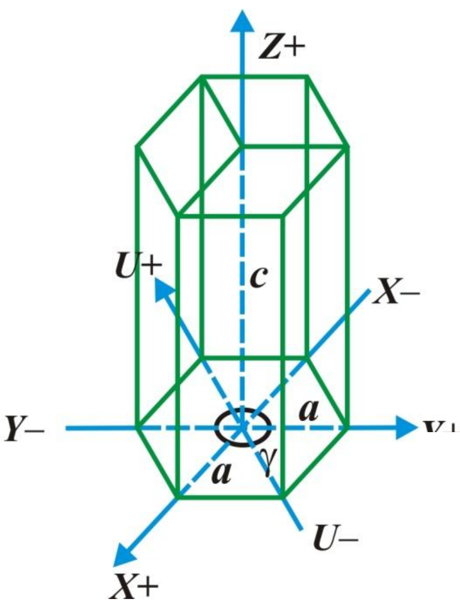


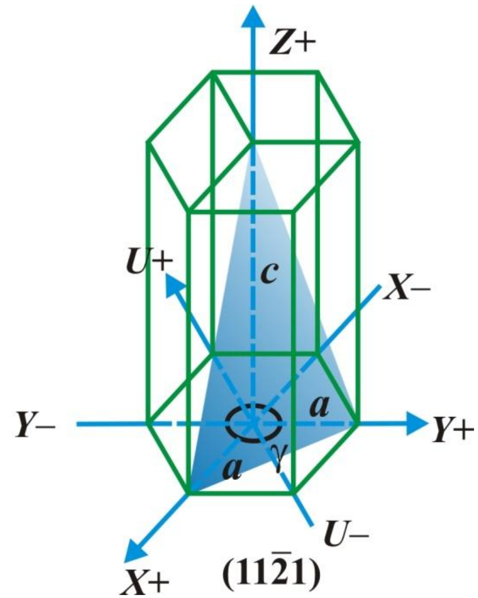
Тетрагоналдық сингония – негізгі симметрия осі 4 немесе $\bar{4}$ Z осі болып қабылданады.
$\boldsymbol{a = b \neq c,\ \alpha = \beta = \gamma = 90°}$.

$\boldsymbol{a = b \neq c,\ \alpha = \beta = \gamma = 90°}$.

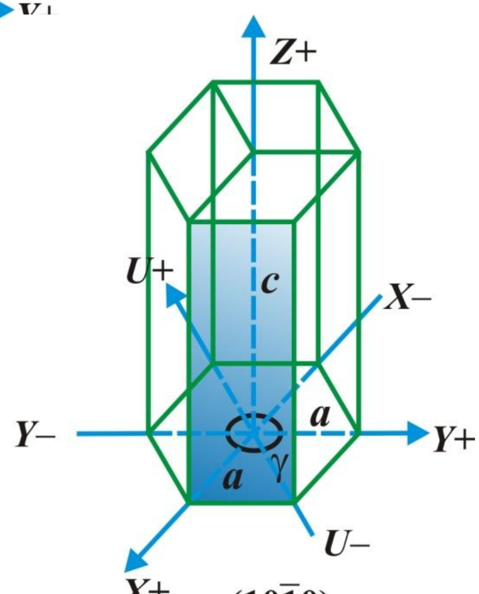
Гексагоналдық жүйе кристалдарында төрт горизонтал осьтері бар орнықтыру қолданылатын кезде бұл осьтерде масштабтар бірдей болады. Бұл жағдайда қабырғалар символдары (*hkil*) ұқсас жолмен тұрғызылады.

$$\boldsymbol{h + k = -i}$$

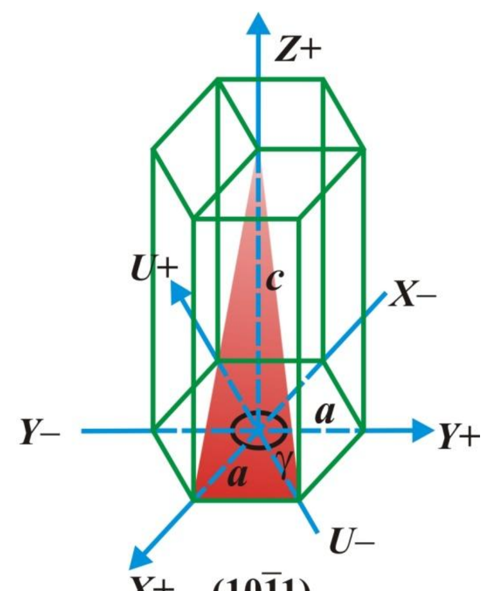




(11$\bar{2}$1)



(10$\bar{1}$0)

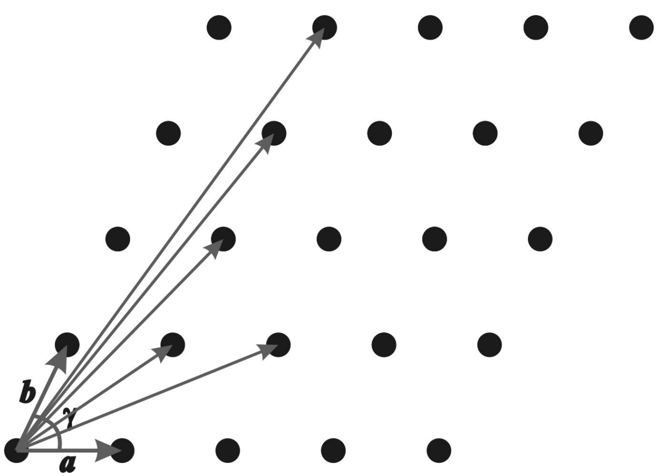


(10$\bar{1}$1)

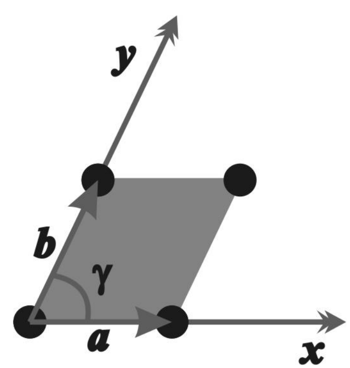
Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

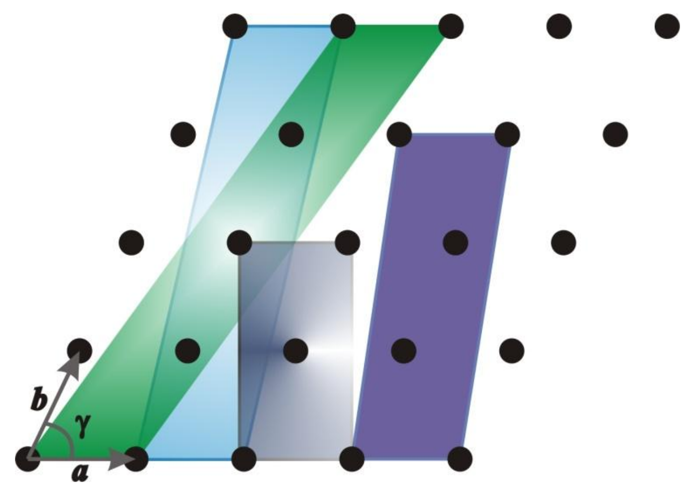
Кристалл құрылымында нүктелік симметрия тобына кіретін шекті симметрия түрлендірулеріне шексіз симметрия түрлендірулері қосылады. ***Трансляция*** негізгі шексіз симметрия түрлендіруі болып табылады, б.а. ***трансляция периоды*** деп аталатын бір түзудің бойымен бірдей қашықтыққа шексіз қайталанатын орын ауыстыру.

Элементар трансляцияларды олар жазық тордың симметриясын ең айқын түрде көрсететіндей қылып таңдайды.



Әртүрлі негізгі трансляциялар. ***a*** мен ***b*** ең қысқа элементар трансляциялар

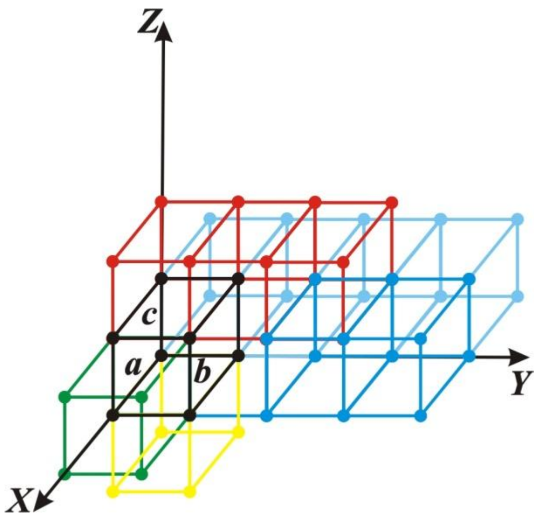




Элементар ұяшықтар

Ең қысқа трансляциялар көмегімен тұрғызылған, тордың симметриясын айқындайтын қарапайым элементар ұяшық

Бравэ торлары



a, ***b***, ***c*** ең қысқа трансляциялар көмегімен тұрғызылған және тордың симметриясын айқындайтын кеңістік торы. ***a***, ***b***, ***c*** үш негізгі трансляциялар шамаларына және өзара бағдарына байланысты симметриясы әртүрлі торлар пайда болады.

Симметрия мүмкін болатын торлардың санын шектейді. Тор берілген кристалл кеңістігі үшін барлық мүмкін болатын симметрия түрлендірулеріне қатысты инварианттық болуы қажет. Барлық кристалдар құрылымдары 14 Бравэ торына сәйкес болатын 14 трансляциялық топ көмегімен сипатталады.

Бір нүктенің трансляциялық қайталану әдісімен тұрғызылған шексіз нүктелер жүйесі Бравэ торы деп аталады.

a, ***b***, ***c*** үш элементарлық трансляция элементарлық ұяшықты немесе қайталану параллелепипедін айқындайды.

14 Бравэ торы бір бірінен элементар ұяшықтарының пішіні мен симметриясы бойынша ажыратылады және олар 7 сингонияға бөлінеді. Сингонияға бөлу **XIX ғасырдың** басында **кристалдың сыртқы пішінін зерттеу негізінде** енгізілген болатын. Сфералық бөлшектердің (материалдық нүктелер) кеңістікте симметриялық орналасуы туралы есепті шешу барысында француз математигі О. Бравэ 1848 ж. кристалдық торлардың бар жоғы 14 негізгі түрі болатынын дәлелдеп аталған сингонияларға бөлуді енгізген.

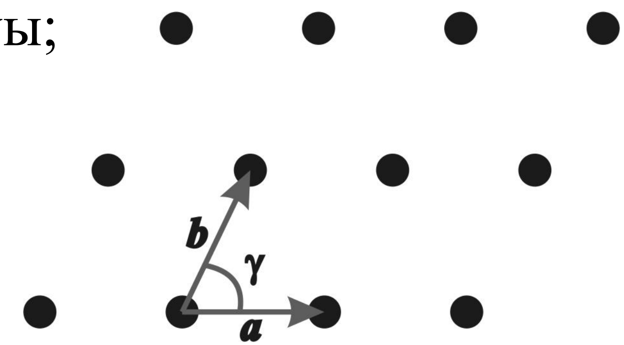
Екіөлшемдік торлар үшін Бравэ торларын қорыту принципі

Жазық тор екі базистік векторлар $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ көмегімен анықталады; ұяшық параметрлері – $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{\gamma}$. Жазық тормен тор жазықтығына перпендикляр ***1***, ***2***, ***3***, ***4***, ***6***, осьтерді айналулар сондай-ақ тор жазықтығына перпендикуляр болатын симметрия жазықтығындағы шағылулар үйлесуі қажет; торды оның жазықтығынан шығаратын ешқандай симметриялық түрлендіру үйлеспейді.

