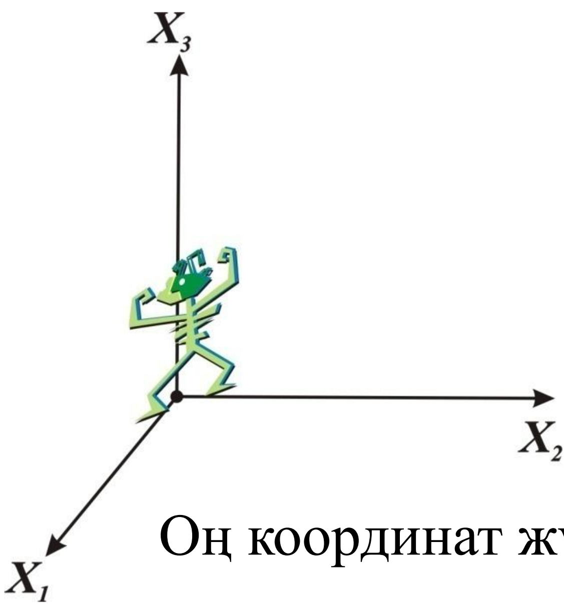
***Кристаллофизика негіздері* (*3-4 дәрістер*)**

- **Кристаллофизикалық координат жүйесі**
- **Нүктелік симметрия элементтерін матрица түрінде көрсету**
- **Кеңістік фигуралардың нүктелік симметрия топтары туралы ұғым. Топтық әсердің заңдары**
- **Нүктелік симметрия элементтерінің үйлесуі туралы теоремаларды матрица арқылы дәлелдеу**
- **Ерекше немесе жекелік бағыттар**
- **Кристалдың нүктелік симметрия топтары (кластары). 32 нүктелік симметрия тобын шығару**
- **Кристаллографиялық категориялар, жүйелер және сингониялар**
- **Кристаллографиялық номенклатура**

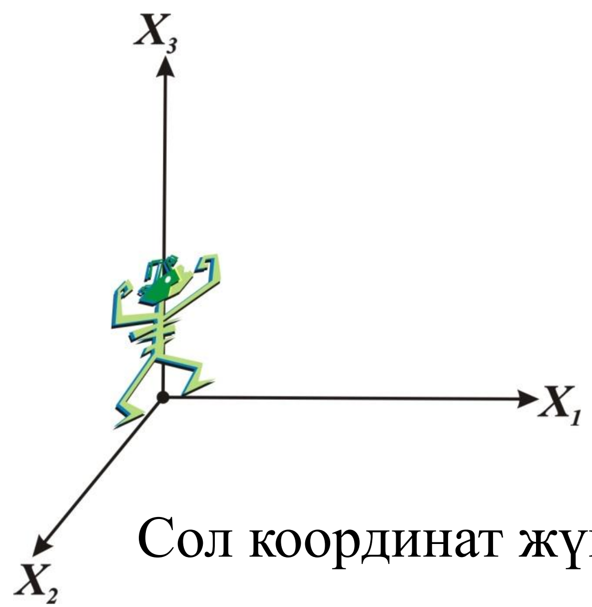
Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

Симметриялық түрлендірулерді талдау үшін қолданатын тікбұрышты координат жүйелері оң немесе сол болуы мүмкін.

Оларды ажырату үшін координаттардың бастапқы нүктесінде X_3 осіне сүйеніп тұрған адамды қарастыру керек. Егер оның оң жағында X_1 осі ал сол жағында X_2 осі орналасқан болса, онда бұл оң координат жүйесі болады. Егер керісінше болса, оның оң жағында X_2 осі, ал сол жағында X_1 осі болса, онда бұл сол координат жүйесі болады.



Оң координат жүйесі



Сол координат жүйесі

Кристаллофизикалық координат жүйелері

Симметриялық түрлендірулер ескі және жаңа координат осьтерінің арасындағы бұрыштардың косинустары арқылы табылады. Қысқаша белгілеу енгізейік:

$$
\begin{aligned}
C_{11} &= \cos(X_1'X_1), & C_{12} &= \cos(X_1'X_2), & C_{13} &= \cos(X_1'X_3),\\
C_{21} &= \cos(X_2'X_1), & C_{22} &= \cos(X_2'X_2), & C_{23} &= \cos(X_2'X_3),\\
C_{31} &= \cos(X_3'X_1), & C_{32} &= \cos(X_3'X_2), & C_{33} &= \cos(X_3'X_3).
\end{aligned}
$$

Бірінші орынға жаңа координат жүйенің, ал ***екінші орынға*** ескі жүйенің ***индексі*** қойылады.

Бағыттаушы косинустарды матрица түрінде келтіру қолайлы болады:

	X_1	X_2	X_3
X_1'	c_{11}	c_{12}	c_{13}
X_2'	c_{21}	c_{22}	c_{23}
X_3'	c_{31}	c_{32}	c_{33}

немесе қысқаша

$$
\begin{vmatrix}
c_{11} & c_{12} & c_{13}\\
c_{21} & c_{22} & c_{23}\\
c_{31} & c_{32} & c_{33}
\end{vmatrix}
$$

Бағыттаушы косинустар матрицасы төмендегі қасиеттерге ие болады:

1. **Жолдар немесе бағаналар квадраттарының сомасы бірге тең болады.**
2. **Қос жолдар немесе бағаналардың көбейтіндісінің сомасы нольге тең.**
3. **Матрица детерминанты:**

$$|C_{ij}| = C_{11}C_{22}C_{33} + C_{12}C_{23}C_{31} + C_{13}C_{21}C_{32} - C_{13}C_{22}C_{31} - C_{11}C_{23}C_{32} - C_{12}C_{21}C_{33} = +1$$

оң жүйеден оң жүйеге және сол жүйеден сол жүйеге өткенде;

$$|C_{ij}| = C_{11}C_{22}C_{33} + C_{12}C_{23}C_{31} + C_{13}C_{21}C_{32} - C_{13}C_{22}C_{31} - C_{11}C_{23}C_{32} - C_{12}C_{21}C_{33} = -1$$

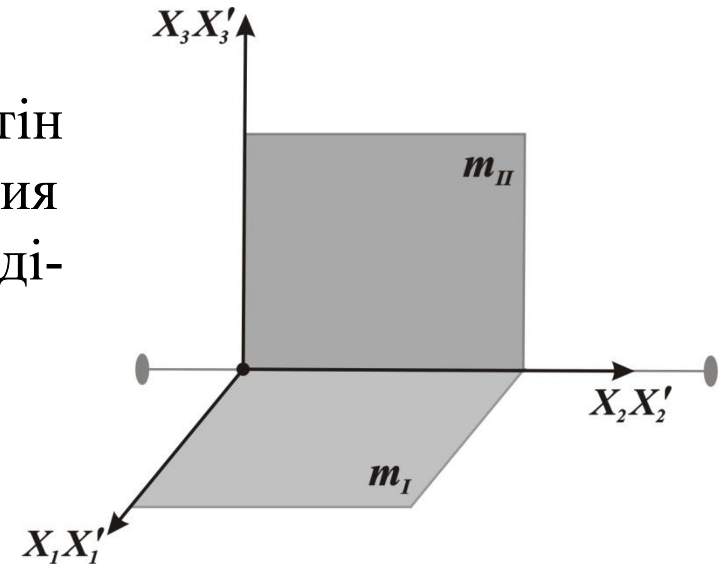
оң жүйеден сол жүйеге және керісінше өткенде.

4. **Матрицаның кез келген элементі келесі қатынастан табылады:**

$$C_{ij} = (-1)^{i+j} A_{ij}|C_{ij}|,$$

A_{ij} – i бағанасын және j жолын сызып тастағанда шығатын қосымша минор.

Реті ***2-ші*** ось және осы ось бойымен өтетін $\boldsymbol{m_I}$, $\boldsymbol{m_{II}}$ екі өзара перпендикуляр симметрия жазықтықтарының симметриялық түрлендіруін қарастырайық.



Түрлендірулер басында ескі және жаңа координат жүйелері бір болады.

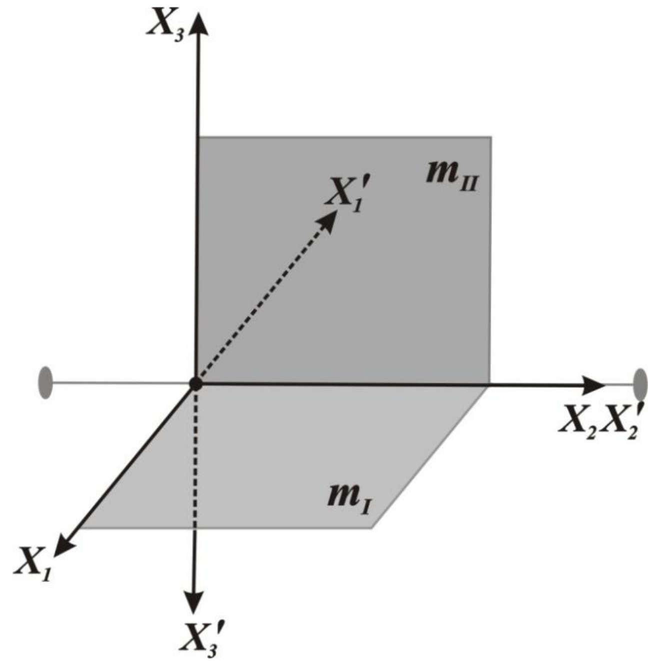
Тождестволық операция нәтижесінде (*1* ось) жаңа координат жүйесі 360° айналып бастапқы қалпына оралады. Осындай түрлендіру нәтижесінде бағыттаушы косинустар келесі түрге келеді:

$$\begin{aligned}
&C_{11} = \cos(0) = 1, && C_{12} = \cos(90) = 0, && C_{13} = \cos(90) = 0,\\
&C_{21} = \cos(90) = 0, && C_{22} = \cos(0) = 1, && C_{23} = \cos(90) = 0,\\
&C_{31} = \cos(90) = 0, && C_{32} = \cos(90) = 0, && C_{33} = \cos(0) = 1.
\end{aligned}$$

Бағыттаушы косинустар матрицасы келесі түрде болады:

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

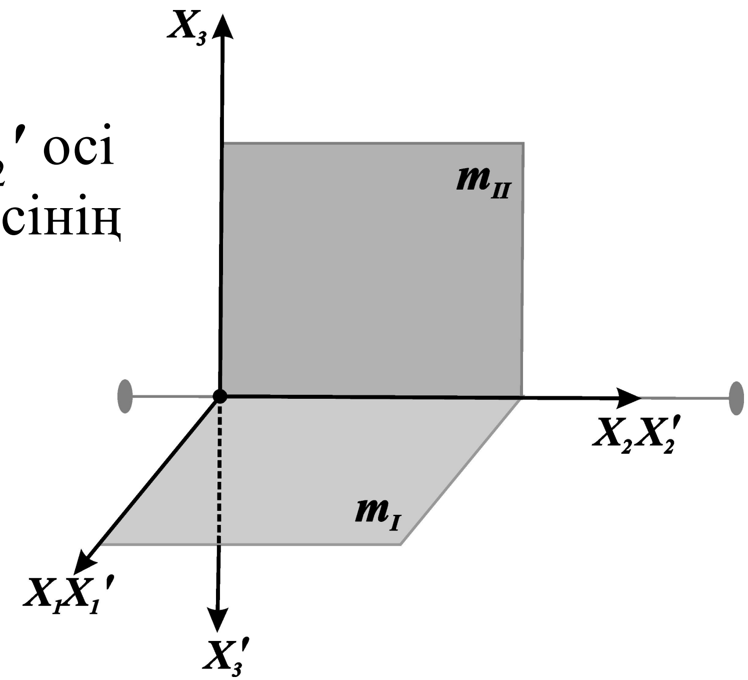
X_2 (ось **2**) осін 180° айналдыру симметриялық түрлендіруін жасайық. Бұл жағдайда X_2' осі X_2 осінің орнына келеді, X_3' осі $-X_3$ осінің бойымен бағыталады, ал X_1' осі $-X_1$ осінің бойымен бағыталады.



Онда бағыттаушы косинустар матрицасы келесі түрде болады:

$$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

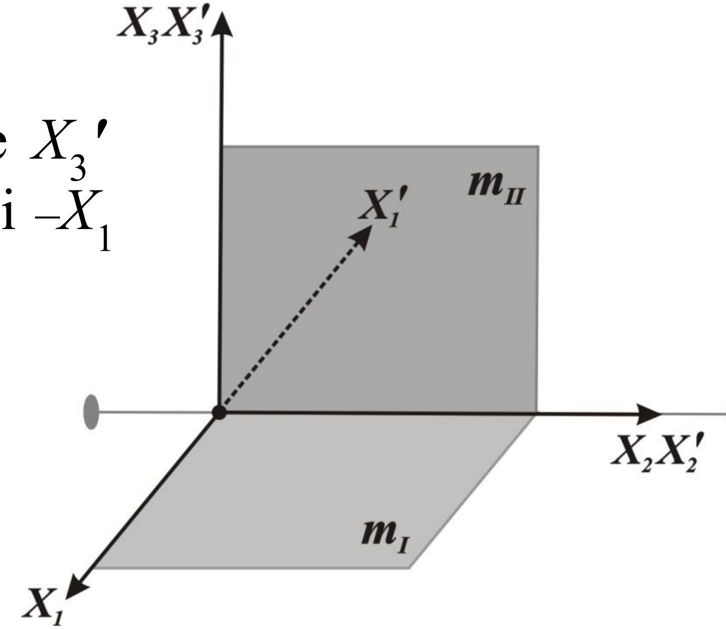
m_I жазықтығында шағылу нәтижесінде X_2' осі X_2 осінің, X_1' осі X_1 осінің, ал X_3' осі $-X_3$ осінің бойымен бағыталады.



