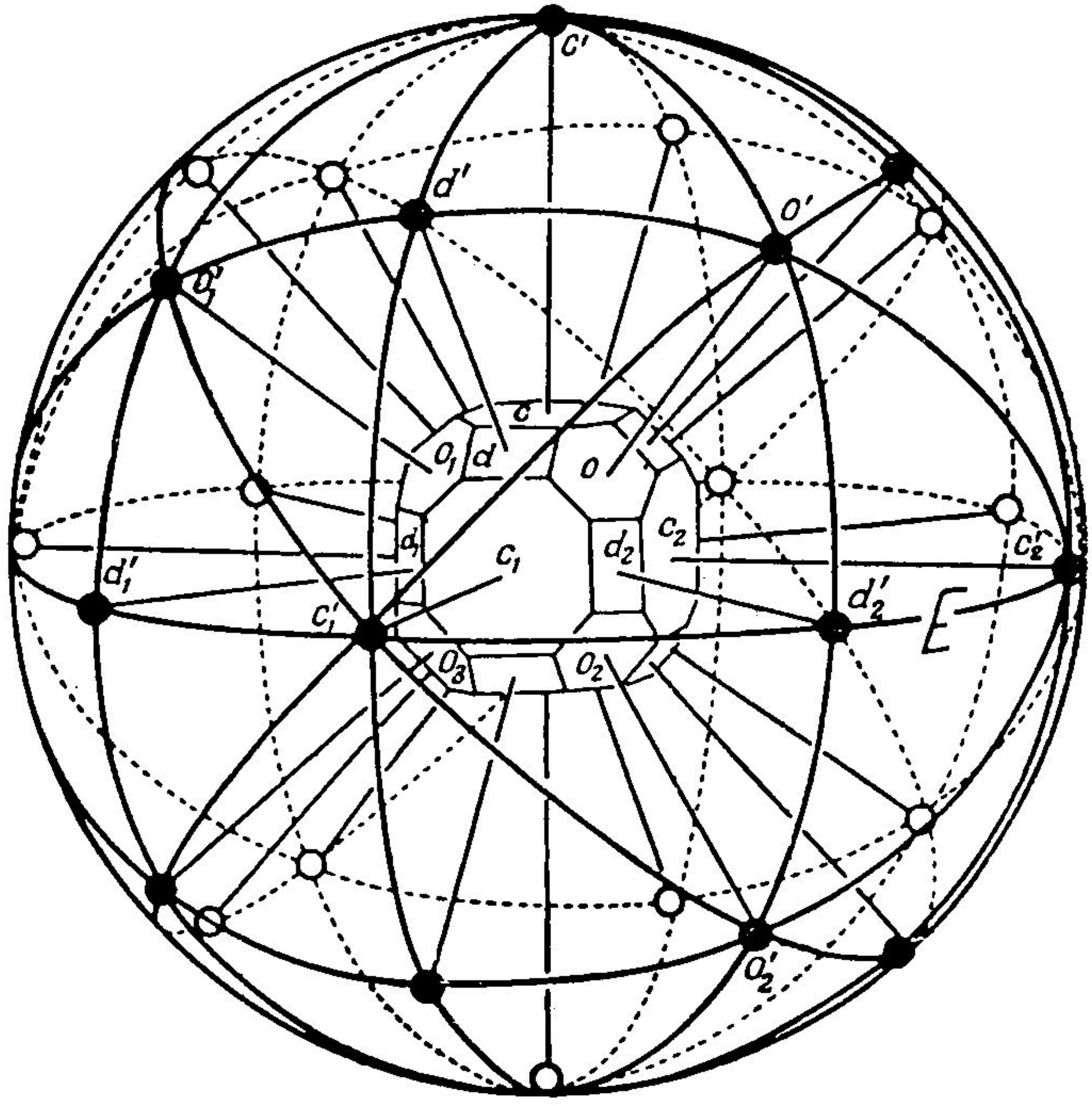
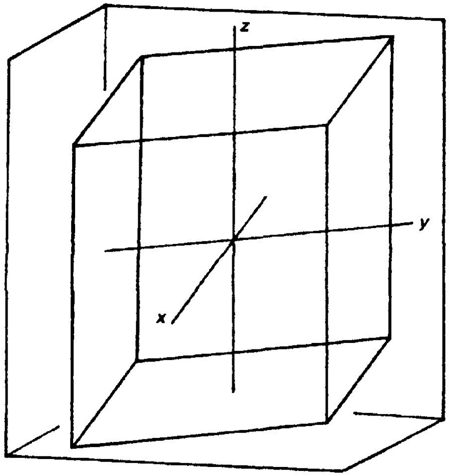
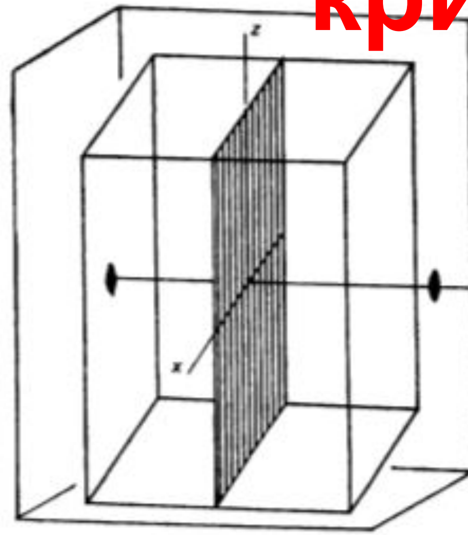
Стереографическая проекция



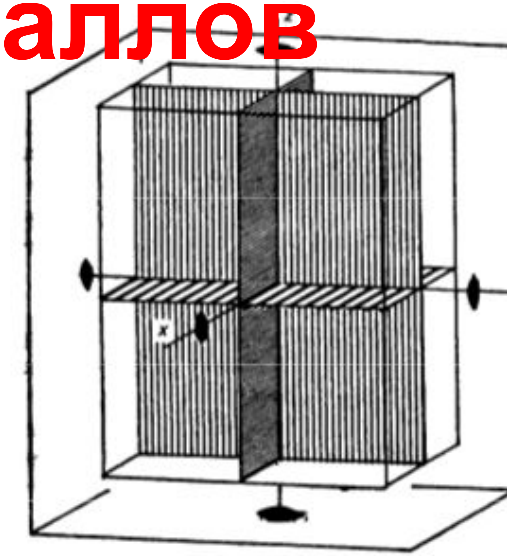
Ориентация кристаллов

Триклинная (нет элементов симметрии или только С)

