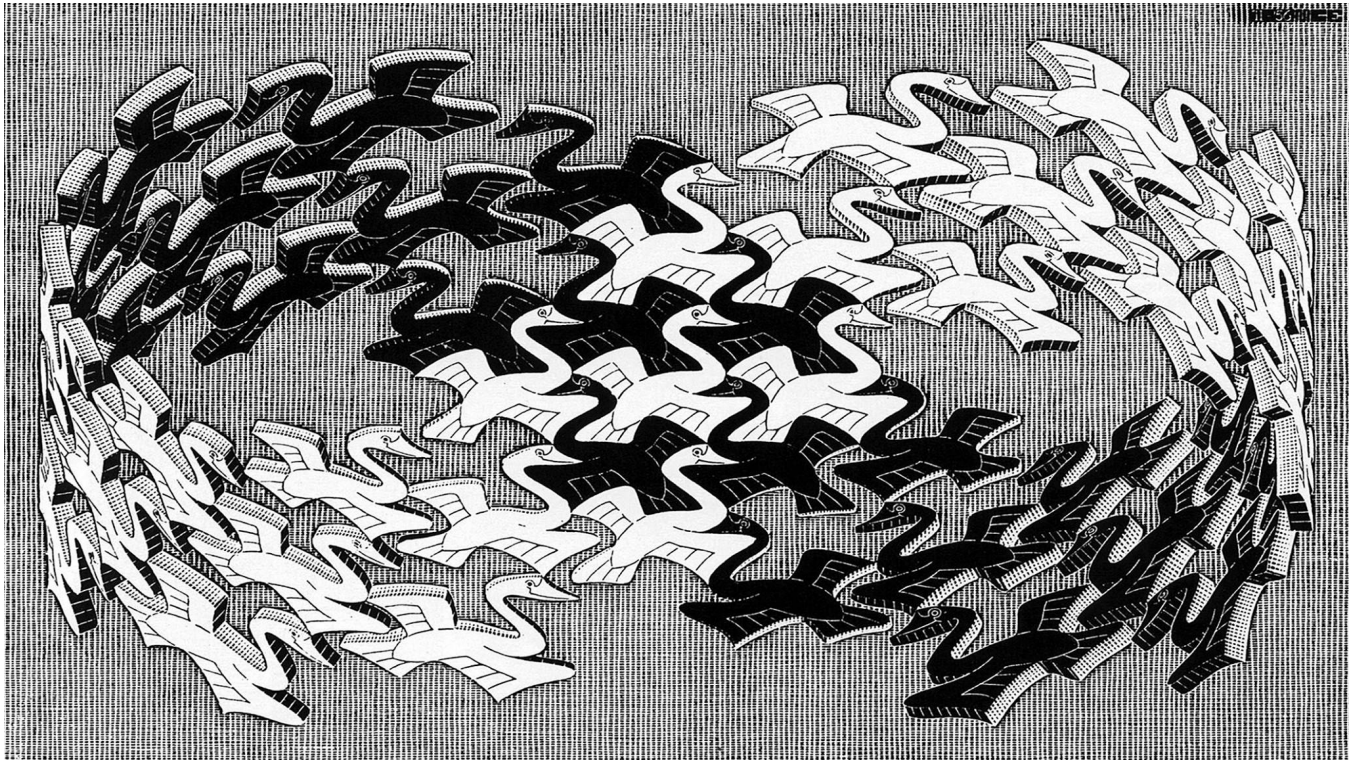
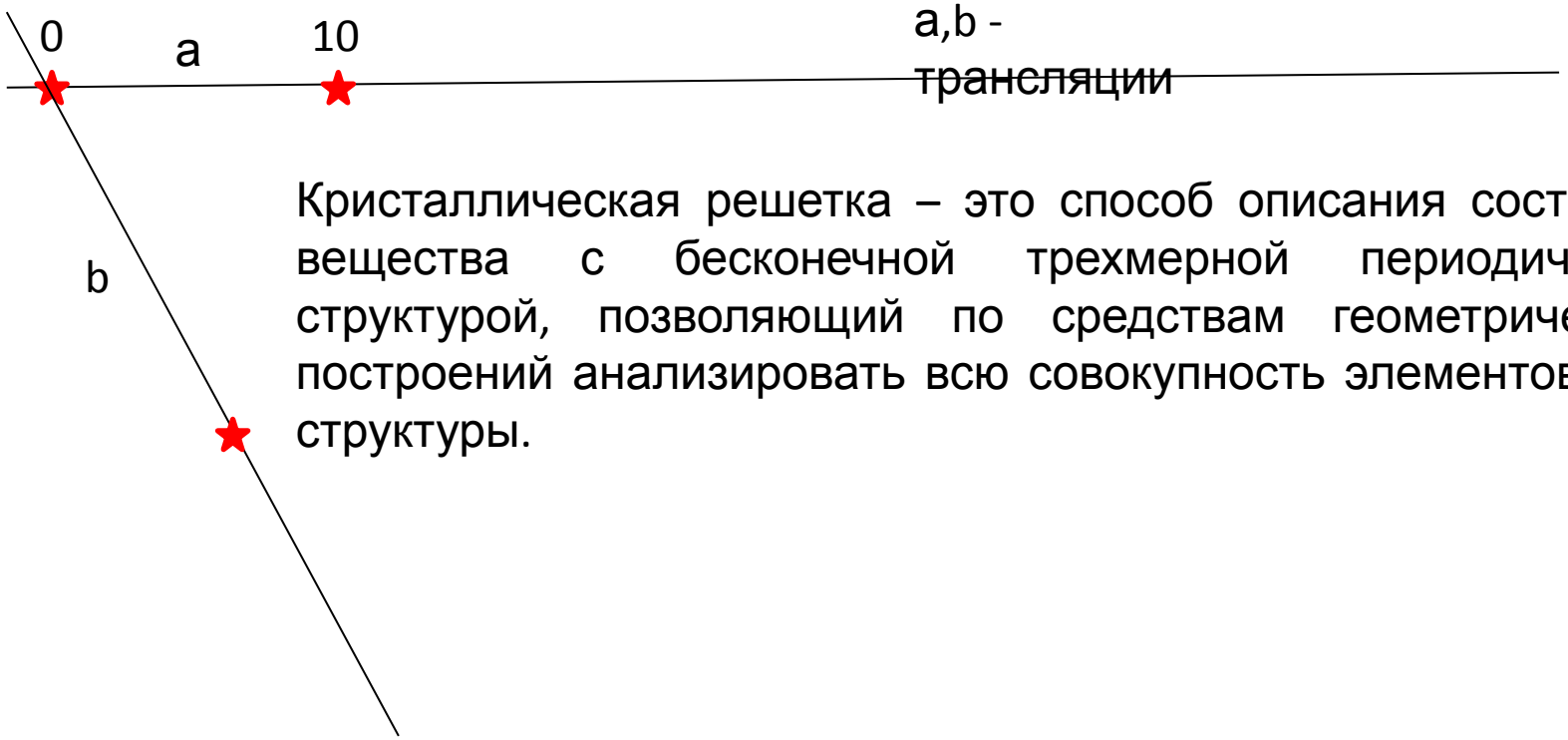
Лекция 3. Кристаллы. Дефекты в кристаллах. Симметрия и способы её описания.