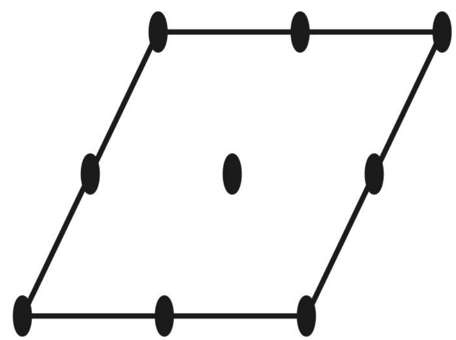
32 нүктелік симметрия топтарынан жазық жүйелер үшін тек 10 нүктелік топ жарайды: ***1***, ***2***, ***3***, ***4***, ***6***, ***m***, ***mm2***, ***3m***, ***4mm***, ***6mm***.

Екіөлшемдік торларда элементар ұяшықтарды таңдаған кезде келесі шарттар орындалуы тиіс:

- оның симметриясы тордың симметриясына сәйкес болуы;
- тік бұрыштардың саны максимал болуы;
- ұяшық ауданы минимал болуы.

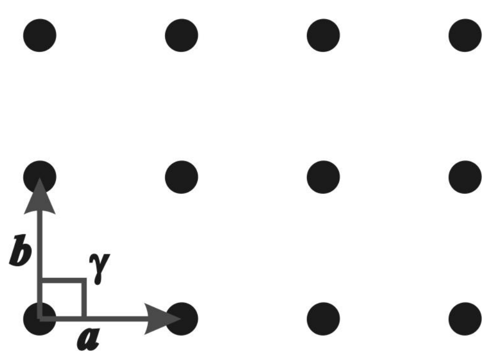


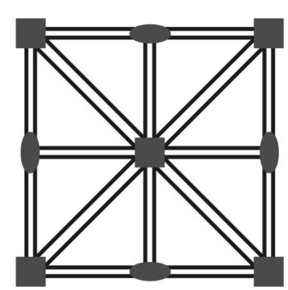
Жалпы жағдайда ұяшық қабырғалары әртүрлі қисықбұрышты $\boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{b}$, $\gamma \neq 90°$ торды аламыз. Онымен ***1*** және ***2*** осьтерді айналулар үйлеседі.



1 и ***2***

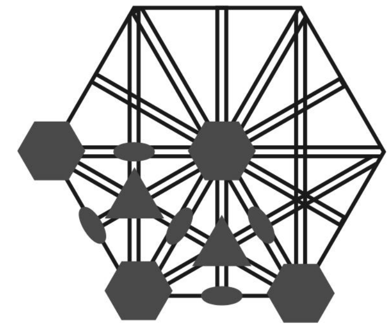
4 ось болған жағдайда тор квадратты болуы тиіс, б.а. $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}$, $\gamma = 90°$.



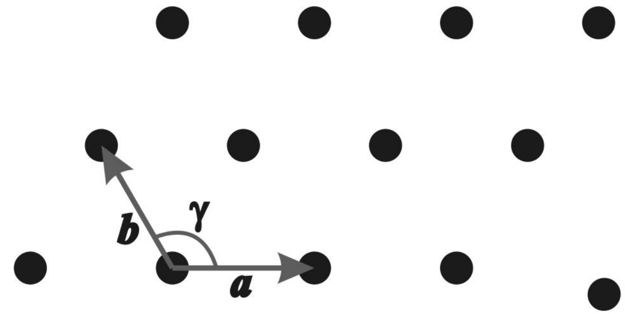


4 және ***4mm***

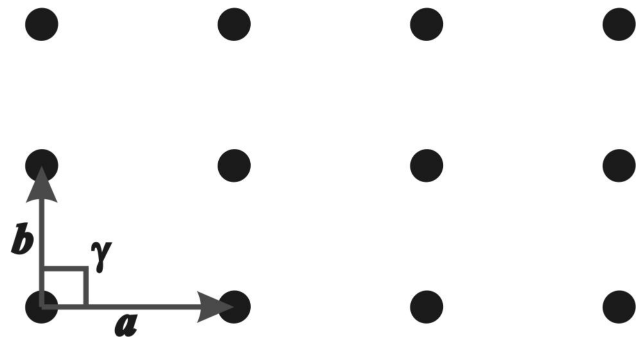
3 және ***6*** осьтер болған жағдайда тор гексагоналды болуы тиіс, б.а. $\boldsymbol{a = b}$, $\boldsymbol{\gamma = 120°}$.

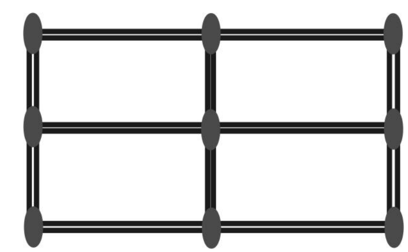


3 және ***3m***
6 және ***6m***

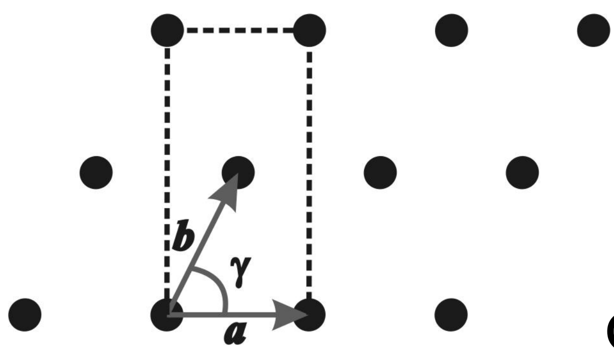


Тікбұрышты ұяшығы бар тікбұрышты тор ($\boldsymbol{a \neq b}$, $\boldsymbol{\gamma = 90°}$) ***m*** және ***mm2*** жазық нүктелік топтарға сәйкес болады.

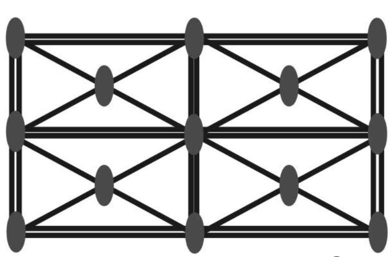




m және ***mm2***



Осы топтарға тағы бір тікбұрышты тор сәйкес болады $\boldsymbol{a \neq b}$, $\boldsymbol{\gamma = 90°}$, бірақ оның элементар ұяшығы қарапайым емес, центрленген болады.



m және ***mm2***

Сонымен осындай тәсілмен 5 Бравэ жазық торларын аламыз.

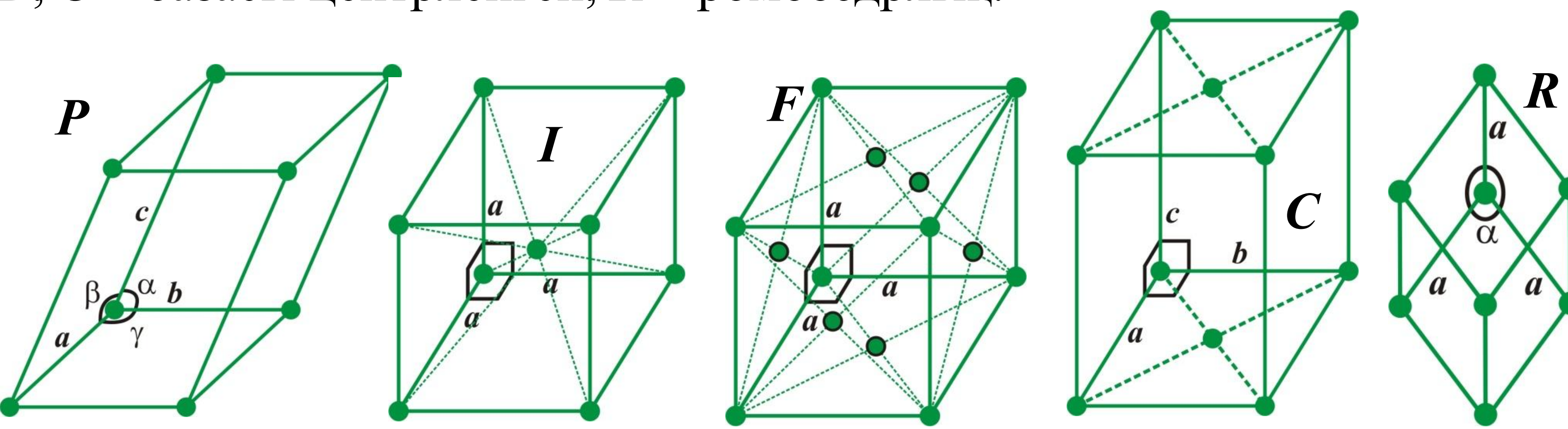
14 Бравэ кеңістік торлары да осы жолмен қорытылады.

Бравэ торларында элементар ұяшықтарды таңдаған кезде келесі шарттар орындалуы тиіс:

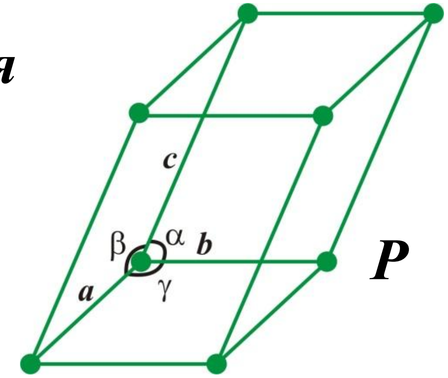
- оның симметриясы тордың симметриясына сәйкес болуы;
- тік бұрыштар мен бірдей қабырғалардың саны максимал болуы;

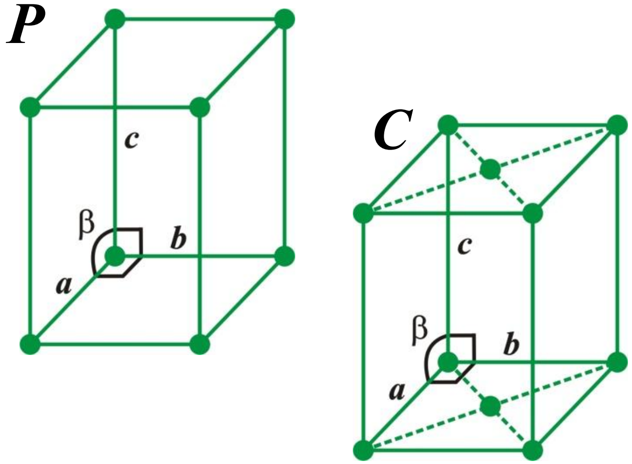
- ұяшық ауданы минимал болуы.

Бравэ бойынша барлық кристалл торлары негізгі трансляциялардың немесе түйіндердің өзара орналасуына қатынасты төрт түрге бөлінеді: ***P*** – қарапайым, ***I*** – көлемі центрленген, ***F*** – қабырғасы центрленген, ***A***, ***B***, ***C*** – базасы центрленген, ***R*** – ромбоэдрлық.