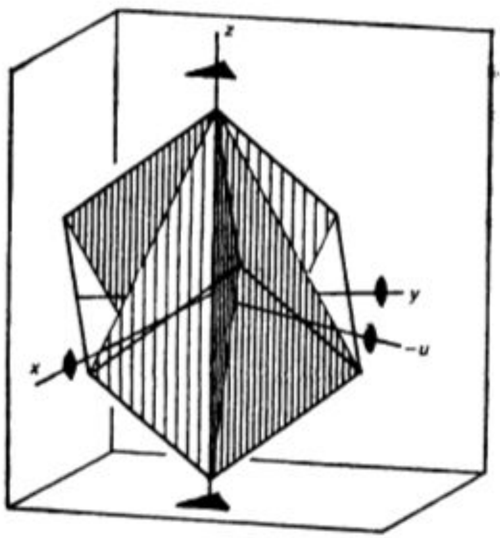




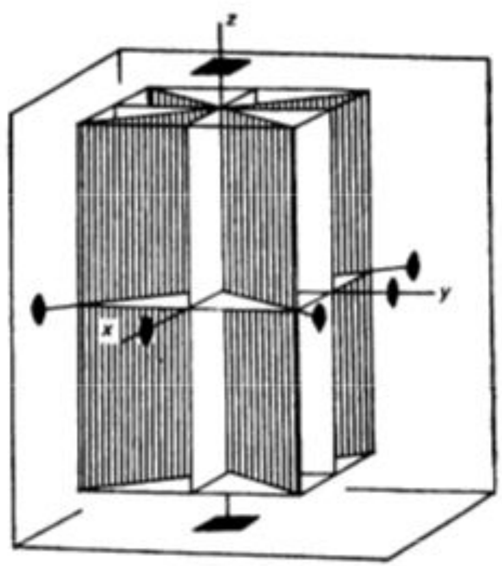
Моноклинная 2/m



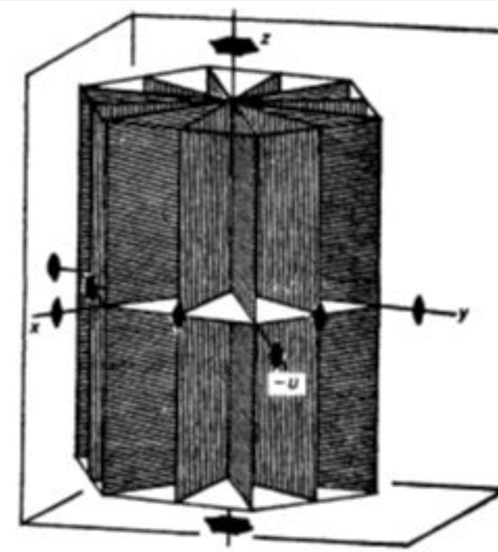
Ромбическая mmm



Тригональная $\bar{3}$



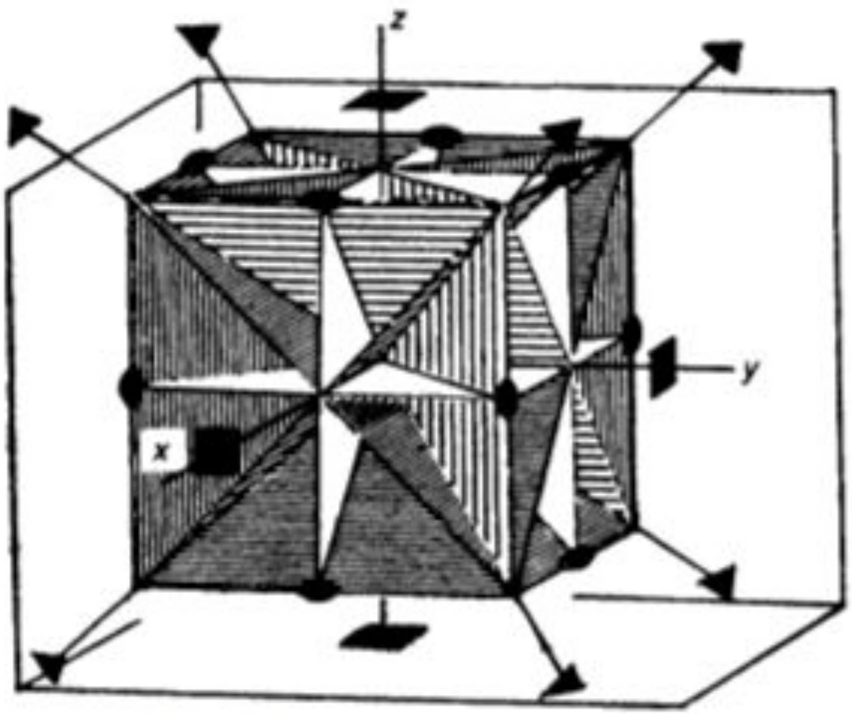
Тетрагональная 4/mmm



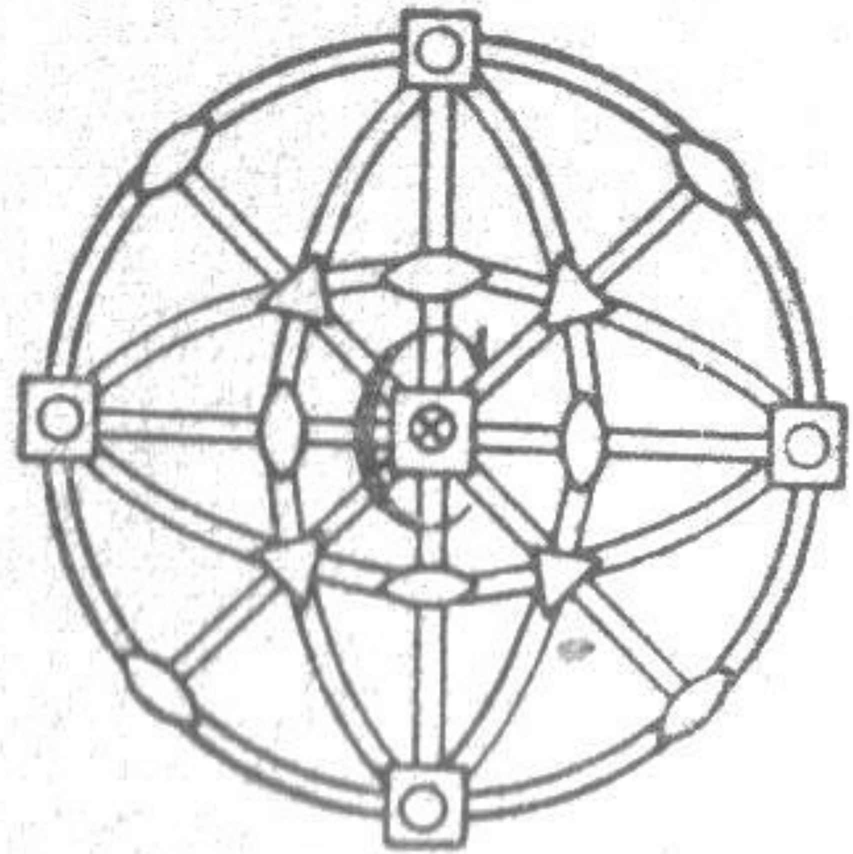
Гексагональная 6/mm

Гексагональная 6/mm

Ориентация кристаллов высшей категории



Кубическая m3m



Простые формы

Простая форма - это совокупность граней, связанных друг с другом элементами симметрии кристалла.

Простые формы низшей категории (7)

1. **Моноэдр (одногранник**) - грань, не размножаемая элементами симметрии либо в силу их отсутствия (примитивный вид симметрии триклинной сингонии), либо из-за положения перпендикулярно единственной оси симметрии порядка n) – (**не бывает, если есть С**).

2. **Диэдр (двугра**нник) - две **одинаковых** грани, пересекающиеся в общем ребре и образующие «двускатную крышу». Грани диэдра могут быть связаны осью симметрии L_2, перпендикулярной общему ребру (осевой диэдр), или плоскостью симметрии, проходящей через ребро (плоскостной диэдр).

3. **Пинакоид** (греч. пинакс - доска) - две **равные и параллельные** грани.

