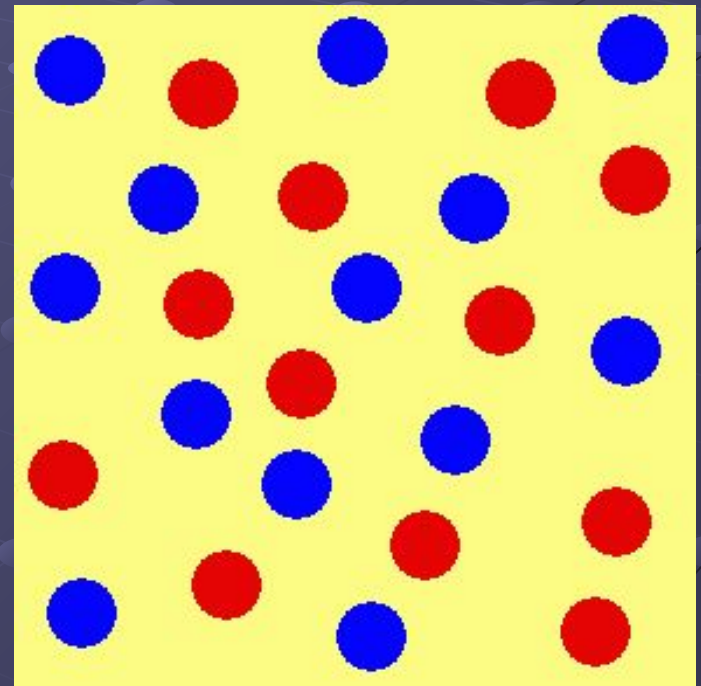
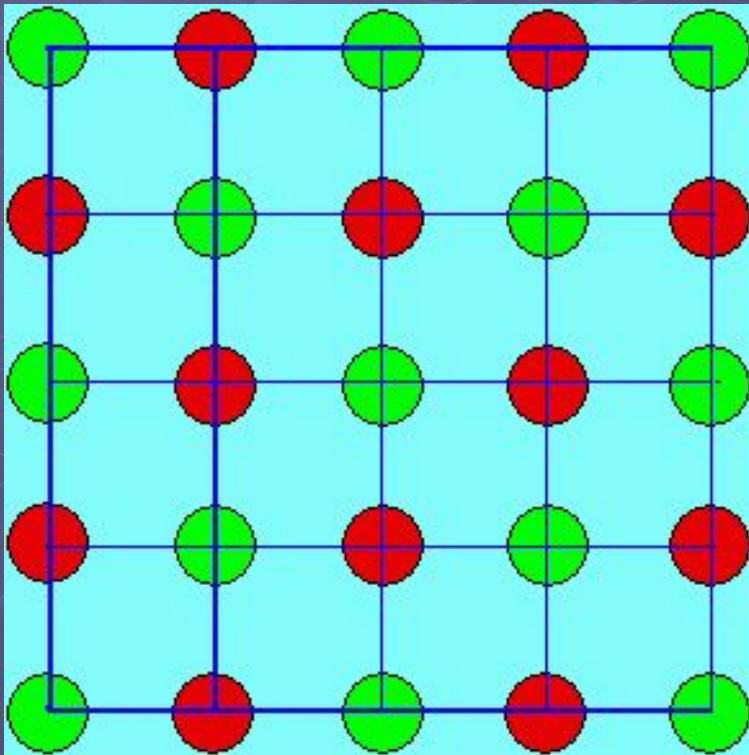


Симметрия
физических
свойств
кристалла

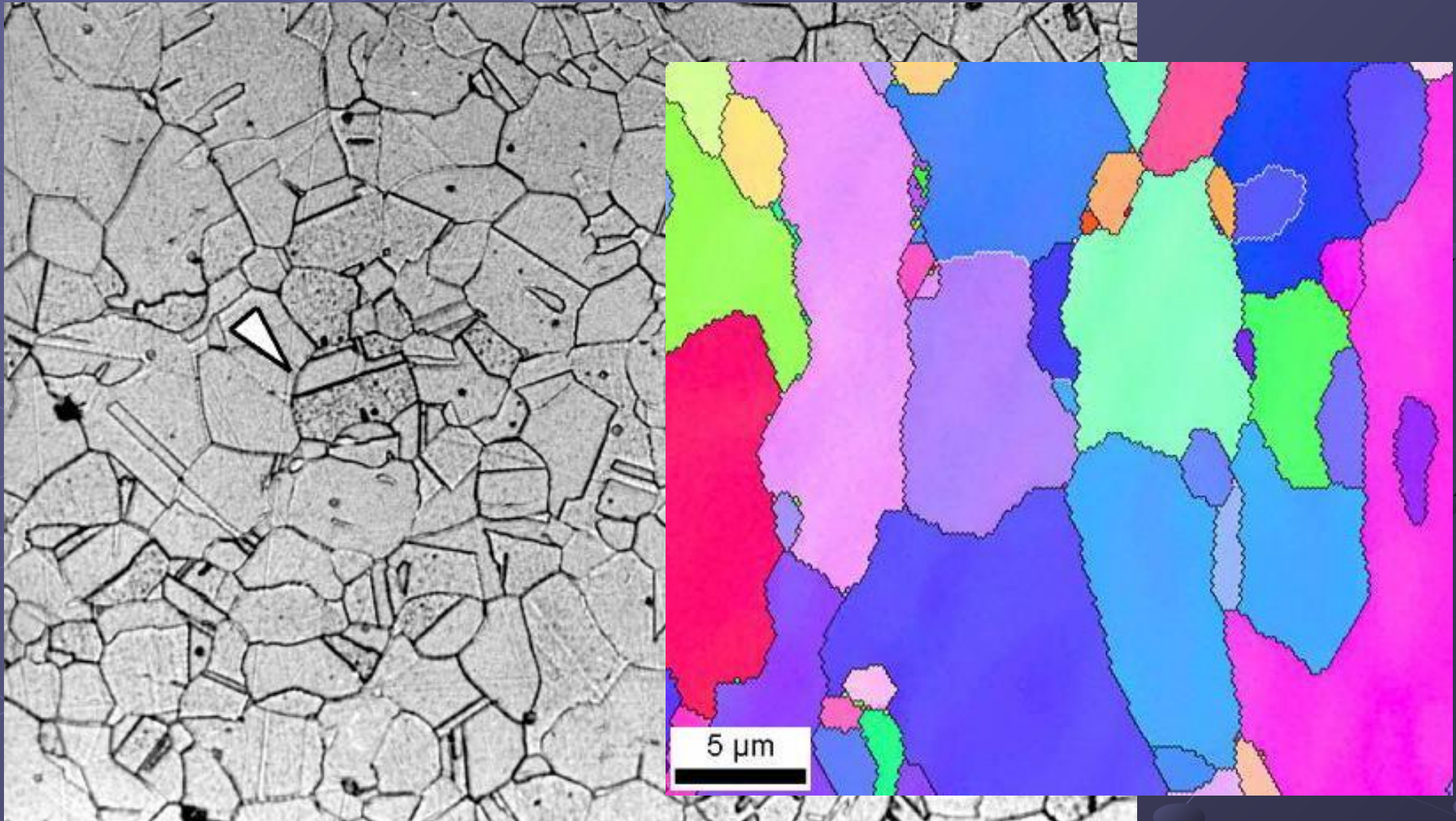
Твердые тела



Формы кристаллов



Поликристаллы



Макроскопические законы кристаллографии

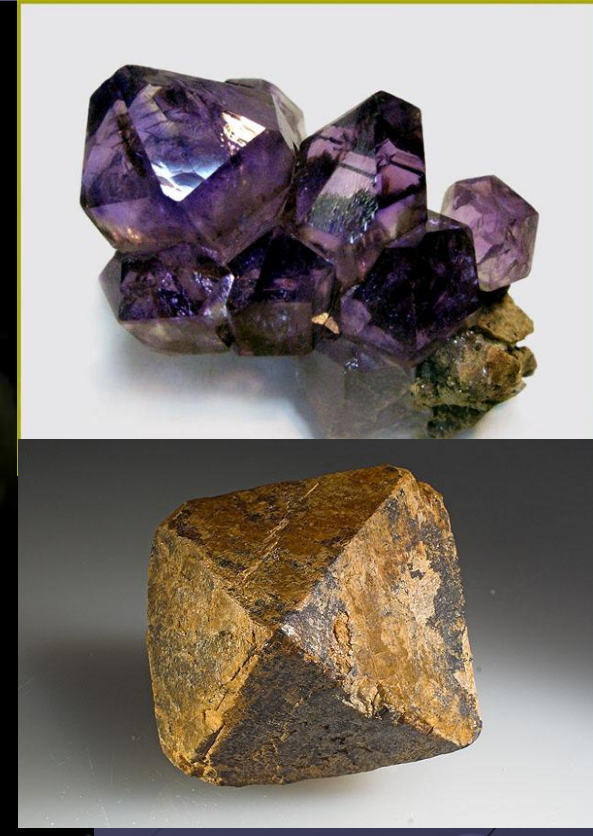
- Плоскогранность и прямореберность
- Постоянство граничных углов
- Рациональное отношение осевых отрезков
- Развитие форм
- Допустимая симметрия

1. Плоскогранность и прямореберность



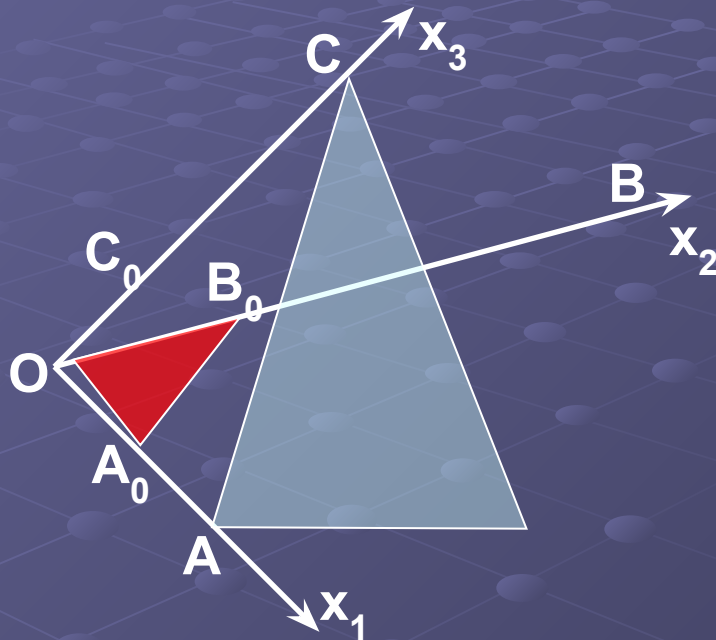
Грани кристалла являются плоскостями,
а ребра - прямыми линиями.

2. Постоянство граничных углов



Углы между гранями и ребрами постоянны для всех кристаллов данного типа.

3. Закон рациональных отношений



ABC – грань кристалла
A₀B₀C₀ – единичная грань

$$\frac{OA \cdot OB \cdot OC}{OA_0 \cdot OB_0 \cdot OC_0} = p:q:r$$

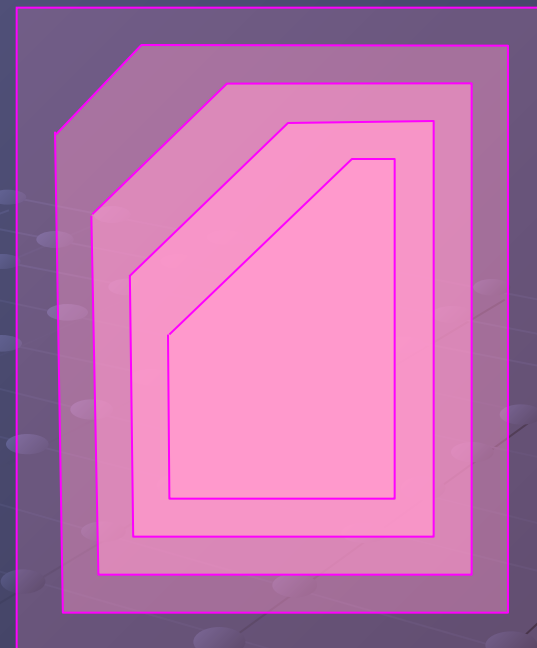
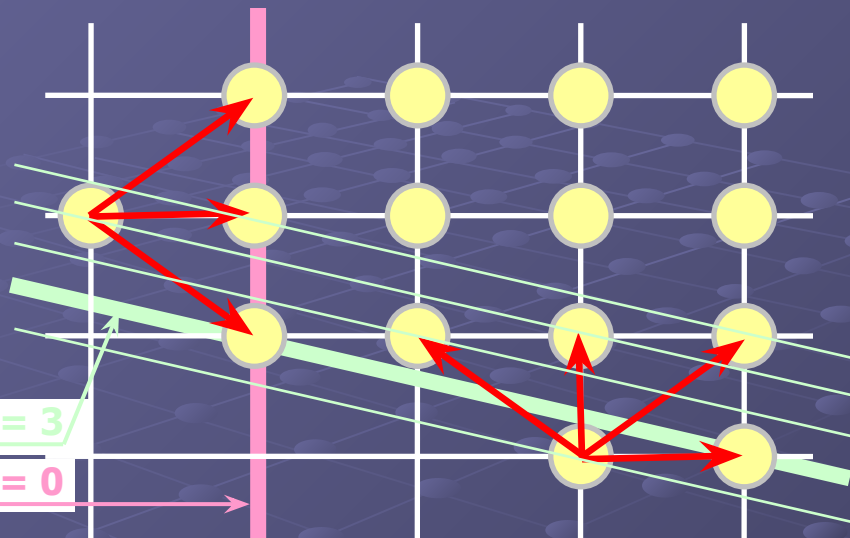
p, q, r – параметры граней

$$\frac{1 \cdot 1 \cdot 1}{p \cdot q \cdot r} = h:k:l$$

h, k, l – индексы граней

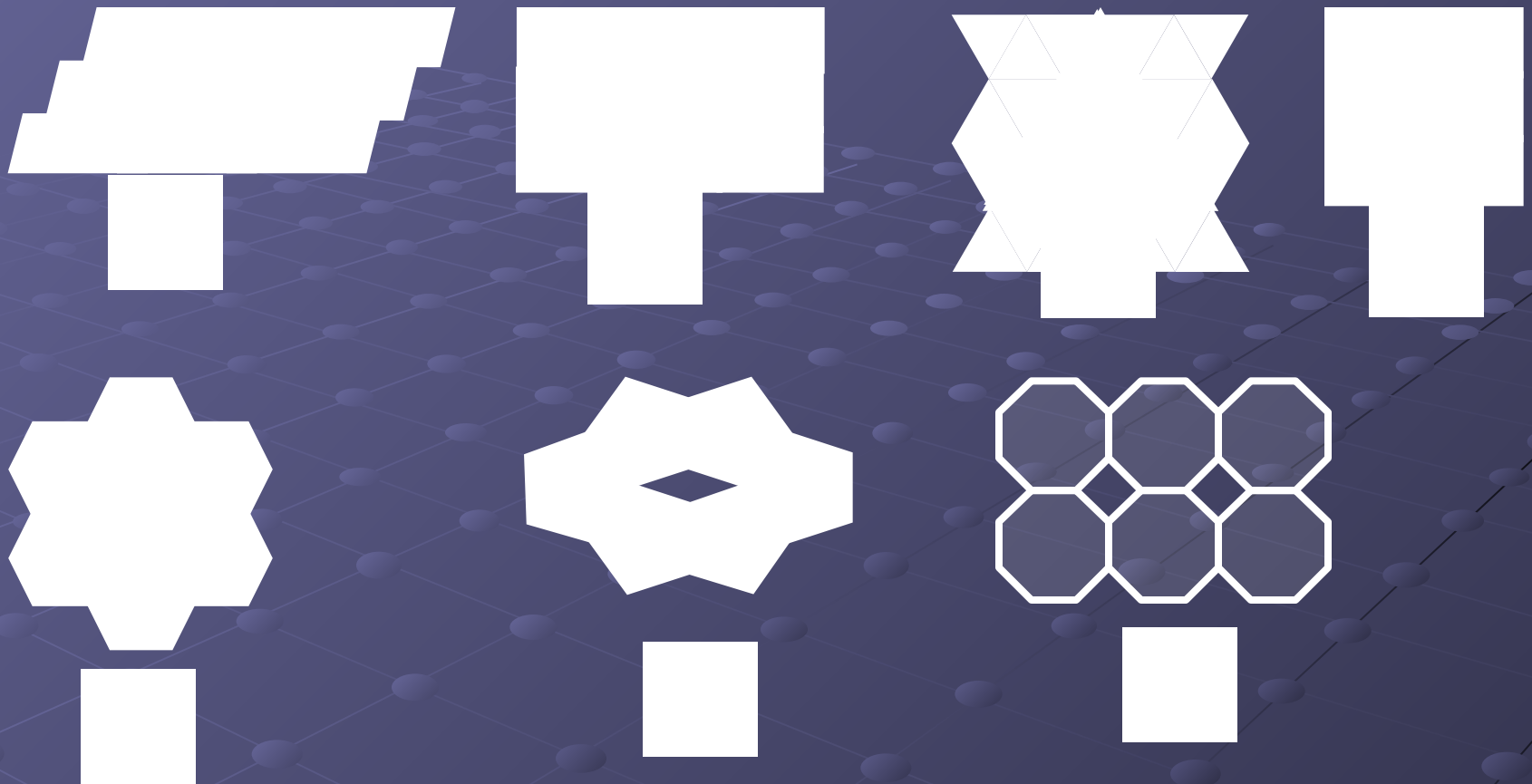
Отрезки, отсекаемые гранями кристалла на осях координат, относятся между собой как целые числа.