Бағыттаушы косинустар матрицасы келесі түрде болады:

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

m_{II} жазықтығында шағылу нәтижесінде X_3' осі X_3 осінің, X_2' осі X_2 осінің, ал X_1' осі $-X_1$ осінің бойымен бағыталады.



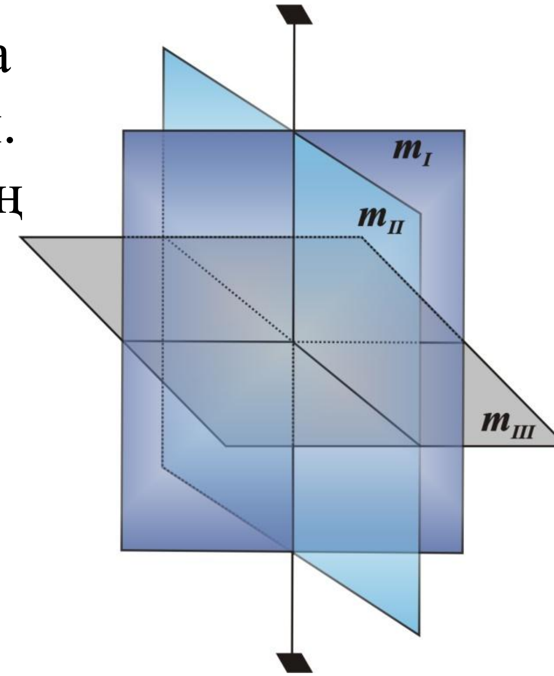
Онда бағыттаушы косинустар матрицасы келесі түрде болады:

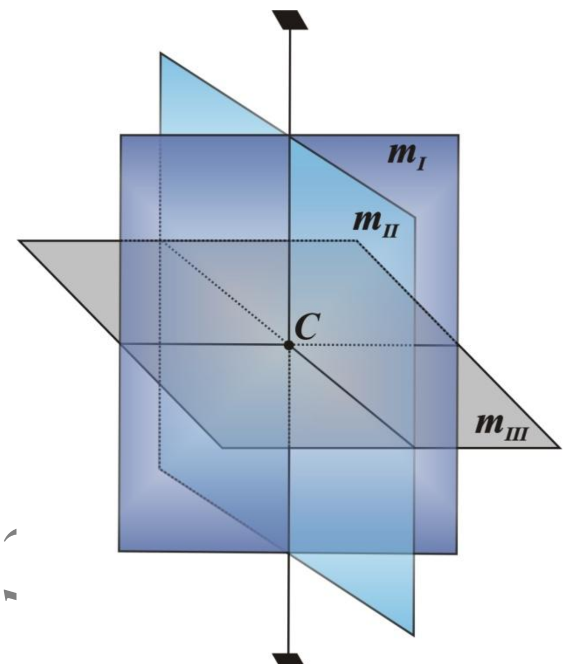
$$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

Кеңістік фигуралардың көбісі бірнеше симметриялық түрлендіру көмегімен бейнеленетін күрделі симметрияға ие болады. Олардың қатар әсерінің себебінен жаңа симметриялық түрлендірулер туындайды. Мұндай кезде симметриялық түрлендірулер «қосылады» дейді. Симметриялық түрлендірулердің «қосылуын» симметрия элементтерін қолдана отырып геометриялық әдіспен көрсету оңай. «Қосылу» жоғарыда аталған теоремаларға негізделеді.

Сол теоремалар көмегімен кез келген кеңістік фигураға тән барлық симметрия элементтерін табуға болады. Ол үшін фигураның екі-үш симметрия элементі табылса, қалғандарын «қосу» ережелерін пайдаланып табуға болады.

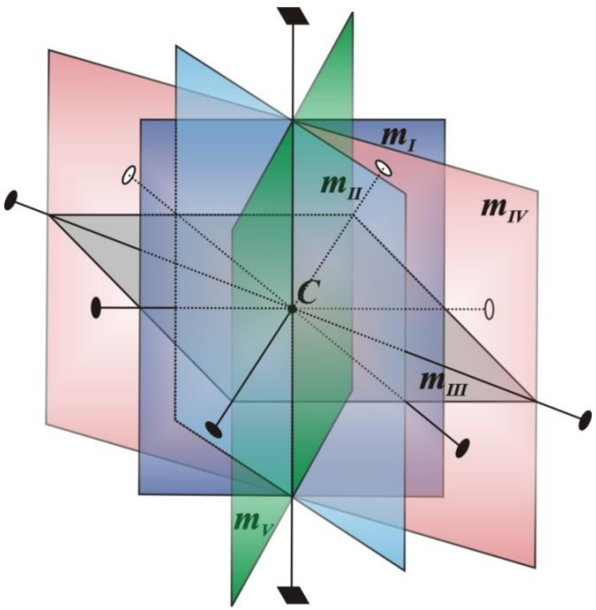
Мысал. Фигураның реті *4* осі және үш өзара перпендикуляр жазықтықтары бар болсын. «Қосу» теоремаларын қолданып осы фигураның қалған симметрия элементтерін табайық.

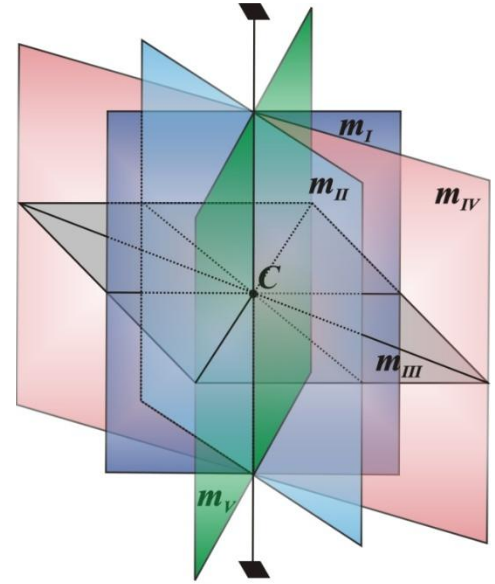




Біріншіден, 2 - теорема бойынша, реті *4* жұп ось пен оған перпендикуляр симметрия жазықтығының қиылысында *C* симметрия центрі пайда болады.

Екіншіден, 4-ші теорема бойынша реті ***4-ші*** ось оның ретіне тең жазықтықтар санын тудырады, б. а. 4 жазықтық пайда болады.





Үшіншіден, 1-ші теорема бойынша, өзара перпендикуляр симметрия жазықтықтарының қиылысында реті ***2-ші*** осьтер пайда болады.

Сонымен, бұл фигура келесі симметрия элементтерінің жинағынан тұрады: ***4*** ось, төрт ***2*** осьтер, бес ***m*** симметрия жазықтығы және ***C*** симметрия центрі. Қысқаша бұл симметрия элементтерінің жинағы келесі түрде жазылады: $\boldsymbol{42^4m^5C}$.

Бастапқы берілген симметрия элементтері ***4*** және $\boldsymbol{m^3}$ тудырушы элементтер деп аталады. Симметрия формуласына т**ек соларды** жазады. Онда бұл фигураның симметрия формуласы ***4/mmm*** болады.

Кез келген кеңістік фигураның барлық симметриялық түрлендірулерінің жинағы математика тұрғысынан топ құрады.

Элементер жинағы топ құру үшін келесі заңдардың орындалуы қажет:

1. Кеңістік фигураның екі симметриялық түрлендіруінің көбейтіндісі осы фигураның симметриялық түрлендіруі болып табылады.

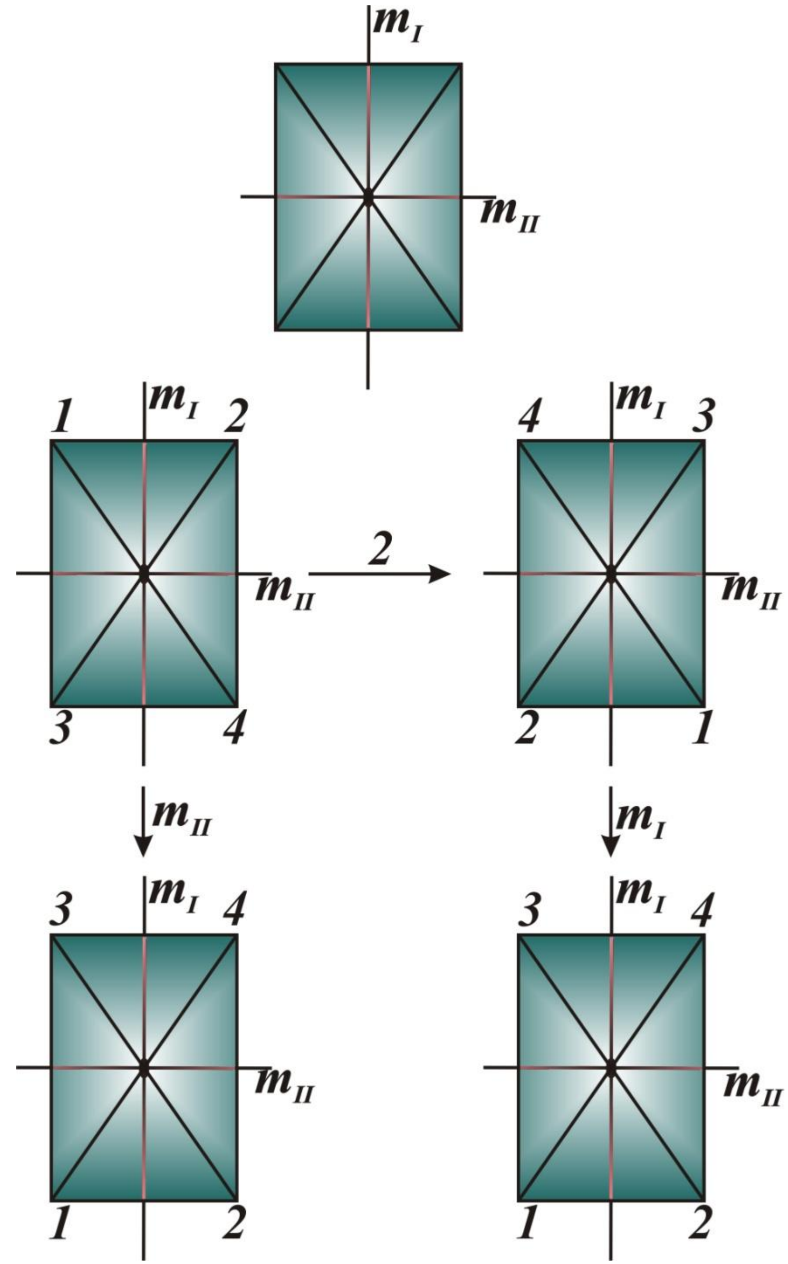
2. Терімділік заңы орындалады – үш симметриялық түрлендірудің көбейтіндісінде олардың орындарын ауыстыруға болады .

3. Берілген кеңістік фигураның кез келген симметриялық түрлендіруінің бірлік симметриялық түрлендіруге көбейтіндісі осы симметриялық түрлендіруге тең болады.

4. Кеңістік фигураның әрбір симметриялық түрлендіруіне кері симметриялық түрлендіру табылады, ал олардың көбейтіндісі бірлік симметриялық түрлендіруге тең болады.

Мысал. Тікбұрышты пирамиданың симметриялық түрлендірулері топтық заңдарға бағынатынын тексеріп көрейік. Бұл фигураның симметриясы келесі түрлендірулермен сипатталады: тождестволық (***1*** ось), 180° бұрышына айналу (***2*** ось) және m_I и m_{II} жазықтықтардан шағылулар. Пирамиданың бұрыштарын суретте көрсетілгендей белгілейік.

Топтың бірінші қасиетін тексеру үшін екі операцияны ретімен орындайық: 180° айналу және m_I жазықтығынан шағылу. Осы екі операцияның көбейтіндісі m_{II} жазықтығынан шағылуына тең болады, ал бұл симметриялық түрлендіру осы топқа жатады.



mm2 **тобының топтық заңдарының орындалуын бейнелетін симметриялық түрлендірулер.**

Топтық көбейту заңын келесі түрге келтіруге болады:

	1	2	m_I	m_{II}
1	1	2	m_I	m_{II}
2	2	1	m_{II}	m_I
m_I	m_I	m_{II}	1	2
m_{II}	m_{II}	m_I	2	2

Әр ұяшықта вертикал және горизонтал жолдардағы симметриялық түрлендірулердің көбейтіндісінің нәтижесі келтірілген.

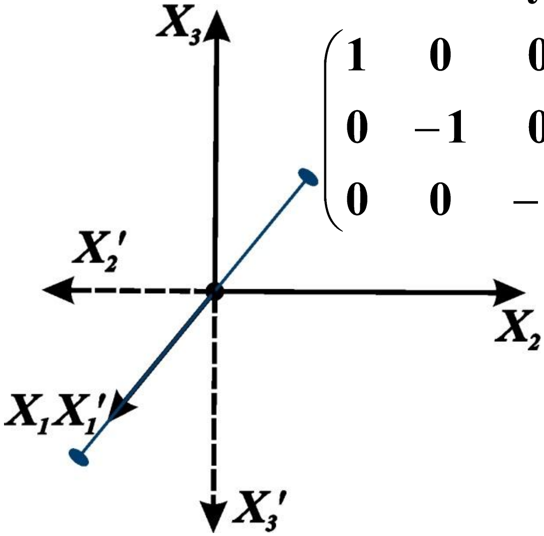
Сонымен, кеңістік фигуралардың симметриялық түрлендірулері топтар құрады. Бұл топтар нүктелік симметрия топтары деп аталады, өйткені кез келген түрлендіруде координата басындағы бір нүкте қозғалмайтын болады.