М. Эшер. Три мира

Как описать структуру кристалла?



a,b - трансляции

Кристаллическая решетка – это способ описания состояние вещества с бесконечной трехмерной периодической структурой, позволяющий по средствам геометрических построений анализировать всю совокупность элементов этой структуры.

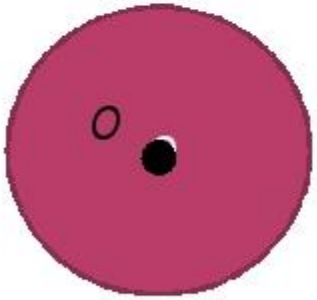
Симметрия

- свойство геометрической фигуры при определенном преобразовании пространства приобретать новое положение неотличимое от исходного (самосовмещаться)

Операция симметрии – отражение геометрической фигуры самой в себя при некотором изометрическом преобразовании пространства.

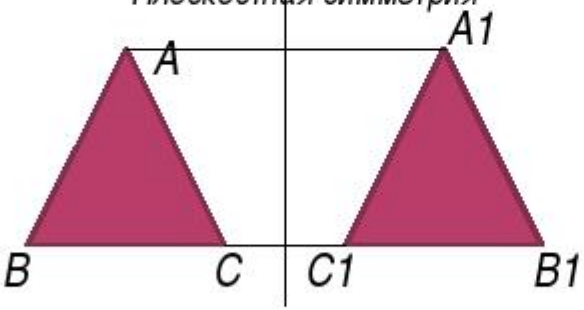
Элемент симметрии – геометрическое место точек, переходящее в себя при симметрическом преобразовании пространства

Центральная симметрия



С – центр симметрии

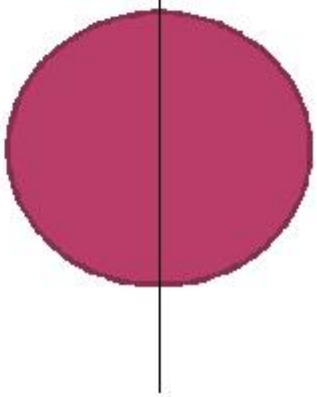
Плоскостная симметрия



m – плоскость симметрии

L – ось симметрии

Ось симметрии



Примеры действия элементов симметрии

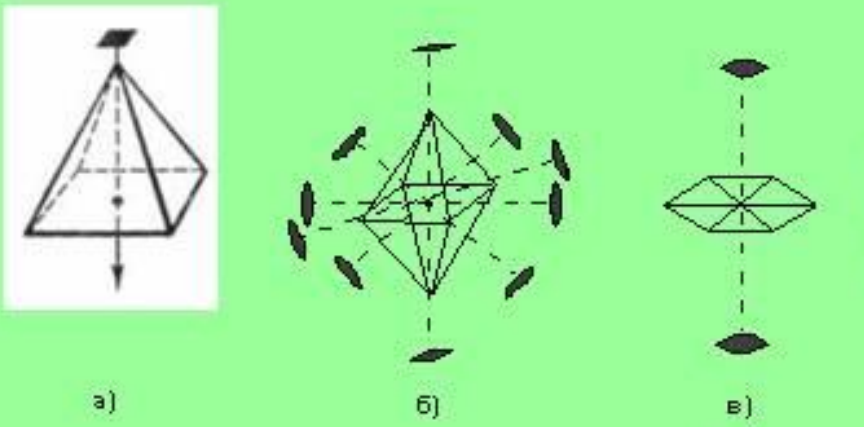


Рис.1. Примеры действия осей симметрии различного порядка: а) – ось 4-го порядка; б) оси 2-го и 4-го порядков; в) ось 6-го порядка.