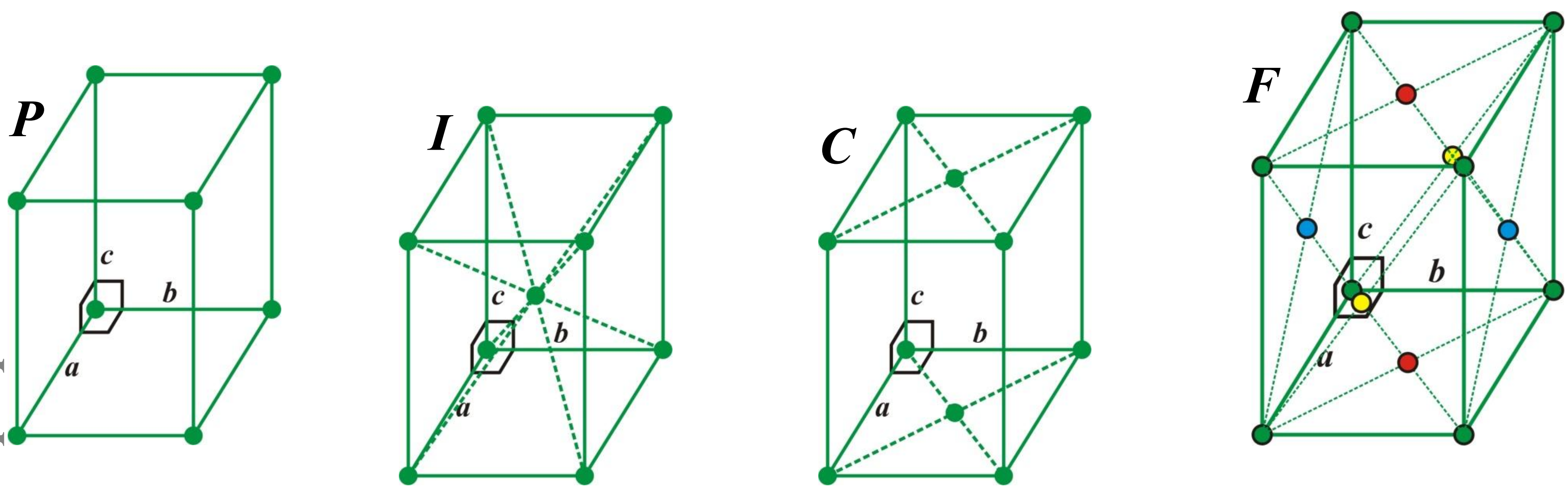
Үшклиндік сингония



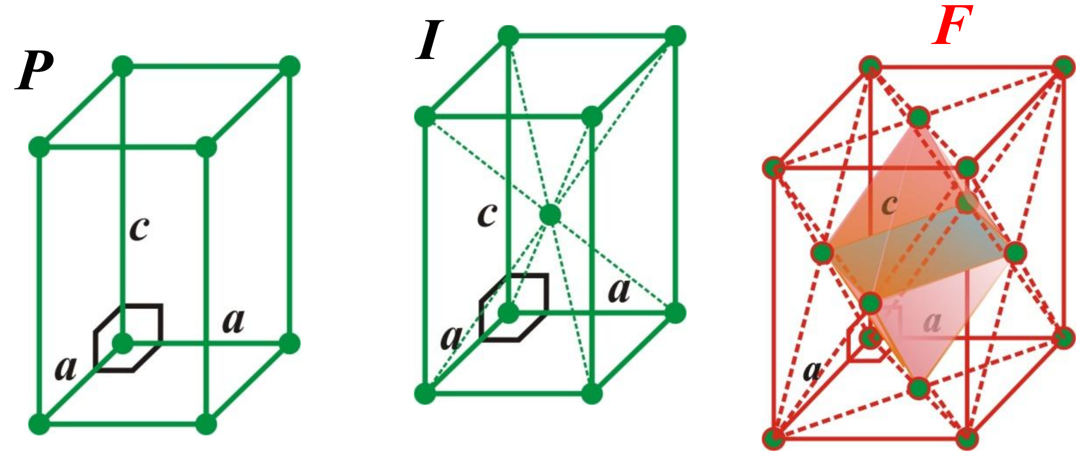


Моноклиндік сингония

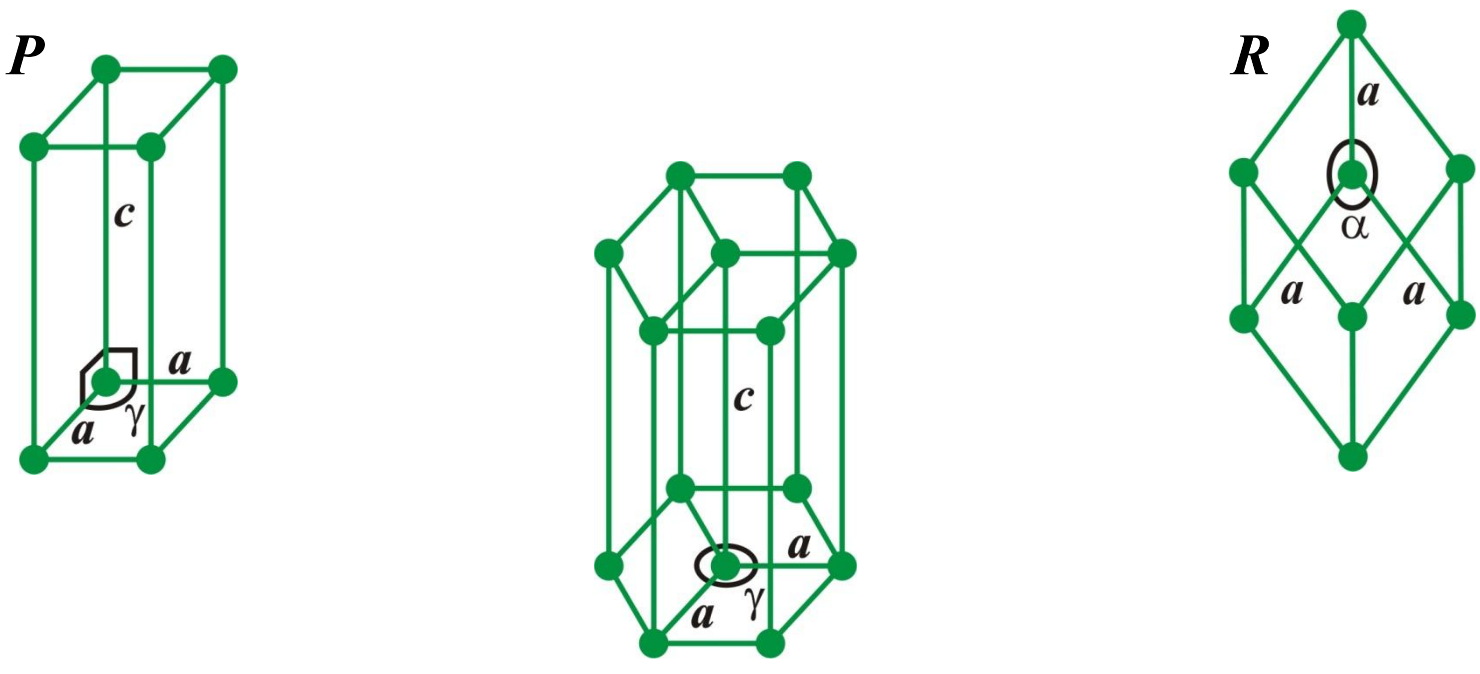
Ромбтық сингония



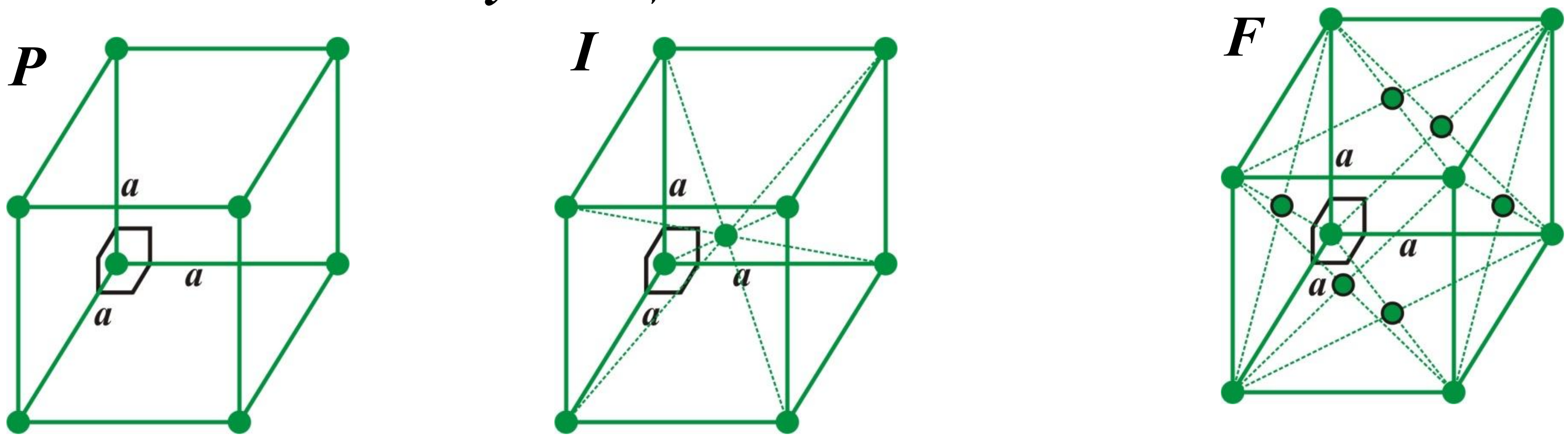
Тетрагоналдық сингония



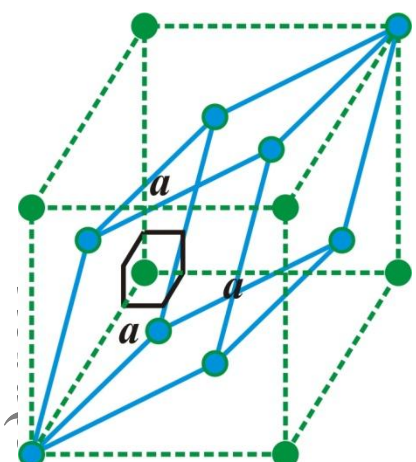
Гексагоналдық және тригоналдық сингониялар



Кубтық сингония

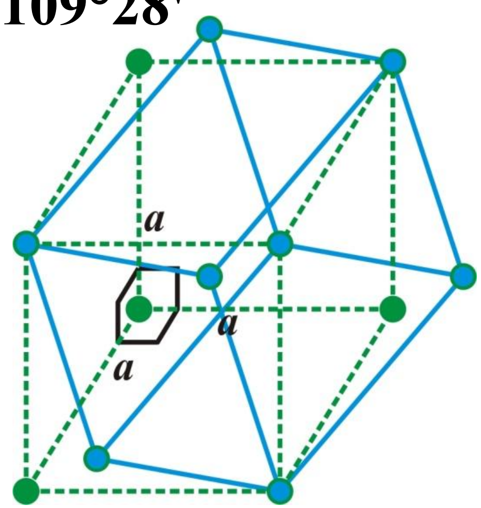


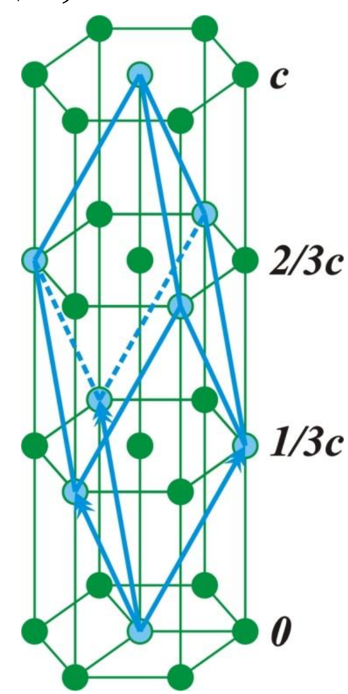
a, ***b***, ***c***, α, β, γ параметрлерінің ара қатынасын анықтағанда қарапайым торға қарағанда күрделі торды қолданған қолайлы болады, өйткені ол құрылымның симметриясын жақсы бейнелейді.