4. Закон развития форм



При естественном росте грани кристалла имеют малые индексы.

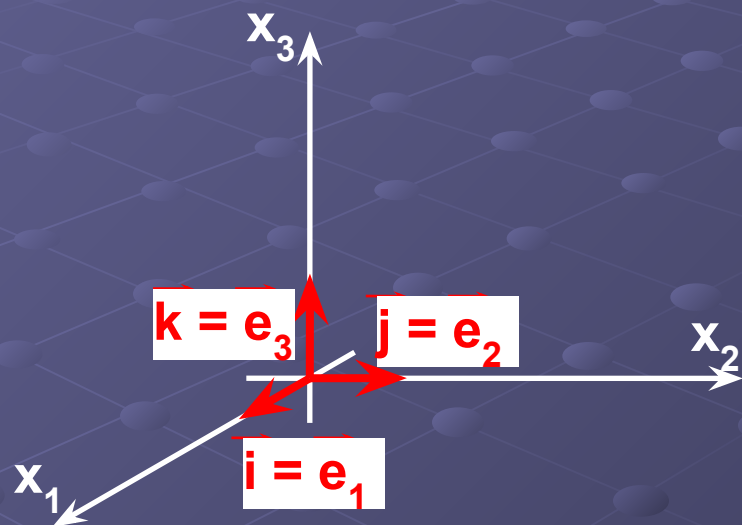
5. Закон симметрии



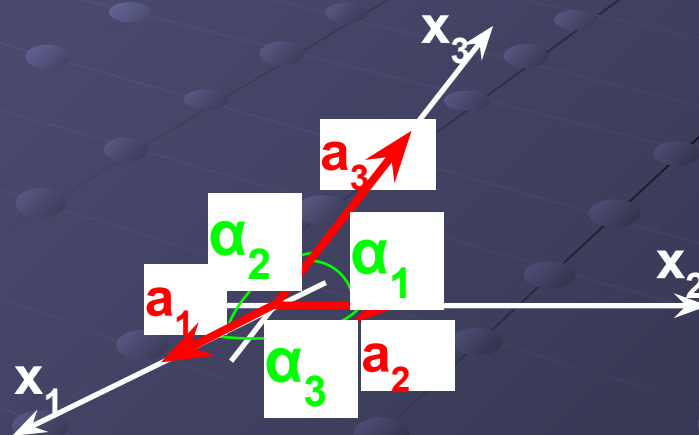
Покрытие плоскости одинаковыми фигурами возможно только при помощи параллелограмма, прямоугольника, равностороннего треугольника, квадрата и правильного шестиугольника, обладающих соответственно осями симметрии 2, 3, 4 и 6 порядков.

Кристаллографические системы координат (сингонии)

Физическая система координат

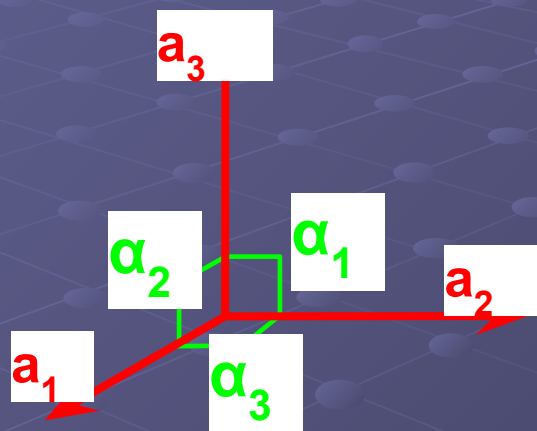


Кристаллографическая система координат



$$\overset{\vee}{e}_i \cdot \overset{\vee}{e}_j = \delta_{ij}$$

1. Кубическая сингония



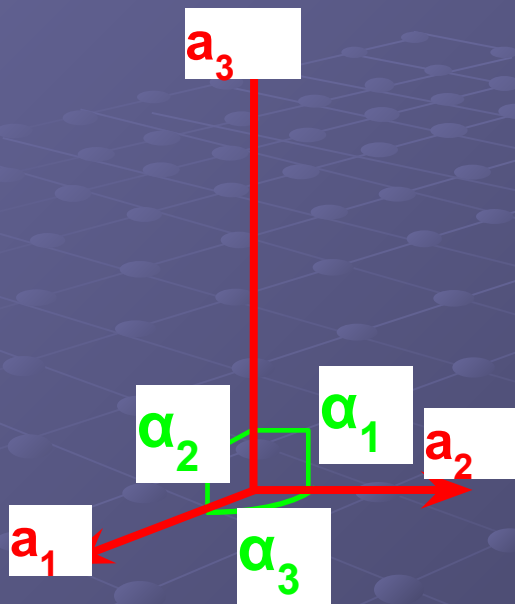
$$\overline{a}_1 = \overline{a}_2 = \overline{a}_3$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$$



Пирит (FeS₂)

2. Гексагональная сингония



$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| \neq |\vec{a}_3|$$

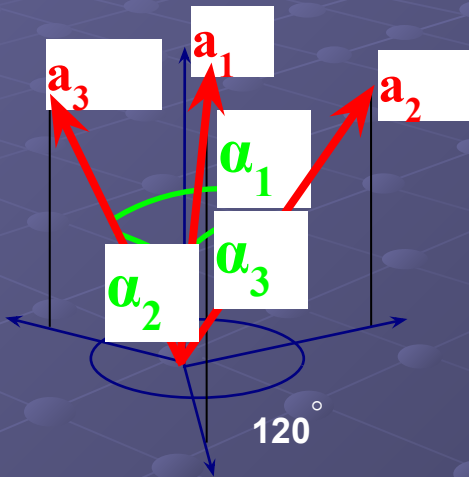
$$\alpha_1 = \alpha_2 = 90^\circ$$

$$\alpha_3 = 120^\circ$$



Берилл

3. Тригональная (ромбоэдрическая) сингония



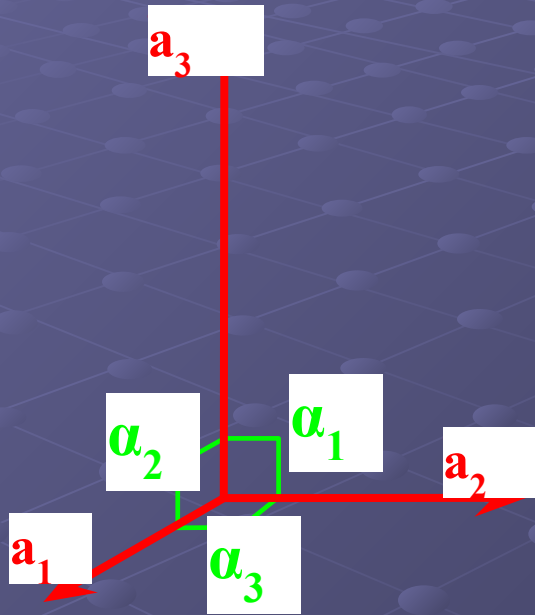
$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3|$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 \neq 90^\circ$$



Кварц (горный хрусталь SiO_2)

4. Тетрагональная сингония

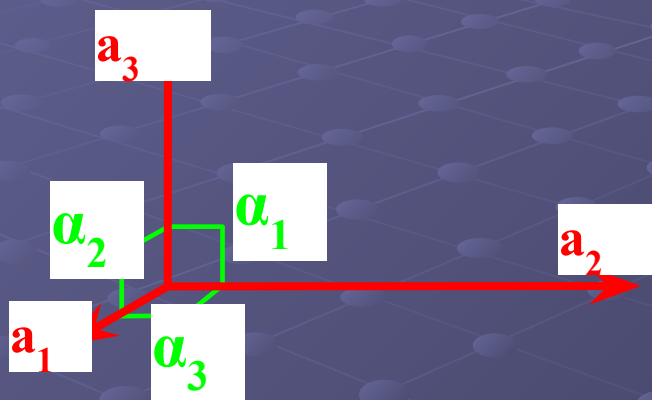


Везувиан

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| \neq |\vec{a}_3|$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$$

5. Ромбическая сингония

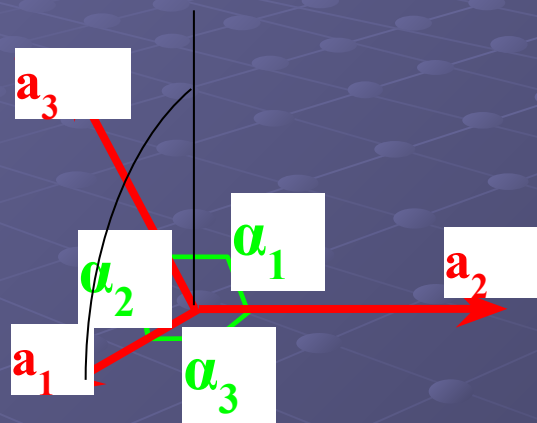


$$|a_1| \neq |a_2| \neq |a_3|$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$$

Серa

6. Моноклинная сингония



$$|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2| \neq |\vec{a}_3|$$

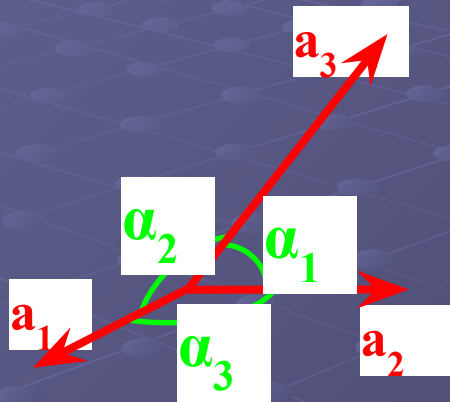
$$\alpha_1 = \alpha_3 = 90^\circ$$

$$\alpha_2 \neq 90^\circ$$



Реальгар (AsS)

7. Триклинная сингония



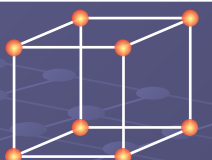
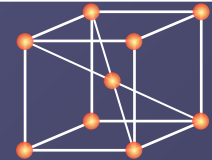
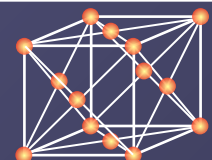


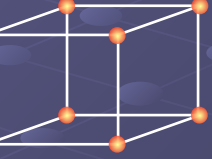
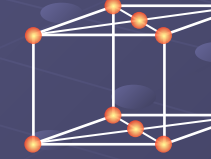
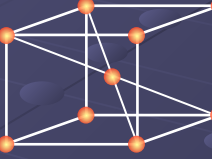
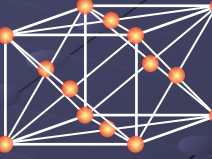


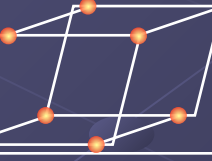
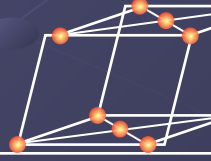

$$|\overline{a}_1| \neq |\overline{a}_2| \neq |\overline{a}_3|$$

$$\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \alpha_3$$

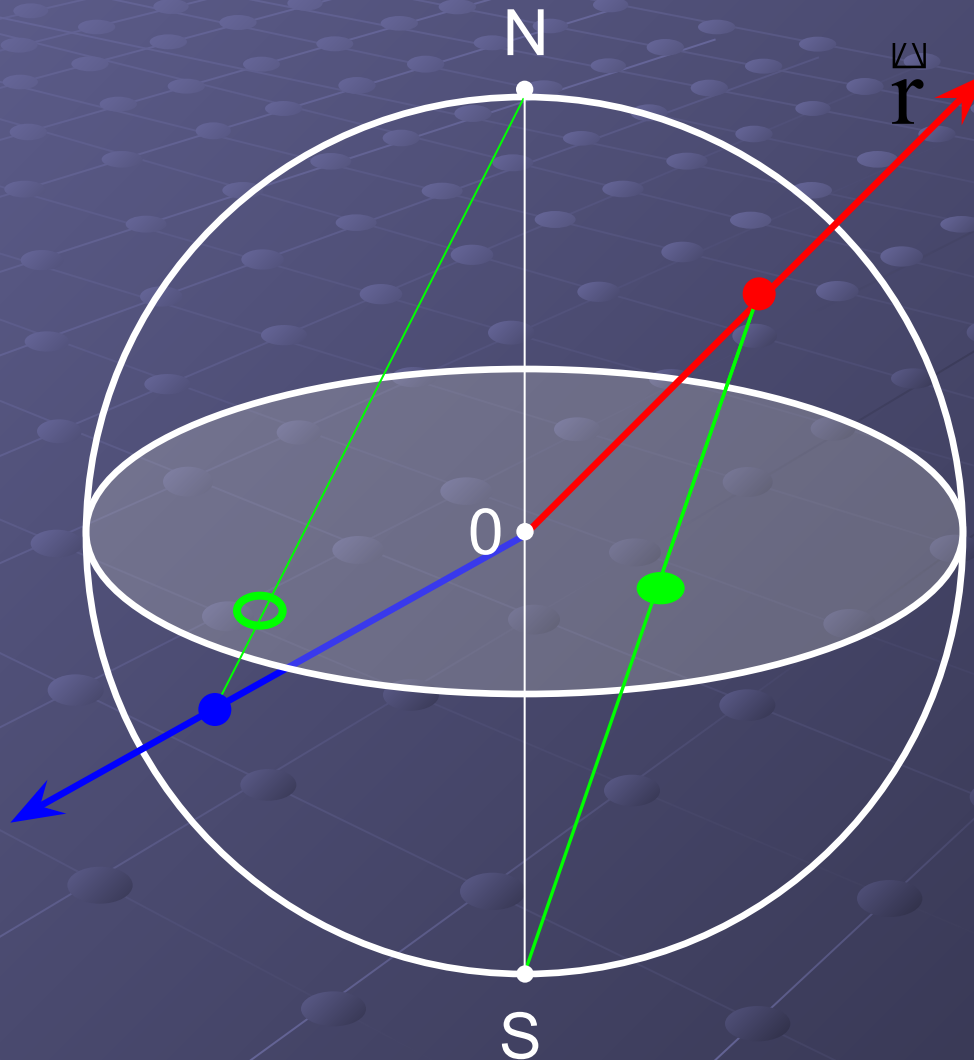


Амазонит

Элементарные ячейки Браве

		Р	С	І	F
1.	кубическая				
2.	тетрагональная				
3.	ромбическая				
4.	гексагональная				
5.	ромбоэдрическая				
6.	моноклинная				
7.	триклинная				