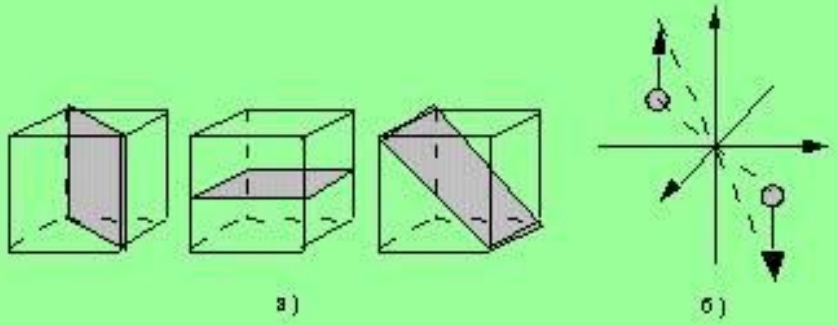


Рис.2. Примеры действия плоскостей симметрии (а) и центра инверсии (б).

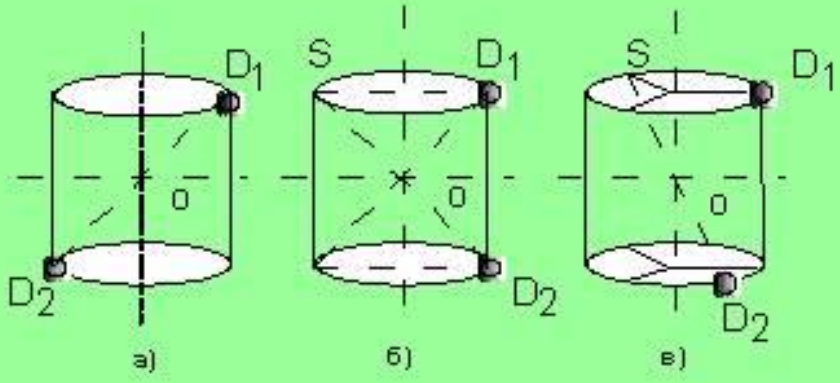
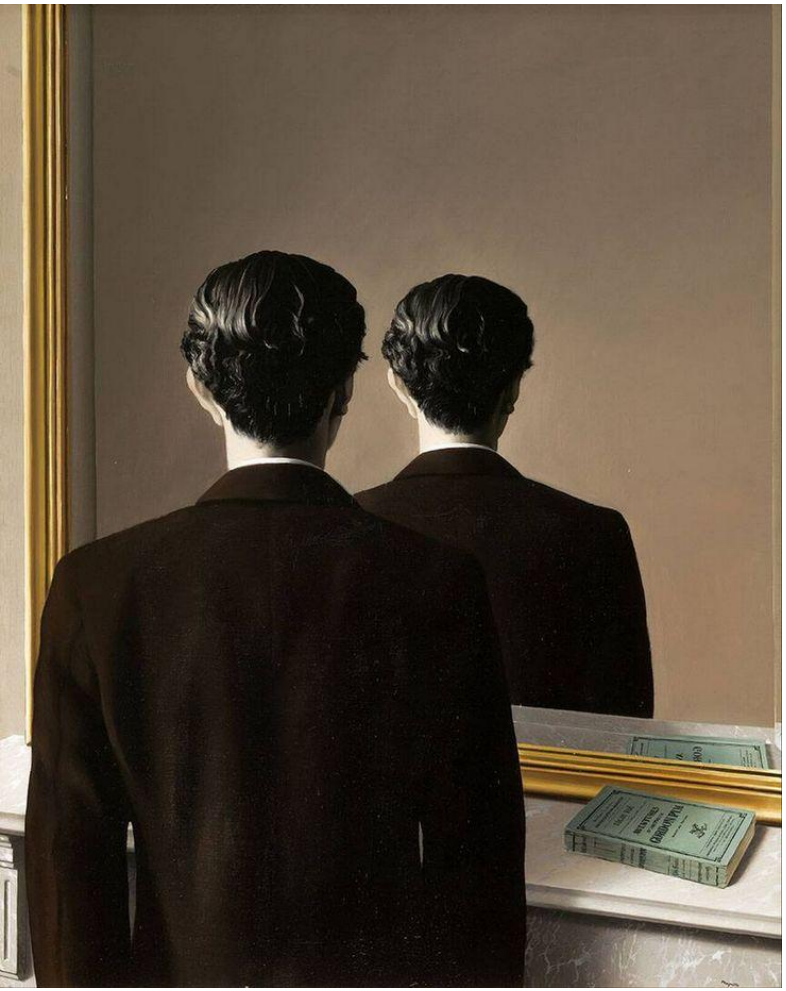