γ = 60°

γ = 109°28'





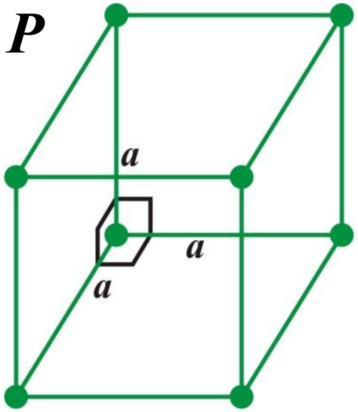
Ұяшықтың ұшындағы түйін сегіз көршілес ұяшықтар үшін, ал қабырғаның центріндегі түйін екі көршілес ұяшық үшін ортақ болады.

Ұяшық көлеміне: ***P***-ұяшыққа – 1 түйін, ***I***-ұяшыққа – 2 түйін, ***F***-ұяшыққа – 4 түйін, ***C***-ұяшыққа – 2 түйін келеді.

Бравэ кеңістік торы атомдардың орналасуын анықтамайды, ол тек кеңістіктегі нүктелердің орналасуын көрсетеді. Кристалл құрылымын бейнелеу үшін тордан басқа базис (кристалл тордың әр нүктесінде орналасқан атомдар) симметриясын анықтау қажет.

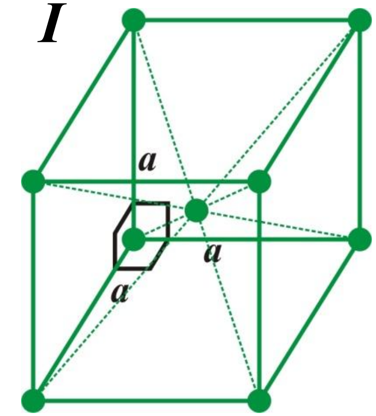
Элементар ұяшыққа кіретін атом координаттарының жиыны базис деп аталады. Сонымен кристалдағы әр атомның орны ескеріледі. Кейбір элементар кристалдардың (Ar, Na, ...) базисы бір ғана атомнан тұрады. Басқа элементтердің кристалл құрылымында элементар ұяшығының базисіне бірнеше атомдар кіреді (мысалы, кремний базисында 2 атом, галлийде 4 атом болады). Әртүрлі сортты атомдардан тұратын заттың кристалдық базисіне кем дегенде бір молекула кіреді.

P



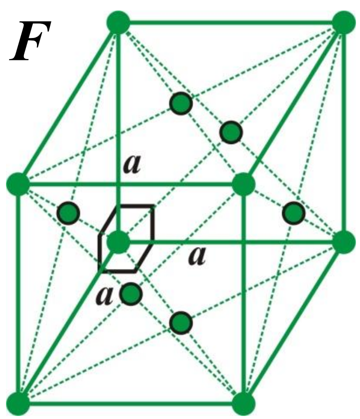
Базис – [[000]], негізгі трансляциялар ***a***, ***b***, ***c***.

I



Базис – [[000]], [[½½½]].
Негізгі трансляциялар ***a***, ***b***, ***c***, **(*a* + *b* + *c*)/2.**

F



Базис – [[000]], [[½½0]], [[½0½]], [[0½½]].
Негізгі трансляциялар ***a***, ***b***, ***c***, **(*a* + *b*)/2, (*b* + *c*)/2, (*a* + *c*)/2.**

Кристалл құрылымының симметриясы

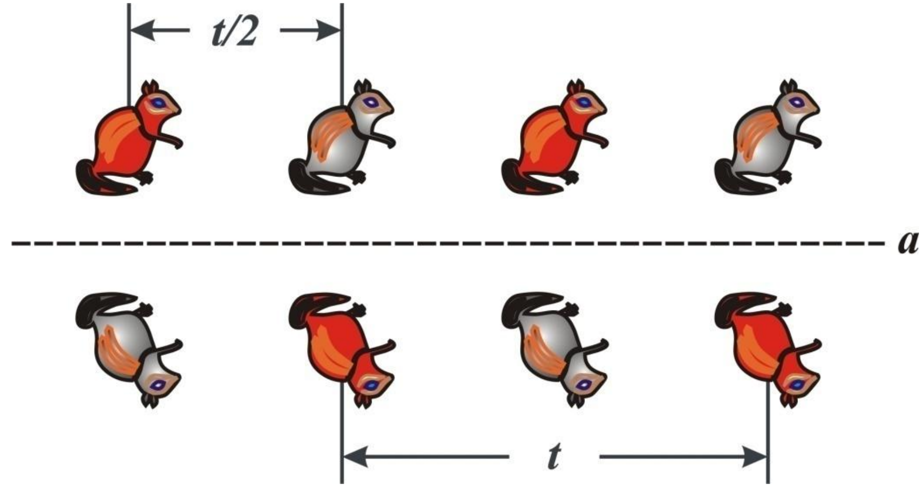
Кристалл құрылымында нүктелік симметрия тобына кіретін шекті симметрия түрлендірулеріне **шексіз симметрия түрлендірулері** қосылады.

Трансляция – негізгі шексіз симметрия түрлендіруі болып табылады, б.а. ***трансляция периоды*** деп аталатын бір түзудің бойымен белгілі бір қашықтыққа шексіз қайталанатын орын ауыстыру.

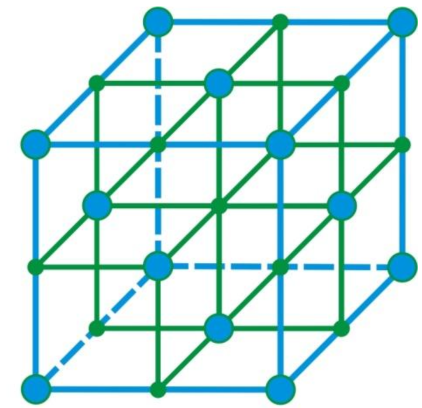
Трансляция мен симметрия жазықтығынан шағылу операциясының көбейтіндісі күрделі шексіз симметрия операциясын тудырады, бұл сырғанай шағылу жазықтығы арқылы түрлендіру болып табылады.

Сырғанай шағылу жазықтығы дегеніміз симметрия жазықтығы мен жазықтықты бойлай және оған паралель трансляция **периодының жартысына** тең шамаға орын аустырудың біріккен әрекеті.

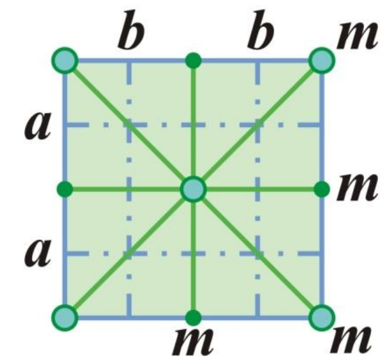
Сырғанай шағылу жазықтығының әрекеті



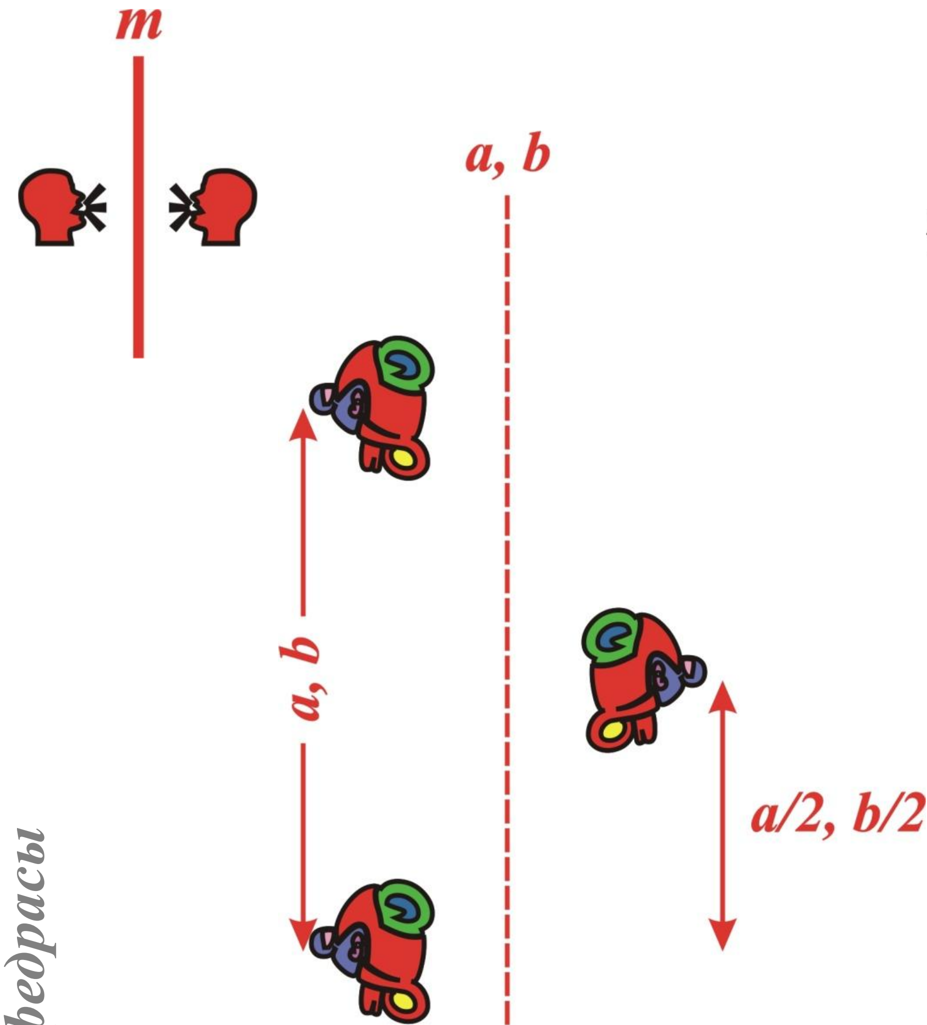
Сырғанай шағылу жазықтығының әрекетін NaCl тас тұзы құрылымының мысалында көрсетуге болады.