Стереографическая проекция



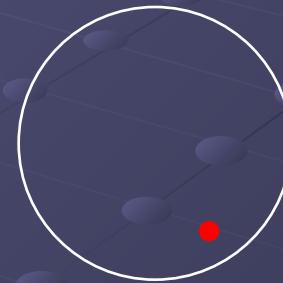
Точечная симметрия кристаллической среды

Кристаллографические группы с операторами собственных поворотов

I. Циклические группы

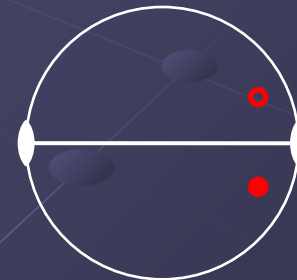
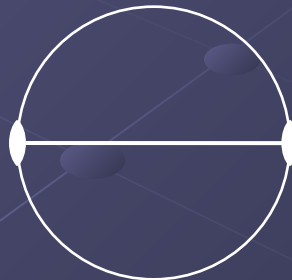
$$C_n = n = \{ \hat{E}, \hat{n}, \hat{n}^2, \dots, \hat{n}^{n-1} \}$$

1. $C_1 = 1 = \{ \hat{E} \}$



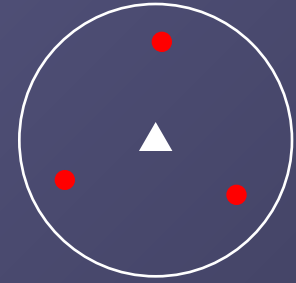
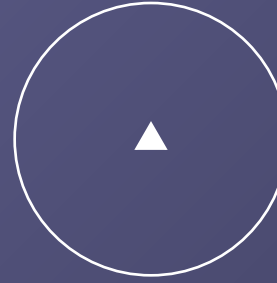
1

2. $C_2 = 2 = \{ \hat{E}, \hat{2}_y \}$



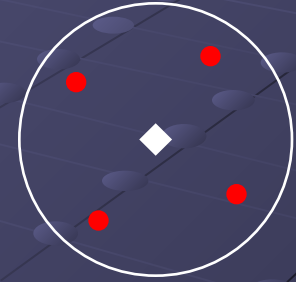
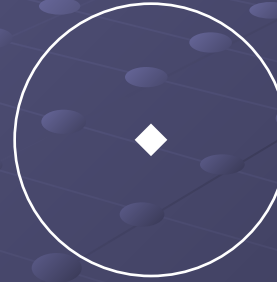
2

$$3. \quad C_3 = 3 = \{\hat{E}, \hat{3}_z, \hat{3}_z^2\} = \{\hat{E}, \hat{3}_z, \hat{3}_z^{-1}\}$$



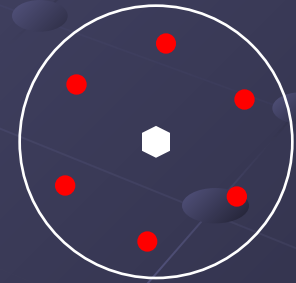
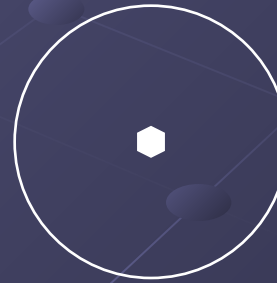
3

$$4. \quad C_4 = 4 = \{\hat{E}, \hat{4}_z, \hat{4}_z^2, \hat{4}_z^3\} = \{\hat{E}, \hat{4}_z, \hat{4}_z^{-1}, \hat{2}_z\}$$



4

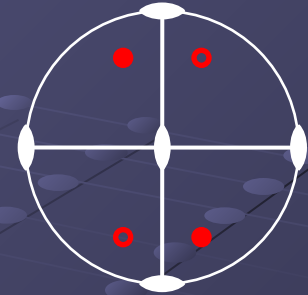
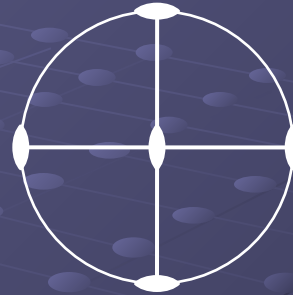
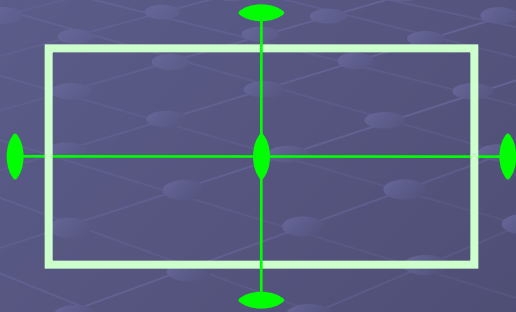
$$5. \quad C_6 = 6 = \{\hat{E}, \hat{6}_z, \hat{6}_z^2, \hat{6}_z^3, \hat{6}_z^4, \hat{6}_z^5\} = \{\hat{E}, \hat{6}_z, \hat{6}_z^{-1}, \hat{3}_z, \hat{3}_z^{-1}, \hat{2}_z\}$$



6

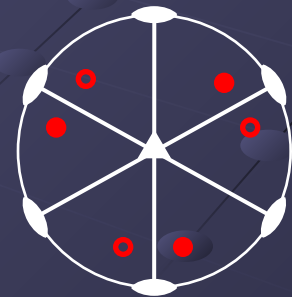
II. Группы диэдра $D_n = n22 = \left\{ \hat{E}, \hat{n}_z, \hat{n}_z^2, \dots, \hat{n}_z^{n-1}, \hat{2}_x, \dots \right\}$

6. $D_2 = 222 = \left\{ \hat{E}, \hat{2}_z, \hat{2}_x, \hat{2}_y \right\}$



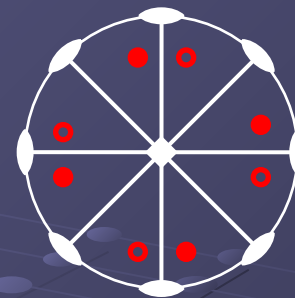
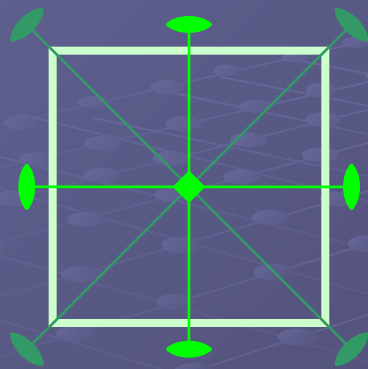
222

7. $D_3 = 32 = \left\{ \hat{E}, \hat{3}_z, \hat{3}_z^{-1}, \hat{2}_x, \hat{2}_y, \hat{2}_{xy} \right\}$



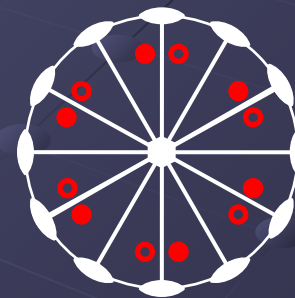
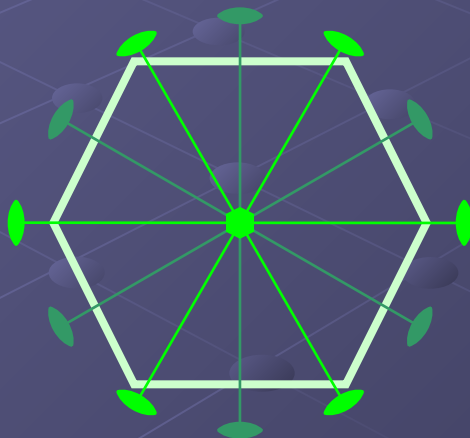
32

8. $D_4 = 422 = \{ \hat{E}, \hat{4}_z, \hat{4}_z^{-1}, \hat{2}_z, \hat{2}_x, \hat{2}_y, \hat{2}_{xy}, \hat{2}_{\bar{xy}} \}$



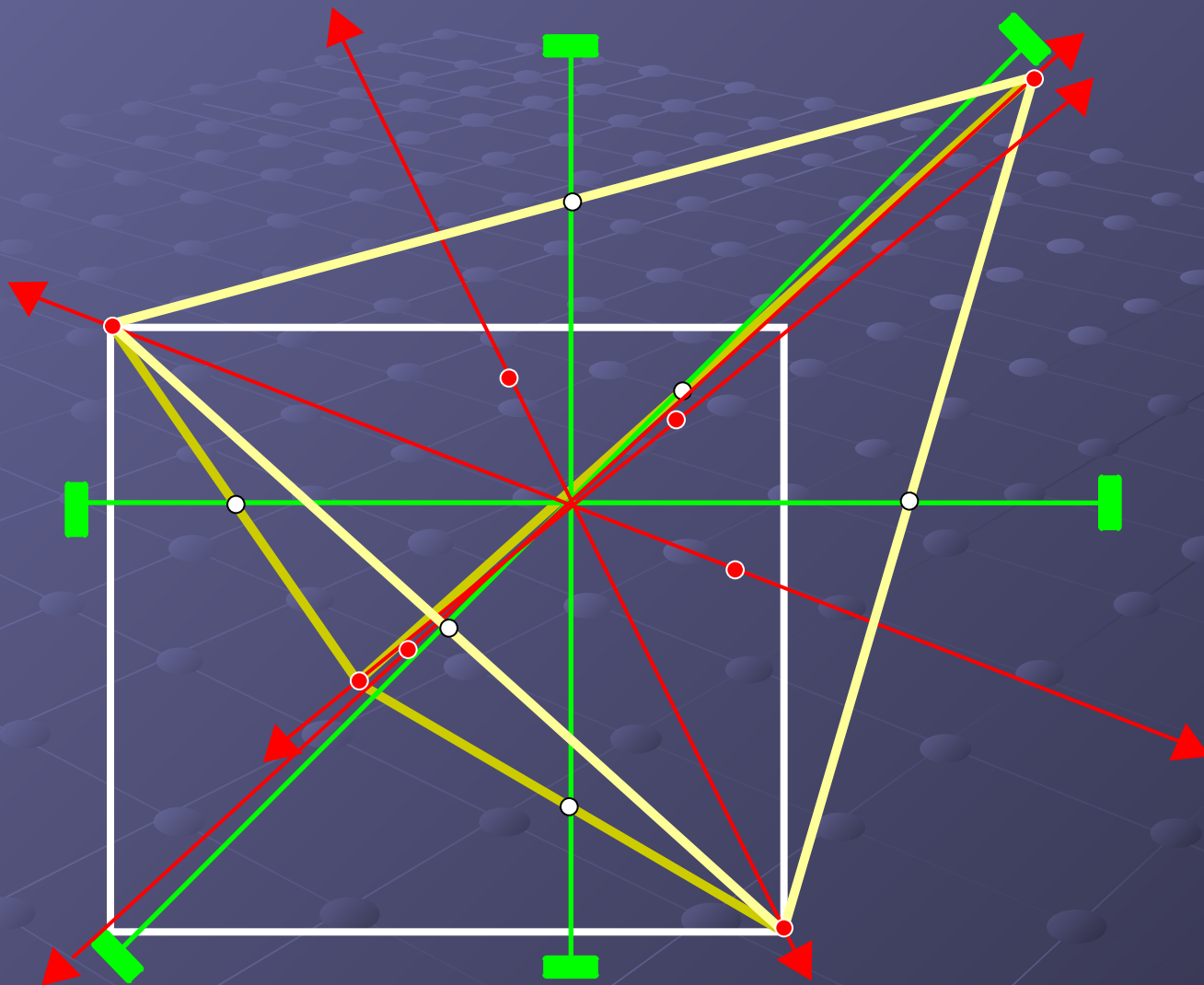
422

9. $D_6 = 622 = \{ \hat{E}, \hat{6}_z, \hat{6}_z^{-1}, \hat{3}_z, \hat{3}_z^{-1}, \hat{2}_z, \hat{2}_x, \hat{2}_y, \hat{2}_{xy}, \hat{2}_I, \hat{2}_{II}, \hat{2}_{III} \}$

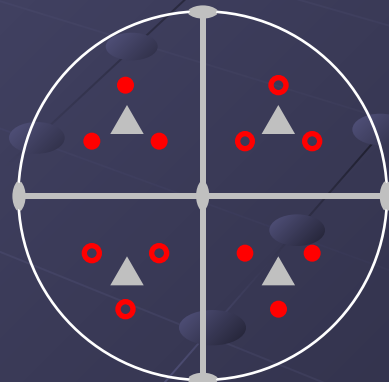


622

III. Группа тетраэдра

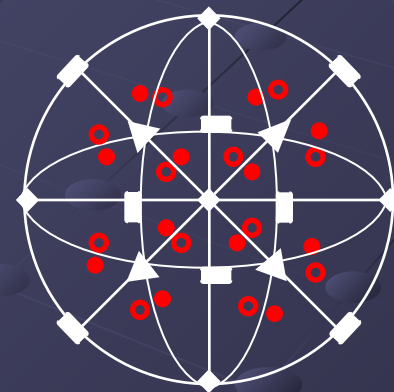
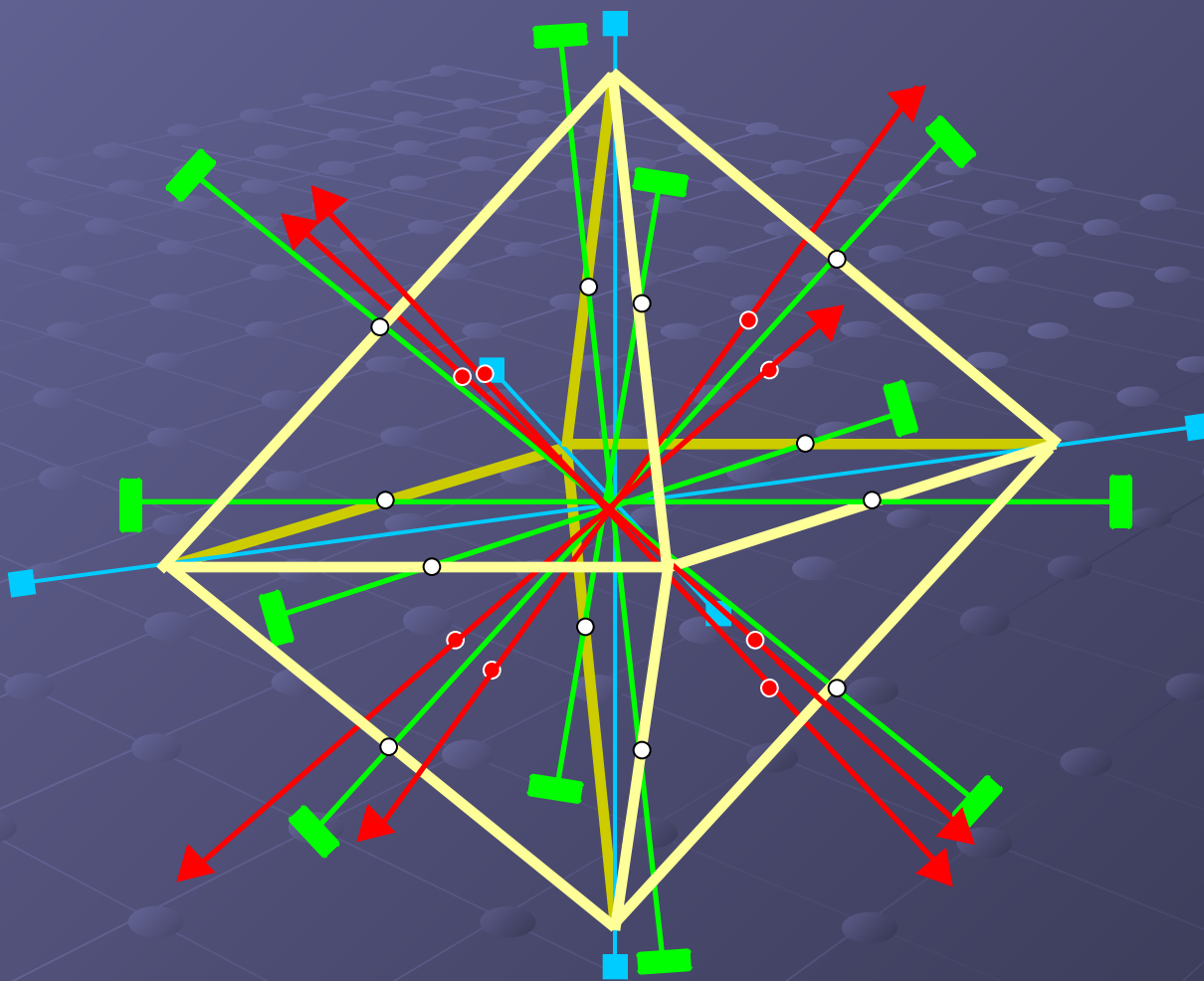