Симметрия элементтерінің жоғарыда көрсетілген график түріндегі қосуын матрицалық әдіспен жасауға болады. Симметрия элементтерінің үйлесуі сәйкесті матрицалардың көбейтіндісі арқылы табылады. Екі матрицаның көбейтіндісі төмендегідей анықталады:

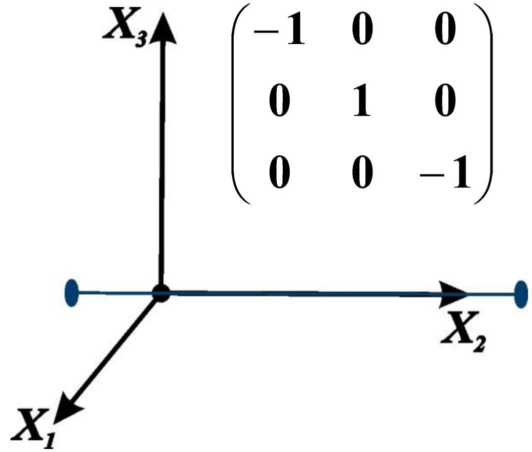
$$a_{kl}b_{li} = d_{ki} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{pmatrix}$$

бұл жерде $d_{ki} = \sum a_{kl} b_{ki}$

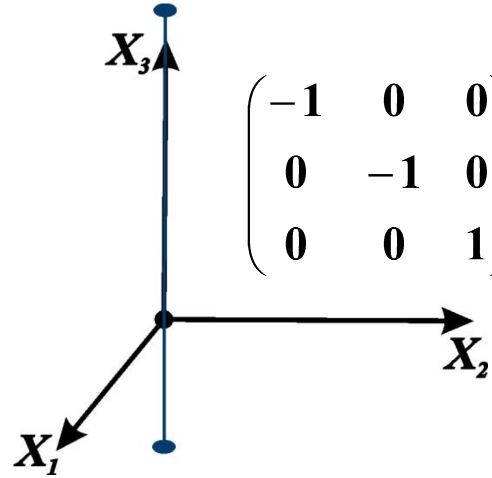
Төменде негізгі шекті симметрия түрлендірулерінің бағыттаушы косинустарының матрицалары келтірілген:



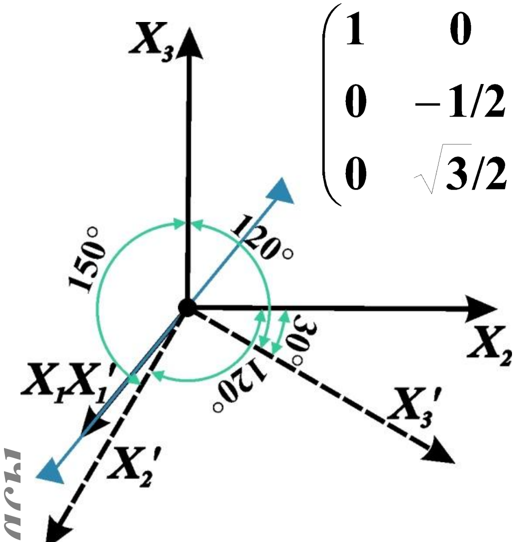
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$



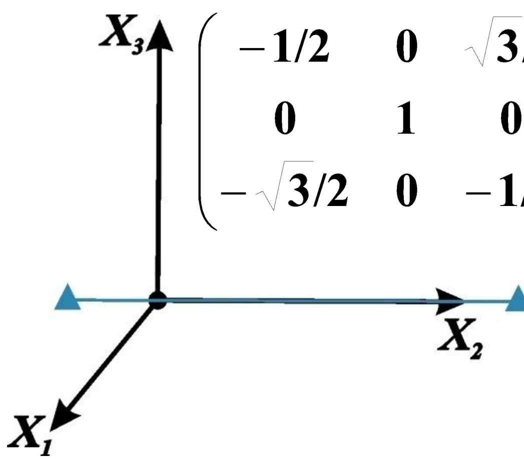
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$



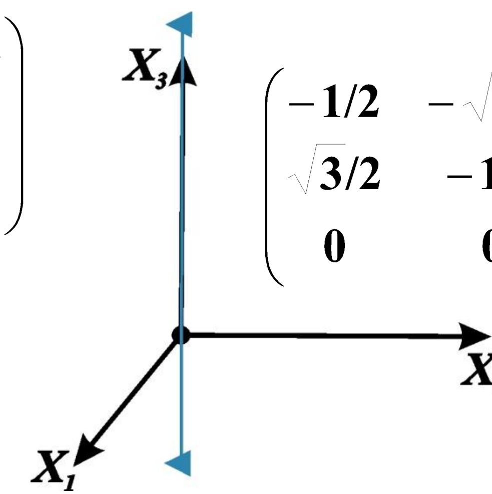
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



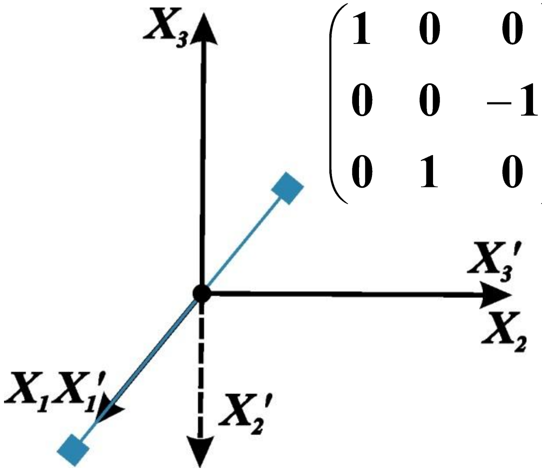
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$



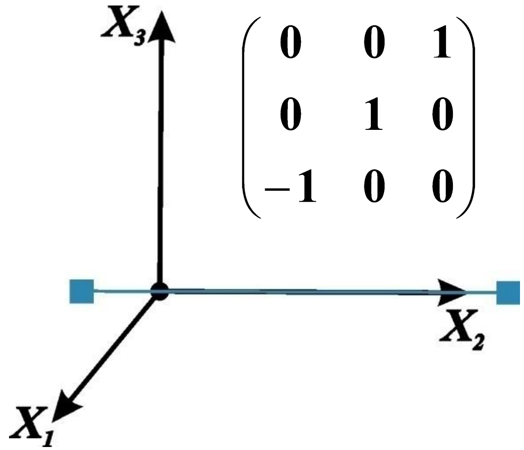
$$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$



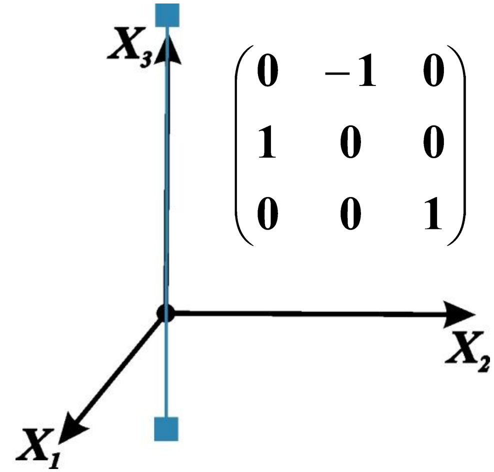
$$\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



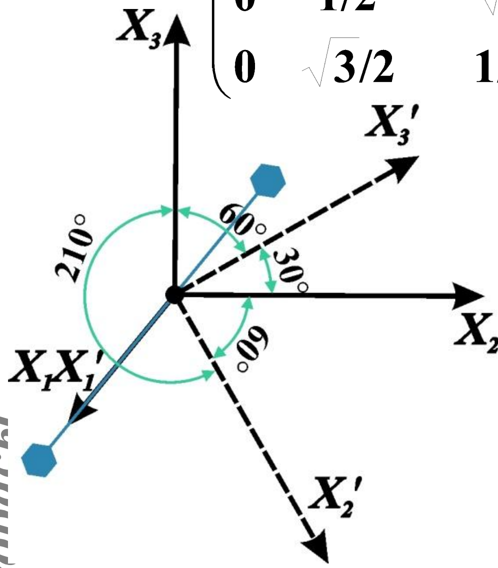
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



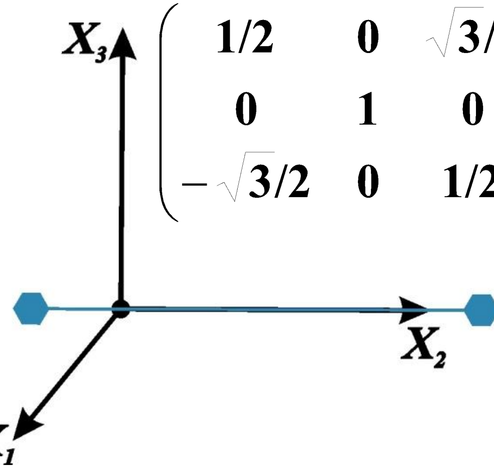
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



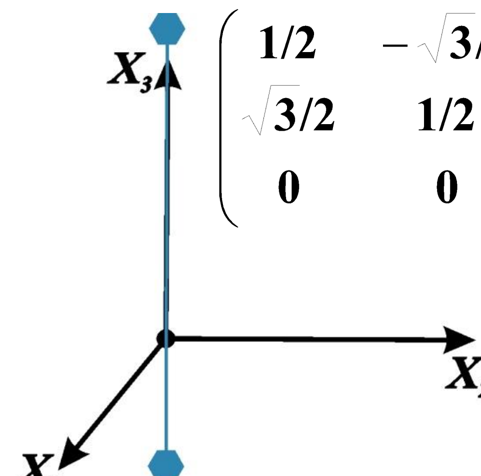
$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



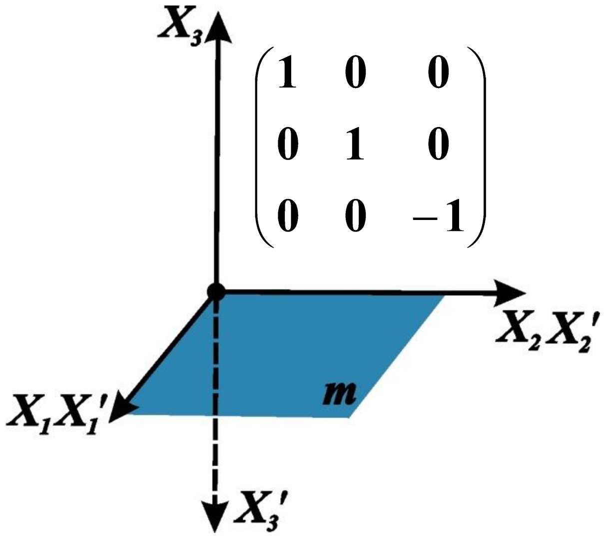
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

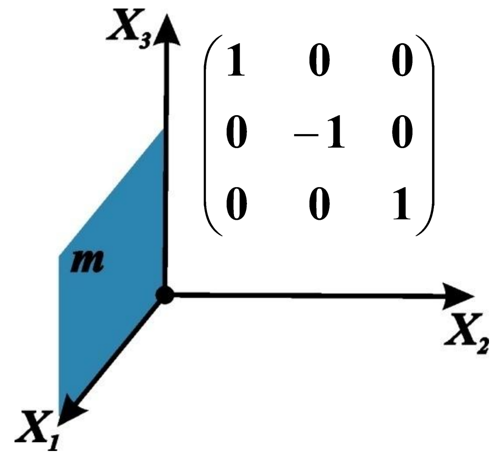


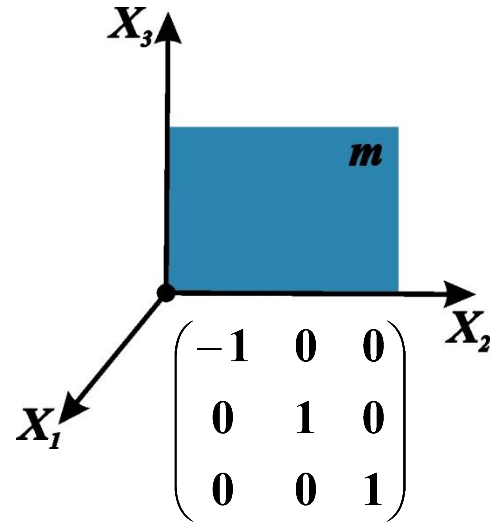
$$\begin{pmatrix} 1/2 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

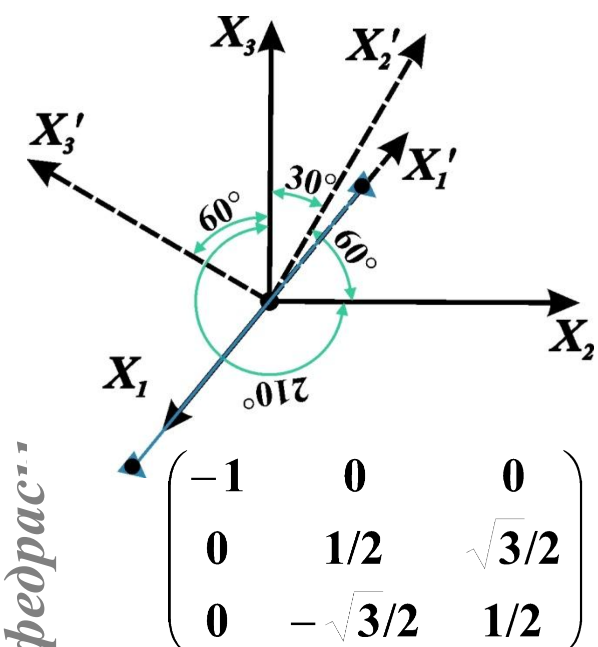


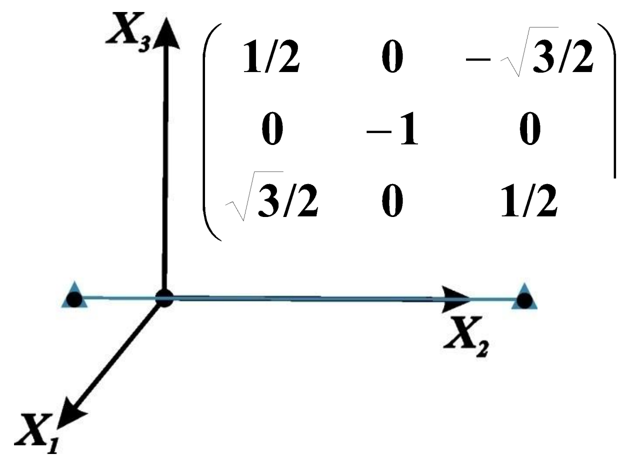
$$\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