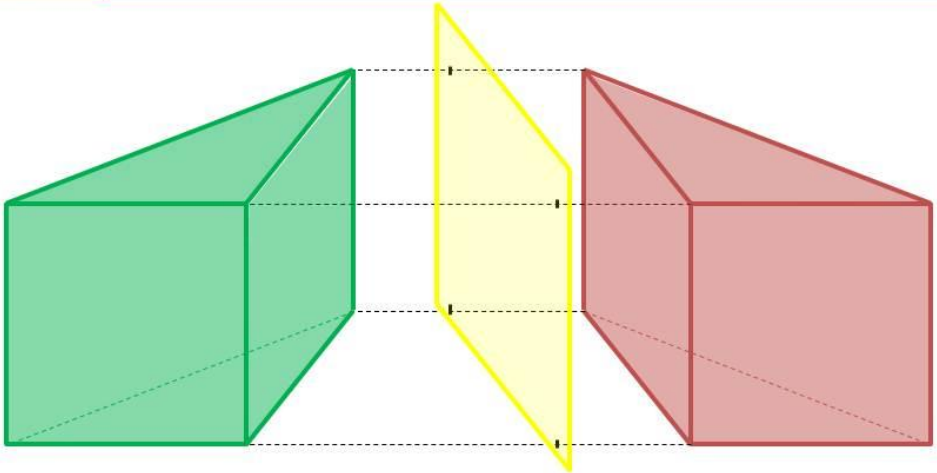
Рис.3. Примеры действия инверсионных осей симметрии: 1-го (а), 2-го (б) и 3-го порядка (в).

Плоскости отражения



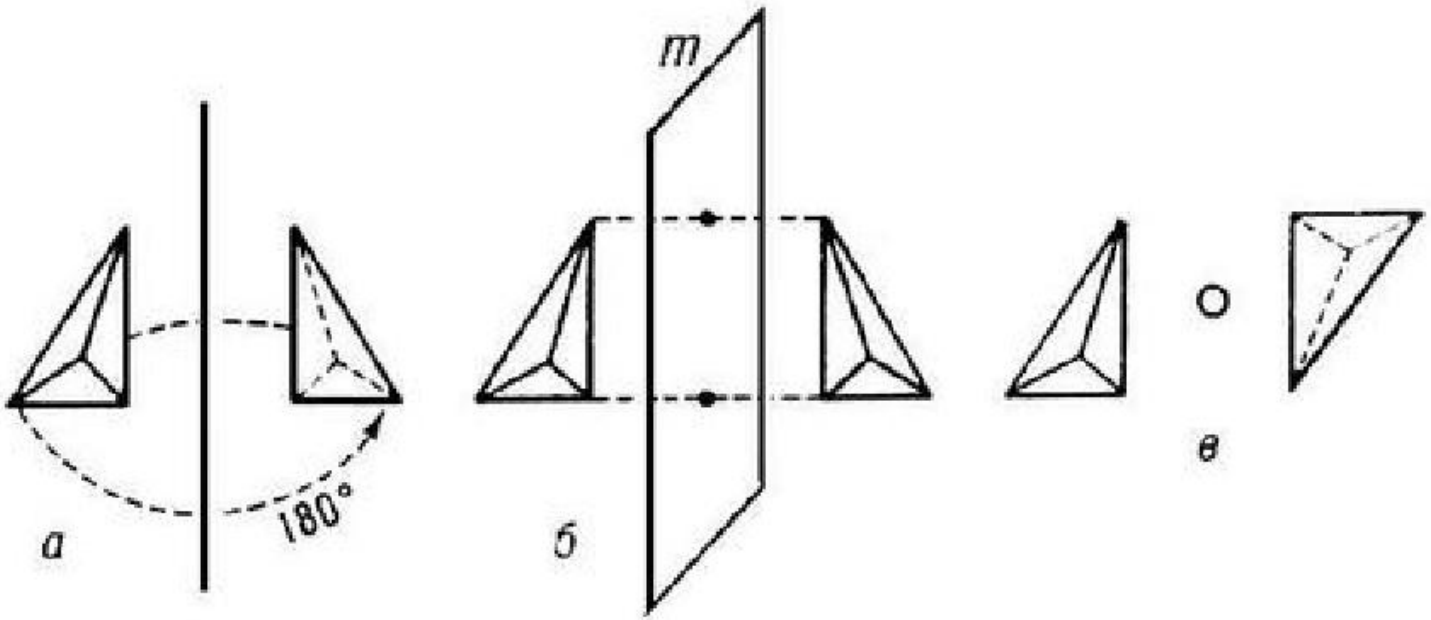
Определение

Зеркальная симметрия — отображение пространства на себя, при котором **каждая точка К** переходит в симметричную ей относительно **плоскости β точку K_1**