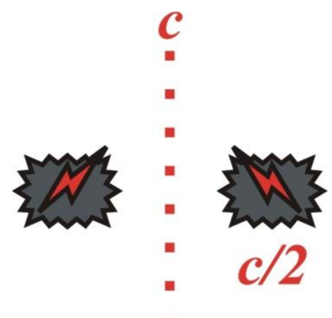


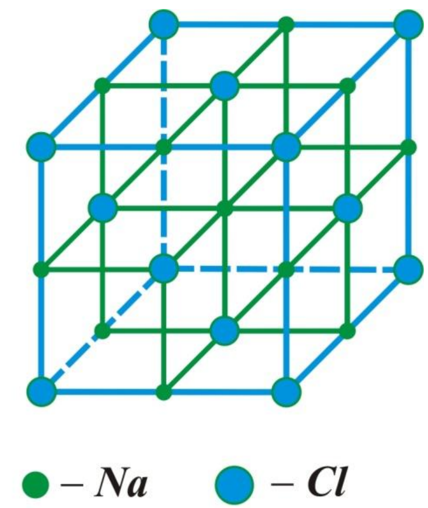
Ион оған ең жақын орналасқан бірдей ионмен бірлесу (қатар болу) үшін *a* немесе *b* симметрия жазықтығынан шағылу сәйкесінше *a/2* немесе *b/2* тең қашықтыққа жазықтық бойымен орын ауыстыру операциялары бірлесу (қатар болу) керек. Ион центрлерінен сырғанай шағылу жазықтықтарымен кезектесіп кәдімгі m симметрия жазықтықтары өтеді.

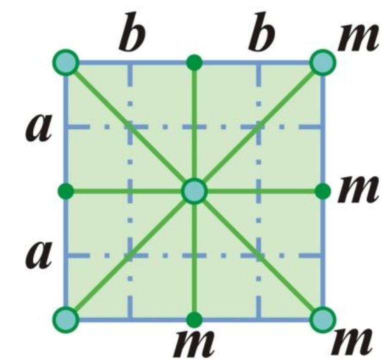


Егер сырғанау *a*, *b, c* (*XYZ*) осьтерін бойлай бағытталған болса онда сырғанай шағылу жазықтығын *a, b, c* символдарымен белгілейді және оның шамасы *a/2, b/2, c/2* тең болады.

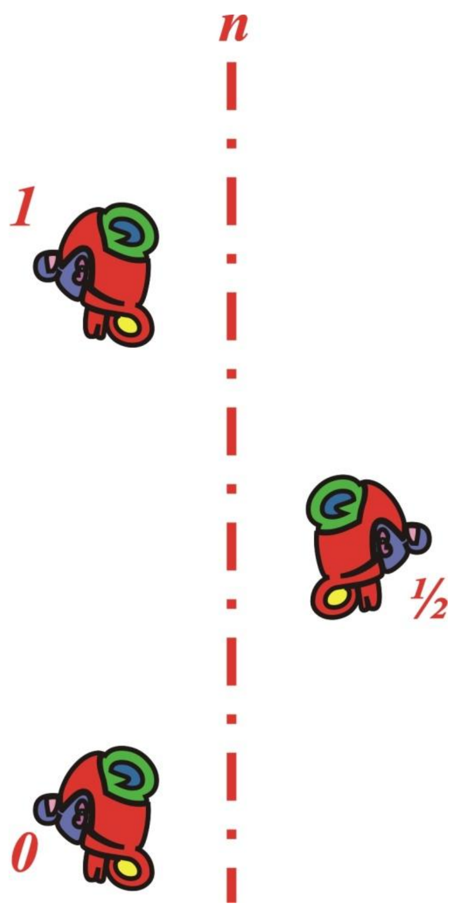


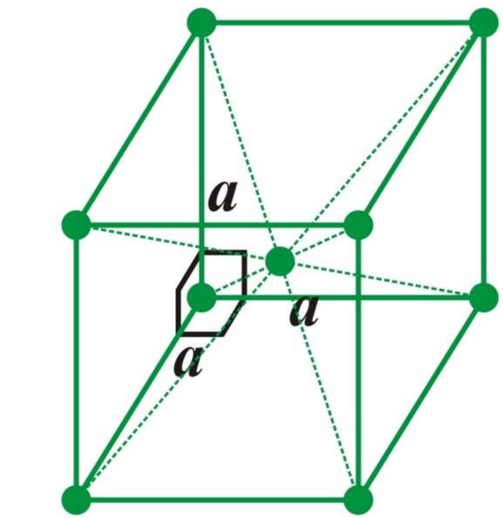


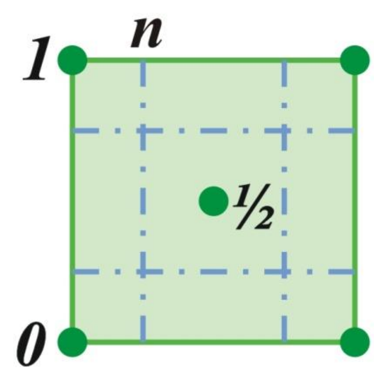




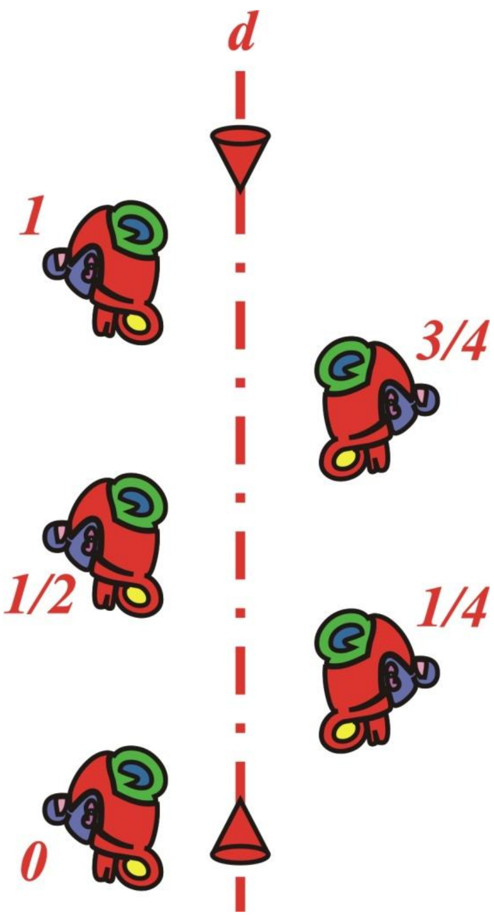
Сырғанау *a, b, c* сырғанау жазықтығында жататын элементар трансляциялардың көмегімен тұрғызылған параллелограмм диагоналі бойымен бағытталуы мүмкін. Егер бұл жағдайда орын ауыстыру параллелограмм **диагоналінің жартысына** тең болса (*a* + *b*)/2, жазықтық ***n*** символымен белгіленеді.

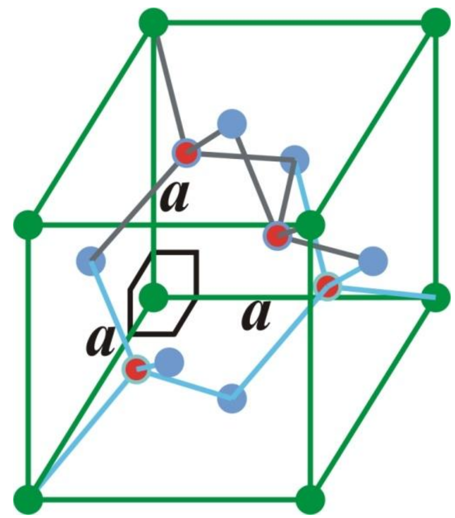


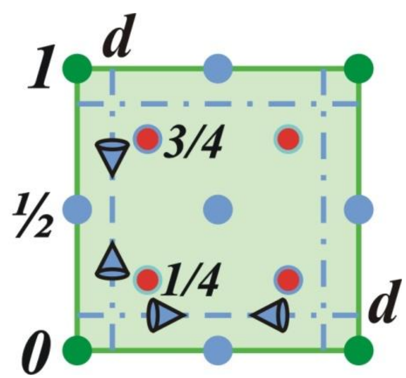




Егер орын ауыстыру параллелограмм **диагоналінің төртен бір бөлігіне** тең болса (а + *b*)/4 – ***d*** символымен белгіленеді; ***d*** жазықтықтары «**алмас**» жазықтықтары деп аталады, өйткені олар **алмас** құрылымына **тән**.