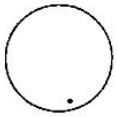
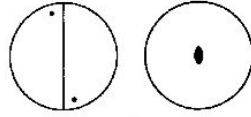
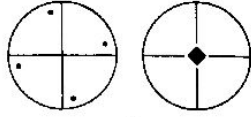
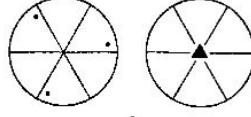
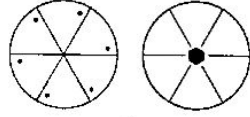
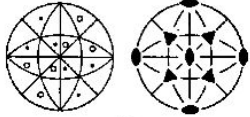
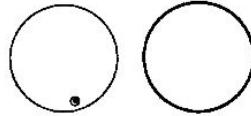
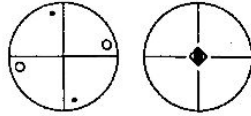
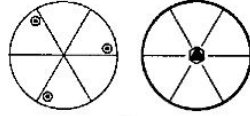
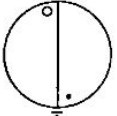
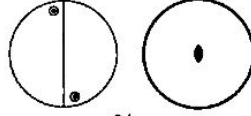
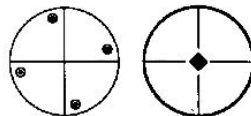
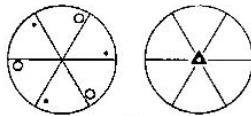
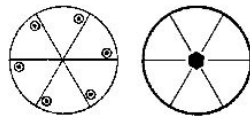
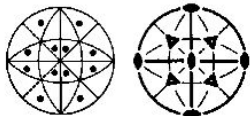
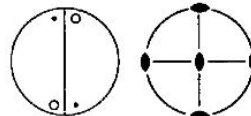
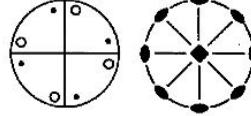
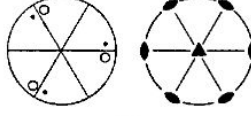
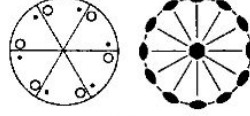
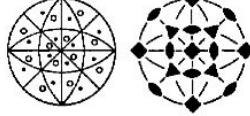
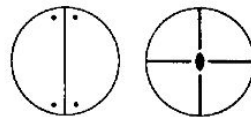
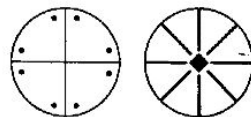
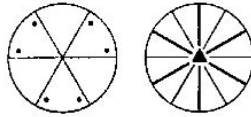
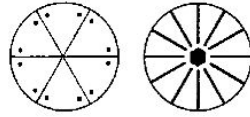
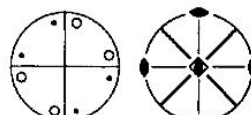
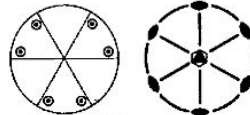
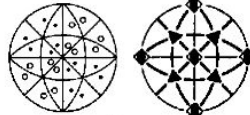
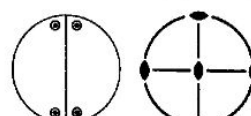
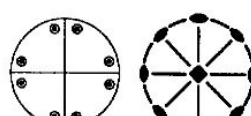
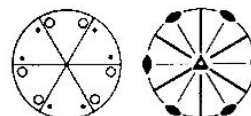
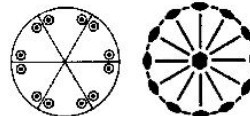
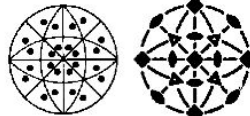
$T = 23$










IV. Группа октаэдра

O = 432



Triclinic	Monoclinic	Tetragonal	Trigonal	Hexagonal	Cubic
 1	 2	 4	 3	 6	 23
—	 $m(-\bar{2})$	 4	—	 6	—
 1	 $2/m$	 $4/m$	 3	 $6/m$	 $m\bar{3}$
Orthorhombic					
	 222	 422	 32	 622	 432
	 $2mm$	 $4mm$	 $3m$	 $6mm$	—
	—	 $42m$	—	 $6m\bar{2}$	 $43m$
	 mmm	 $4/mmm$	 $3m$	 $6/mmm$	 $m\bar{3}m$

Пределные группы симметрии

1.	$C_n \rightarrow C_\infty = \infty$	
2.	$C_{nv} \rightarrow C_{\infty v} = \infty m$	
3.	$C_{nh} \rightarrow C_{\infty h} = \frac{\infty}{m}$	
4.	$D_n \rightarrow D_\infty = \infty 2$	
5.	$D_{nh} \rightarrow D_{\infty h} = \frac{\infty}{m} m$	
6.	$T \rightarrow T_\infty = \infty \infty$	
7.	$T_h \rightarrow T_{\infty h} = \infty \infty m$	

Пространственные группы симметрии

$$\underline{\hat{r}} = \hat{S} \underline{r}$$

$$\hat{S} = \left(\hat{R} \mid \underline{\hat{T}} \right)$$

$$\hat{S}_t = \left(\hat{E} \mid \underline{\hat{T}} \right)$$

$$\hat{S}_r = \left(\hat{R} \mid \underline{\hat{0}} \right)$$

$$\hat{S} = \left(\hat{n} \mid \underline{\hat{t}} \right)^n$$

Оператор винтового перемещения

$$\hat{S} = \left(\hat{n} \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{t} \end{array} \right. \right)_n$$

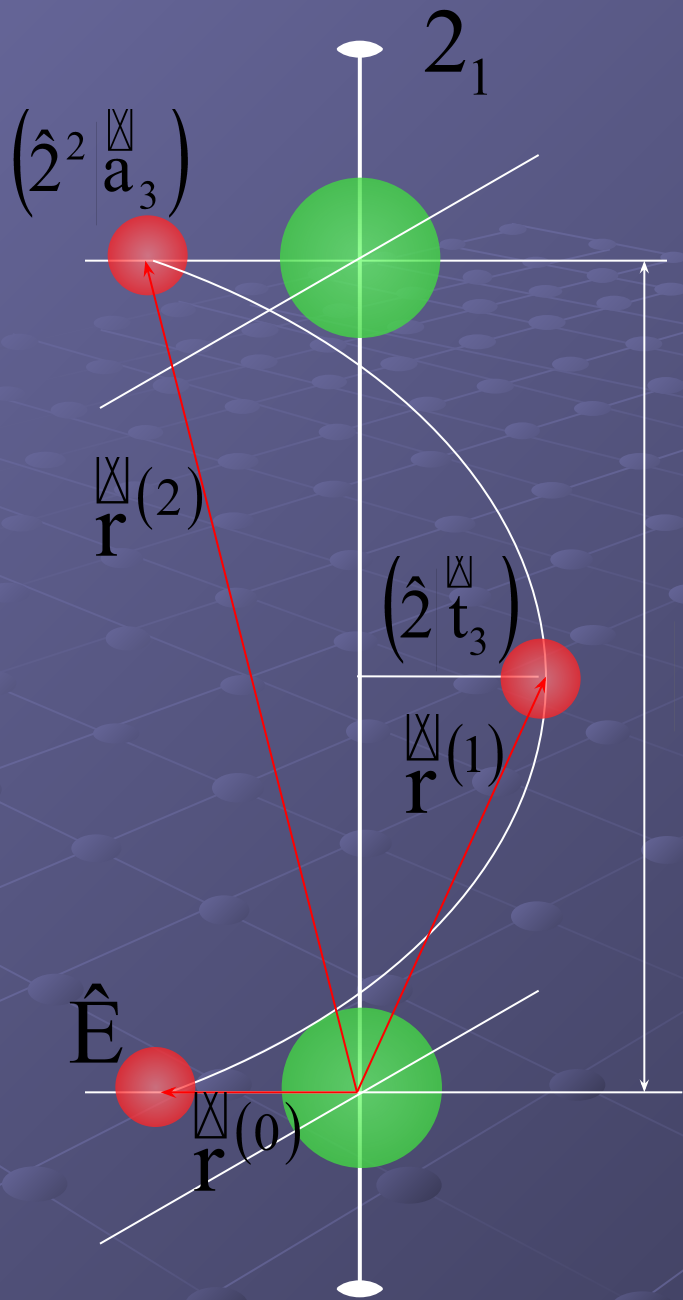
$$\left(\hat{n} \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{t} \end{array} \right. \right)_n = \left(\hat{E} \hat{n}^{(n-1)} \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{t} \end{array} \right. + \hat{n}^{(n-2)} \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{t} \end{array} \right. + \dots + \hat{n} \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{t} \end{array} \right. + \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{t} \end{array} \right. \right)$$

$$\left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{t} \end{array} \right. = (00t_3)$$

$$\hat{n} \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{t} \end{array} \right. = \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{a}_3 \end{array} \right.$$

$$\mathbf{t}_3 = \left| \begin{array}{c} \boxtimes \\ \mathbf{a}_3 \end{array} \right.$$

$$n$$



$$\varphi_n = \frac{360^\circ}{n}$$

$$a_3 = J$$

$$t = \frac{s}{n} \cdot J \quad s < n$$

$$\hat{n}_s$$

$$\frac{s}{n} < \frac{1}{2}$$

правовращающий

$$\frac{s}{n} > \frac{1}{2}$$

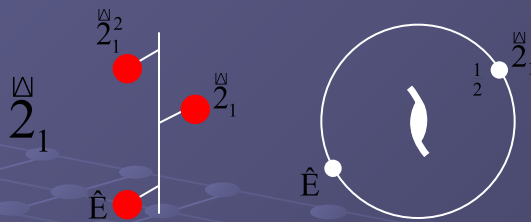
левообрацающий

Правые

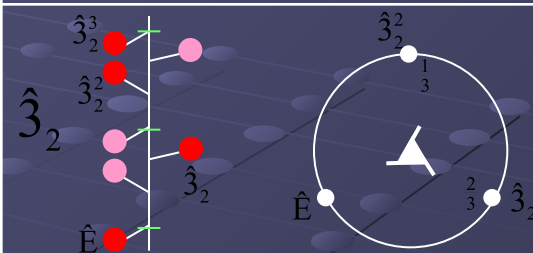
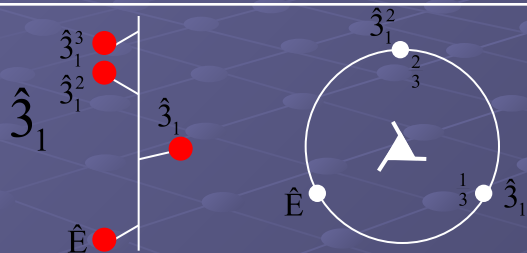
Неподвижные

Левые

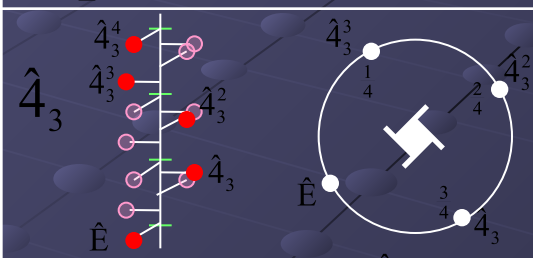
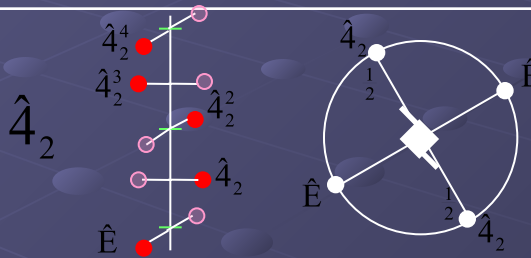
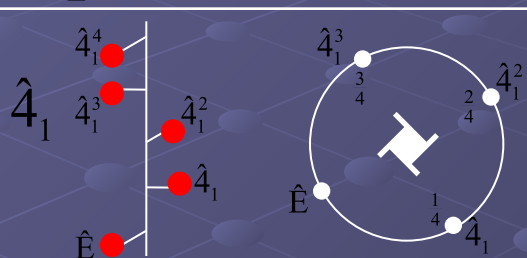
2



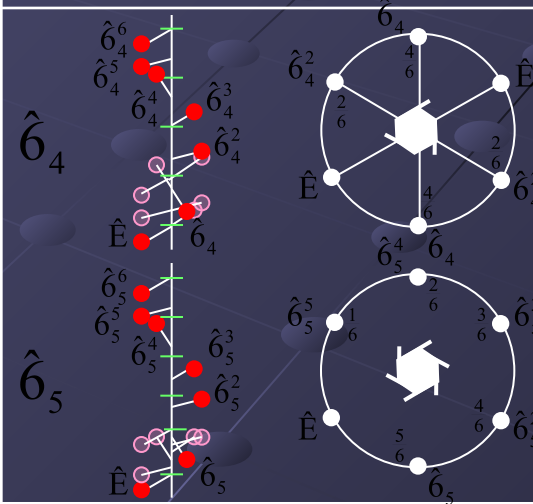
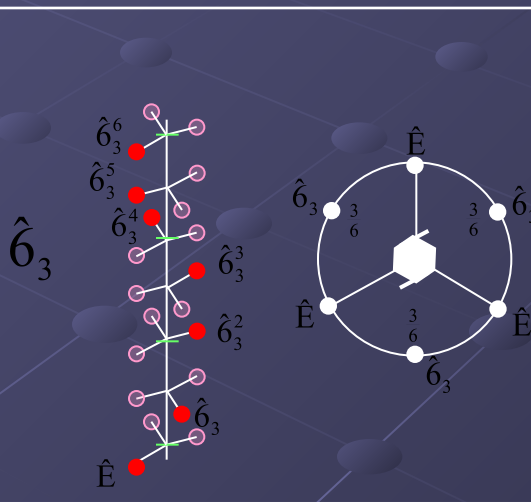
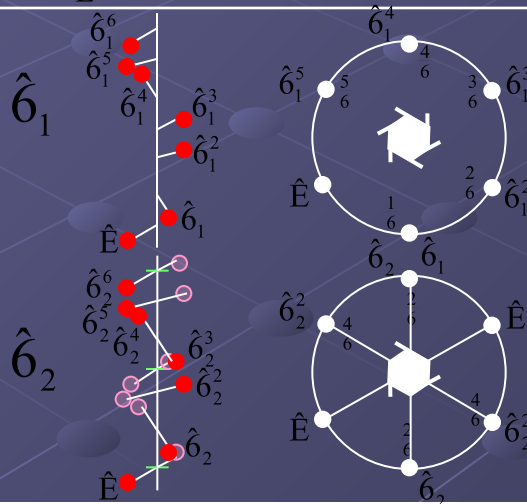
3