σ – плоскость отражения

Центр
инверсии



2
порядок

Инверсионные оси, зеркально-поворотные оси

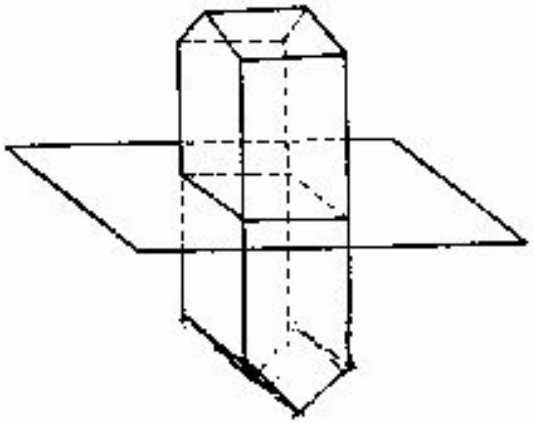
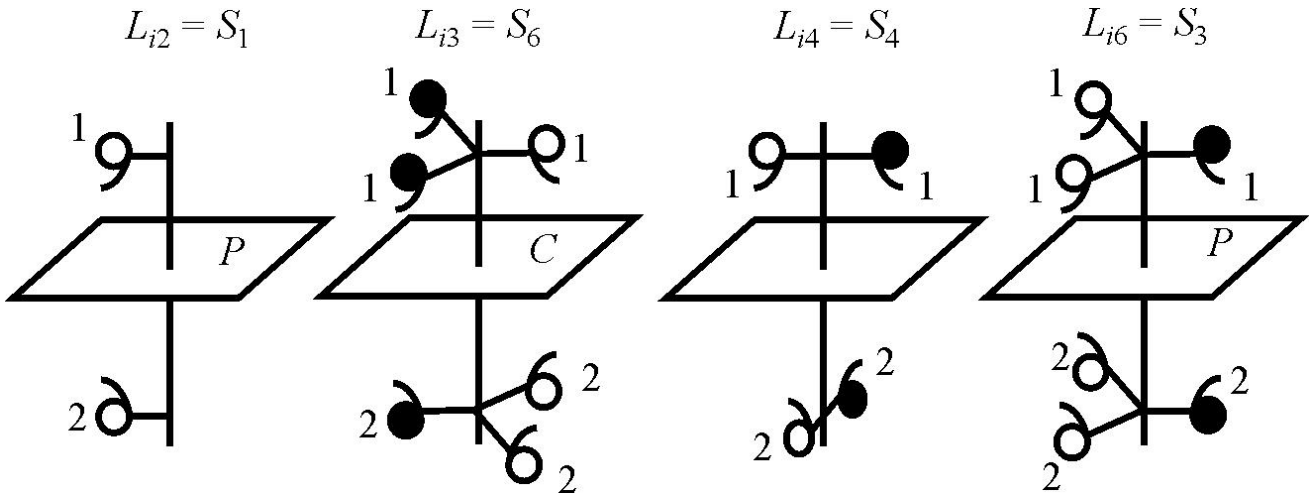