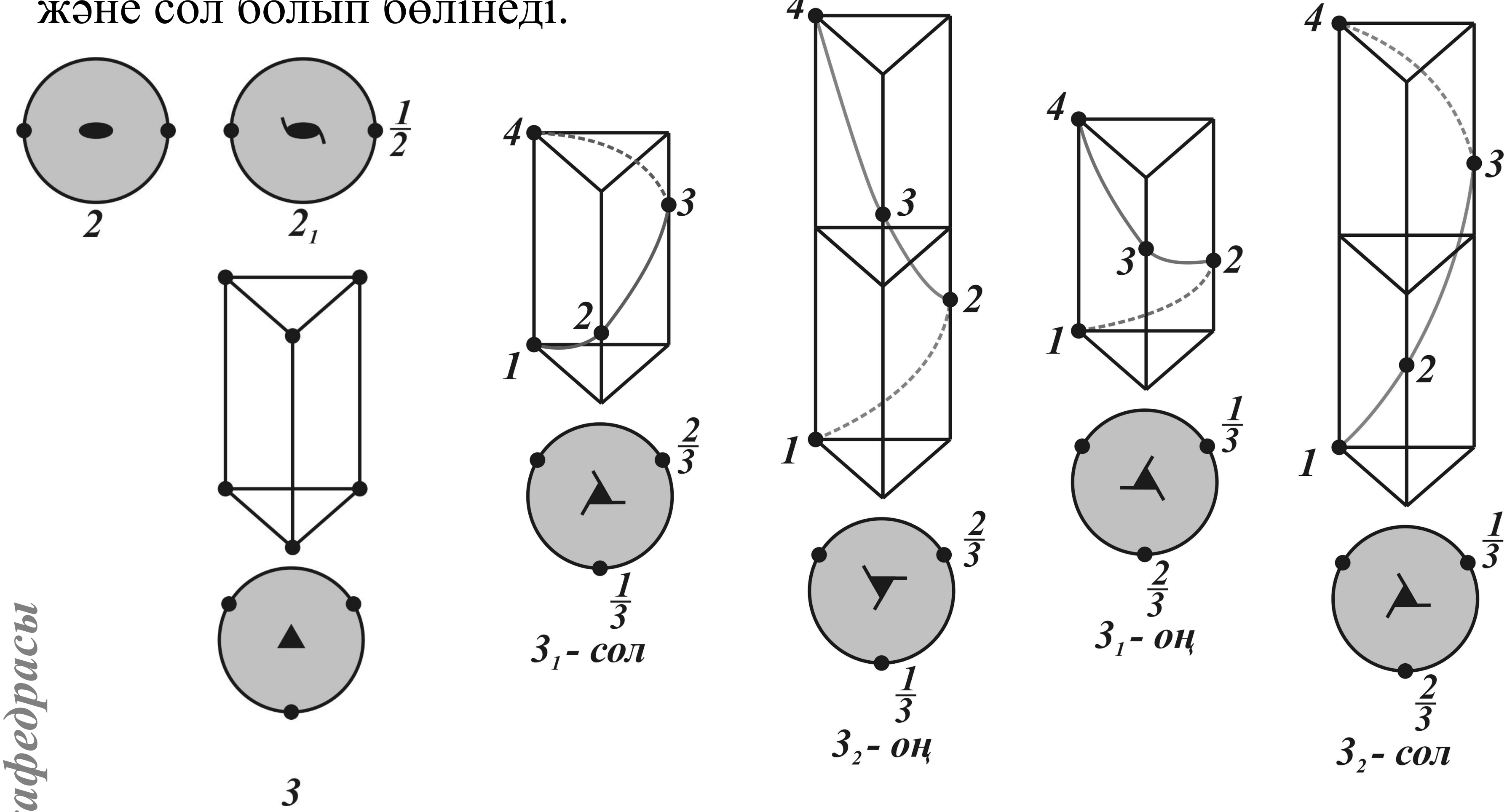


Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

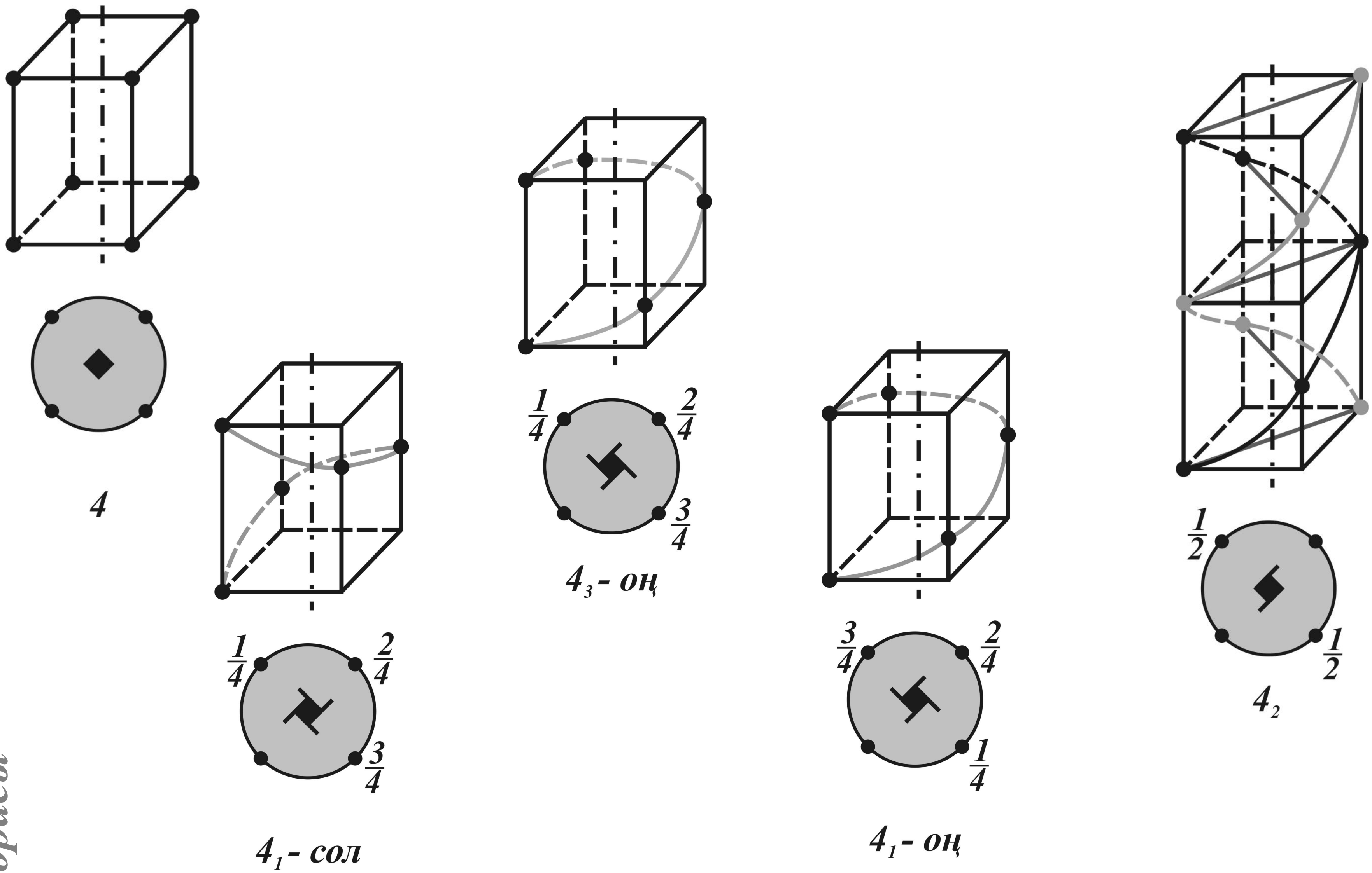
Трансляцияның симметрия осін айналу операциясына көбейтіндісі бұрандалық айналу операциясын тудырады.

Симметрия осін айналу мен осы ось бойымен орын ауыстырудың біреккен әрекеті ***бұрандалық симметрия осі*** болып табылады. Толық айналудан кейін бастапқы нүкте одан бір немесе бірнеше трансляция периодына қашық орналасқан ұқсас нүктемен бірлесу керек.

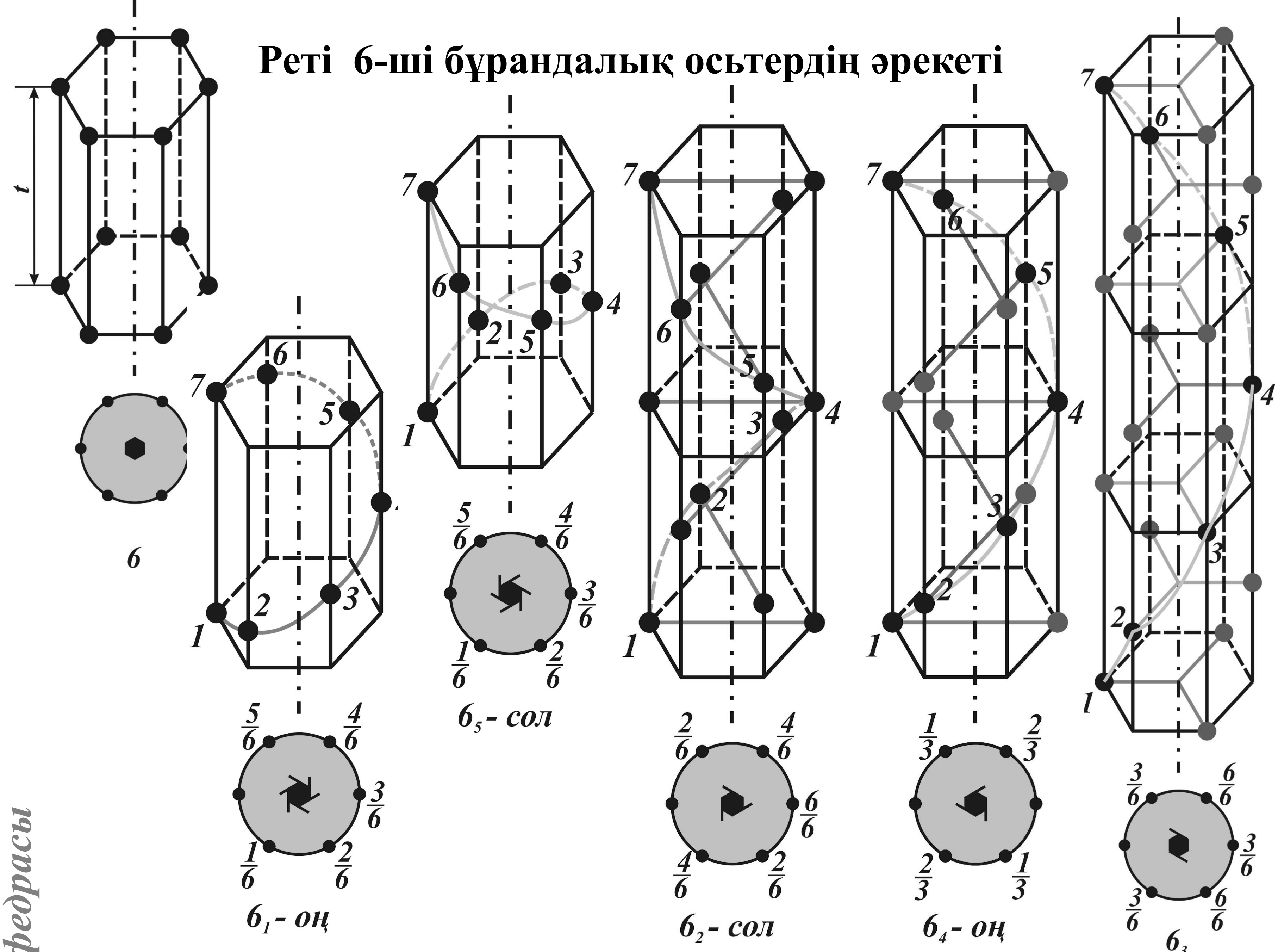
Кристалл кеңістігінде бұрандалық симметрия осьтерінің реттері тек **2**, **3**, **4**, **6** тең болады. Бұрандалық ось сандық индексі бар санмен белгіленеді: сан осьтің ретін көрсетеді, ал индекстің ось ретіне бөліндісі ось бойымен элементар трансляция бірлігімен өлшенетін орын ауыстыру (трансляция) шамасын береді. Бұрандалық осьтер оң және сол болып бөлінеді.



Реті 4-ші бұрандалық осьтердің әсері



Реті 6-ші бұрандалық осьтердің әрекеті

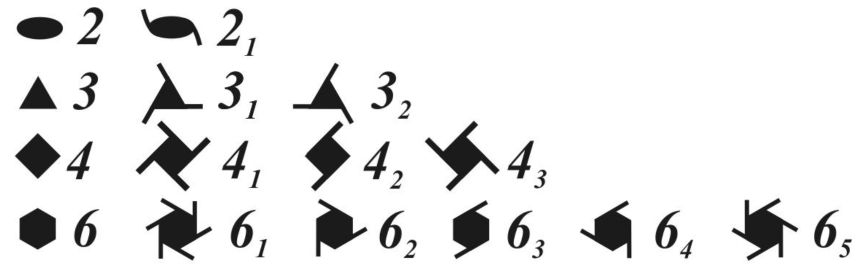


Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

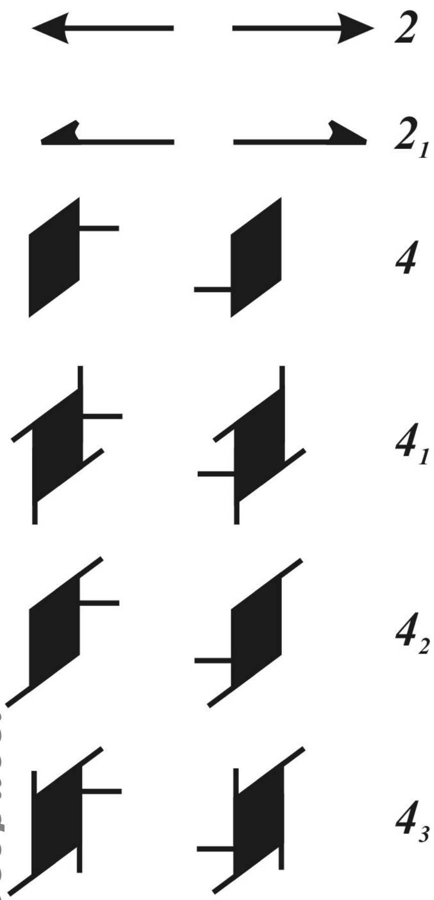
Құрылымдар симметрия элементтерінің халықаралық белгілеуі