4



6



Плоскость скользящего отражения

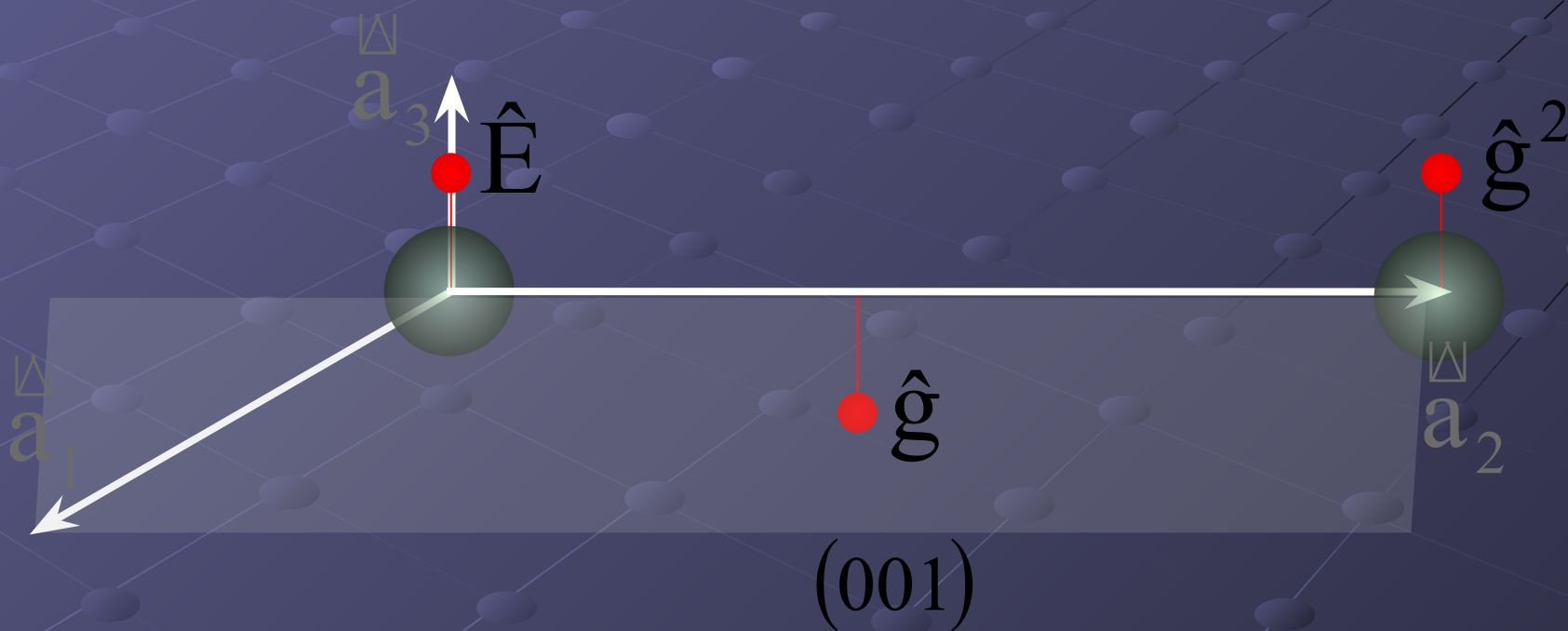
$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{R} & \hat{\Delta} \\ \hat{T} & \hat{\Gamma} \end{pmatrix}$$







$$\hat{R} = \hat{m}$$

$$\hat{m}^2 = \hat{E}$$

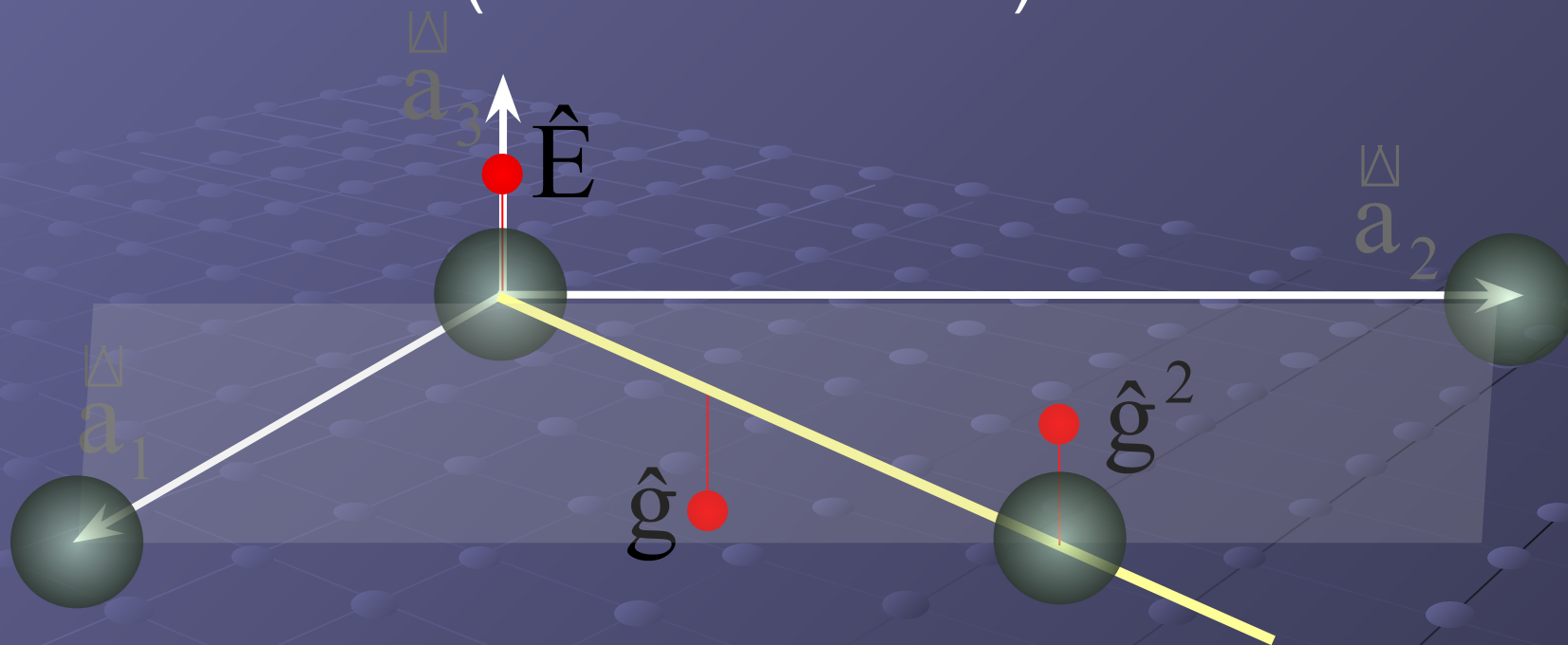
$$\hat{g} = \begin{pmatrix} \hat{m} & \hat{\Delta} \\ \hat{T} & \hat{\Gamma} \end{pmatrix}$$

$$\hat{\Delta} \hat{T} = \frac{1}{2} \mathbf{J}$$



$\frac{1}{2}t$	обозначение	проекция	
		вертикальная	горизонтальная
$\left(\frac{1}{2} 00\right)$	a		
$\left(0 \frac{1}{2} 0\right)$	b		
$\left(00 \frac{1}{2}\right)$	c		

Диагональные плоскости скользящего отражения (клиноплоскости)



t	обозначение	проекция	
		вертикальная	горизонтальная
$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	n		
$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 4 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	d		

Основные типы кристаллических структур

Структуры металлов

1. Структура меди
ГЦК ($Fm\bar{3}m$)

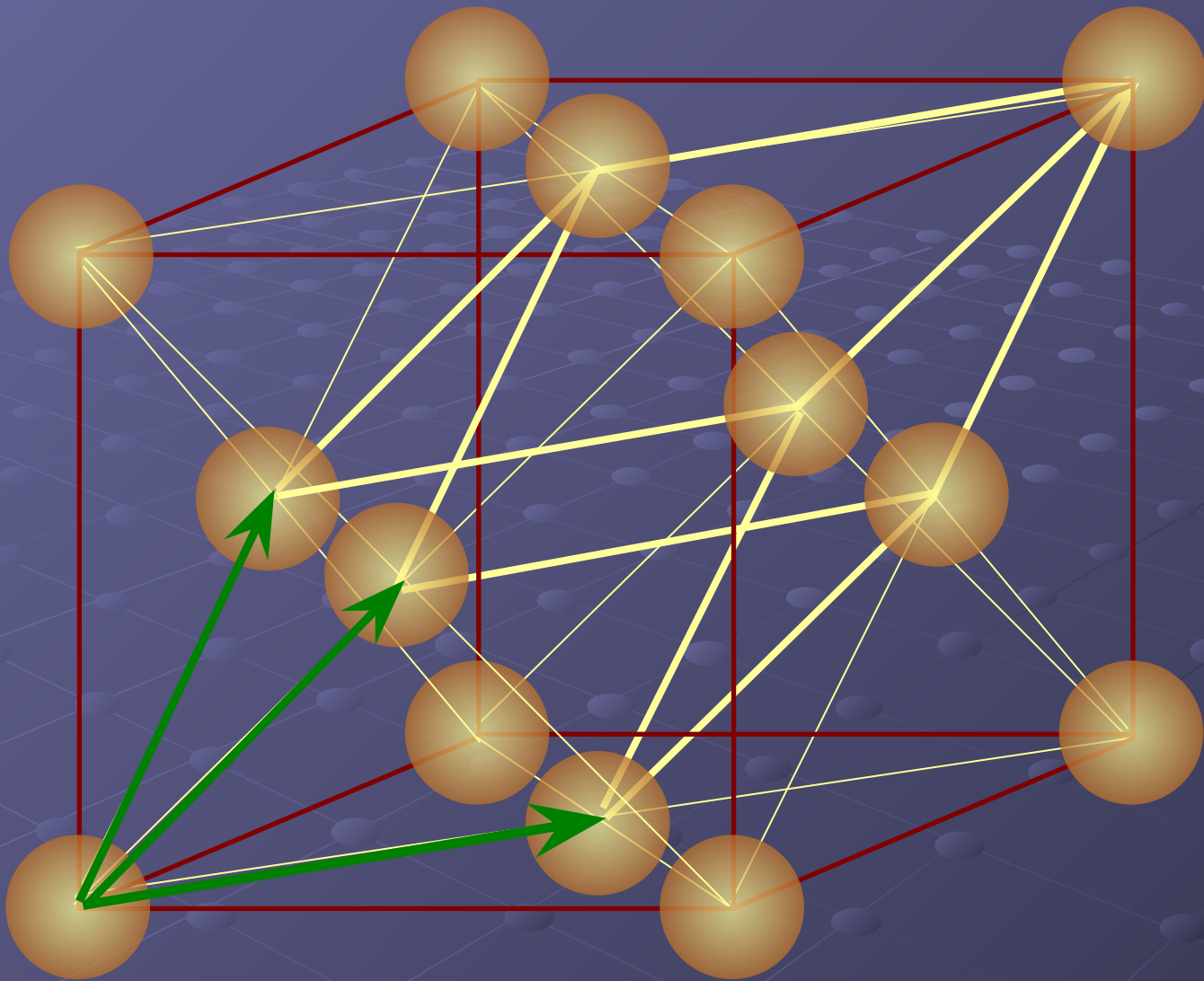


Cu Ag Au

Al Pb

Co Ni Rh Pd Ir Pt

Ne Ar Kr Xe

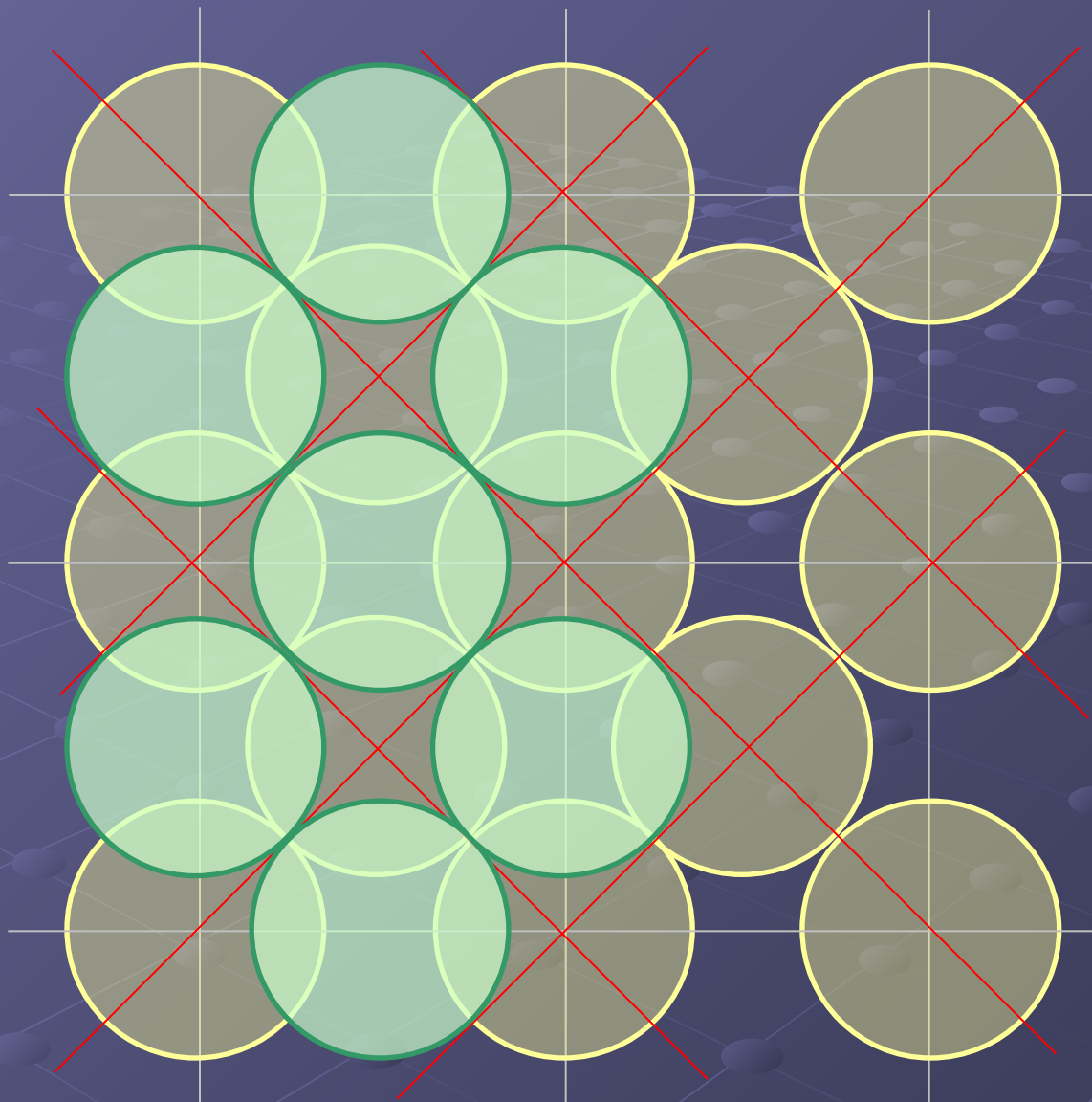


$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

K.ч. = 12

$$R = \frac{a}{2\sqrt{2}}$$

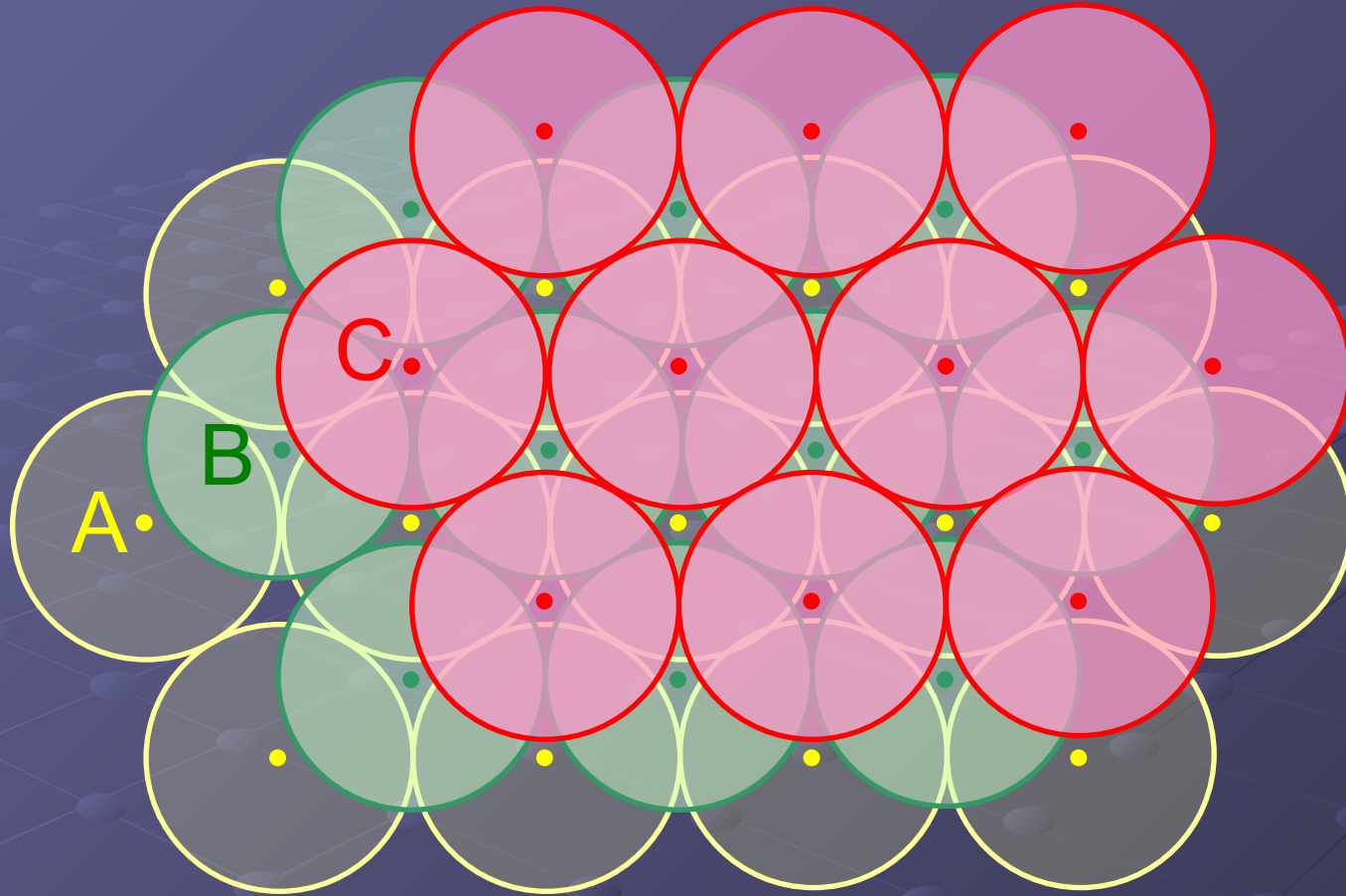
$\{100\}$



$$\begin{aligned} k &= \frac{V_{\sigma}}{V_{\dot{y}}} = \\ &= \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \\ &= \frac{16\pi a^3}{3a^3 \cdot 8 \cdot 2\sqrt{2}} = \\ &= \frac{\pi\sqrt{2}}{6} \end{aligned}$$