Рис. 69. Зеркально-поворотная ось S_4 в кристалле пентаэритрита



Преобразования симметрии плоского равностороннего треугольника

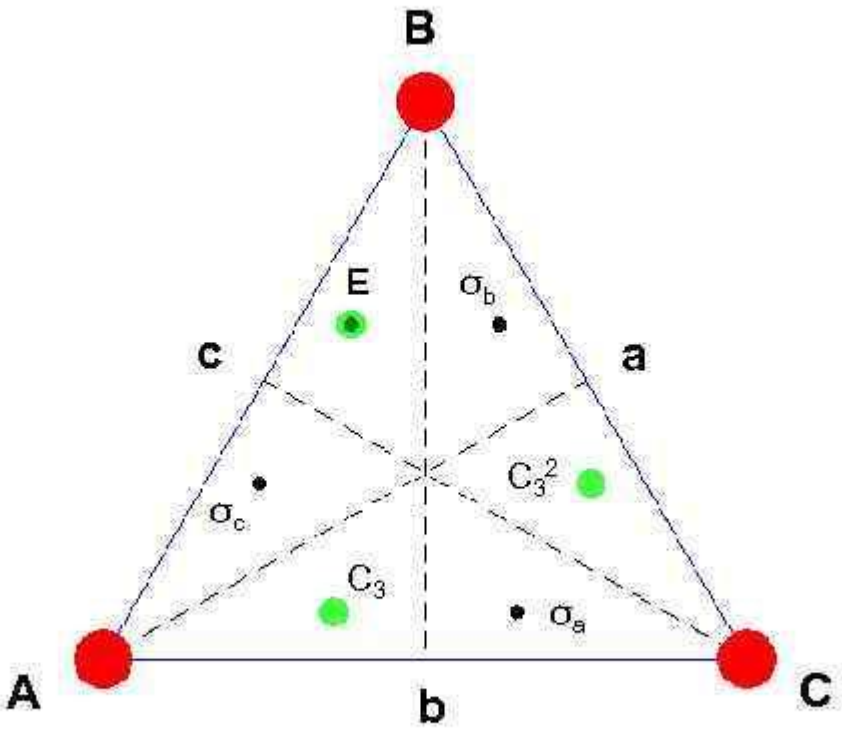
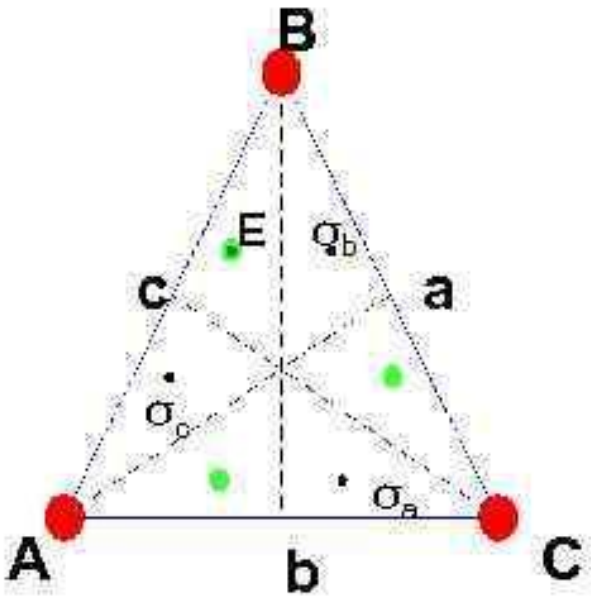
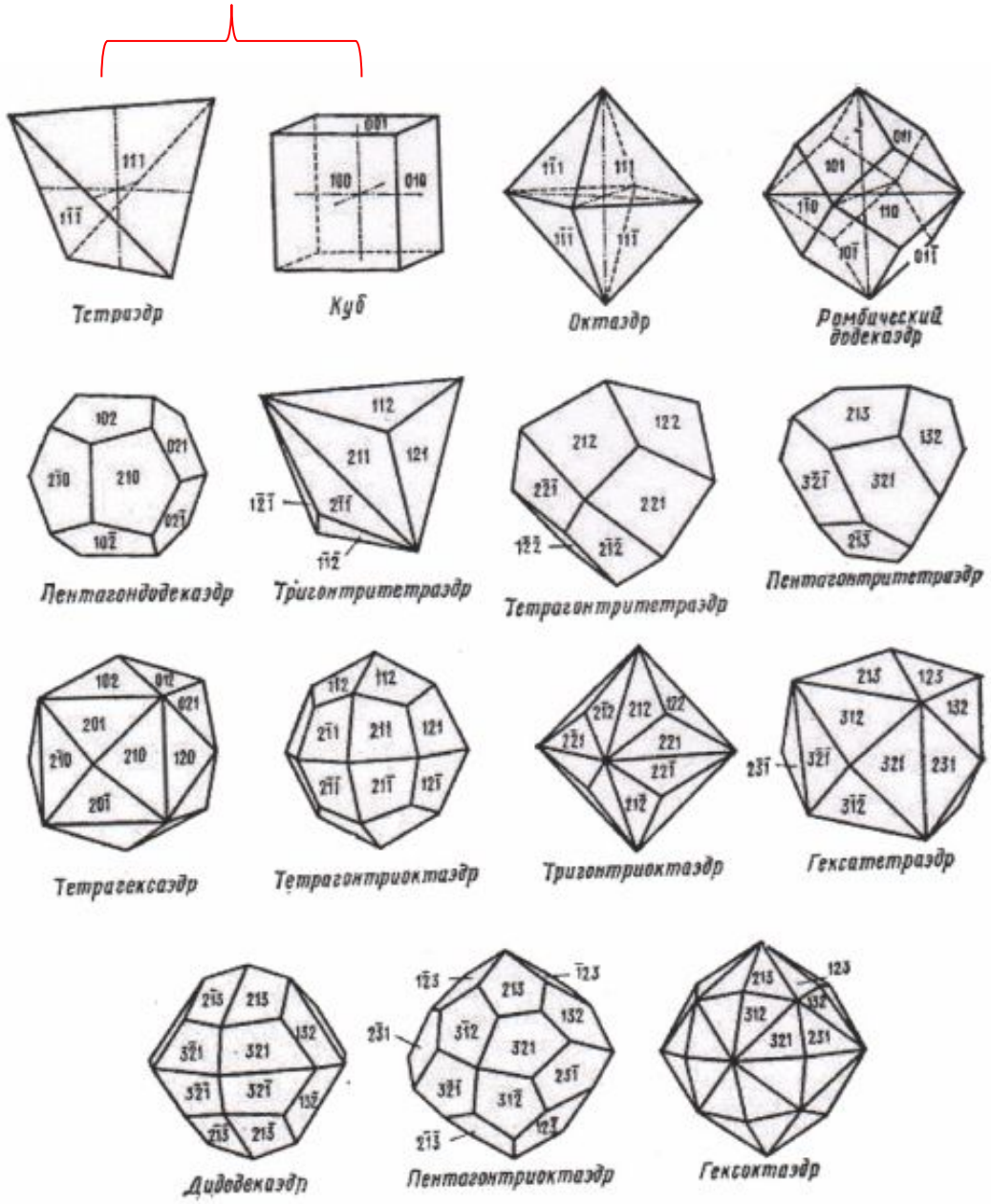


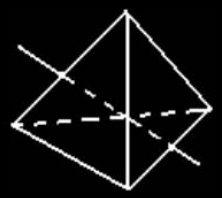
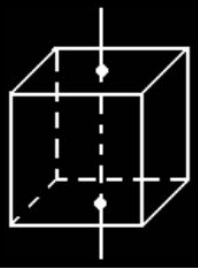
Таблица умножения группы симметрии равностороннего плоского треугольника (C_{3v})

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_a	σ_b	σ_c
E	E					
C_3		C_3^2				
C_3^2		E				
σ_a		σ_c		E		
σ_b		σ_a		C_3		
σ_c				C_3^2		

