Вывод 32 точечных групп симметрии в обозначениях по Шенфлису.

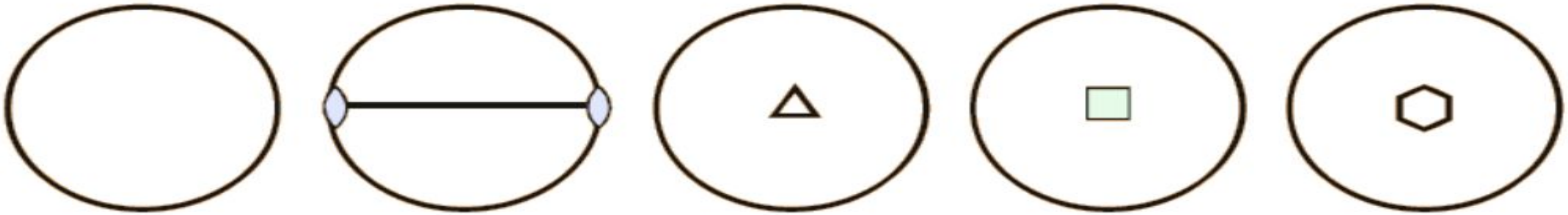
Трансляционные элементы симметрии.

Выполнил: Студент 815 группы Заварзин Н.Н.

Вывод 32 точечных групп симметрии в обозначениях по Шенфлису.
Все точечные группы можно разбить на три категории симметрии: низшую, среднюю и высшую.

Вывод групп (классов) симметрии

За основу вывода можно взять все возможные в кристаллах поворотные оси симметрии. В результате получим 5 исходных классов L_n



ИТОГО - 5

Остальные классы с единичным направлением — поворотной осью, ориентированной вертикально в пространстве, можно получить добавлением к классу L_n

1) вертикальной зеркальной плоскости симметрии (P_{υ}), проходящей вдоль каждой из осей L_n;

2) горизонтальной зеркальной плоскости симметрии (P_h) перпендикулярной оси L_n;

3) оси 2-го порядка, перпендикулярной оси L_n;

4) операции инверсии в точке (i), т. е. центра симметрии, расположенного на оси L_n ;

5) любой комбинации перечисленных выше элементов симметрии.

2) Добавляем вертикальную зеркальную плоскость симметрии, проходящую вдоль каждой из осей (P_v) Приходим к группам L_n . nP.

$(L_1)P_\upsilon \rightarrow P$, $L_2 \rightarrow L_2 2P$, $L_3 \rightarrow L_3 3P$, $L_4 \rightarrow L_4 4P$, $L_6 \rightarrow L_6 6P$

ИТОГО - +5 = 10

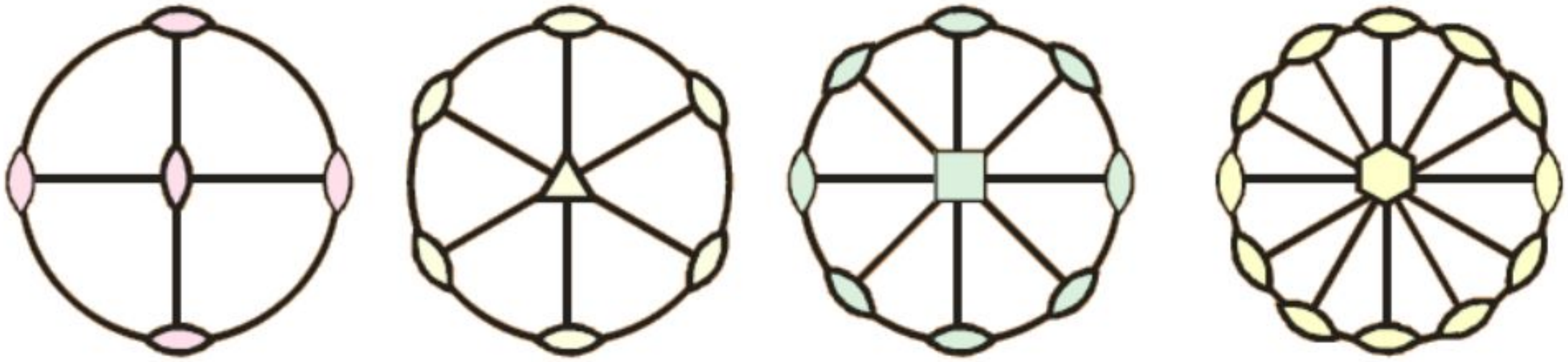
3) Добавляем горизонтальную зеркальную плоскость симметрии, перпендикулярную оси (P_h). Приходим к классам L_nP_h