$$k \approx 0.74$$

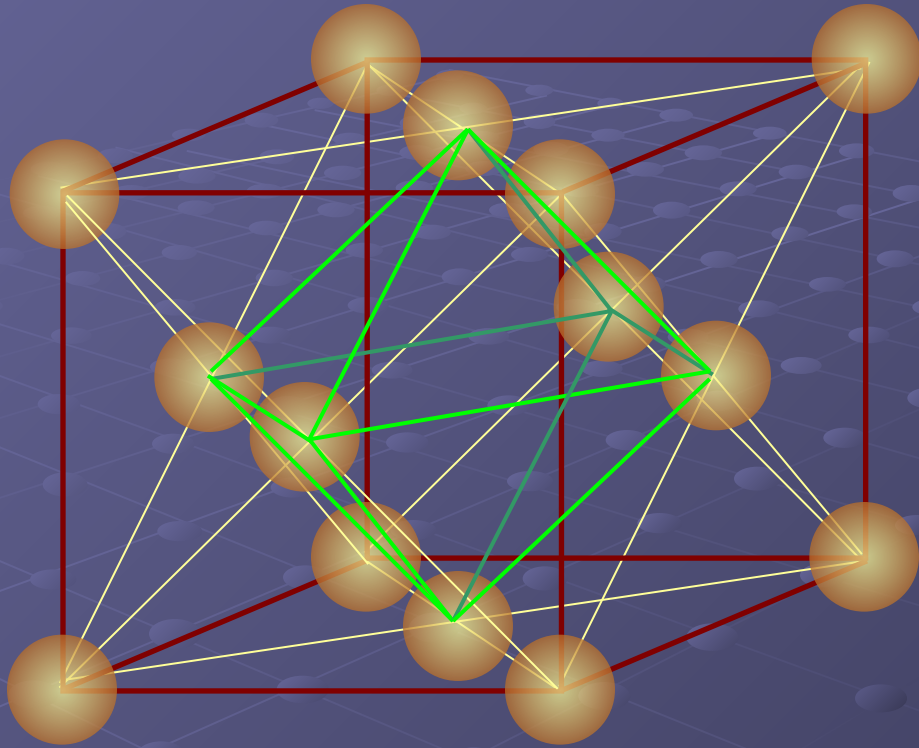
$\{111\}$



ABCA3BCAB

ACBACBACB

Междоузлия



октаэдрические

$$\left[\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 1 & & 0 \\ 2 & & 0 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 0 & 1 & 0 \\ & 2 & 0 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 0 & & 1 \\ & & 2 \end{array} \right]$$

$$r = \left(\sqrt{2} - 1 \right) \cdot R$$

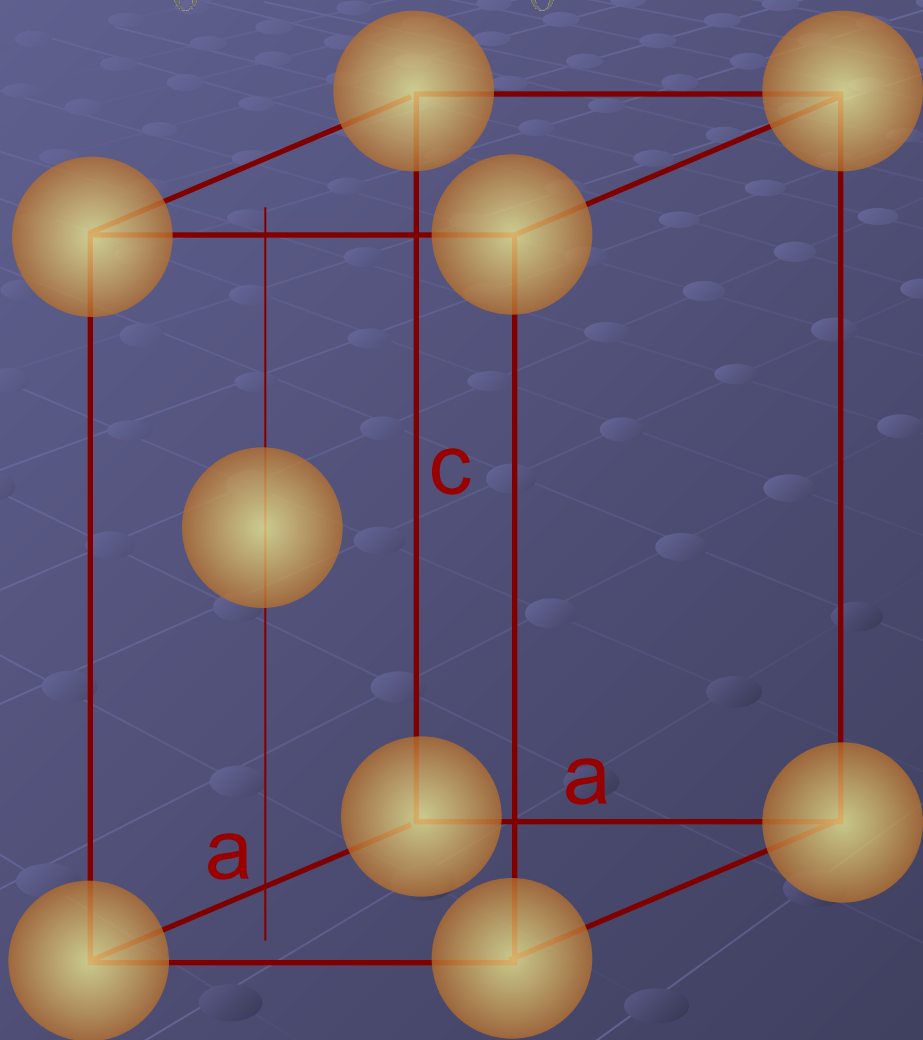
тетраэдрические

$$\left[\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 4 & 4 \end{array} \right]$$

$$r = \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \right) \cdot R$$

2. Структура магния ГПУ ($P6_3/mmc$)

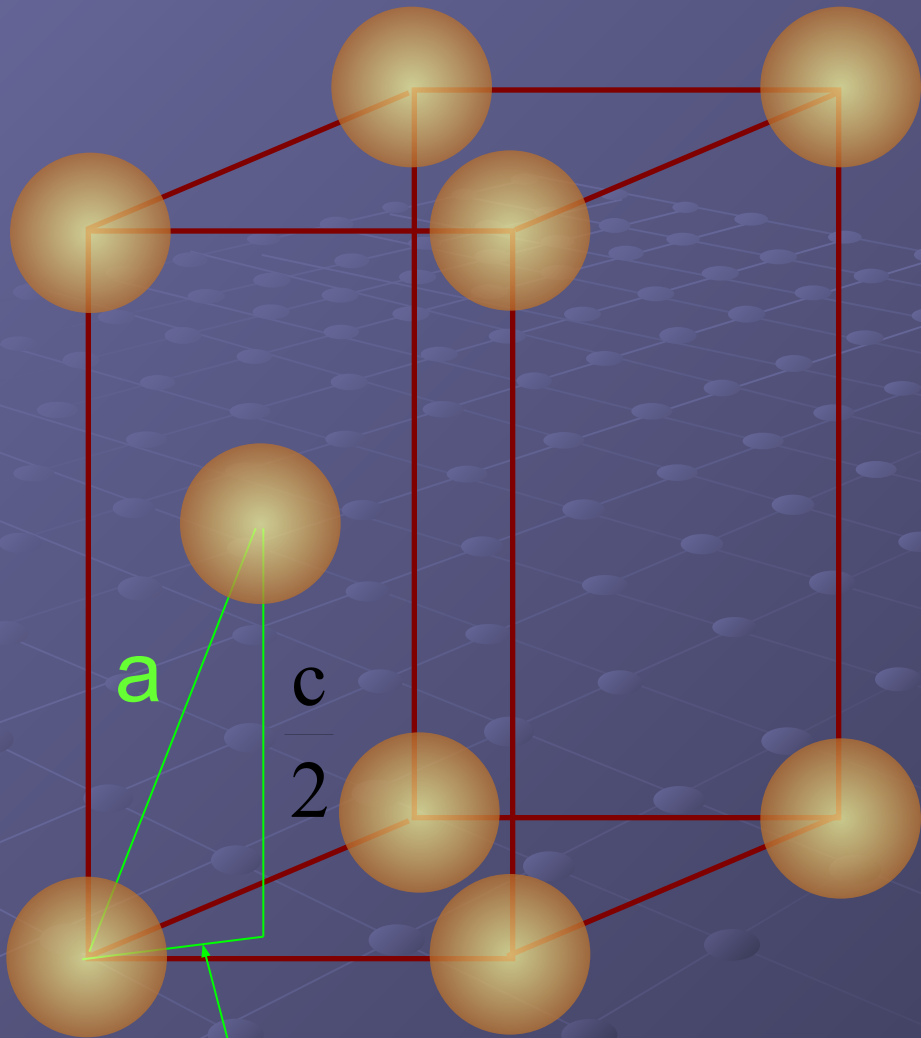
$$D_6 \longrightarrow D_6 \times I \equiv 6/mmm \longrightarrow 6_3/mmc$$



Sc Ti Yt Zr
Be Mg Zn Cd

$$[[000]]$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 \end{array} \right]$$



$$\left(\frac{c}{2}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{3}}{3}\right)^2 = a^2$$

$$c = \sqrt{\frac{8}{3}}a \approx 1.633a$$

$$K.ч. = 12$$

$$k = 0.74$$

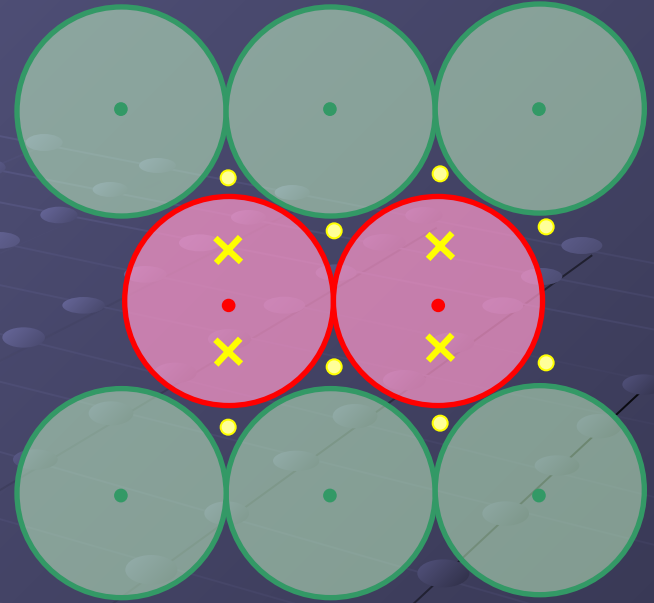
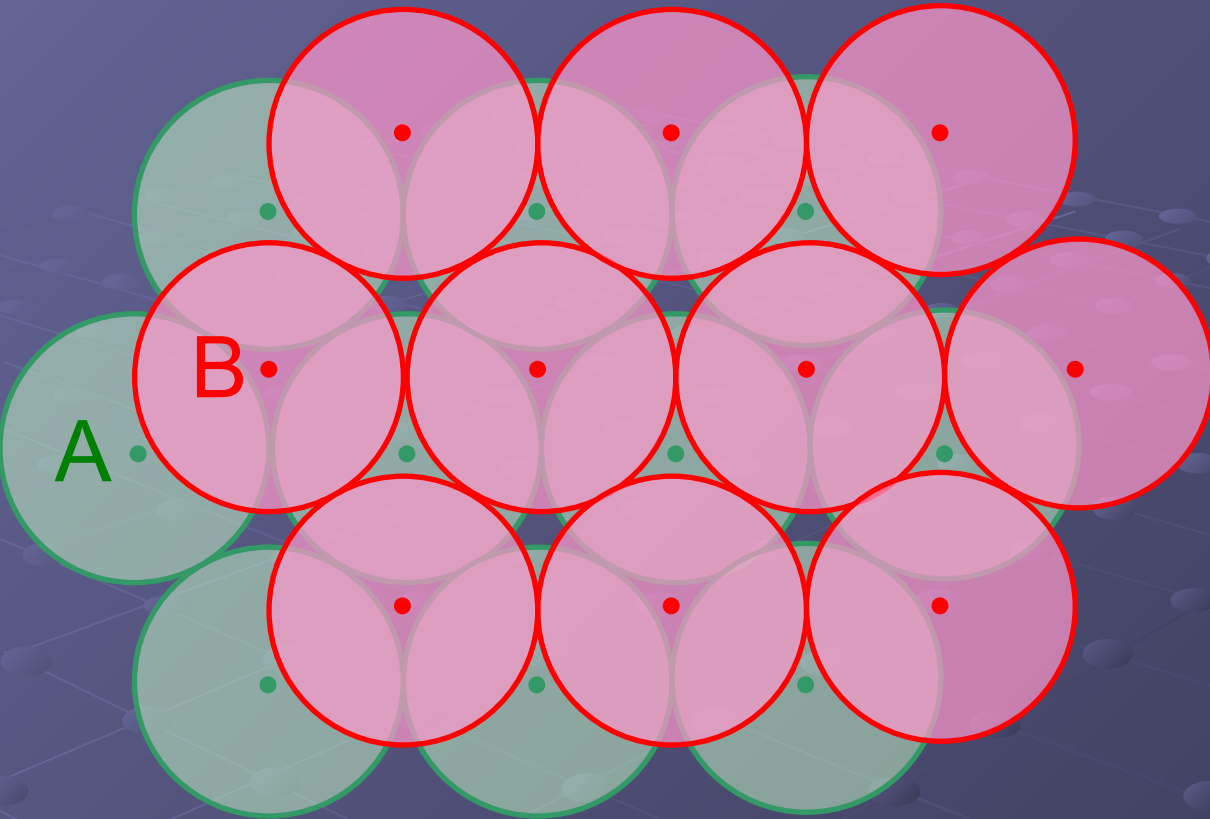
Cd: 1.886