Осьтер

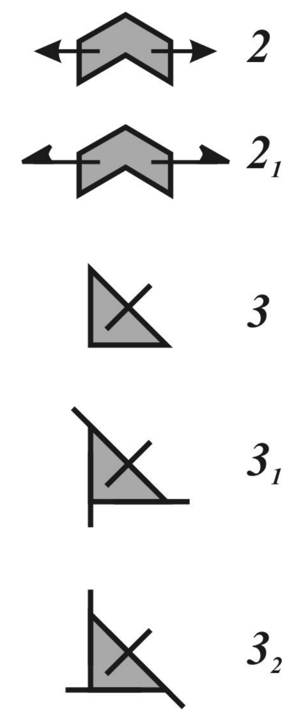
Вертикал



Горизонтал



Көлбеу

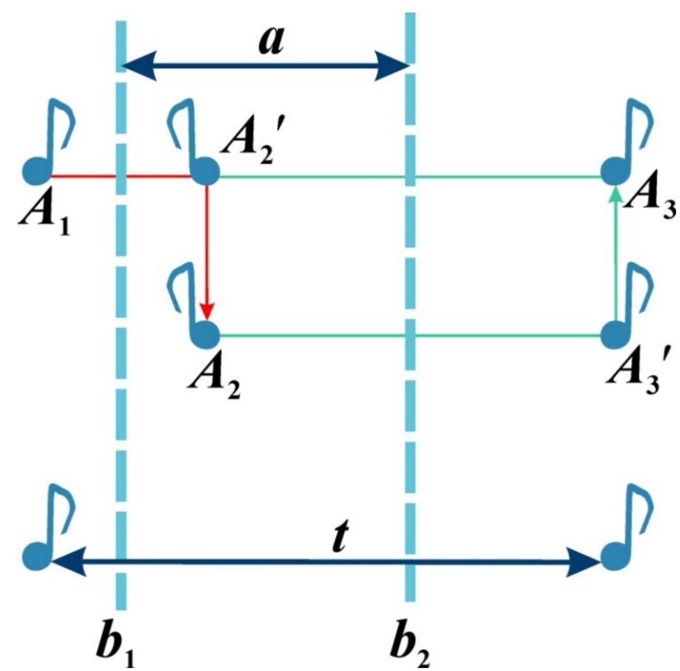


Құрылымдар симметрия элементтерінің халықаралық белгілеуі

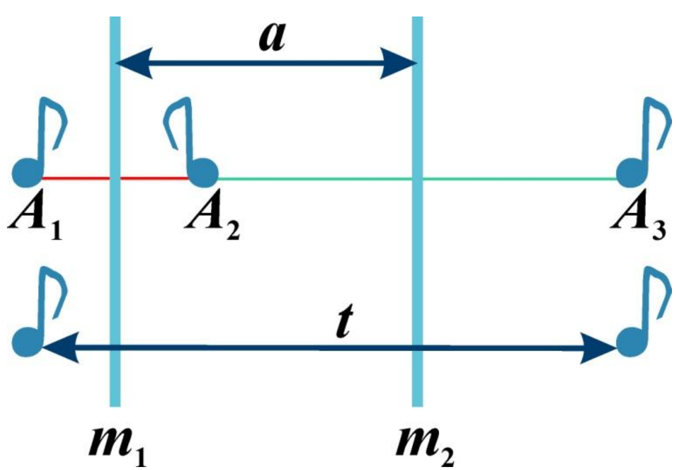
Жазықтықтар

Құрылымның симметрия элементтерін көбейту көпқырлықтар симметриясын сипаттайтын 1-6 теоремаларына бағынады. Сонымен қатар шексіз қайталау қосылатындықтан жаңа терулер пайда болады.

1-теорема. Екі параллель симметрия жазықтықтарынан тізбектелген шағылу параметрі $\boldsymbol{t = 2a}$ трансляциясына тең, мұндағы $\boldsymbol{a}$ – жазықтықтар арасындағы қашықтық.

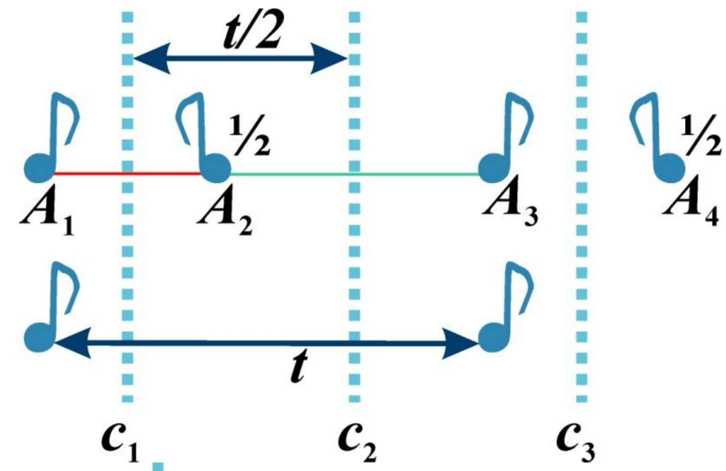


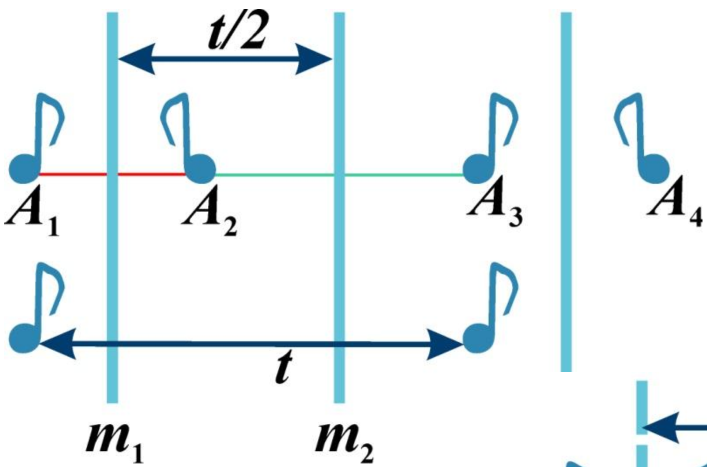
1а-теорема (кері). Кез келген трансляцияны бір бірінен $\boldsymbol{a = t/2}$ қашықтықта орналасқан екі параллель жазықтықтардан шағылумен алмастыруға болады, мұндағы $\boldsymbol{t}$ – трансляция параметрі.

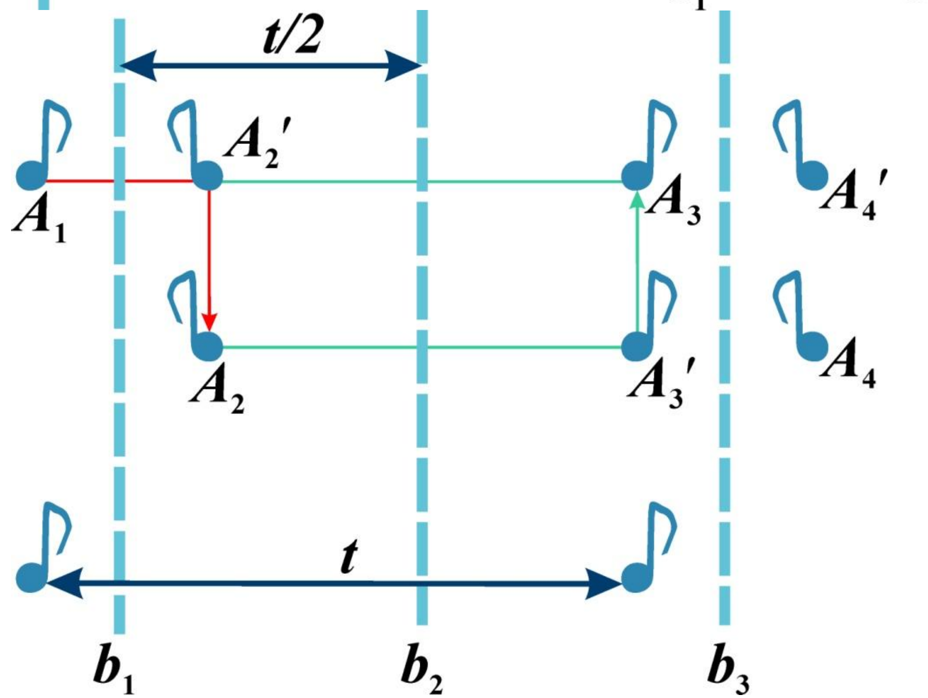


Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

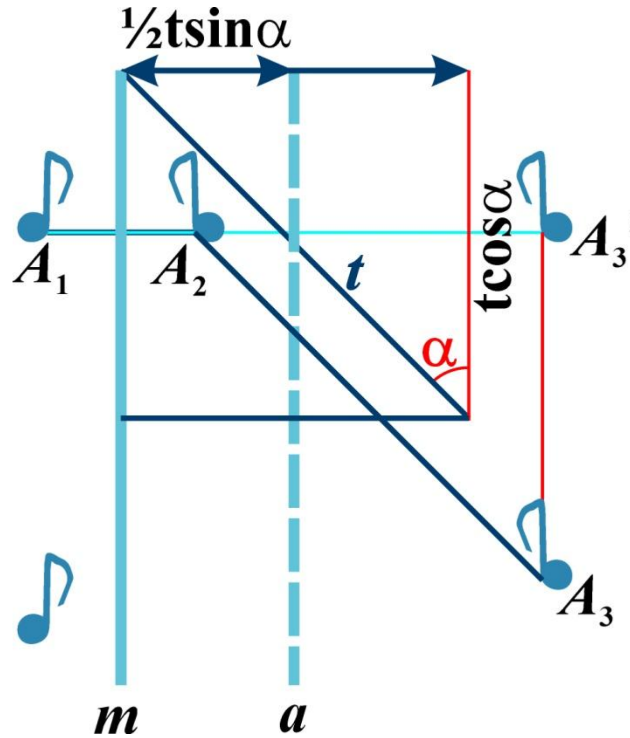
2-теорема. Симметрия жазықтығы және оған перпендикуляр параметрі ***t*** трансляция жаңа қондырылған симметрия жазықтықтарын тудырады және олар тудырушы жазықтыққа параллель, ұқсас және одан ***t*/2** қашықтықта орналасқан болады.

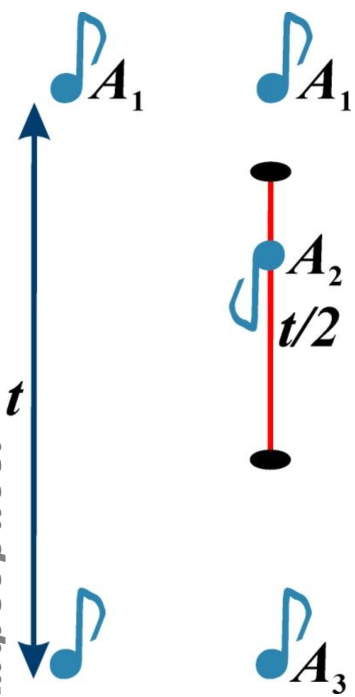






3-теорема. ***m*** симметрия жазықтығымен **α** бұрыш жасайтын ***t*** трансляция сырғанай шағылу жазықтығын тудырады, ол тудырушы жазықтыққа параллель болады және одан трансляцияға қарай **½*t*sinα** қашықтықта орналасады. Туынды жазықтық бойымен сырғанау шамасы ***t*cosα** тең.