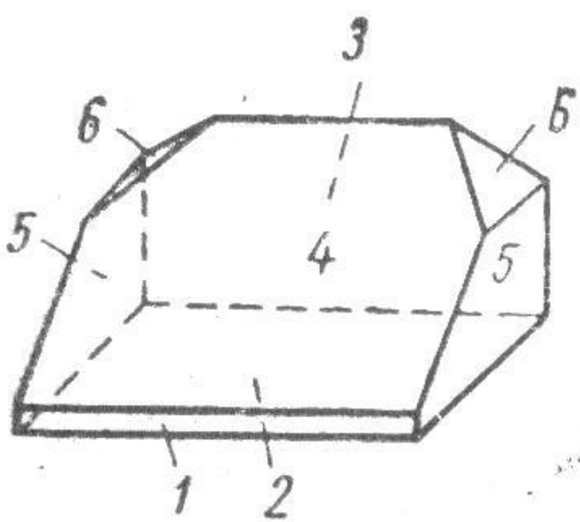
Простые формы низшей категории
(продолжение)

5. **Ромбический тетраэдр** – четырехгранник, грань – косоугольный треугольник, в вершинах пересекаются по три грани. Бывают левые и правые – т.е. это **энантиоморфная** форма.

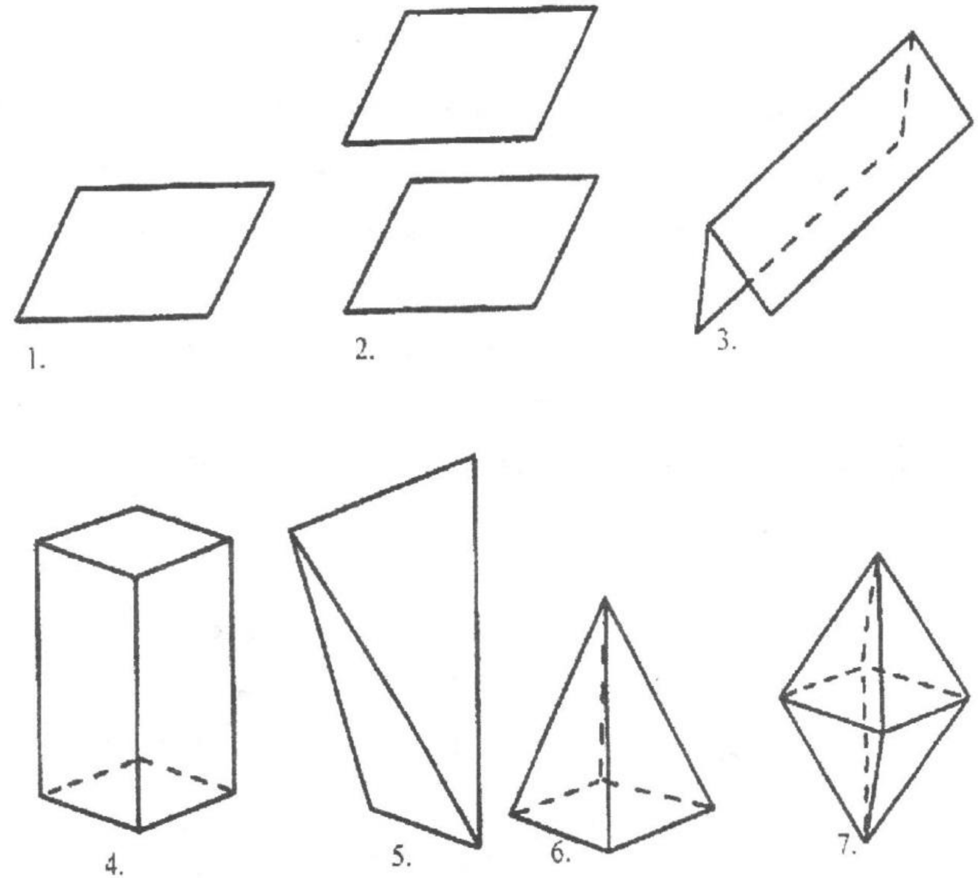
6. **Ромбическая пирамида** – в сечении **ромб**.

7. **Ромбичес**

Паратолуидо-изомаслянокислый эфир — $CH_3 \cdot C_6H_4NH \cdot C_3H_6 \cdot CO_2 \cdot C_2H_5$

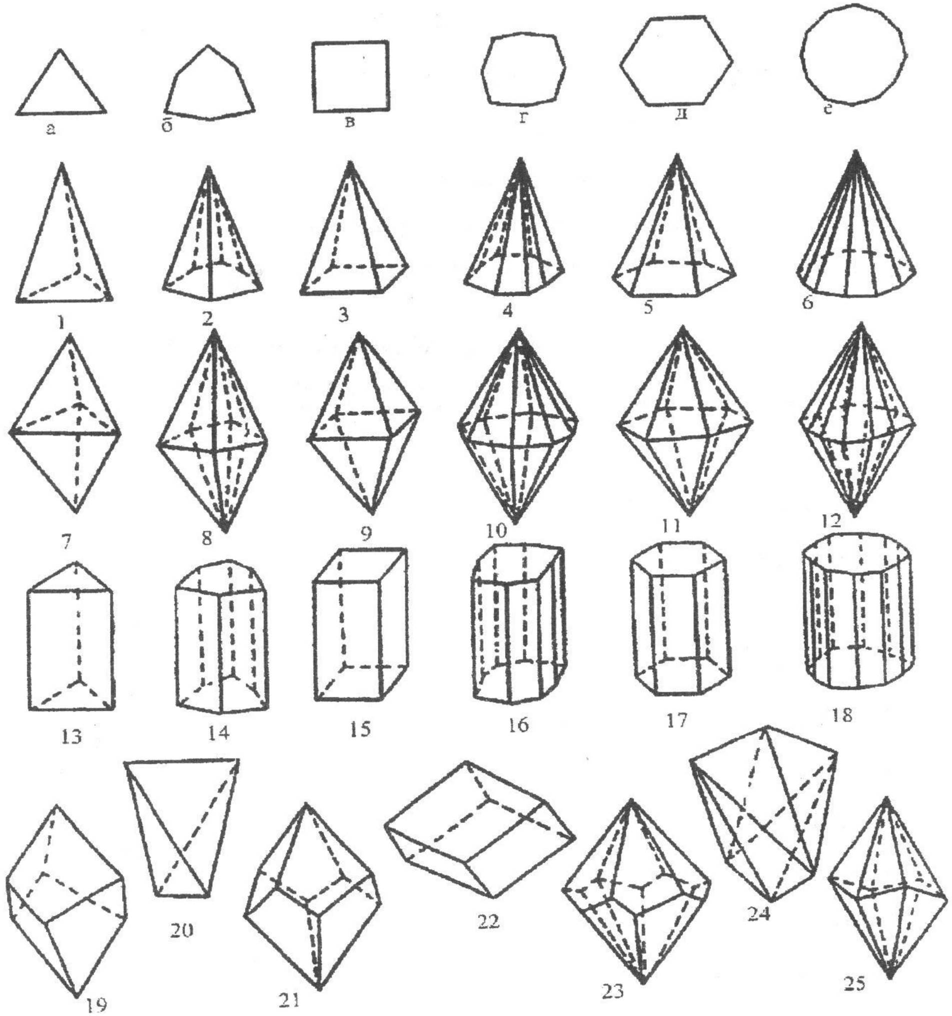


1. Моноэдр (100)
2. » $(00\bar{1})$
3. » $(\bar{1}00)$
4. » (101)
5. Пинакоид (010)
6. Диэдр (011)



ПФ кристаллов низшей категории: 1- моноэдр, 2 – пинакоид, 3- диэдр, 4 – ромбическая призма, 5 – ромбический тетраэдр, 6 – ромбическая пирамида, 7 – ромбическая дипирамида.

Простые формы кристаллов средней категории (27)



+ моноэдр и пинакоид !