$(L_1)\mathrm{P_h} \rightarrow P$, $L_2 \rightarrow L_2PC$, $L_3 \rightarrow$ Ł$_6$, $L_4 \rightarrow L_4PC$, $L_6 \rightarrow L_6PC$

ИТОГО - +4 = 14

4) Добавляем горизонтальную ось симметрии 2-го порядка, перпендикулярную главной оси ($L_2 \perp$). Получаем классы L_n . nL_2

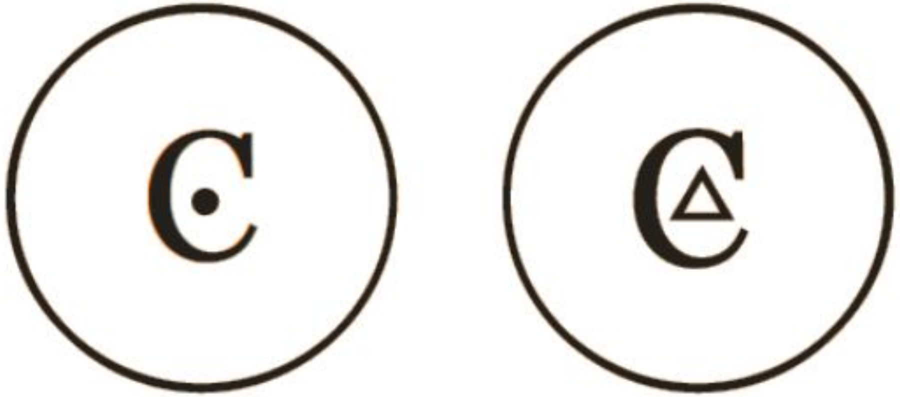
$L_1 \rightarrow L_2$, $L_2 \rightarrow 3L_2$, $L_3 \rightarrow L_3 3L_2$, $L_4 \rightarrow L_4 4L_2$, $L_6 \rightarrow L_6 6L_2$



ИТОГО - +4 = 18

5) Добавляем операцию инверсии в точке (i), т.е. центр симметрии

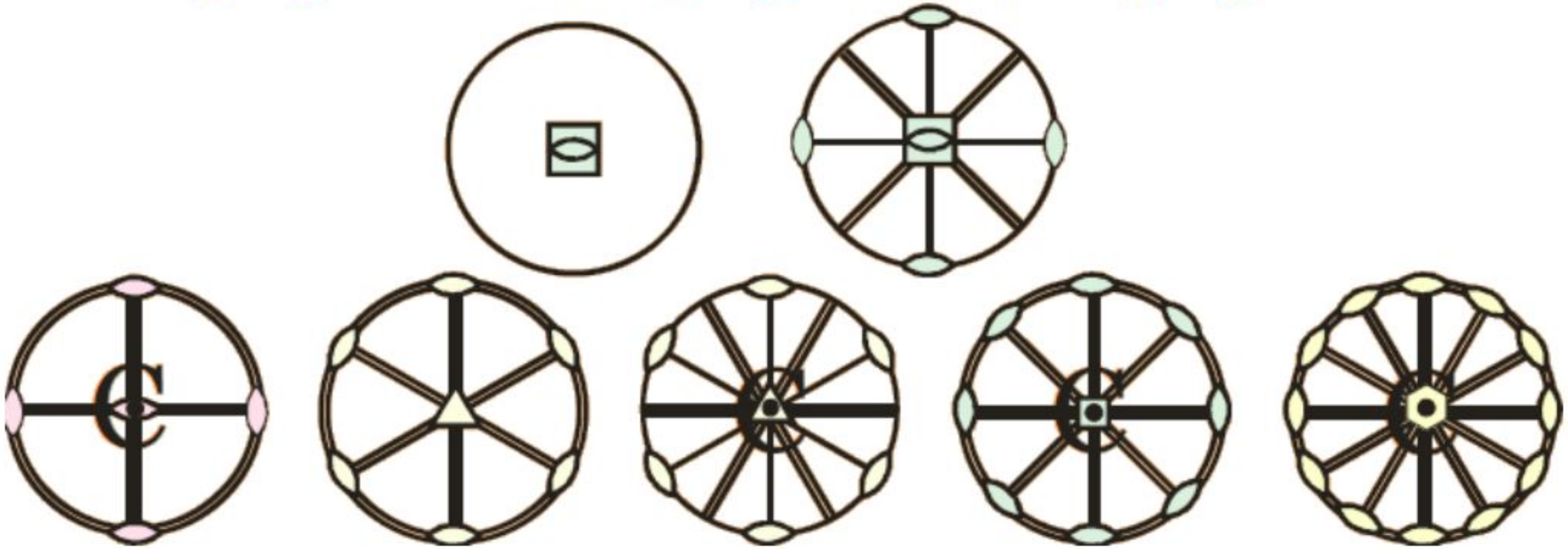
$L_1 \rightarrow C$, $L_2 \rightarrow L_2PC$, $L_3 \rightarrow \text{Ł}_3$, $L_4 \rightarrow L_4PC$, $L_6 \rightarrow L_6PC$