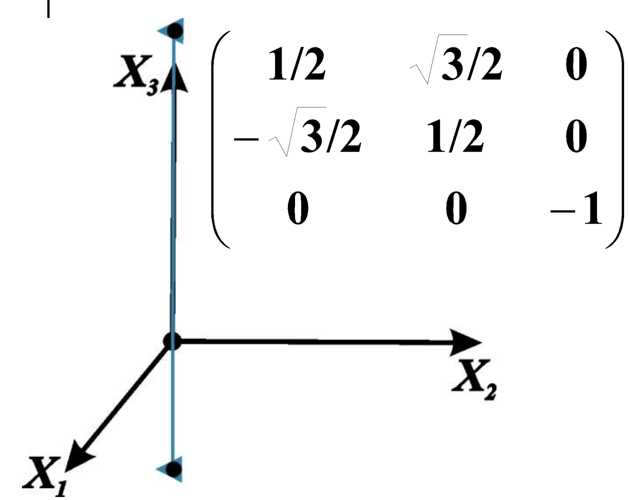

X_3
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$X_2 X_2'$
m
$X_1 X_1'$
X_3'

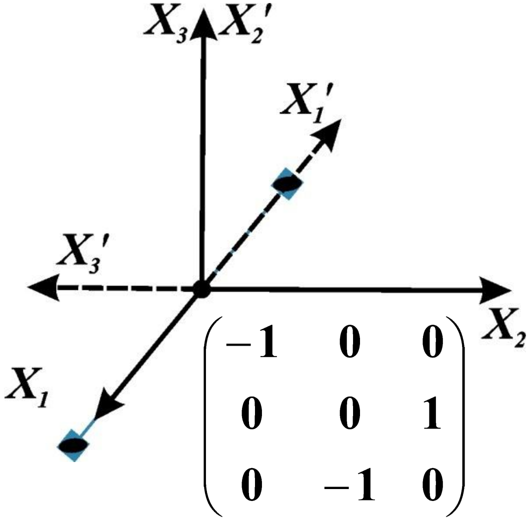

X_3
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
m
X_2
X_1


X_3
m
X_2
X_1
$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

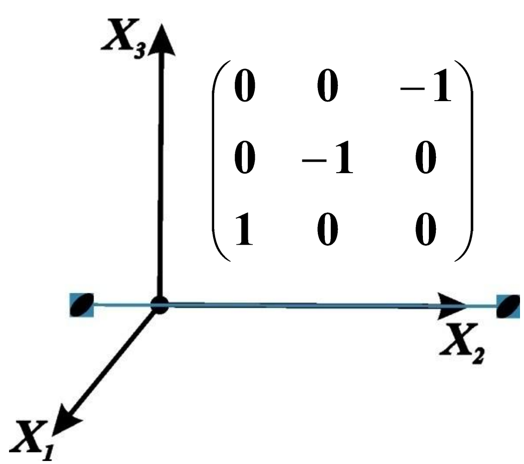

X_3
X_2'
X_3'
X_1'
30°
60°
60°
210°
X_2
X_1
$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$


X_3
$\begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & -1 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$
X_2
X_1

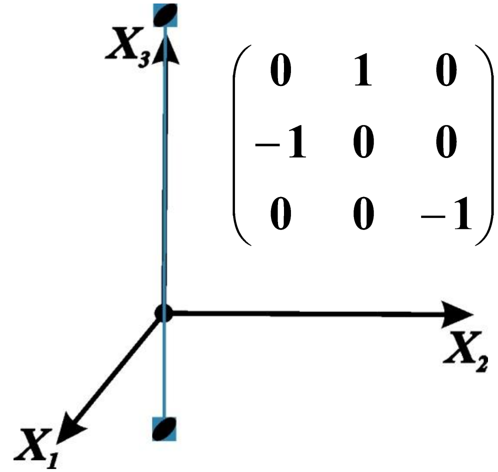

X_3
$\begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
X_2
X_1



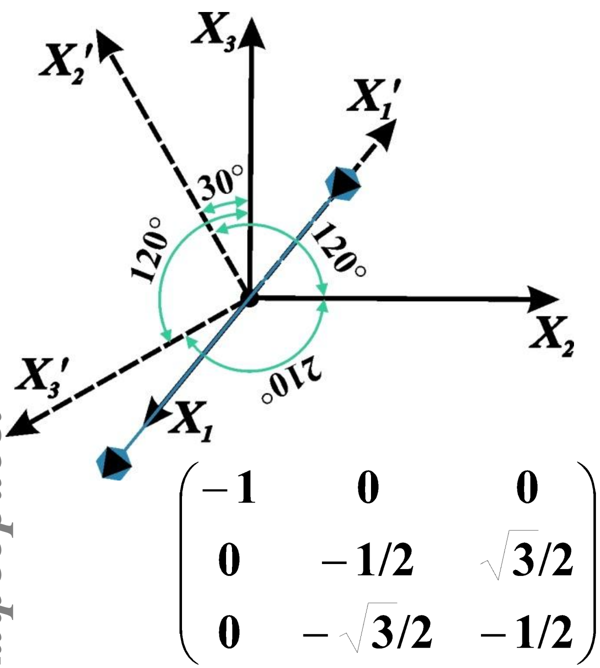
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$



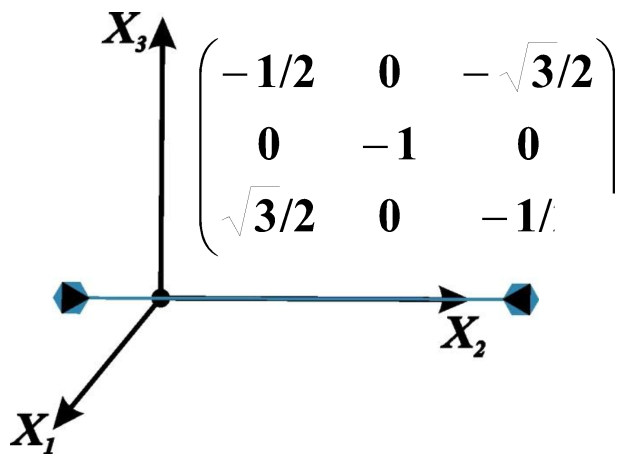
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



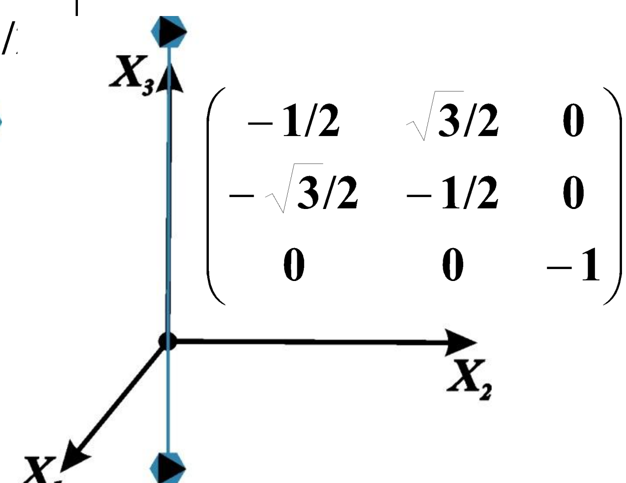
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & -1 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Мысал. 2-ші теореманы матрицалық әдіспен дәлелдейік. X_2 параллель ***2*** симметрия осінің және перпендикуляр $m_{(010)}$ жазықтығының матрицаларын көбейтіп:

$$2_{[010]} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \qquad m_{(010)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

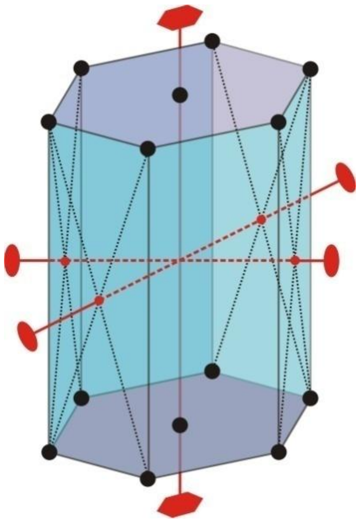
Симметрия центрінің матрицасын табамыз: $\bar{1} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$

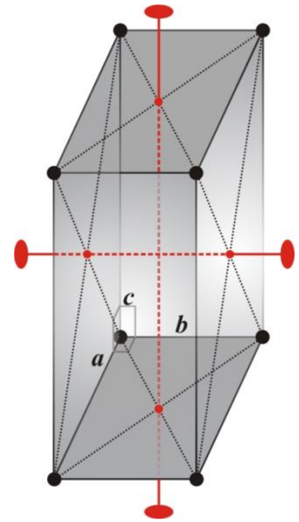
Сонымен 2-ші теореманың матрицалық әдіспен дәлелдеуі келесі түрде жазылады:

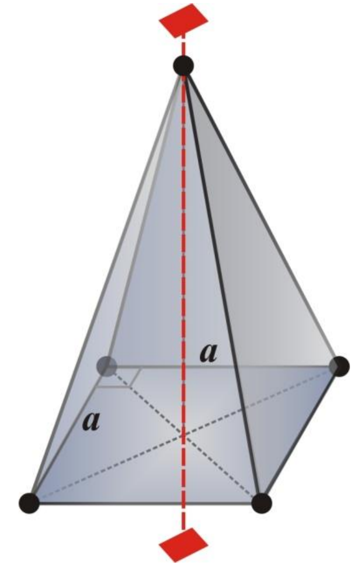
$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \bar{1}$$

Осылай симметрия элементтерінің үйлесуі туралы қалған теоремаларды дәлелдеуге және кристалдардың 32 симметрия классын шығаруға болады.

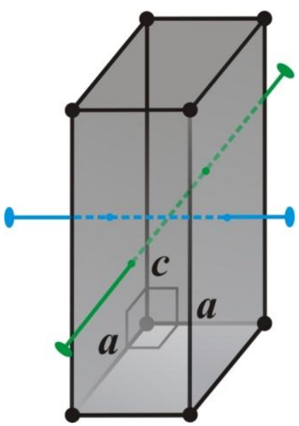
Кристалдағы жалғыз, қайталанбас бағыт ***ерекше немесе жекелік*** деп аталады.

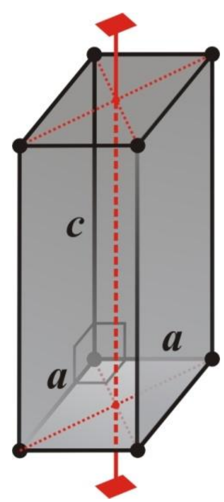


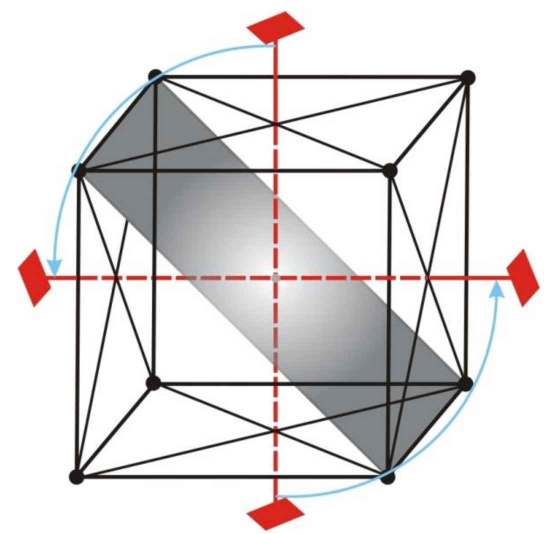




Кристалдағы қайталанатын, өзара симметрия элементтерімен байланысқан бағыттар, ***симметриялық эквивалентті*** деп аталады.







Кристалдың нүктелік симметрия топтары (кластары)

Идеал кристалдық көпқырлықтың симметрия операцияларының көптігі, б.а. оны өз қалпына келтіретін түрлендірулері кристалдың ***симметрия классын*** немесе ***нүктелік симметрия тобын*** құрады. Топқа кіретін әртүрлі симметрия операцияларының саны ***топтың реті*** деп аталады.

Халықаралық символикада нүктелік симметрия топтары келесі түрде белгіленеді: ***n*** – реті *n*-ші симметрия осі (***n*** = 2, 3, 4, 6), $\bar{n}$ – реті *n*-ші инверсиялық симметрия осі, ***m*** – симметрия жазықтығы, ***nm*** – реті *n*-ші симметрия осі және оның бойымен өтетін n симметрия жазықтықтары; ***n/m*** – реті *n* симметрия осі және оған перпендикуляр симметрия жазықтығы; егер *n* жұп болса, онда 3-ші теорема бойынша қосымша симметрия центрі бар болады; ***n2*** – реті *n-ші* симметрия осі және оған перпендикуляр реті екінші *n* симметрия осьтері; ***n/mmm*** – реті *n-ші* симметрия осі және оған параллель және перпендикуляр *m* жазықтықтар.