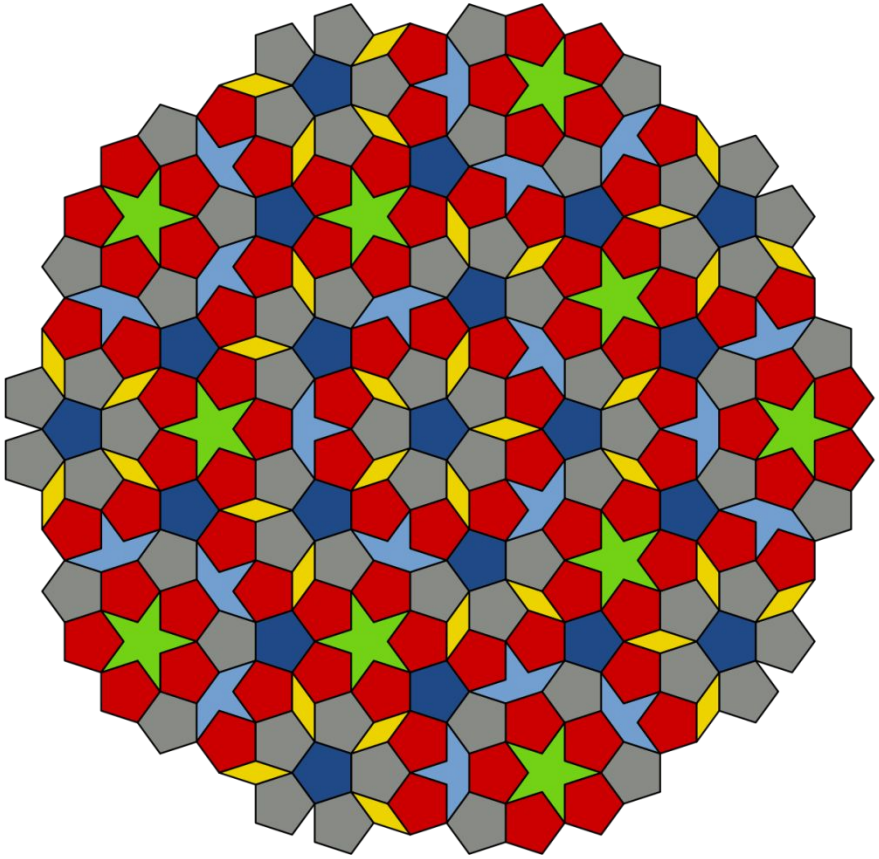


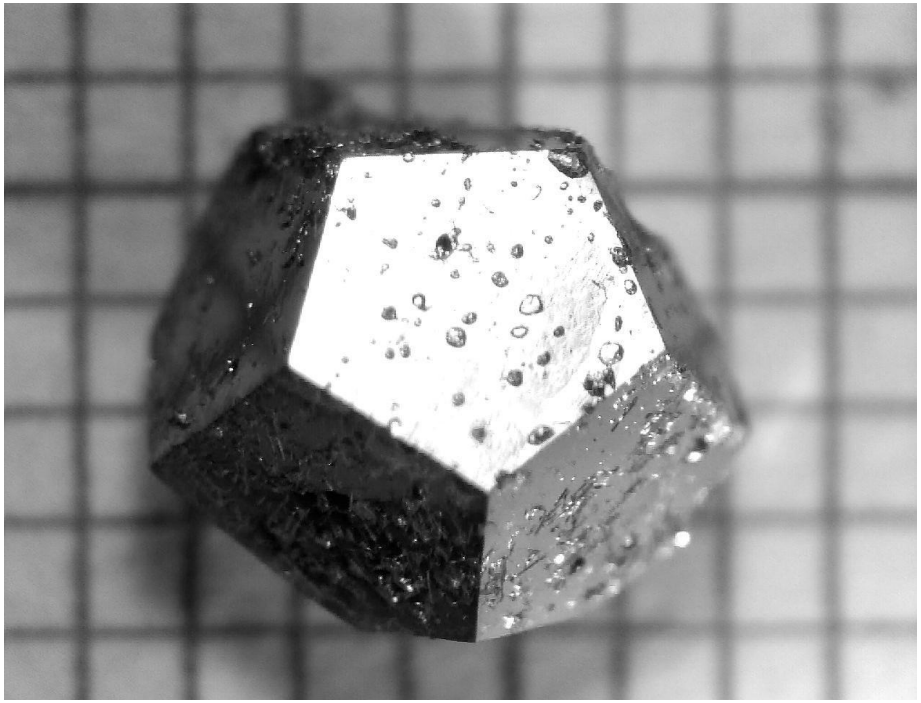
При умножении сначала выполняем "горизонтальную" операцию



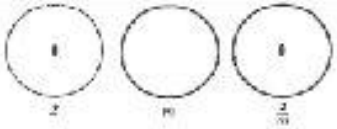
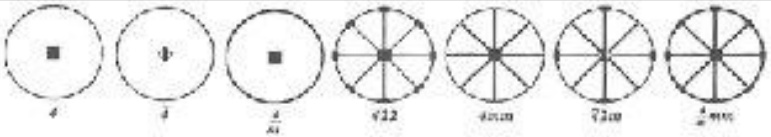
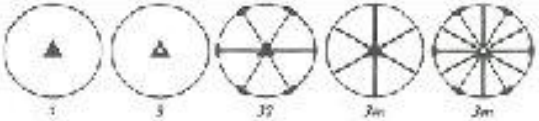
Центр симметрии	Ось симметрии	Плоскость симметрии
Нет		
-	3 оси симметрии	6 плоскостей симметрии
		