ИТОГО - +2 = 20

6) Любую комбинацию перечисленных выше элементов симметрии (не забыв про существование инверсионных осей 4-ого порядка)

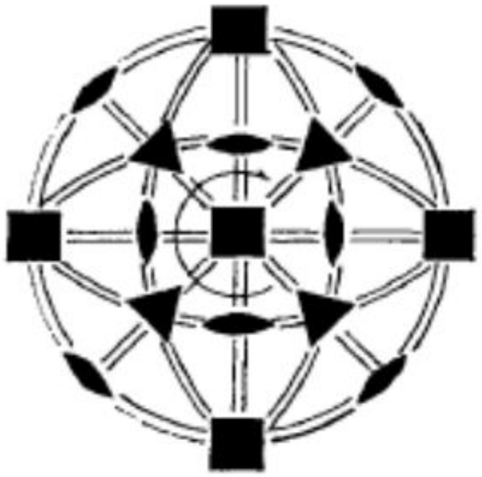
$\text{Ł}_4 \rightarrow \text{Ł}_4 2L_2 2P$, $L_2 \rightarrow 3L_2 3PC$, $L_3 \rightarrow L_3 3L_2 4P$, $L_3 3L_2 3PC$, $L_4 \rightarrow L_4 4L_2 5PC$, $L_6 \rightarrow L_6 6L_2 7PC$



ИТОГО - +7 = 27

Вывод классов симметрии без единичных направлений

Добавим к классам $3L_44L_36L_6$ и $3L_24L_3$ зеркальную плоскость симметрии (*P*) или центр инверсии (C).

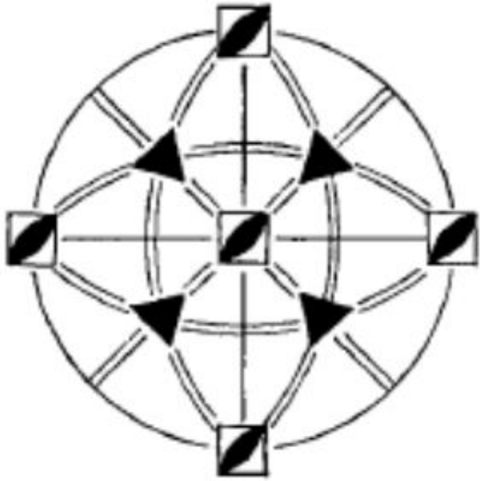


$3L_44L_36L_29PC$

а

$3L_24L_33PC$

б



$3L_44L_36P$

в

В итоге выведены еще пять классов симметрии с несколькими осями высшего порядка — классов без единичных направлений.