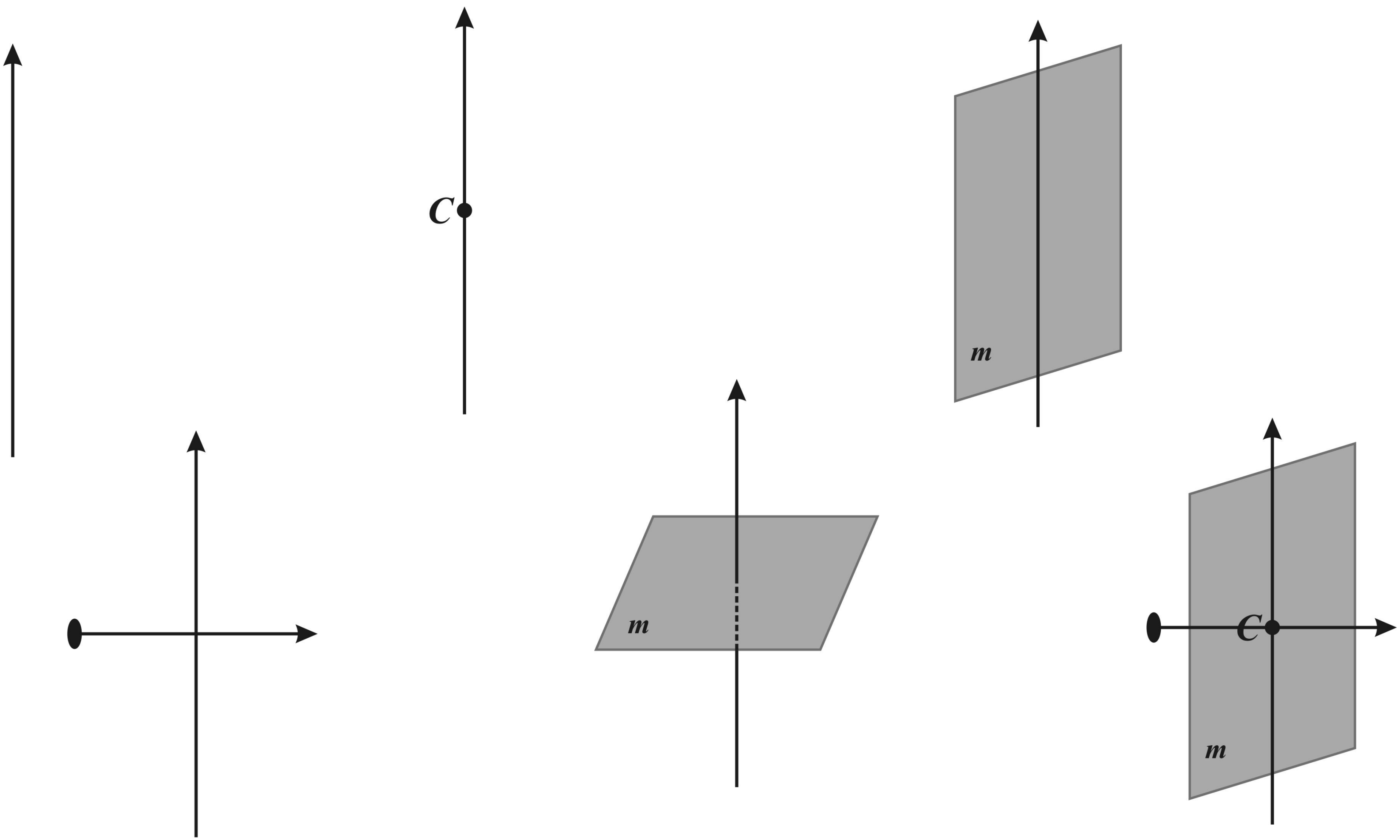
Кристалдың барлық нүктелік симметрия топтарын **1820 ж**. неміс минералогия профессоры **И. Гессель** анықтаған. Олардың саны **32**. Бірақ бір жағынан бұл нәтиже қолайсыз түрде берілген, ал екіншіден Гессель мақаласы қолға сирек түсетін басылымда шыққан себебтен оған ғылыми қауым назар аудармады.

1867 ж. Гессельге тәуелсіз 32 нүктелік симметрия тобын Ресей академигі, Артиллерия академиясының профессоры, қызығушы-кристаллограф, генерал **А.В. Гадолин** шығарып анықтады**.**

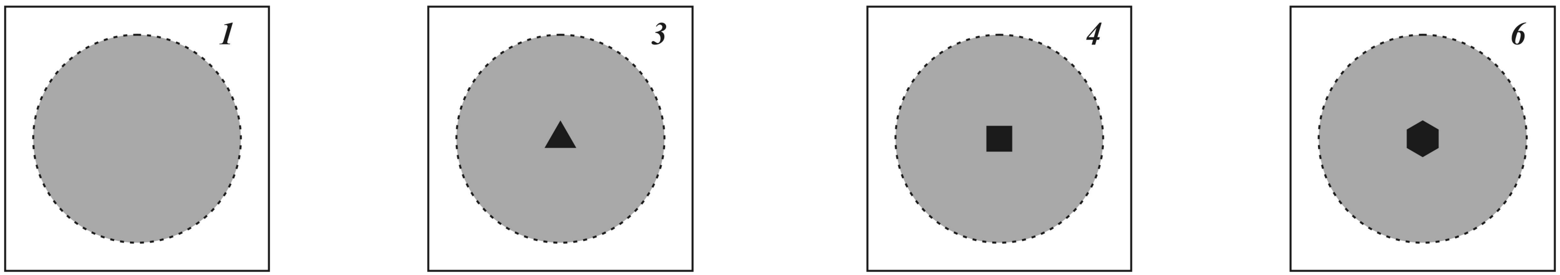
32 симметрия классын шығару үшін бір нүктеде қиылысатын кристаллографиялық симметрия элементтерінің барлық мүмкін терулерін қарастыру керек. Ол үшін кез келген бастапқы тудырушы симметрия элементін алып оған кезегімен тудырушы элемент ретінде қалған барлық симметрия элементтерін қосады. Теоремалардың негізінде екі тудырушы симметрия элеметтерінің терулерінен туынды симметрия элементтері шығарылады.

Ерекше бағыттары бар кристалдар

Тудырушы симметрия элементі ретінде ерекше бағыт бойымен өтетін симметрия осін алып оған суретте көрсетілгендей басқа симметрия элементтерін қосайық.



Тек бір симметрия элементі бар кластар қарапайым симметрия кластары болып табылады, атап айтқанда, ерекше бағыт бойымен өтетін реті ***n-ші*** айналу осі



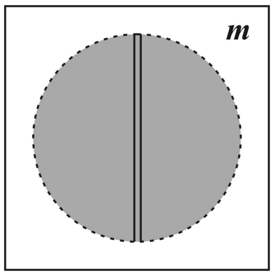
Қарапайым кластар

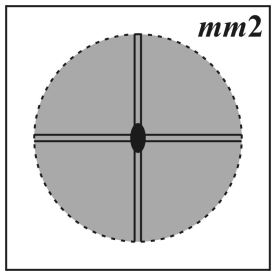
Әр оське симметрия центрін қосып және 2-ші теореманы қолданып центрлік кластарын аламыз

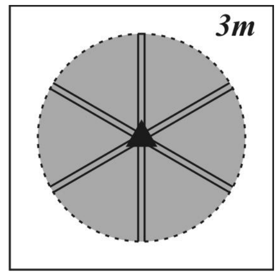
Симметрия элементі							
Симметрия элементі	Тудырушы	1-й	**1**	**2**	**3**	**4**	**6**
		2-й	***C***	***C***	***C***	***C***	***C***
	Туынды			***m***	$\bar{3}$	***m***	***m***
Халықаралық символ			$\bar{1}$	**2/*m***	$\bar{3}$	**4/*m***	**6/*m***

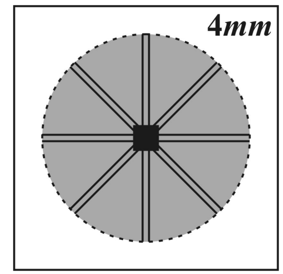
Тудырушы симметрия осіне оның бойымен өтетін симметрия жазықтығын қосып 4-ші теорема бойынша $m \cdot n = nm$ ***планалдық кластарды*** табамыз.

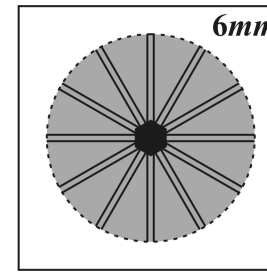
Симметрия элементі	Тудырушы		1	2	3	4	6
		1-й	**1**	**2**	**3**	**4**	**6**
		2-й	***m***	***m***	***m***	***m***	***m***
	Туынды		$\mathbf{1}m$	$\mathbf{2}mC$	$\mathbf{3}m^{3}$	$\mathbf{4}m^{4}$	$\mathbf{6}m^{6}$
Халықаралық символ			***m***	***mm*2**	**3*m***	**4*mm***	**6*mm***





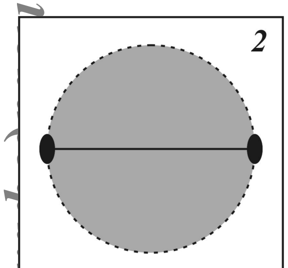


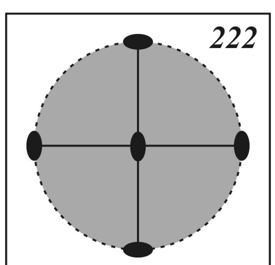


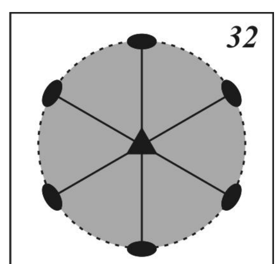


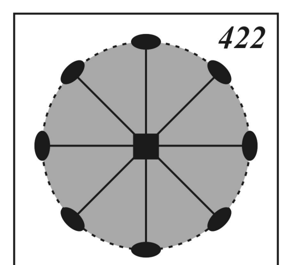
Егер тудырушы оське перпендикуляр реті 2 осьті қосатын болсақ, онда 1-ші теорема бойынша ***аксиалдық кластарды*** табамыз.

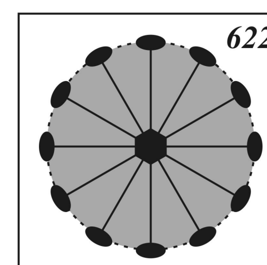
Симметрия элементі	Тудырушы		1	2	3	4	6
		1-й	**1**	**2**	**3**	**4**	**6**
		2-й	**/2**	**/2**	**/2**	**/2**	**/2**
	Туынды		**2**	$\mathbf{2^{3}}$	$\mathbf{32^{3}}$	$\mathbf{42^{4}}$	$\mathbf{62^{6}}$
Халықаралық символ			**2**	**222**	**32**	**422**	**622**



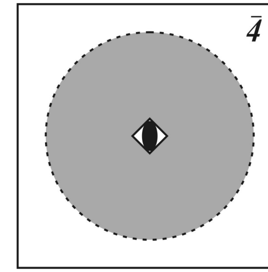


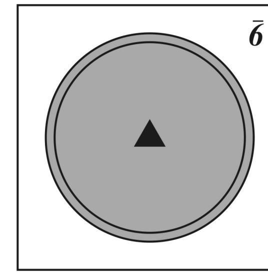






Тудырушы симметрия осіне көлденең жазықтық қосылған кезде ***инверсиялық-қарапайым класс*** пайда болады.

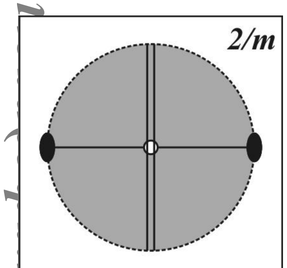


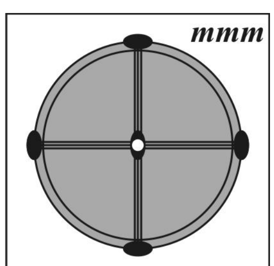


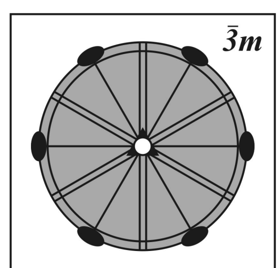
Симметрия элементі	Тудырушы	1-й	**1**	**2**	**3**	**4**	**6**
		2-й	***/m***	***/m***	***/m***	***/m***	***/m***
	Туынды		***C***	**2*mC***	**3*m***	**4*m*C**	**6*m***
Халықаралық символ			$\bar{1}$	**2/*m***	$\bar{6}$	$\bar{4}$	**6/*m***

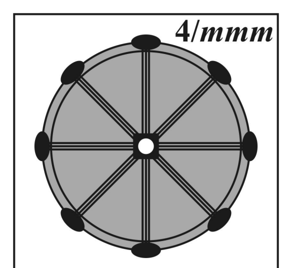
Тудырушы сиимметрия осіне симметрия центрі, параллель жазықтықтар және реті 2-ші перпендикуляр осьтері қосылған кезде ***планаксиалдық (аксиал-центрлік) класс*** пайда болады.