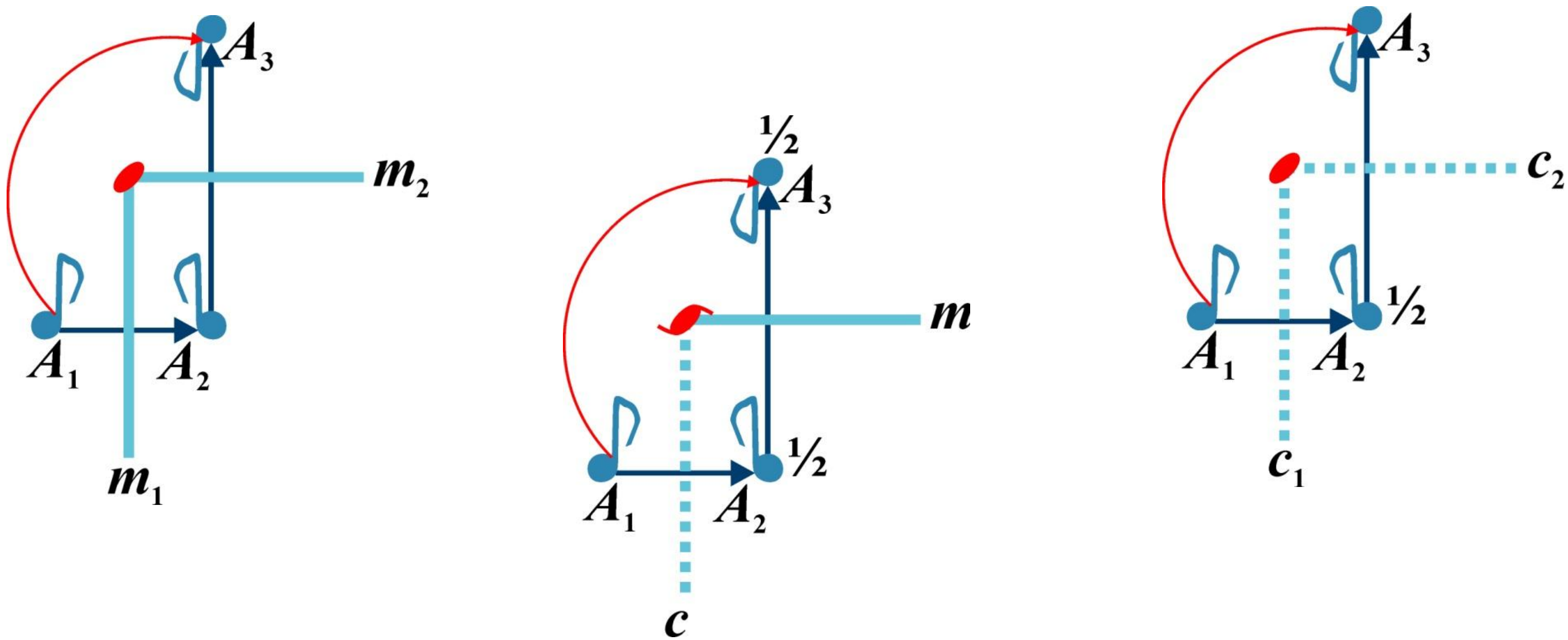




4-теорема. Симметрия осіне перпендикуляр трансляция дәл осындай симметрия осін тудырады, ол тудырушы оське параллель және трансляцияға қарай ***t/2*** қашықтыққа ығысқан болады.

5-теорема. Екі қиылысатын жазықтықтан шағылуды осы жазықтықтардың қиылысу сызығына сәйкес немесе параллель симметрия осін айналумен алмастыруға болады. Осы осьтегі бұрылу бұрышы екі жазықтық арасындағы бұрыштың екі еселенген мәніне тең.

5а-теорема (кері)**.** Қарапайым немесе бұрандалық симметрия осін оның элементар бұрышынан екі есе кем бұрышпен қиылысатын қарапайым немесе сырғанау симметрия жазықтықтарының жұбымен алмастыруға болады.



Е.С. Федоров - құрылымдық кристаллографияның негізін қалаушы

Ұлы орыс кристаллографы, минералогы, математигі Евграф Степанович Федоров 1853 ж. 22 желтоқсанда Орынбор қаласында, әскери инженер отбасында дүниеге келген.

15 жасында Федоров көпқырлықтардың математикалық теориясымен айналысады. 1869 ж. «Фигуралар туралы ілімнің бастамалары» атты бірінші кітабін жаза бастайды, 1879 ж. оны аяқтап 1885 ж. басып шығарады.

Онда көпқырлықтар классификациясы, шекті фигуралар үшін барлық симметрия түрлерін қорыту, Федоров параллелоэдрларын қорыту берілген. Бірдей және бүкіл кеңістікті толтыратын, параллель бағытталған және толық қабырғасы ортақ болатын көпқырлықтар Федоров параллелоэдры деп аталады.

Кристалдық құрылымдардың бар екендігі эксперимент жүзінде дәлелденген уақытқа дейін жиырма жыл бұрын Евграф Степанович Федоров және А. Шенфлис бір уақытта және бір бірінен тәуелсіз 230 кеңістік топтарын 1890-1894 жж. қорытқан.

230 кеңістік симметрия топтары

Кристалл құрылымында барлық мүмкін болатын симметрия түрлендірулерінің терулері ***кеңістік симметрия тобы*** деп аталады. Нүктелік симметрия тобы кристалдың сыртқы пішіні мен оның макроскопиялық қасиеттерінің симметриясын сипаттағандай кеңістік симметрия тобы кристалл құрылымының симметриясын сипаттайды.

Әр нүктелік топқа бірнеше кеңістік топ сәйкес болады. Кристалдың кеңістік тобынан оның нүктелік тобын алу үшін ойша барлық трансляцияларды жою керек, яғни сырғанай шағылу жазықтықтарын қарапайым айналық жазықтыққа, ал бұрандалық осьтерді кәдімгі айналу осьтеріне айналдыру және қалған симметрия элементтерін бір нүктеге келтіру қажет.

Нүктелік топтан оған қатысты барлық кеңістік топтарын қорыту күрделі мәселе. Бұл жағдайда барлық мүмкін симметрия элементтерінің терулері мен Бравэ торларын сұрыптау керек. Мысалы егер нүктелік топқа 3 және 2 осьтер кіретін болса, онда кеңістік топта бұл осьтер келесі түрде болуы мүмкін 3, 31, 32, 2 и 21 және барлық осьтер мен трансляциялардың терулерін қарастыру керек. Осы әдіспен кристалл кеңістігінің 230 кеңістік үздіксіз симметрия тобы немесе **Федоров симметрия топтары** алынады.

Кеңістік топтарын белгілеу үшін халықаралық символдары, сондай-ақ Шенфлис символдары және Е. С. Федоров символдары қолданылады.

Нүктелік топ символы сияқты кеңістік топтың халықаралық символында тек тудырушы симметрия элементтері жазылады. Жазудың реті өте маңызды. Кеңістік топ символында бірінші орында әрқашан Бравэ торының символы тұрады. Әрі қарай тудырушы симметрия элементтері, әрқайсысы қатаң берілген орында.

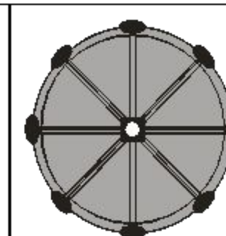
Кеңістік топтарын жазудың мысалдары

Құрылым	Қысқа символ	Толық символ	Симметрия классы (нүктелік топ)
Cu, NaCl, CaF_2.	Fm3m	F4/m32/m	m3m
C	Fd3m	$F4_1/d32/m$	m3m
ZnS (сфалерит)	$F\bar{4}3m$	$F\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$
TiO_2 (рутил)	P4/mnm	$P4_2/m2_1/n2/m$	4/mmm
TiO_2 (анатаз)	I4/amd	$I4_1/a2m/2d$	4/mmm
Mg	$P6_3/mmc$	$P6_3/m2m2/c$	6/mmm

Кеңістік топ символын жазудың халықаралық ережелері

Сингония	Позициясы			
	I	II	III	IV
Үшклиндік	Тип решетки Бравэ	Бар симметрия элементі		
Моноклиндік		Бар симметрия элементі 2 немесе 2_1	2 оське перпендикуляр жазықтық	
Ромбтық		Перпендикуляр жазықтық немесе параллель ось:		
		X осі	*Y* осі	*Z* осі
Тригоналдық Тетрагоналдық Гексагоналдық		Реті жоғарғы ось (және оған нормаль орналасқан жазықтық)	Координат жазықтығы немесе осі	Диагонал жазықтығы немесе осі
Кубтық		Координат жазықтықтары немесе осьтері	3	Диагонал жазықтықтары немесе осьтері

№3 тестілік тапсырманың үлгісі

Вариант №				
1.	**Жазық Бравэ торларының саны:** A) 14 B) 2 C) 3 D) 5 E) 6	6.	**Бағыттаушы косинустар матрицасынан симметрия осінің ретін және орналасуын анықта:** A) X_1 осі бойынша реті 2-ші ось B) X_2 осі бойынша реті 2-ші ось C) X_3 осі бойынша реті 2-ші ось D) X_1 осі бойынша реті 4-ші ось E) X_2 осі бойынша реті 4-ші ось	$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$
2.	**Көлемі центрленген Бравэ торының халықаралық сиволы:** A) P B) C C) F D) I E) B	7.	**Кубтың неше реті екінші симметрия осьтері болады?** A) 2 B) 4 C) 6 D) 8 E) 0	
3.	**Магнит өрісінің кернеулік векторының симметриясын келесі шекті топ сипаттайды:** A) ∞ B) ∞m C) ∞/m D) ∞∞ E) ∞/mm	8.	**Симметрия элементтерінің стереографиялық проекциясы суретте көрсетілген кристалл үшін нүктелік симметрия тобын жаз:** A) 4mm B) 4/mmm C) 422 D) 432 E) 224	
4.	**Алмас сырғанай шағылу жазықтығының халықаралық символы:** A) *a* B) *m* C) *n* D) *d* E) *b*	9.	**Бағыттаушы косинустар матрицасынан симметрия осінің ретін және оның орналасуын анықта:** A) X_1 осі бойынша реті 2-ші ось B) X_2 осі бойынша реті 2-ші ось C) X_3 осі бойынша реті 2-ші ось D) X_1 осі бойынша реті 4-ші ось E) X_2 осі бойынша реті 4-ші ось	
5.	**P4/mmm кеңістік тобының кристаллы қандай сингонияға жатады:** A) Тетрагоналдық B) Тригоналдық C) Гексагоналдық D) Ромбтық E) Кубтық	10.	**Егер тор I түріне жататын болса элементар ұяшыққа неше Fe атомдары келеді?** A) 4 B) 9 C) 5 D) 2 E) 6	