Пирамиды

Дипирамиды (нижние грани точно под верхними)

Призмы

Трапецоэдры (3,4,6) Нижние грани не симметричны верхним

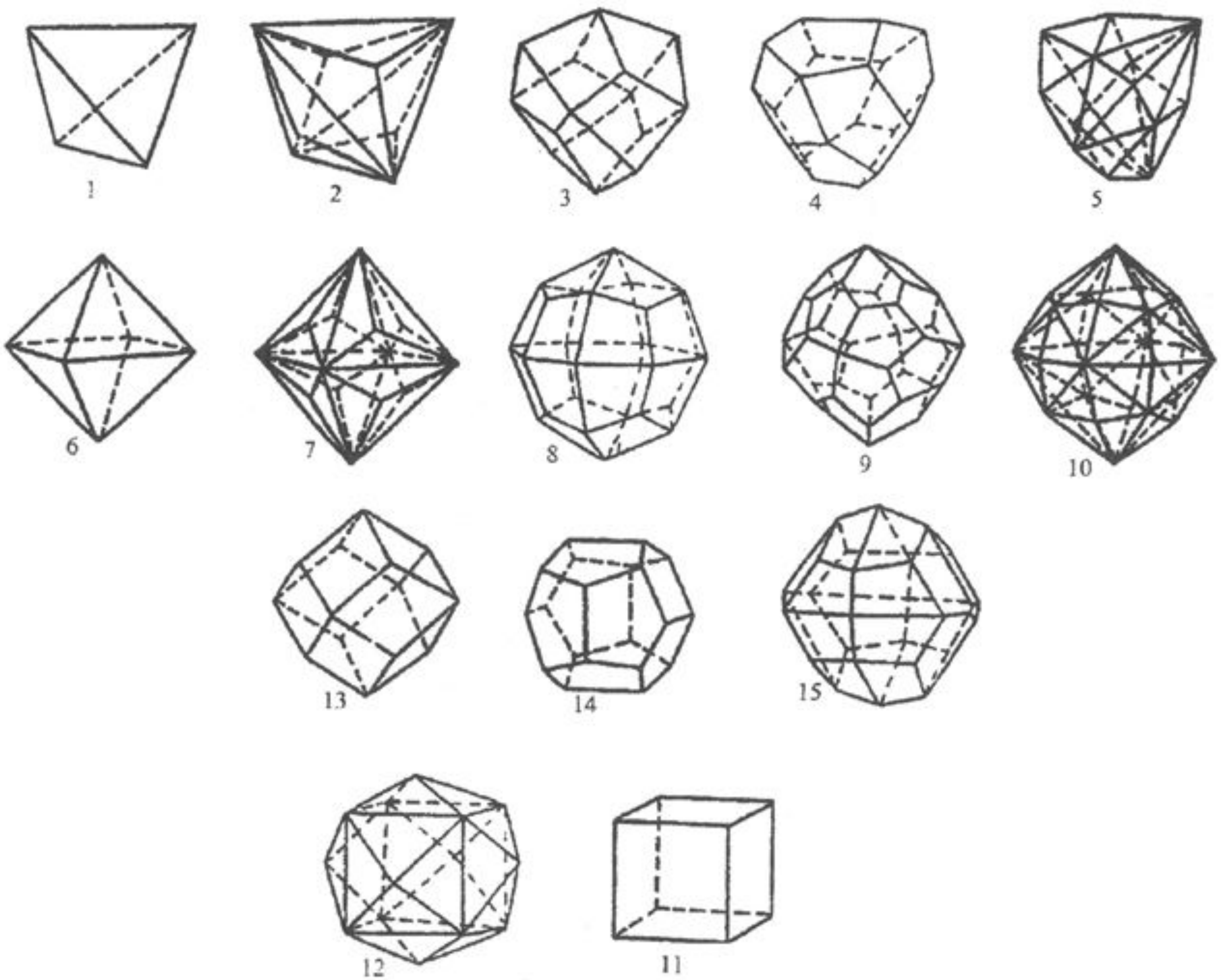
Ромбоэдр – грани – ромбы, L_3

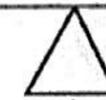
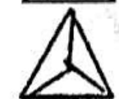
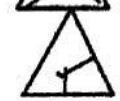
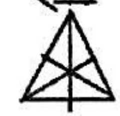
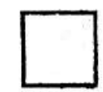
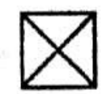
Скаленоэдр (3,4) – удвоение граней ромбоэдра и тетраэдра

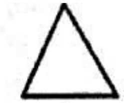
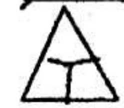
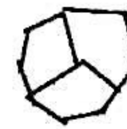
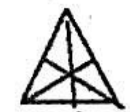
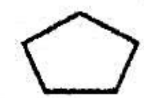
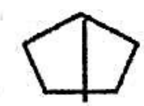
Тетрагональный тетраэдр (грани – равнобедр. треугольники) L_{i4}

Простые формы кристаллов высшей категории

Все эти формы закрытые. Ни одна из простых форм низших и средних сингоний не может встречаться в кубической сингонии! ПФ кубической сингонии являются производными от трех основных простых форм - **тетраэдра**, **октаэдра** и куба (**гексаэдра**). В основе названий – форма и число граней (эдр).



№ п/п	Названия простых форм	Кол-во граней	Форма граней
1	Тетраэдр	4	
2	Тригонтритетраэдр	12	
3.	Тетрагонтритетраэдр	12	
4	Пентагонтритетраэдр	12	
5	Тригонгексатетраэдр	24	
6	Гексаэдр	6	
7	Тригонтетрагексаэдр	24	

8	Октаэдр	8	
9	Тригонтриоктаэдр	24	
10	Тетрагонтриоктаэдр	24	
11	Пентагонтриоктаэдр	24	
12	Тригонгексаоктаэдр	48	
13	Ромбододекаэдр	12	
14	Пентагондодекаэдр	12	
15	Дидодекаэдр	24	

ПФ называется **частной**, если ее грани занимают частные положения относительно элементов симметрии кристалла:

а - перпендикулярны каким-либо элементам симметрии;
б - параллельны каким-либо элементам симметрии;
в - лежат под равными углами к равным элементам симметрии.

В противном случае ПФ называется **общей**.

ПФ, отличающиеся по хиральности, называются **энантиоморфными** и встречаются только в видах симметрии, в которых отсутствуют инверсионные оси симметрии (в том числе плоскости симметрии и центр инверсии). Следовательно, это примитивные и аксиальные виды симметрии.

ПФ, не отличающиеся по хиральности, называются **конгруэнтными**.