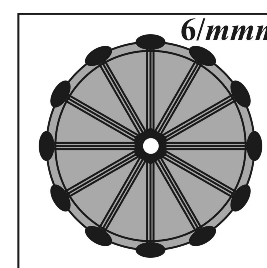
Симметрия элементі	Тудырушы	1-й	**1**	**2**	**3**	**4**	**6**
		2-й	***C*, *m*, 2**	***C*, 2*m*, 22**	***C*, 3*m*, 32**	***C*, 4*m*, 42**	***C*, 6*m*, 62**
	Туынды		***m***		***m***	***m***	***m***
Халықаралық символ			**2/*m***	***mmm***	$\bar{3}m$	**4/*mmm***	**6/*mmm***





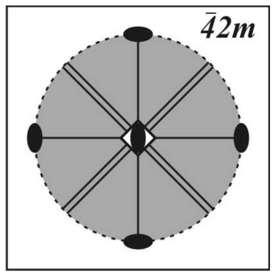


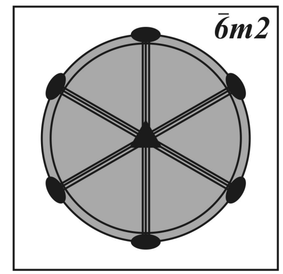




Тудырушы инверсиялық оське бойлай өтетін симметрия жазықтықтарын қосқанда ***инверсиялық-планалдық класс*** пайда болады.

Симметрия элементі	Тудырушы	1-й	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
		2-й	m	m	m	m	m
	Туынды		$2mC$	$\bar{2}m^2$	$\bar{3}2^3m^3C$	m	m
Халықаралық символ			$2/m$	$mm2$	$\bar{3}m$	$\bar{4}2m$	$\bar{6}m2$

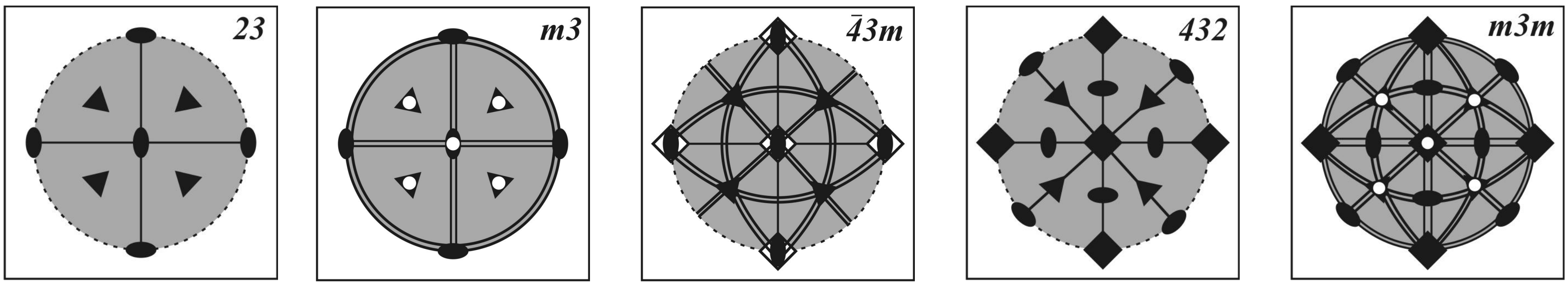




Ерекше бағыттары жоқ кристалдар

Ерекше бағыттары жоқ кристалдар дұрыс көпқырлықтарға сәйкес келеді, б.а. олар қырлары дұрыс көпбұрыштардан тұратын көпқырлықтарға сәйкес болады. Оларға тетраэдр (23 қарапайым классы, тетраэдрдың симметрия осьтері), куб және октаэдр (432 аксиал классы, октаэдр немесе кубтың симметрия осьтері) жатады. Қалған кластарды жоғарыда көрсетілгендей кезегімен симметрия центрін немесе симметрия жазықтықтарын қосып шығаруға болады. Реті 2-ші осьті қосуға болмайды, өйткені осьтердің барлық мүмкін терулері таусылған.

Симметрия элементі	Тудырушы	1-й	**23**	**23**	**23**	**23**	**4**	**432**	**432**	**432**
		2-й		$\bar{1}$	***m*** **вдоль 2**	***m*** **вдоль 3**	**под углом 3**	$\bar{1}$	***m*** **вдоль 4**	***m*** **вдоль 3**
	Туынды			mmm	$\bar{1}$	m^6, **оси** $2 \to 4$	$4^3 3^4 2^6$	$m^3 + m^6$	C	$m^3 + C$
Халықаралық символ			**23**	$m3$	$m3$	$\bar{4}3m$	**432**	$m3m$	$m3m$	$m3m$



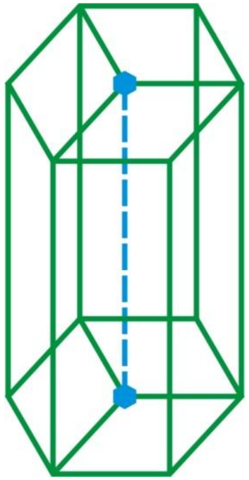
Кристаллографияда грек сөздері қолданылады: моно – бір; ди – екі; тетра – төрт; пента – бес; гекса – алты; окта – сегіз, дека – он; додека – он екі; эдра – қабырға; гониа – бұрыш; клино – ылди; пинакс – тақта; скалена – қисық, түзу емес; трапеца – төртбұрыштық; теми – жарты; энантио – қарама-қарсы, кері; морфо – пішін, бейне, түрі, син – ұқсастық.

Кристаллографиялық категориялар, жүйелер және сингониялар

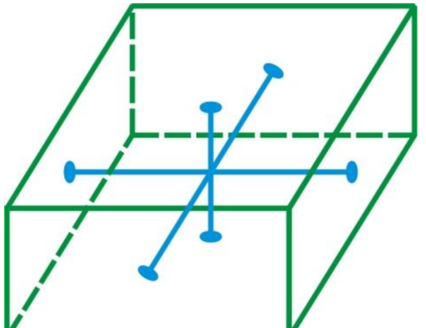
Кристалдар ерекше бағыттардың санына және симметрия осьтеріне байланысты үш категорияға бөлінеді :

<u>жоғарғы категория</u> **– ерекше бағыттары жоқ, реті 2-шіден жоғары бірнеше симметрия осьтері бар (мысалы – куб);**

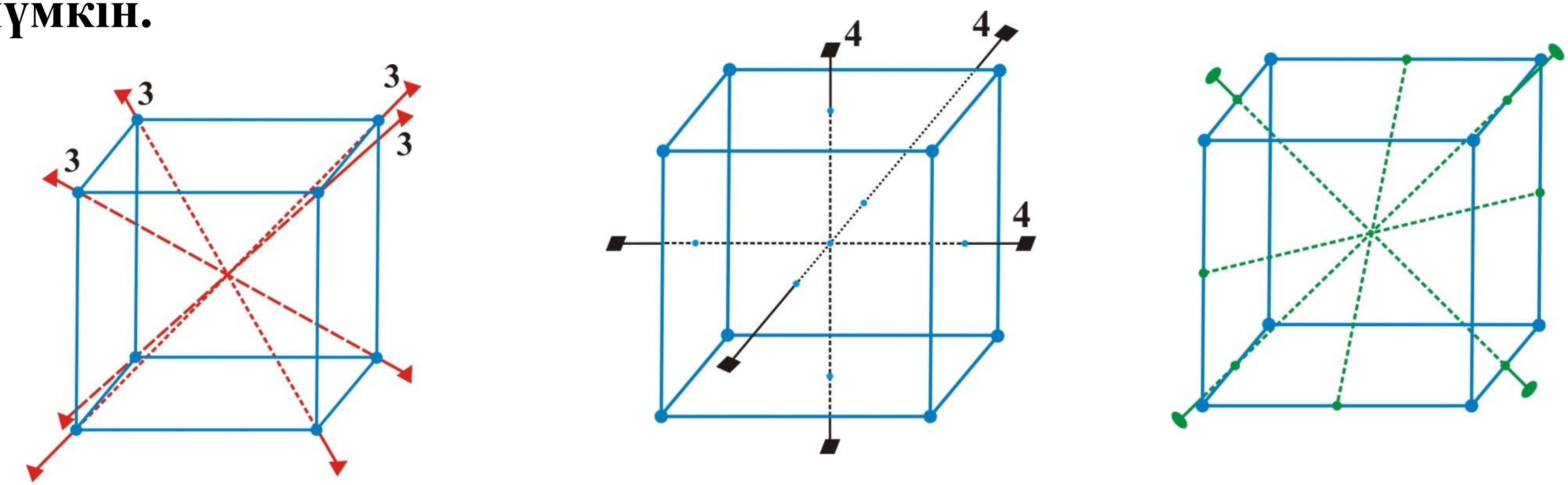
<u>орта категория</u> **– реті 2-ден жоғары б.а. реті 3, 4 немесе 6 жалғыз симметрия осіне сәйкес бір ерекше бағыт (мысалы – үш-, төрт- және алтықырлы призма);**



<u>төменгі категория</u> **– бірнеше ерекше бағыт, реті 2-ден жоғары осьтер жоқ (мысалы – реті 2-ші үш осі бар кірпіш).**



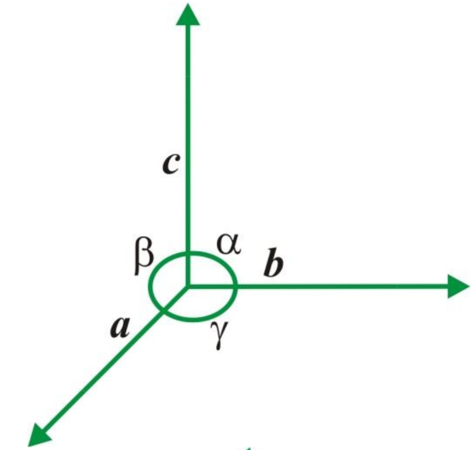
Жоғарғы категорияға реті 2-ден жоғары бірнеше симметрия осьтері бар кристалдар жатады; атап айтқанда міндетті түрде реті 3-ші төрт ось және сонымен қатар реті 4 немесе $\bar{4}$ үш ось болуы мүмкін.



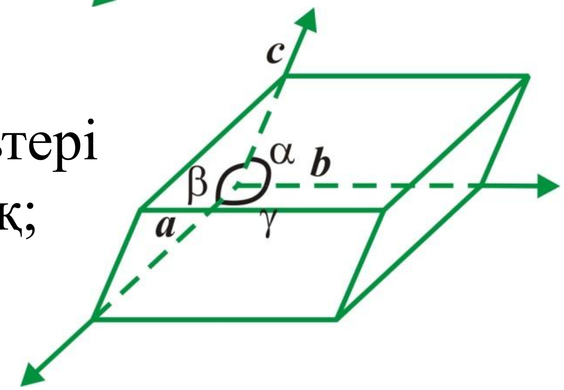
Ол симметриясы жоғары кристалдар болады. Жоғарғы категория кристаллында кез келген бағытқа басқа симметриялы эквиваленттік бағыттар сай болады. Эквиваленттік бағыттарда кристалдың қасиеттері бірдей болуы керек, сондықтан жоғарғы категория кристалдарында қасиеттердің анизотропиясы аз байқалады.

Кристалдың физикалық қасиеттері: жылуөткізгіштік, диэлектрлік өтімділік, электрөткізгіштік және т.б. бұл кристалдарда изотроптық болады.

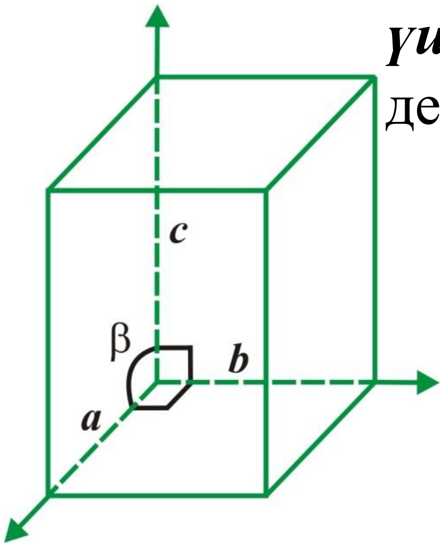
Үш категория оларға тән симметрия сипаты және симметрия осьтерінің терулері бойынша жүйелерге бөлінеді. Ондай жүйелер алтау – үшклиндік, моноклиндік, ромбтық, тетрагоналдық, гексагоналдық және кубтық.



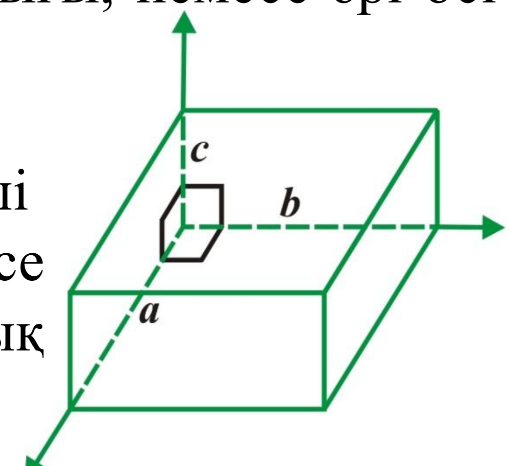
Төменгі категория үш жүйеге бөлінеді:



үшклиндік жүйеде симметрия осьтері де симметрия жазықтықтары да жоқ;

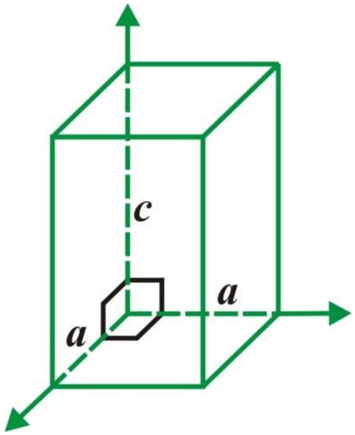


моноклиндік жүйеде реті екінші тек бір симметрия осі немесе бір симметрия жазықтығы, немесе әрі осі әрі жазықтығы бар болады;

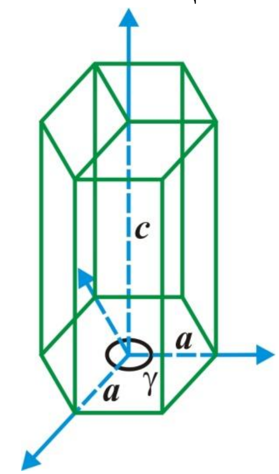


Ромбтық немесе орторомбтық жүйеде реті екінші симметрия осьтерінің саны бірден артық немесе симметрия жазықтықтарының саны бірден артық болады.