Mg: 1.623

Be: 1.567

$$\sqrt{2 \cdot \left(\frac{a}{3}\right)^2 - 2 \cdot \left(\frac{a}{3}\right)^2 \cdot \cos 120^\circ} = \frac{a\sqrt{3}}{3}$$

$\{0001\}$



ABABAB

ACACAC

$$\left[\begin{array}{ccc} 1 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 4 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 4 \end{array} \right]$$

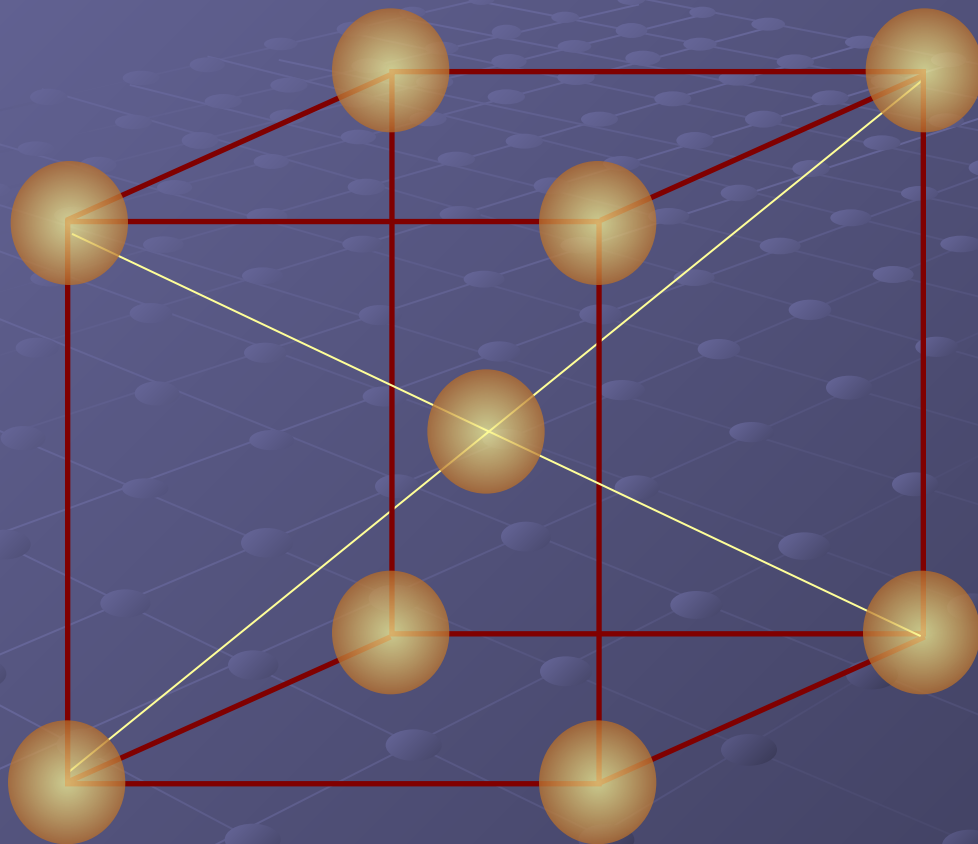
$$\left[\begin{array}{ccc} 00 & 3 & \\ 8 & & \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 00 & 5 & \\ 8 & & \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 8 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 2 & 1 & 7 \\ 3 & 3 & 8 \end{array} \right]$$

3. Структура вольфрама ОЦК ($Im\bar{3}m$)



Li Na K Pb Cs
V Cr Nb Mo Ta W
Fe (при $T < 900^\circ$ и $> 1400^\circ$)

$$K.ч. = 8$$

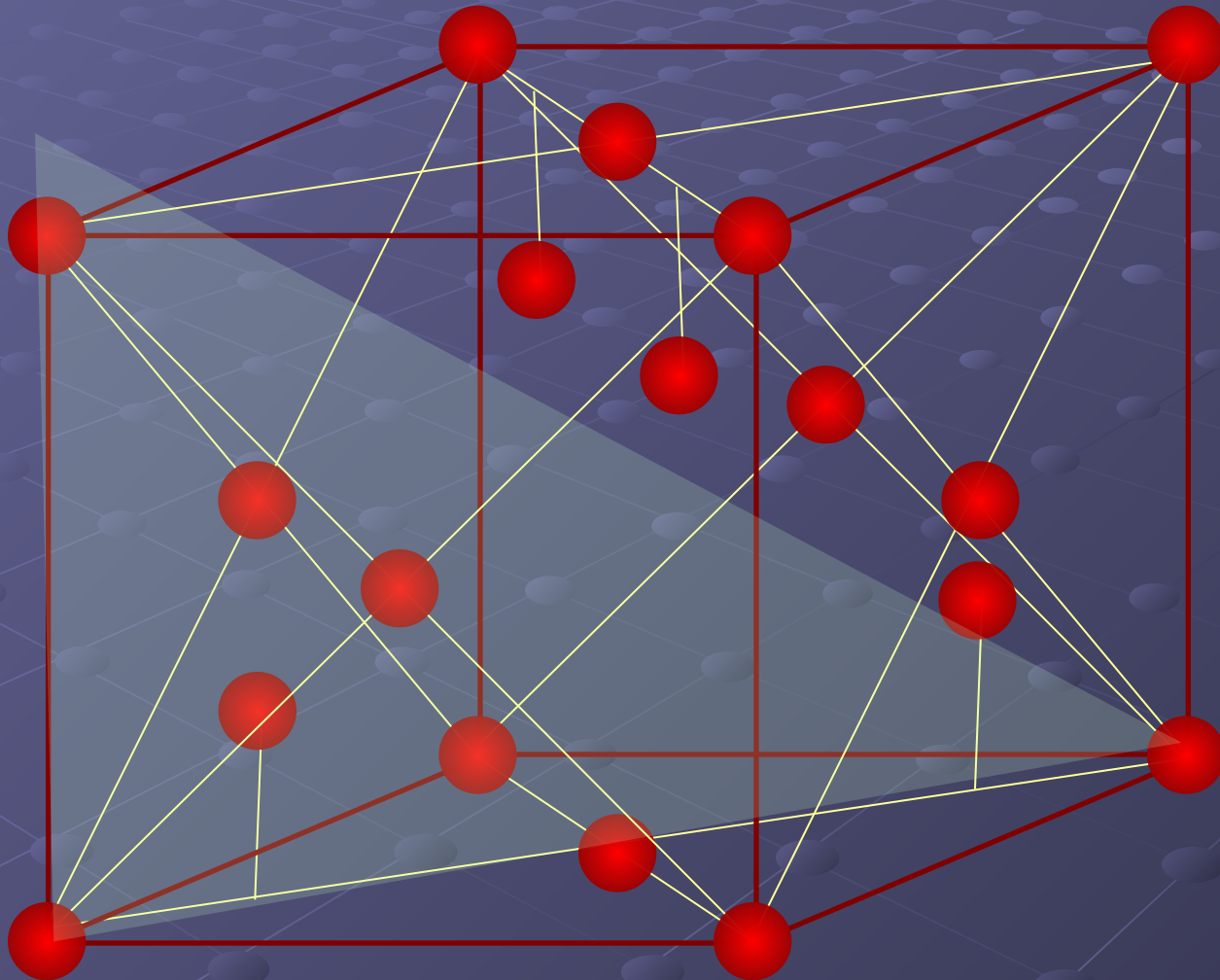
$$R = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$$k = \frac{V_{ш}}{V_{яч}} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{\pi \sqrt{3}}{8} \approx 0.68$$

Структуры неметаллов

4. Структура алмаза

Fd3m

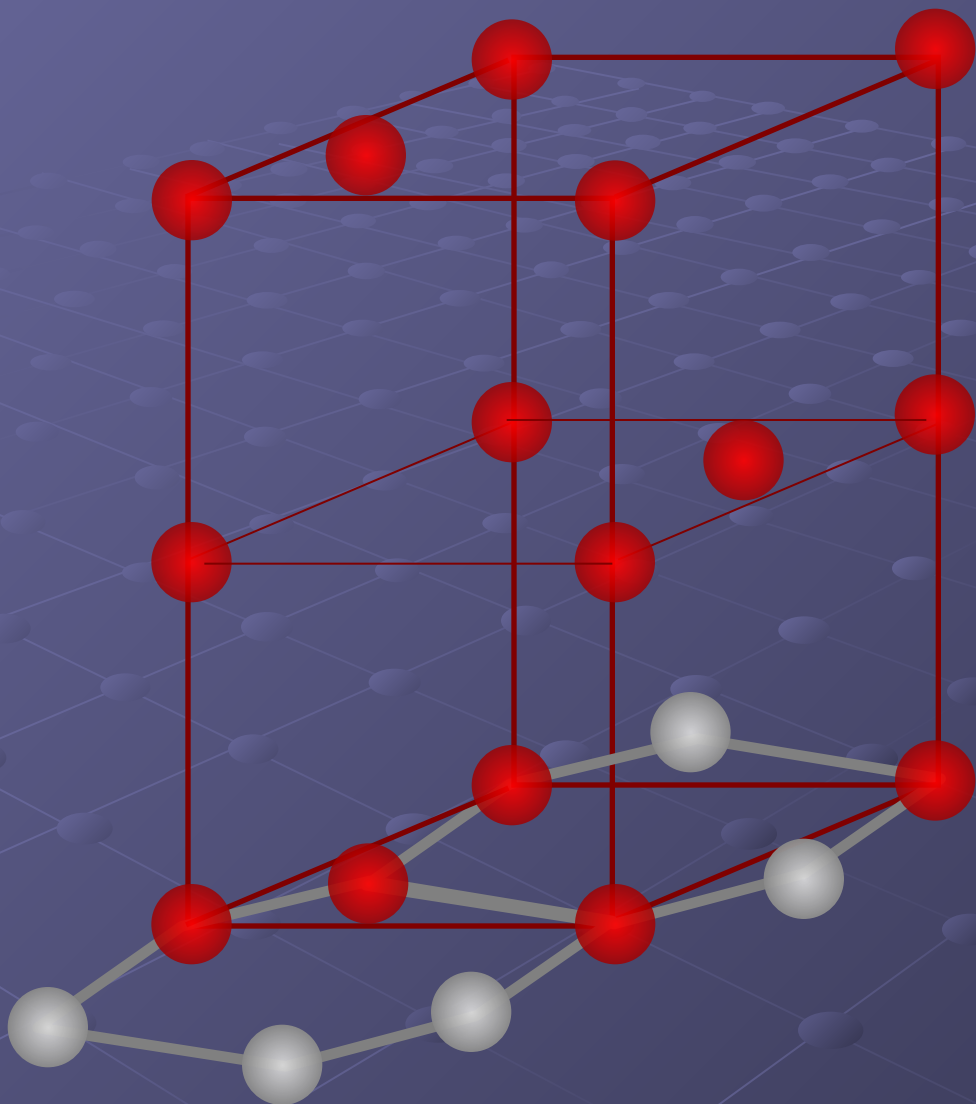


$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 4 & 4 \end{bmatrix}$$

$$K.ч. = 4$$

$$k = \frac{\pi \sqrt{3}}{16} \approx 0.34$$

5. Структура графита $P6_3/mmc$

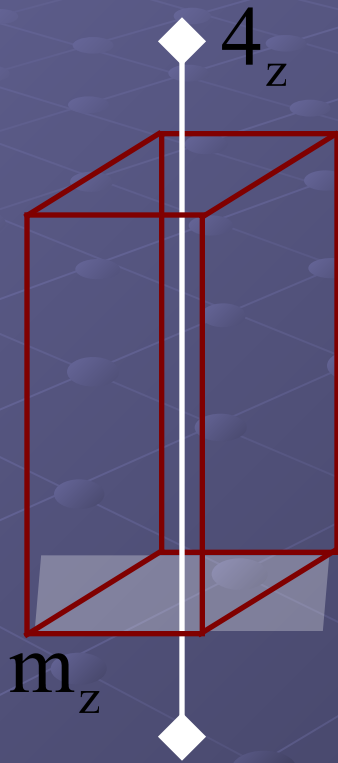


$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 1 & 2 & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 \end{bmatrix}$$

$$c = 6.70 \text{ \AA}$$
$$a = 2.46 \text{ \AA}$$

$$\frac{c}{a} = 2.72$$

Внешняя форма кристалла (простые формы)



$$C_4 = \frac{4}{m} = \left\{ \hat{E}, \hat{4}_z, \hat{4}_z^2, \hat{4}_z^3, m_z, \hat{4}_z, \hat{4}_z^{-1}, \hat{1} \right\}$$

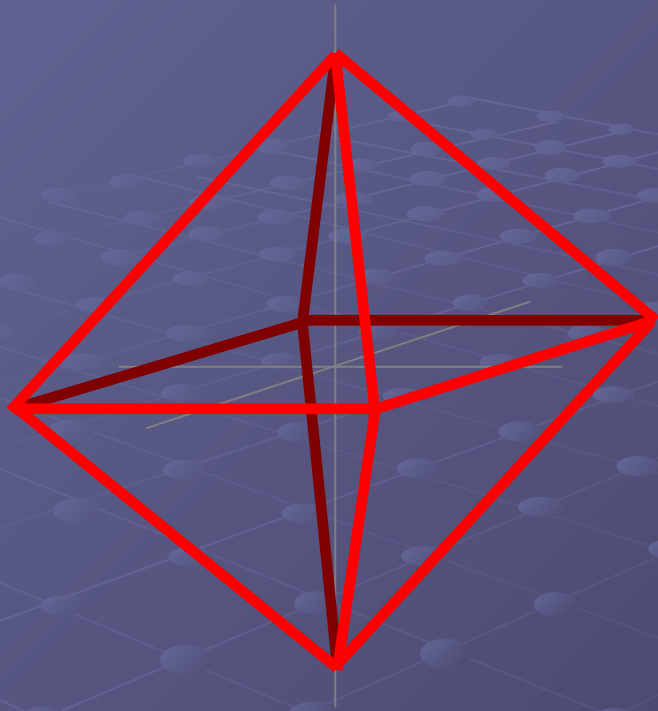
$$D(\hat{4}) = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D(\hat{m}_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

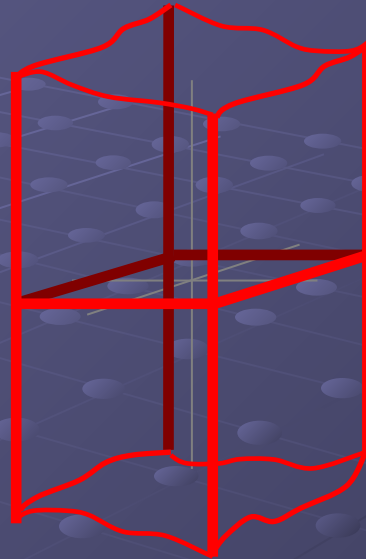
(hkl)

$$(hkl) \rightarrow (\bar{k}hl) \rightarrow (\bar{h}\bar{k}l) \rightarrow (kh\bar{l})$$

$$(hk\bar{l}) \rightarrow (\bar{k}h\bar{l}) \rightarrow (\bar{h}k\bar{l}) \rightarrow (khl)$$



дипирамида



призма

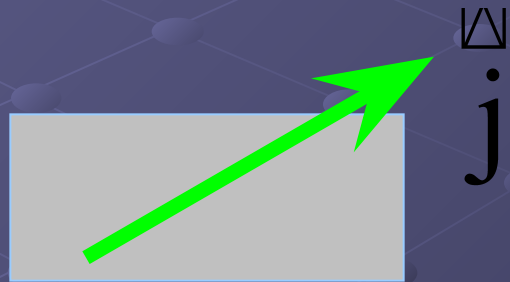


пинакоид

Описание физических свойств кристаллической среды

$$\hat{K} = \hat{\Phi} \otimes \hat{I}$$

Электропроводность



$$\vec{j} = \hat{\sigma} \cdot \vec{E}$$

$$\vec{E} = \hat{\rho} \cdot \vec{j}$$

Симметрия тензоров II ранга

кубическая	
тетрагональная гексагональная ромбоэдрическая	
ромбическая	
МОНОКЛИННАЯ	
триклинная	