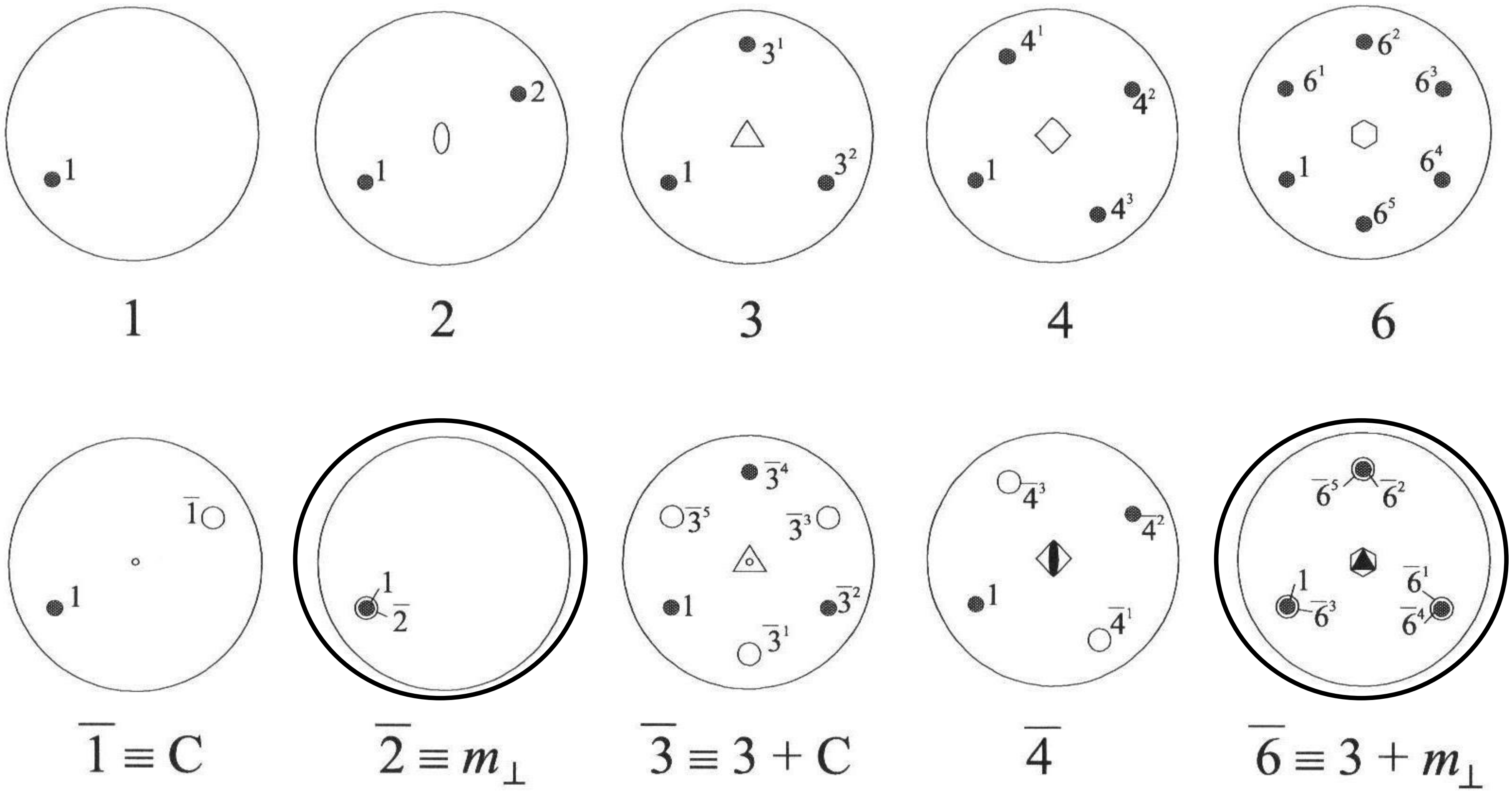
Виды симметрии	Название простых форм						
	Общие	Частные					
	hkl	*hhl*	*hkk*	111	*hko*	110	100
Примитивный (пентагон-тритетраэдрический) $3L_24L_3-23$	Пентагон-тритетраэдр	Тетрагон-тритетраэдр	Тригон-тритетраэдр	Тетраэдр	Пентагон-додекаэдр	Ромбододекаэдр	Гексаэдр
Центральный (дидодекаэдрический) $3L_24L_33PC-m3$	Дидодекаэдр	Тригон-триоктаэдр	Тетрагон-триоктаэдр	Октаэдр	Пентагон-додекаэдр	Ромбододекаэдр	Гексаэдр
Планальный (гексатетраэдрический) $3L_{i_4}4L_36P-\bar{4}3m$	Гексатетраэдр	Тетрагон-тритетраэдр	Тригон-тритетраэдр	Тетраэдр	Тетрагексаэдр	Ромбододекаэдр	Гексаэдр
Аксиальный (пентагон-триоктаэдрический) $3L_44L_36L_2-432$	Пентагон-триоктаэдр	Тригон-триоктаэдр	Тетрагон-триоктаэдр	Октаэдр	Тетрагексаэдр	Ромбододекаэдр	Гексаэдр
Планаксиальный (гексоктаэдрический) $3L_44L_36L_2\times 9PC-m3m$	Гексоктаэдр	Тригон-триоктаэдр	Тетрагон-триоктаэдр	Октаэдр	Тетрагексаэдр	Ромбододекаэдр	Гексаэдр

Символы граней – индексы Миллера соответствующих плоскостей. Пример: **(100)** **Единичная грань – (111).**

Символы точки – координаты точки. Пример: **[[111]].**

Символы ребер или направлений (вектора)– координаты конца вектора, начало его совмещается с началом координат. Пример: **[111]**.

Действие элементов симметрии на стереографической проекции

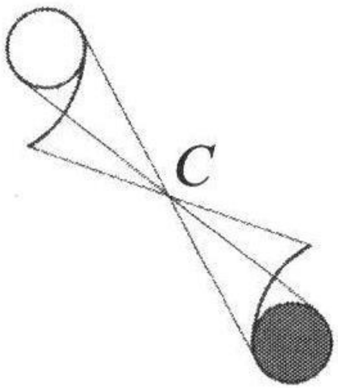


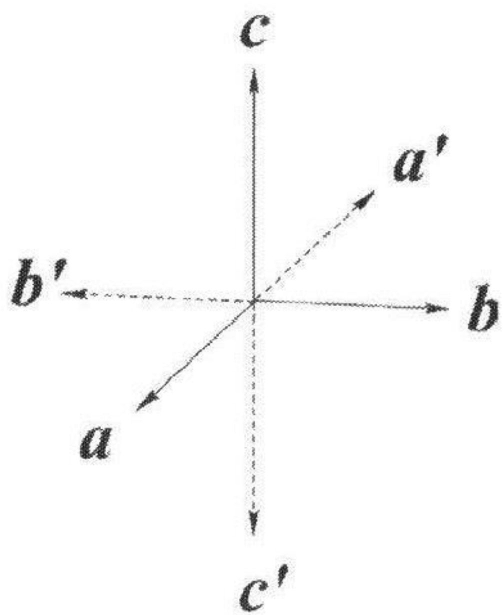
$$L_1 \equiv 1,\ L_2 \equiv 2,\ L_3 \equiv 3,\ L_4 \equiv 4,\ L_6 \equiv 6,$$

$$P \equiv m,\ C \equiv \bar{1},\ L_{3i} \equiv \bar{3},\ L_{4i} \equiv \bar{4},\ L_{6i} \equiv \bar{6}$$

Матричные представления операций симметрии

C - центр инверсии





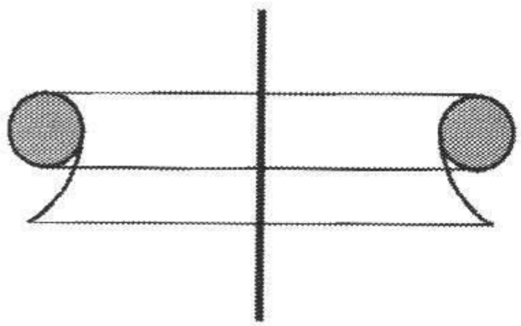
a′ = -1a + 0b + 0c

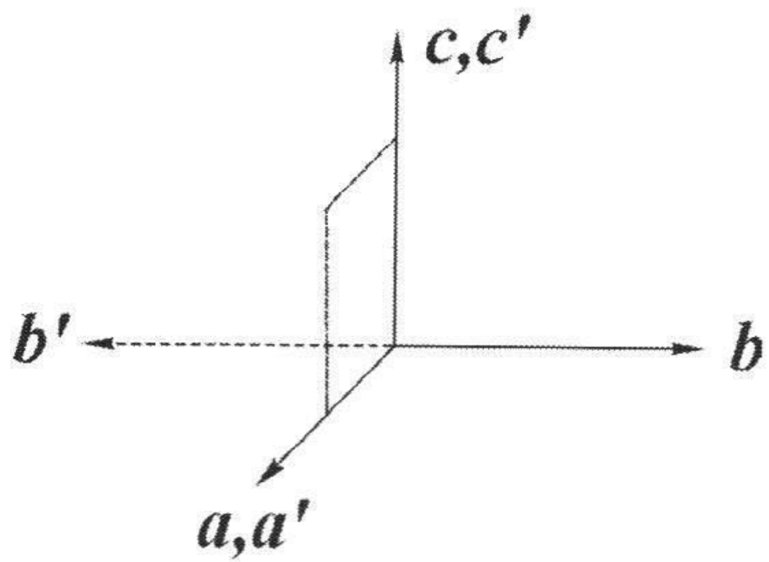
b′ = 0a - 1b + 0c

c′ = 0a + 0b - 1c

$$C = \begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$$ *- матрица перехода*