Орта категория үш жүйеге бөлінеді:

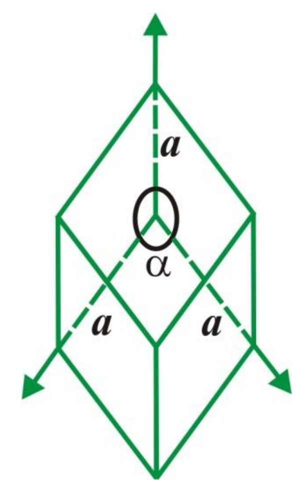


Тетрагоналдық жүйеде негізгі симметрия осінің реті 4 немесе $\bar{4}$;



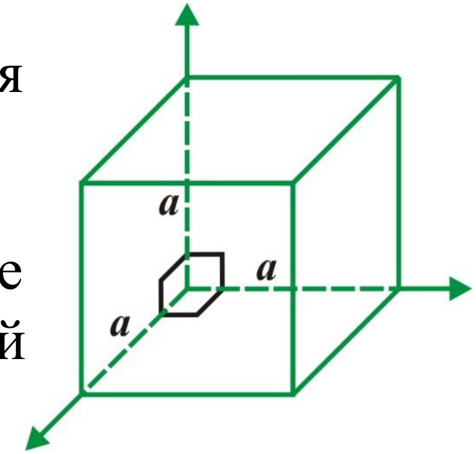
гексагоналдық жүйеде негізгі бір симметрия осінің реті 6 немесе $\bar{6}$;

Кристалдардың сыртқы пішінін және олардың құрылысын зерттейтін кристаллографтар гексагоналдық жүйеден реті 3-ші жоғарғы осі бар тригоналдық кристалдарды бөлек қарастырады.



Тригоналдық немесе ромбоэдрлық жүйеде негізгі бір симметрия осінің реті 3 немесе $\bar{3}$;

Жоғарғы категорияға реті үшінші төрт симметрия осьтері бар жалғыз ***кубтық*** жүйе жатады.



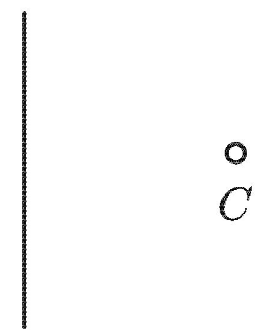
Алты жүйеге бөлудің орнына жеті сингонияға бөлуге болады, жүйелер мен сингониялардың аталуы бірдей (тригоналдық сингония қосылады).

Нүктелік топтың халықаралық символын жазу ережелері

Сингония	Позициялары		
	I	II	III
Үшклиндық	Кристалдың кез келген бағытына сай бір символ		
Моноклиндық	Реті 2 ось немесе *Y* осі бойымен *m* жазықтыққа нормаль (бірінші орнықтыру) немесе *Z* осі бойымен (екінші орнықтыру)		
Ромбтық	Реті 2 ось немесе *m* жазықтыққа нормаль координаттық ось бойымен:		
	X осі	*Y* осі	*Z* осі
Тригоналдық Тетрагоналдық Гексагоналдық	Реті жоғарғы ось (ерекше бағытқа сай)	Реті 2 ось немесе *m* бағыт бойымен:	
		Координаттық бағыттар	Диагоналдық бағыттар
Кубтық	Координаттық жазықтық-тар немесе осьтер	3	Диагоналдық жазық-тықтар немесе осьтер

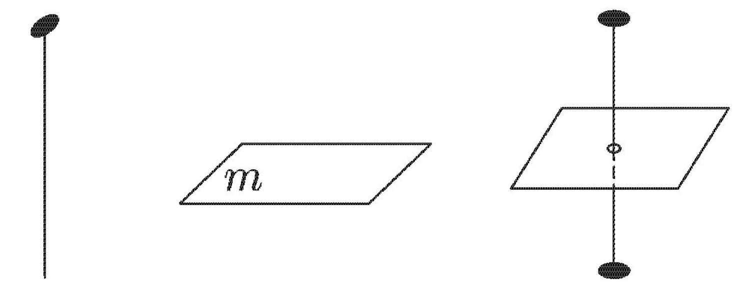
Кристаллографиялық кластарда симметрия элементтерінің орналасуын түсінікті бейнелеу үшін олардың кеңістіктегі көріністерін стереографиялық проекция түрінде емес натуралдық түрде көрсетіледі.