Таблица 2.2. **Обозначения и названия 32 точечных групп (классов) симметрии**

Сингония	Обозначение: международное	Обозначение: по Шубникову	Обозначение: по Шенфлису	Формула симметрии	Название класса
Триклинная	1	1	C_1	L^1	Моноэдрический
	$\bar{1}$	$\tilde{2}$	$C_i = S_2$	C	Пинакоидальный
Моноклинная	2	2	C_2	L^2	Диэдрический осевой
	m	m	$C_{1h} = C_S$	P	Диэдрический безосный
	$2/m$	$2:m$	C_{2h}	L^2PC	Призматический
Ромбическая	222	$2:2$	$D_2 = V$	$3L^2$	Ромбо-тетраэдрический
	mm^2	$2 \cdot m$	C_{2V}	L^22P	Ромбо-пирамидальный
	mmm	$m \cdot 2 \cdot m$	D_{2h}	$3L^2 3PC$	Ромбо-дипирамидальный
Тригональная	3	3	C_3	3	Тригонально-пирамидальный
	32	$3:2$	D_3	L^33L^2	Тригонально-трапецоэдрический
	$3m$	$3 \cdot m$	C_{3V}	L^33P	Дитригонально-пирамидальный
	$\bar{3}$	$\tilde{6}$	$C_{3i} = S_6$	L_6^36C	Ромбоэдрический
	$\bar{3}m$	$\tilde{6}m$	D_{3d}	$L_6^33L^23PC$	Дитригонально-скаленоэдрический
Тетрагональная	4	4	C_4	L^4	Тетрагонально-пирамидальный
	422	$4:2$	D_4	L^44L^2	Тетрагонально-трапецоэдрический
	$4/m$	$4:m$	C_{4h}	L^4PC	Тетрагонально-дипирамидальный
	$4mm$	$4 \cdot m$	C_{4V}	L^44P	Дитетрагонально-пирамидальный
	$4/mmm$	$m \cdot 4:m$	D_{4h}	L^44L^25PC	Дитетрагонально-дипирамидальный
	$\bar{4}$	$\tilde{4}$	S_4	L_4^2	Тетрагонально-тетраэдрический
	$\bar{4}2m$	$\tilde{4} \cdot m$	$D_{2d} = V_d$	$L_4^22L^22P$	Тетрагонально-скаленоэдрический
Гексагональная	$\bar{6}$	$3:m$	C_{3h}	L^3P	Тригонально-дипирамидальный
	$\bar{6}m2$	$m \cdot 3:m$	D_{3h}	L^33L^24P	Дитригонально-дипирамидальный
	6	6	C_6	L^6	Гексагонально-пирамидальный
	622	$6:2$	D_6	L^66L^2	Гексагонально-трапецоэдрический
	$6/m$	$6:m$	C_{6h}	L^6PC	Гексагонально-дипирамидальный
	$6mm$	$6 \cdot m$	C_{6V}	L^66P	Дигексагонально-пирамидальный
	$6/mm$	$m \cdot 6:m$	D_{6h}	L^66L^27PC	Дигексагонально-дипирамидальный
Кубическая	23	$3/2$	T	$3L^24L^3$	Тритетраэдрический
	$m\bar{3}$	$\tilde{6}/2$	T_h	$3L^24L_6^33PC$	Дидодекаэдрический
	$\bar{4}3m$	$3/\tilde{4}$	T_d	$3L_4^24L^36P$	Гексатетраэдрический
	432	$3/4$	O	$3L^44L^36L^2$	Триоктаэдрический
	$m3m$	$\tilde{6}/4$	O_h	$3L^44L_6^36L^29PC$	Гексоктаэдрический

Примечание. В международной и шубниковской системах обозначений приведены элементы симметрии, из которых можно вывести остальные. В графе «Формула симметрии» приведены все элементы симметрии данного класса: L — оси, C — центр, P — плоскость симметрии; перед каждым символом стоит число соответствующих элементов.

Трансляционный элементы симметрии

Одномерная	Бесконечные цепи (бордюры) $\vec{T} = n\vec{a}$	$n \in Z$
Двумерная	Бесконечные слои $\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b}$	$u, v \in Z$
Трехмерная	Кристаллические структуры $\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$	$u, v, w \in Z$

Множество векторов $\vec{T}$ образуют группу, если в качестве умножения принять геометрическое сложение векторов.

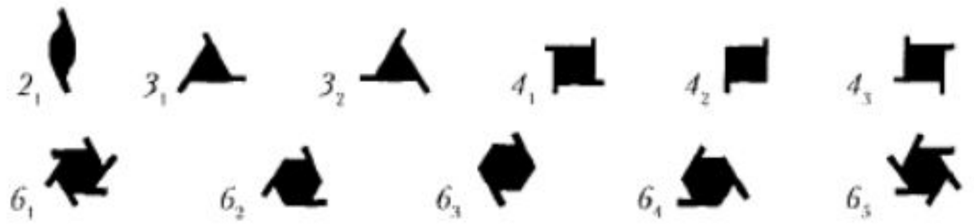
$$e = \vec{0}$$

Обратный элемент: $\vec{t}^{\,-1} = -\vec{t}$

Множество векторов трансляций, совмещающих структуру саму с собой, образуют <u>группу трансляций</u> (ГТ) данной структуры.