P – плоскость зеркального отражения





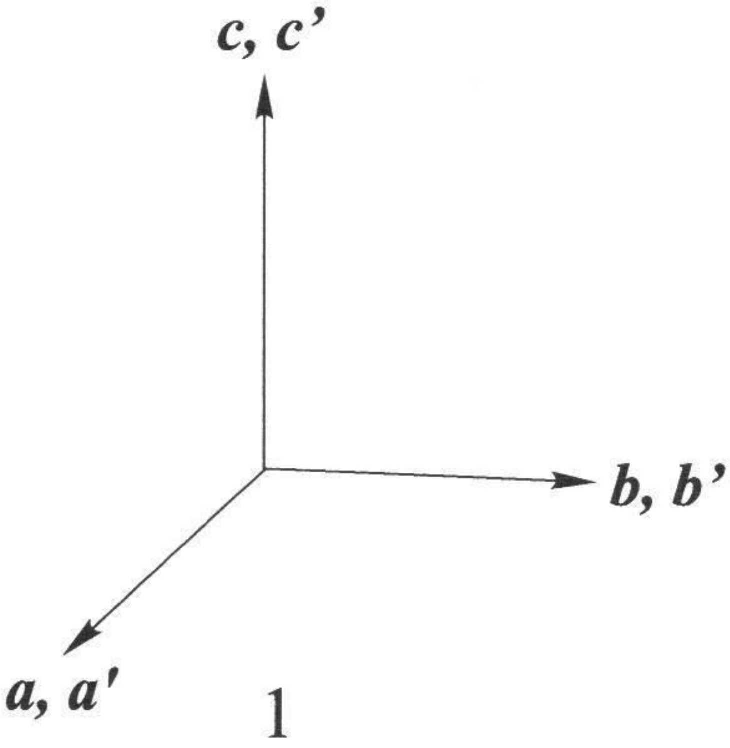
$a' = 1a + 0b + 0c$

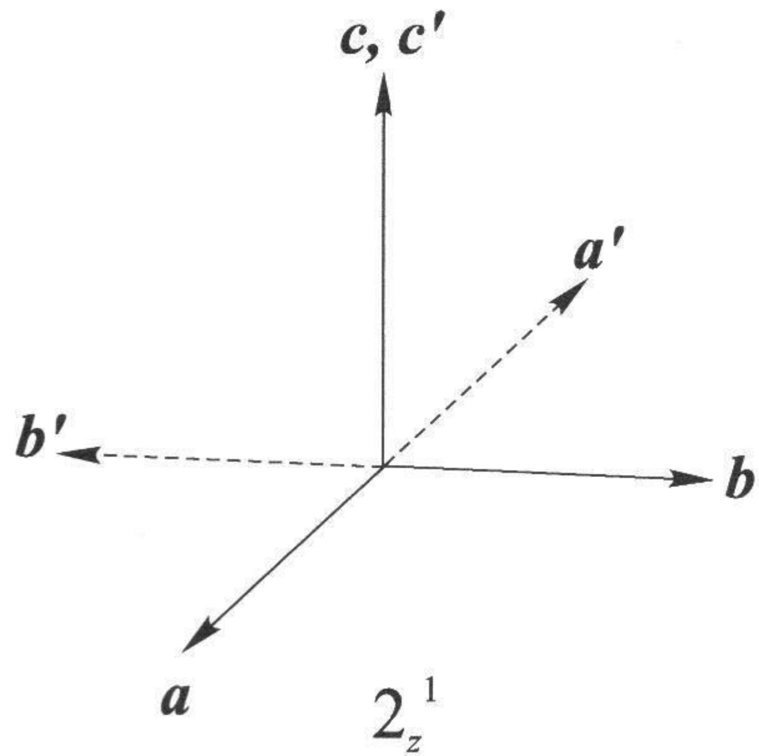
$b' = 0a - 1b + 0c$

$c' = 0a + 0b + 1c$

$$C = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$$ - матрица перехода

L_n – оси вращения порядка n=1 и 2

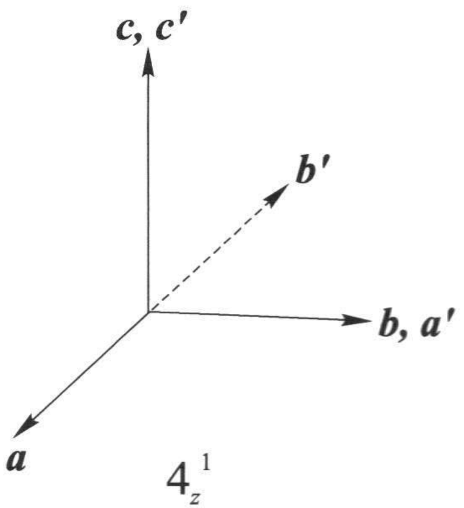


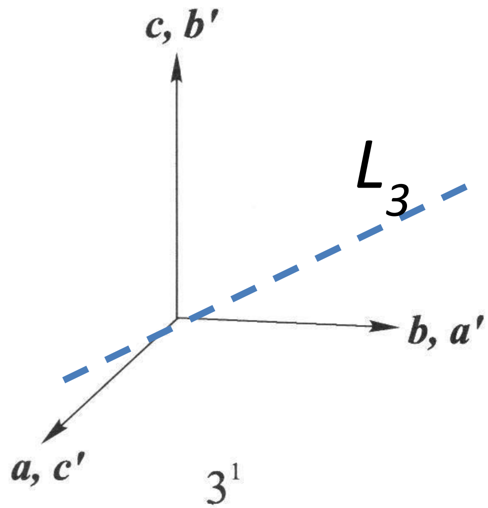


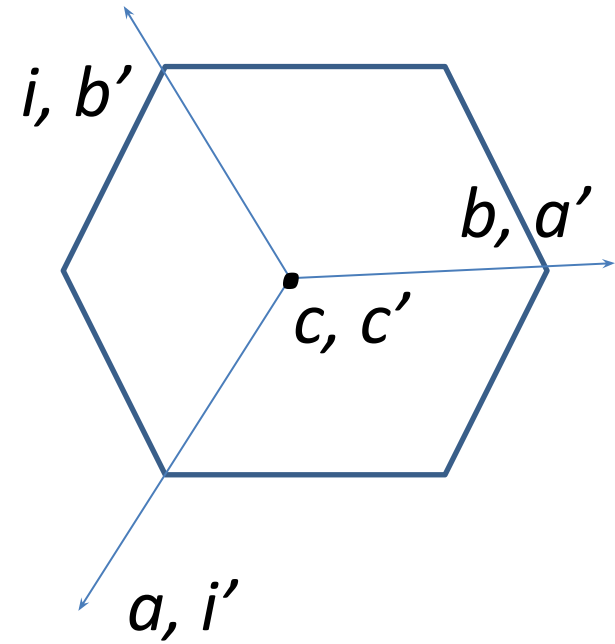
$$L_1 = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$$