Үшклиндік сингония



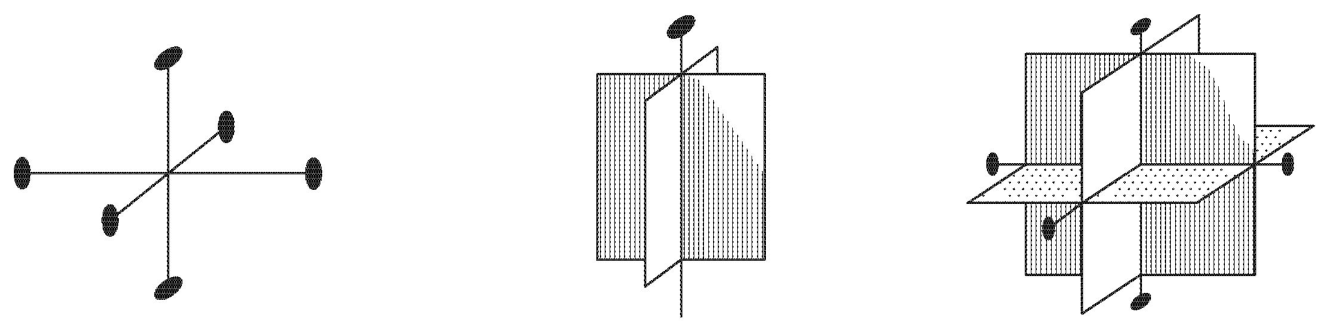
1

Моноклиндік сингония



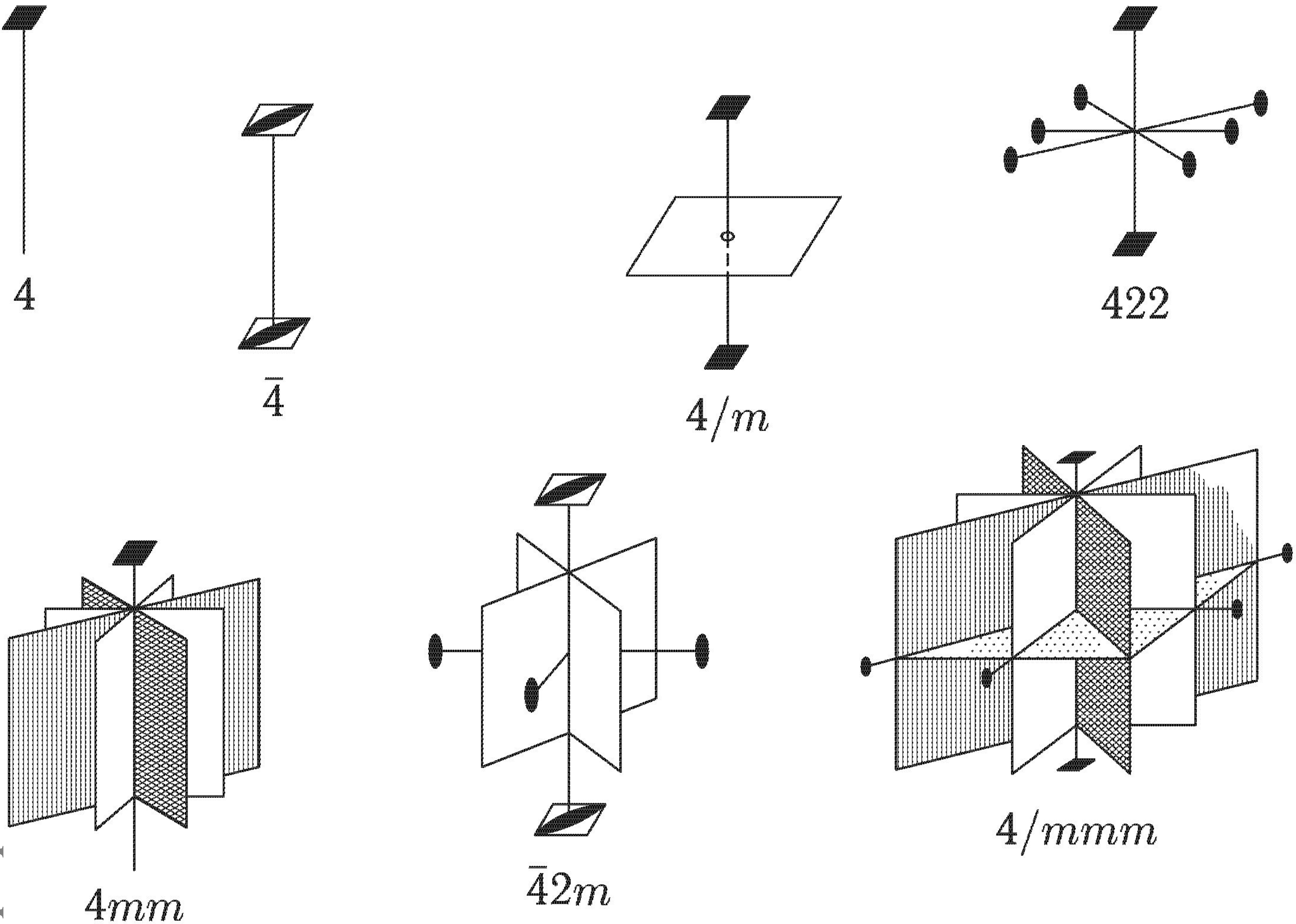
2 $2/m$

Ромбтық сингония

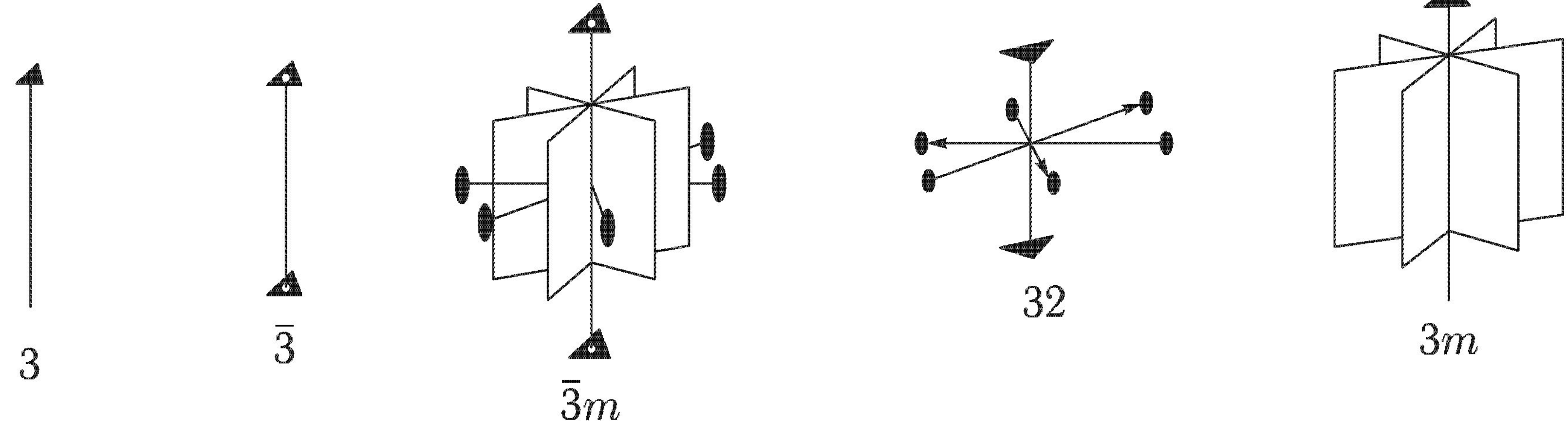


222 $2mm$ mmm

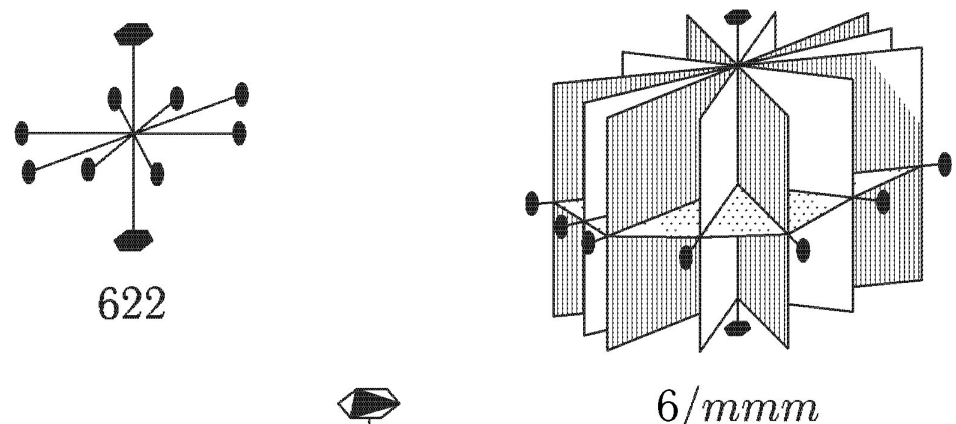
Тетрагоналдық сингония

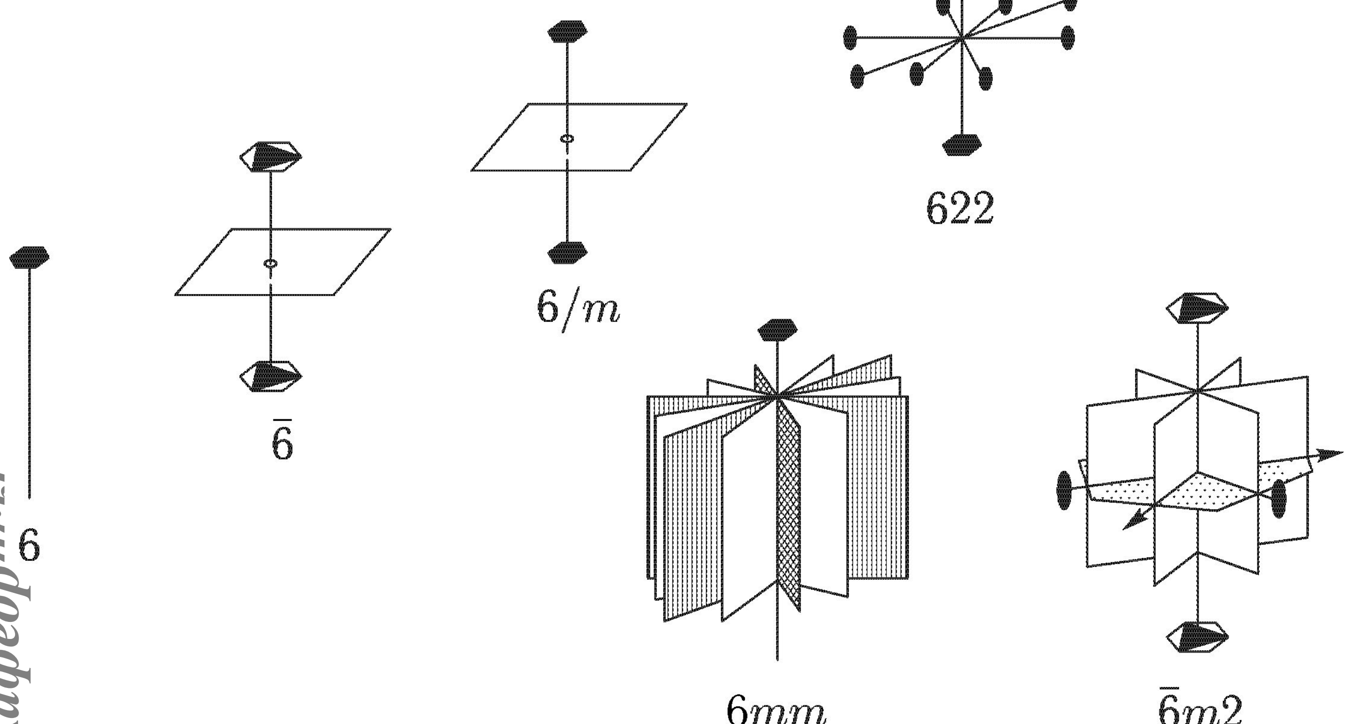


Тригоналдық сингония



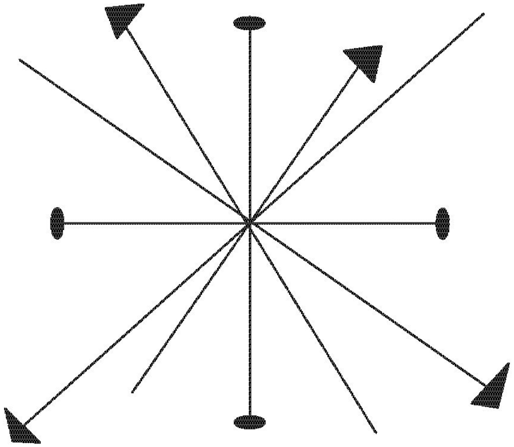
Гексагоналдық сингония



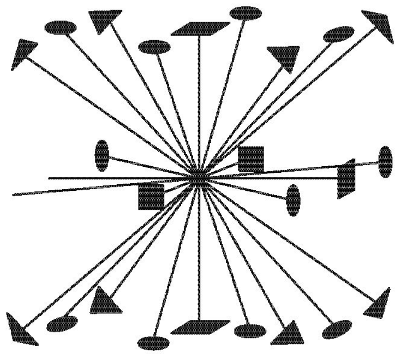


Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

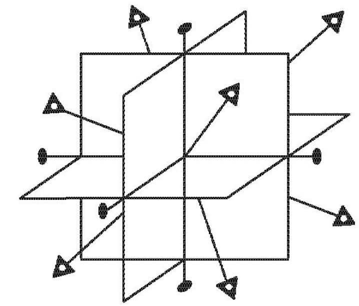
Кубтық сингония



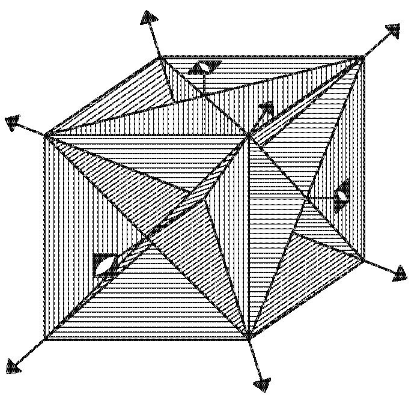
23



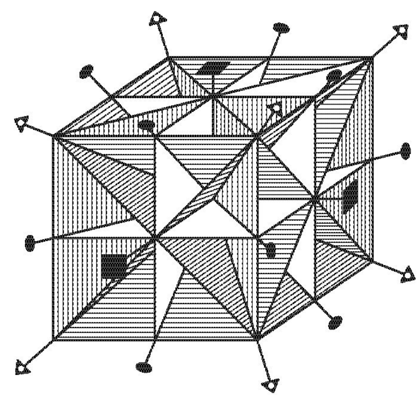
432



$m3$



$\bar{4}3m$



$m3m$

Кристаллографиялық номенклатура

Шенфлис номенклатурасы ең аз хабар береді, бірақ оны физик-теоретиктер жақсы көреді. Ол келесі жолмен тұрғызылған:

тек симметрия осьтері бар топтар C_n деп белгіленеді, бұл жерде n – осьтің реті;

симметрия осьтері және оларға параллель симметрия жазықтықтары бар топтар C_{nv} деп белгіленеді (v – вертикал символы);

симметрия осьтері және оларға перпендикуляр симметрия жазықтықтары бар топтар C_{nh} деп белгіленеді (h – горизонтал символы);

симметрия осьтері және перпендикуляр 2 осі бар топтар D_n деп белгіленеді;

егер топта симметрия осьтері, осьтерге параллель n жазықтықтары және осьтерге перпендикуляр жазықтық бар болса, онда осындай топтар D_{nh} деп белгіленеді;

тек инверсиялық симметрия осьтері бар топтар S_n деп белгіленеді;

үш өзара перпендикуляр 2 осьтері бар топ $V = D_2$ деп белгіленеді;

егер топта үш 2 ось және үш симметрия жазықтықтары бар болса, онда осындай топ $V_h = D_{2h}$ деп белгіленеді;

үш 2 осьтері және диагоналдық симметрия жазықтықтары бар топтар $V_d = D_{2d}$ деп белгіленеді (d – диагональ символы);

тетраэдр топтары T, ал октаэдр топтары O деп белгіленеді через;

егер тетраэдрда диагоналдық жазықтықтар бар болса, онда осындай топ T_d, ал егер горизонтал жазықтықтар бар болса – онда T_h деп белгіленеді;

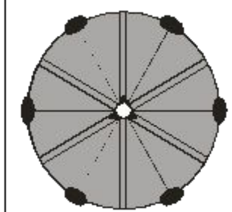
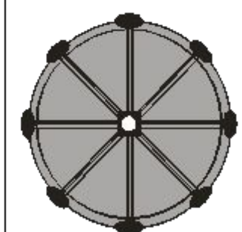
октаэдр тобында да дәл сондай болады – O_h деп горизонтал симметрия жазықтықтары бар топтар белгіленеді.

Шубников ұсынған нүктелік топтардың белгілеуі тудырушы симметрия элементтеріне негізделген, бірақ симметрия элементтерінің перпендикуляр және параллель болатынын көрсету үшін басқа белгілер қолданады. Перпендикулярлық екі нүктемен (:), ал параллельдік – нүктемен (•) белгіленеді.

Сингония	Симметрия формуласы	Номенклатурасы		
		Халықаралық (Герман-Моген)	Шубников	Шенфлис
Үшклиндық	1	1	1	C_1
	C	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$C_i = S_2$
Моноклиндық	2	2	2	C_2
	m	m	m	$C_{1h} = C_s$
	$2mC$	$2/m$	$2{:}m$	C_{2h}
Ромбтық	2^3	222	2:2	$D_2 = V$
	$2m^3$	$mm2$	$2{\cdot}m$	C_{2v}
	2^3m^3C	mmm	$m{\cdot}2{:}m$	$D_{2h} = V_h$
Тригоналдық	3	3	3	C_3
	32^3	32	3:2	D_3
	$3m^3$	$3m$	$3{\cdot}m$	C_{3v}
	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{6}$	$D_{3i} = S_4$
	$\bar{3}2^3m^3C$	$\bar{3}m$	$\bar{6}{\cdot}m$	D_{3d}

Сингония	Симметрия формуласы	Номенклатурасы		
		Халықаралық (Герман-Моген)	Шубников	Шенфлис
Тетрагоналдық	4	4	4	C_4
	42^4	422	$4:2$	D_4
	$4mC$	$4/m$	$4:m$	C_{4h}
	$4m^4$	$4mm$	$4\cdot m$	C_{4v}
	42^4m^5C	$4/mmm$	$m\cdot 4:m$	D_{4h}
	$\bar{4}$	$\bar{4}$	$\bar{4}$	S_4
	$\bar{4}2^2m^2$	$\bar{4}2m$	$\bar{4}\cdot m$	$D_{2d} = V_d$
Гексагоналдық	6	6	6	C_6
	$3m(\bar{6})$	$\bar{6}$	$3:m$	C_{3h}
	32^3m^4	$\bar{6}m2$	$m\cdot 3:m$	D_{3h}
	62^6	622	$6:2$	D_6
	$6mC$	$6/m$	$6:m$	D_{6h}
	$6m^6$	$6mm$	$6\cdot m$	C_{6v}
	62^6m^7C	$6/mmm$	$m\cdot 6:m$	D_{6h}
Кубтық	2^33^4	23	$3/2$	T
	$\bar{3}^42^3m^3C$	$m3$	$\bar{6}/2$	T_h
	$\bar{4}^33^4m^6$	$\bar{4}3m$	$3/\bar{4}$	T_d
	$4^33^42^6$	432	$3/4$	O
	$4^3\bar{3}^42^6m^9C$	$m3m$	$\bar{6}/4$	O_h

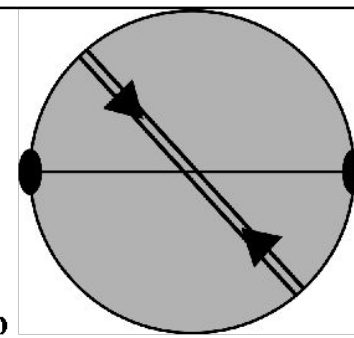
№2 тестілік тапсырманың үлгісі

№ вариант			________________ (Аты-жөні) №_____ тобы	
1.	Жоғарғы категория кристалдарында неше ерекше бағыт болады? A) 1 B) 2 C) 3 D) 4 E) 0	6.	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	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
2.	Моноклиндық сингонияда: A) $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$ B) $a = b \neq c$, $\alpha \neq \gamma \neq \beta \neq 90°$ C) $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = \beta = 90°$ D) $a \neq b = c$, $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$ E) $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = \beta \neq 90°$	7.	Симметрия элементтерінің стереографиялық проекциясы суретте көрсетілген кристалл қандай сингонияға жатады: A) Ромбтық B) Тригоналдық C) Гексагоналдық D) Тетрагоналдық E) Кубтық	
3.	Гексагонал сингонияда: A) $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$ B) $a = b \neq c$, $\alpha \neq \gamma \neq \beta \neq 90°$ C) $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$ D) $a \neq b = c$, $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$ E) $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90° \neq \gamma = 120°$	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.	Бағыт символы келесі түрде жазылады: A) [[uvw]] B) [uvw] C) {uvw} D) <uvw> E) (uvw)	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.	mmm нүклелік тобының кристаллы қандай сингонияға жатады : A) Ромбтық B) Тригоналдық C) Гексагоналдық D) Тетрагоналдық E) Кубтық	10.	Симметрия жазықтығынан шағылудың бағыттаушы косинустар матрицасының анықтауышы неге тең? A) -1 B) -½ C) 0 D) ½ E) 1	

Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

Қатты дене физикасы мен материалтану кафедрасы

№2 бақылау жұмысының үлгісі

Вариант	
1 (2 балл)	**m3m класының кристаллында {112} жазықтықтарын бейнеле.**
2 (2 балл)	**$\bar{4}3m$ нүктелік симметрия тобы үшін симметрия элементтерінің стереографиялық проекциясын бейнеле. Бұл симметрия классы қандай шекті топқа жатады?**
3 (2 балл)	**6/m симметрия элементтерінің біріккен әрекетінің матрицасын анықта.**
4 (2 балл)	**Келесі теореманы (графикалық және аналитикалық түрде) дәлелде: Жұп (4) симметрия осінің оған перпендикуляр симметрия жазықтығымен қиылысуы симметрия центрі болады.**
5 (2 балл)	**Симметрия элементтерінің толық жинағын шығар**  **$\alpha = 45°$.**

3-4 дәріске қосымша әдебиет

Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фадеев М.А. Основы кристаллографии: учебник для вузов. – М.: Издательство Физико-математической литературы, 2004. - 500 с.

Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография: учебник для студентов геологических специальностей вузов. – М.: Высшая школа, 1972. - 352 с.