Число элементов группы трансляции бесконечно. Генераторами ГТ являются вектора <u>элементарных трансляций.</u>

Трансляционные элементы симметрии



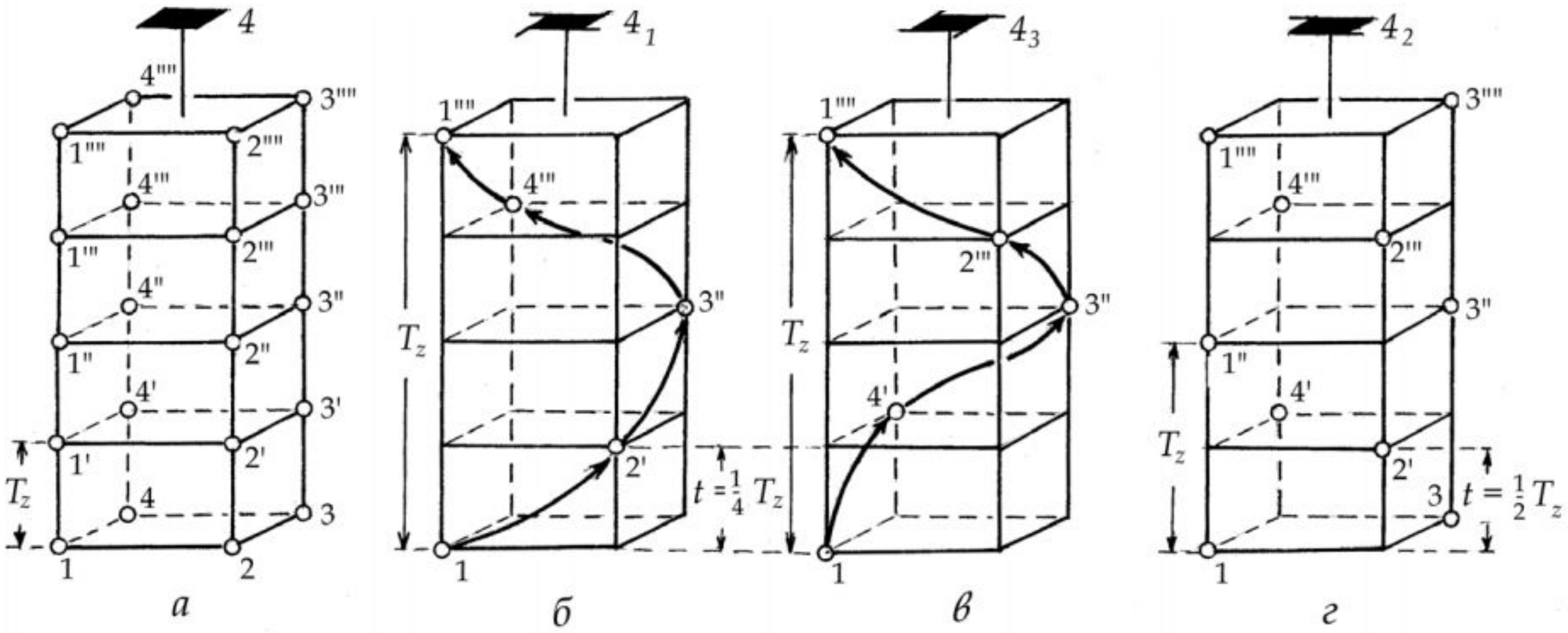


Иллюстрация действия осей 4-го порядка:
а – поворотной оси 4, б – винтовой оси 4_1,
в – винтовой оси 4_3, г – винтовой оси 4_2

Библиографический список

1). Костов, И. КРИСТАЛЛОГРАФИЯ / И. Костов.: Москва.: МИР, 1965. -528 с.

2). Сироткин, Ю.В. Основы кристаллографии / Ю.И. Сироткин, М.П. : Шаскольская. : Москва.: Наука, 1979. -640 с.

3). Лекция 3. Симметрия кристаллов [Онлайн].– Режим доступа : http://portal.tpu.ru/SHARED/e/EIKUPREKOVA/Teaching/Tab3/Tab/lection%203.pdf, свободный. – Загл. с экрана.