$$L_2 = \begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$$

L_n – оси вращения порядка n= 3 и 4







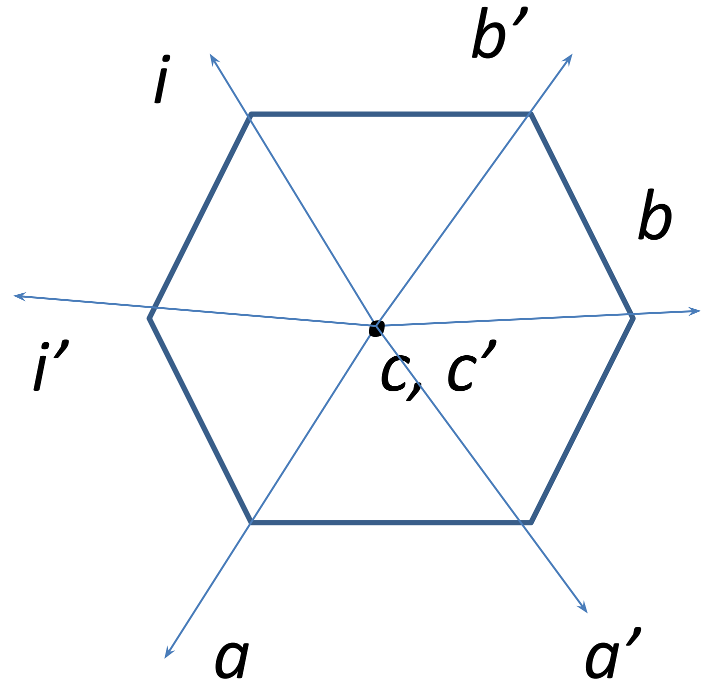
$$L_4 = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$$

$$L_3 = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{matrix}$$

Ось L_3 наклонена относительно Осей координат (угол кубической ячейки)

$$L_3 = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$$

L_n, n= 6



$$L_6 = \begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$$

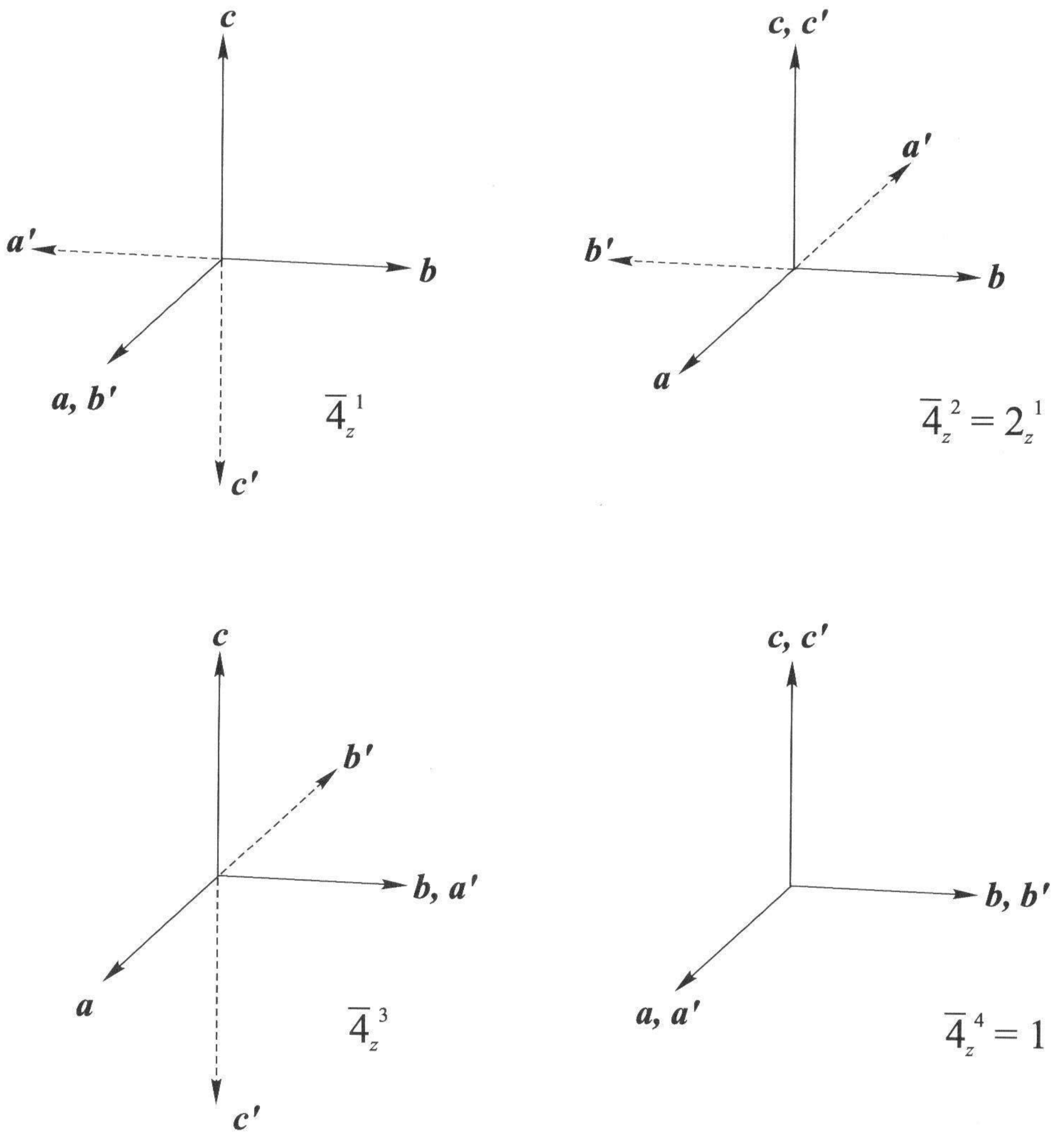
*Вектор **i** = -(**a** + **b**), поэтому 3-й индекс для гексагональной системы (hkil) определяется как*

–(h+k).

$\boxed{\textit{Сумма } h+k+i=0}$

Если определитель матрицы перехода Δ=1 – это «движение»,
если Δ=-1 – преобразование включает инверсию (отражение)

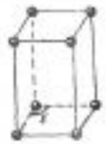
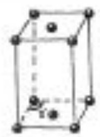
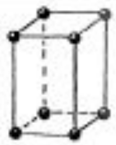
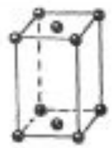
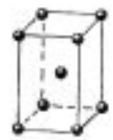
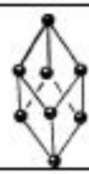
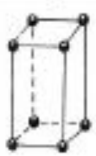
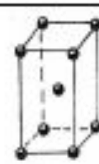
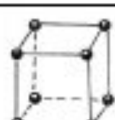
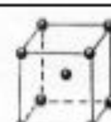
L_{in} – инверсионные оси вращения (на примере n=4)



Важна кратность выполнения операции!

$$L_i = L_{2s} = C,$$
$$L_{2i} = L_s = P,$$
$$L_{3i} = L_{6s} = L_3C$$
$$L_{4i} = L_{4s}$$
$$L_{6i} = L_{3s} = L_3P$$

Решетки Браве (14 шт.): базис: P, C, I, F и R

Сингония	Трансляционная решётка			
	P Примитивная	Базо-центрированная	Объёмно-центрированная	Гране-центрированная
Триклинная		C	I	F
Моноклинная				
Ромбическая				
Тригональная	 R			
Тетрагональная				
Гексагональная	1/3 часть гексагональной призмы			
Кубическая				

Дано:

1.Симметрия ЭЯ = симметрии кристалла.