Упругие свойства

$$\hat{\sigma} = \hat{c} : \hat{\varepsilon}$$

$$c_{ijkl} = c_{jikl}$$

$$c_{ijkl} = c_{ijlk}$$

триклинная



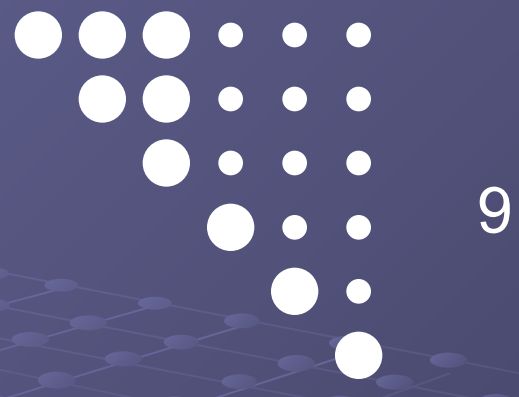
21

моноклинная



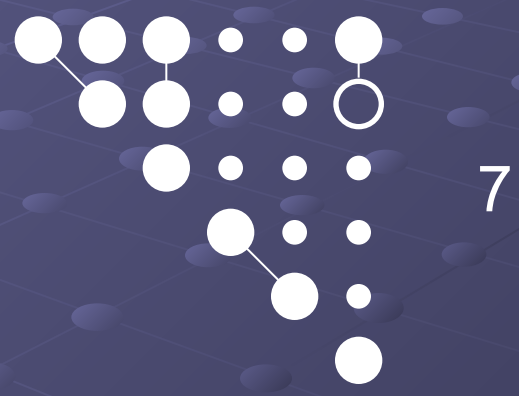
13

ромбическая

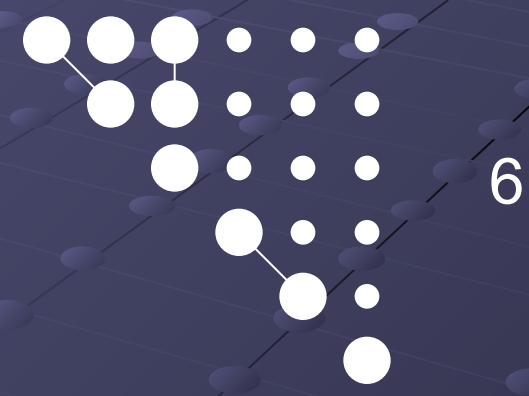


9

тетрагональная

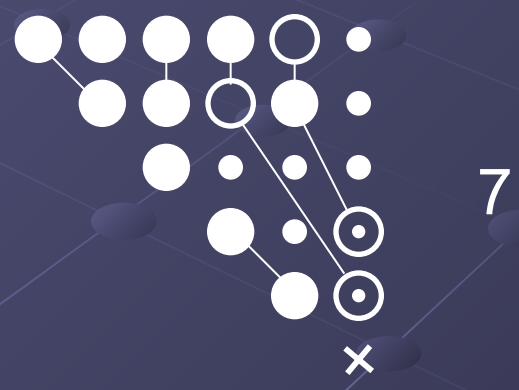


7

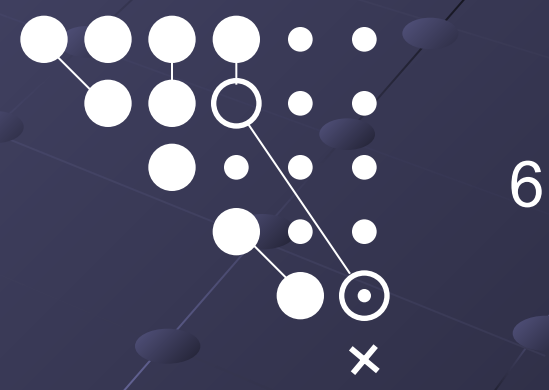


6

ромбоэдрическая

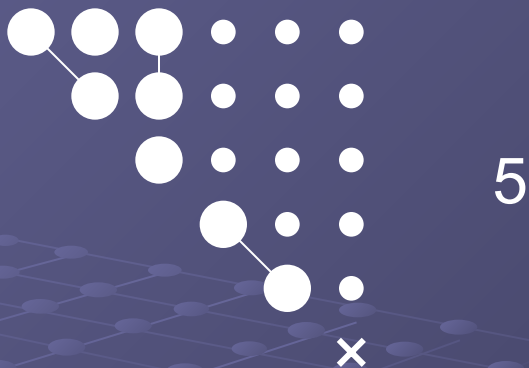


7



6

гексагональная



5

кубическая



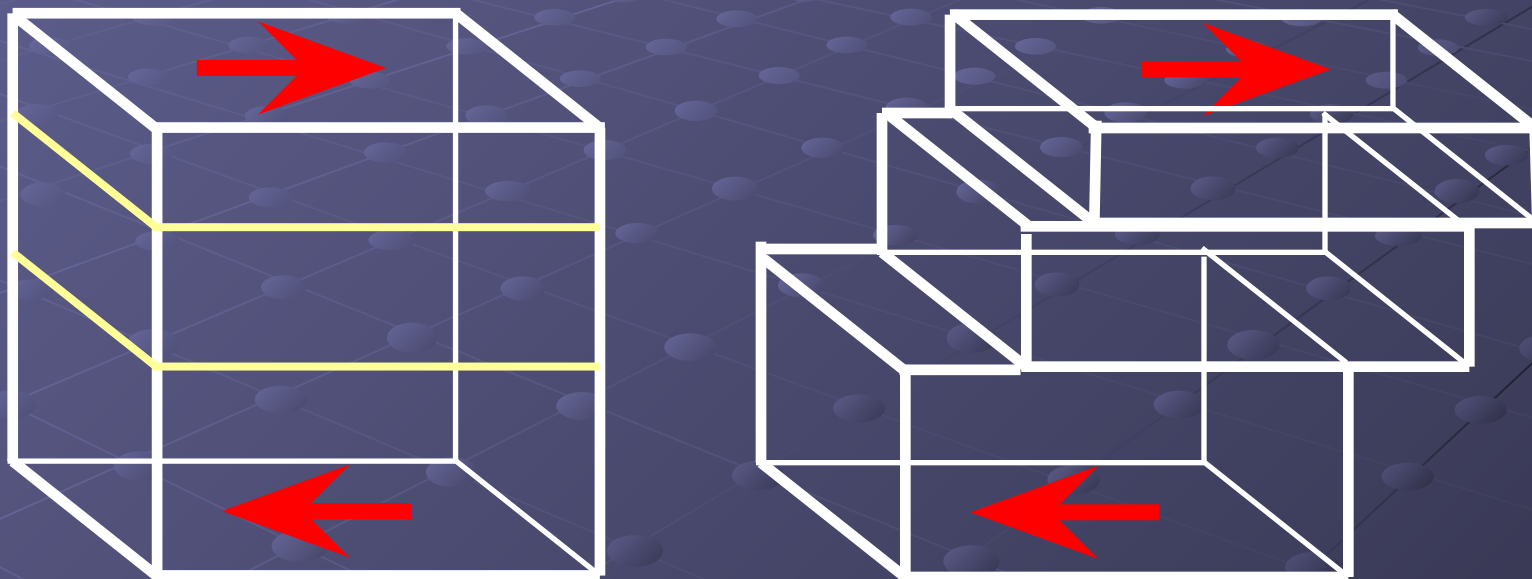
3

изотропная
среда

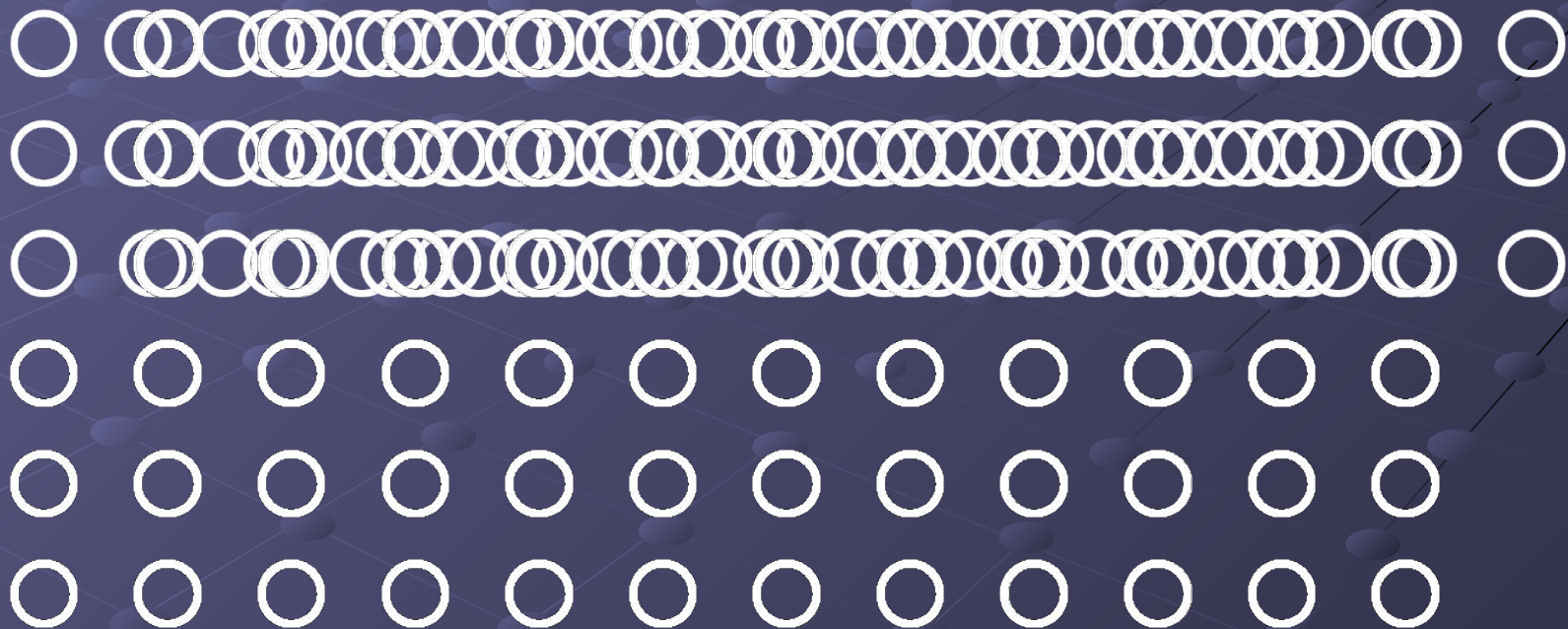


2

Пластическая деформация в монокристалле



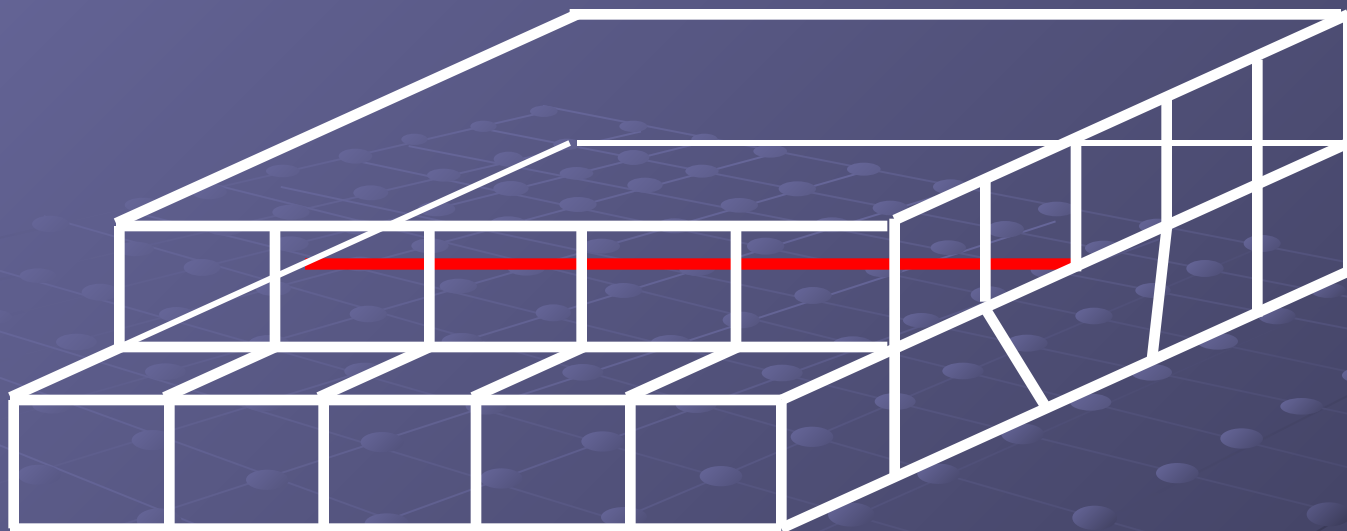
Перемещение краевой дислокации



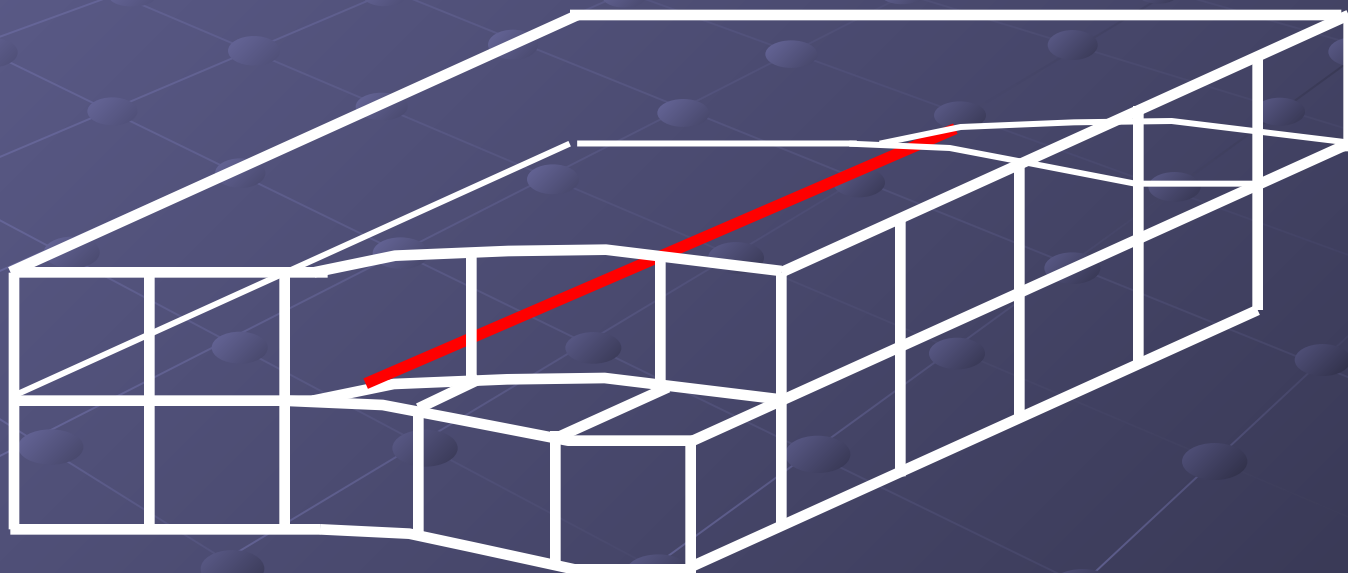
Элементы скольжения в кристалле

Тип структуры	Класс симметрии	Тип решётки	Направление скольжения	Плоскость скольжения	Число независимых систем скольжения
ГЦК	$m\bar{3}m$	F	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$	5
Алмаз	$m\bar{3}m$	F	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$	5
ОЦК	$m\bar{3}m$	I	$\langle 111 \rangle$	$\{110\}$ $\{211\}$ $\{123\}$	2
Каменная соль	$m\bar{3}m$	F	$\langle 110 \rangle$	$\{110\}$	5
ГПУ	$6/mmm$	P	$\langle 1120 \rangle$	(0001) $\{1010\}$ $\{1011\}$	2 2 4
			$\langle 1123 \rangle$	$\{1122\}$	5
Графит	$6/mmm$	P	$\langle 1120 \rangle$	(0001)	2

Дислокации



Краевая
дислокация



Винтовая
дислокация

Вектор Бюргерса