2. Max количество равных рёбер и углов.

3. Min объём элементарной ячейки.

Учитываем :

Возможный базис

Отсюда:

14 наборов элементарных трансляций – решеток Браве.

Операции симметрии бесконечных структур

1) Трансляции (**конгруэнтная** операция)
2) Плоскости скользящего отражения
3) Винтовые оси

Энантиоморфные операции

Плоскость скользящего отражения - элемент симметрии, совмещающий перемещение вдоль плоскости на 1/2**t** и отражение в ней.

Плоскости скольжения:

осевого

$$a = \frac{\vec{a}}{2} \qquad b = \frac{\vec{b}}{2} \qquad c = \frac{\vec{c}}{2}$$

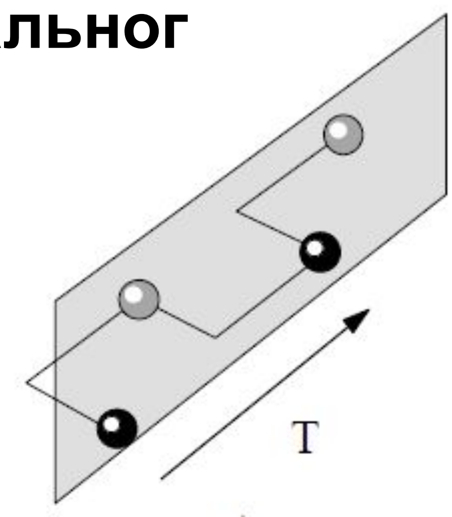
диагонального

$$n = \frac{\overrightarrow{a+b}}{2} \qquad n = \frac{\overrightarrow{b+c}}{2} \qquad n = \frac{\overrightarrow{a+c}}{2}$$

Алмазная плоскость (только в I и F – решетках!

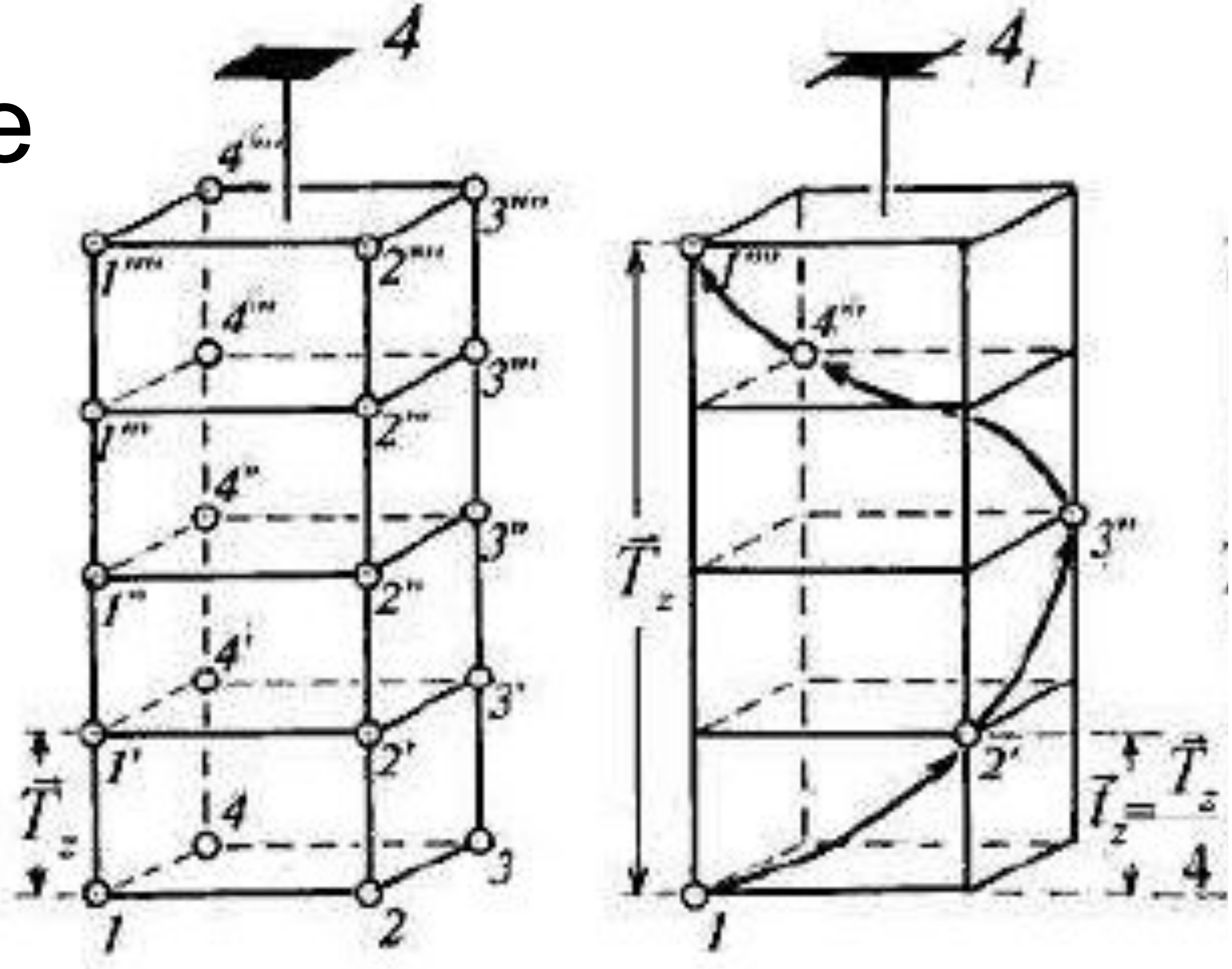
$$d = \frac{\overrightarrow{a+b+c}}{2}$$

P и t – Коммутируют!



Винтовые оси

Смещение – целое число раз в ЭЯ в направлении оси.



Винтовая ось – элемент симметрии, совмещающий поворот вокруг оси и перемещение вдоль оси (доля трансляции).
Угол поворота определяет **порядок оси**, величина перемещения называется **ходом** винтовой оси.

Винтовые оси симметрии

Наименование	Обозначение	Изображение	Величина скольжения
2 (двойная)	2_1		a = 1/2
3 (тройная)	3_1		a = 1/3
	3_2		a = 2/3
4(четверная)	4_1		a = 1/4
	4_2		a = 1/2
	4_3		a = 3/4
6(шестерная)	6_1		a = 1/6
	6_2		a = 1/3
	6_3		a = 1/2
	6_4		a = 2/3
	6_5		a = 5/6

Элементы симметрии конечных многогранников и бесконечных структур

Элементы симметрии	Конечные многогранники	Бесконечные структуры
Центр инверсии	**C**	-
Плоскость отражения	**m** P	**a,b,c,n,d**
Оси симметрии: Второго порядка Третьего порядка Четвёртого порядка Шестого порядка	 Простая $\mathbf{L_2=2}$ Простая $\mathbf{L_3=3}$ Простая $\mathbf{L_4=4}$ Простая $\mathbf{L_6=6}$	 Винтовая ось 2 Винтовые оси $3_1, 3_2$ Винтовые оси $4_1, 4_2, 4_3$ Винтовые оси $6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$.

Пространственные группы

7 сингоний + все элементы симметрии ⇒ 32 точечные группы

14 решеток Браве + все элементы симметрии + Т (трансляции)
⇒ 230 пространственных групп.

Пример: Fd3m