Квазикристаллы, есть порядок, но нет повторений…





7 сингоний и их элементы симметрии

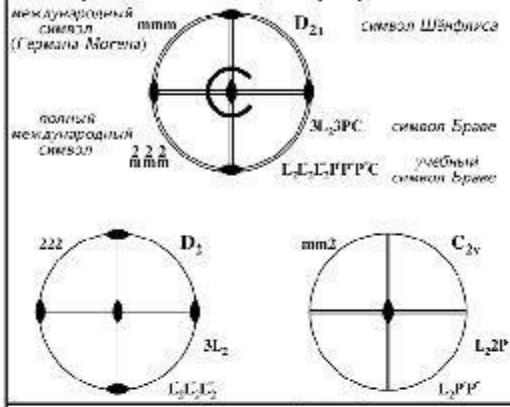
Система	Модель	Соотношение параметров ячейки	Элементы симметрии и их расположение
Триклинная		$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	
Моноклинная		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Ромбическая		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Тетрагональная		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Тригональная (ромбоэдрическая)		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Гексагональная		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Кубическая		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	

32 КЛАССА СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

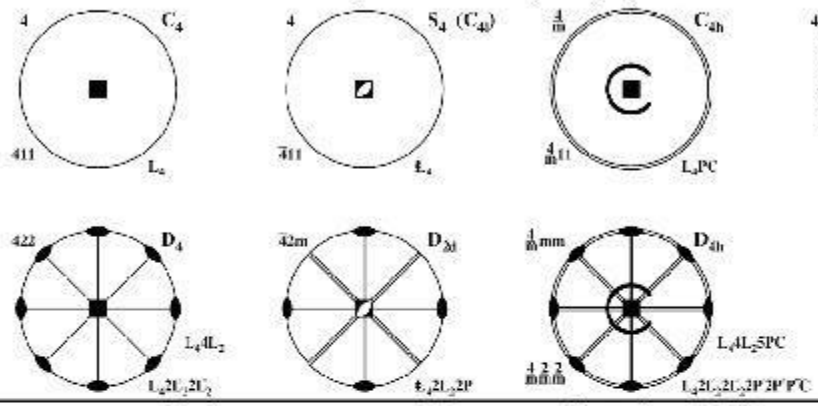
низшая, $a \neq b \neq c$	Категории средняя, $a = b \neq c$	высшая, $a = b = c$

Сингонии

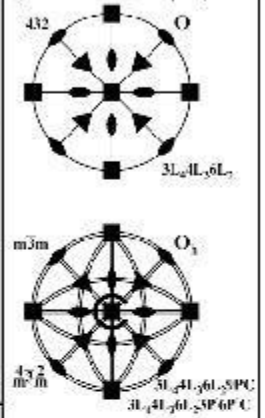
ромбическая, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



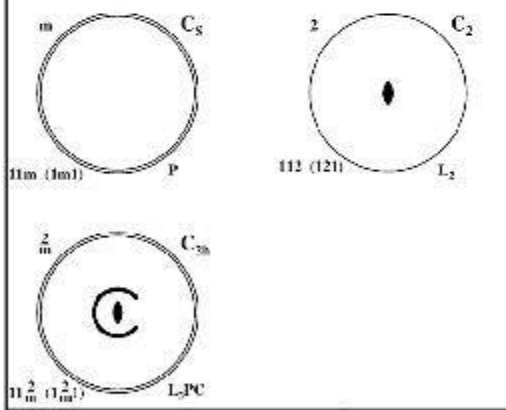
тетрагональная, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



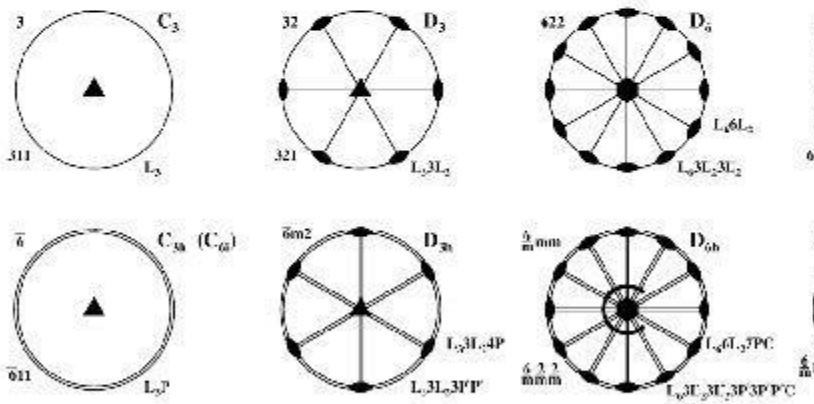
кубическая, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



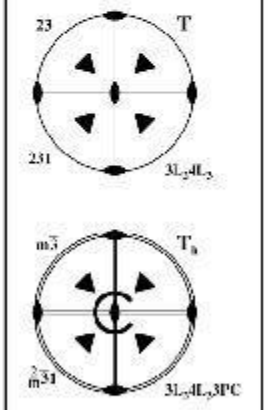
моноклинная, $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma\neq90^\circ$



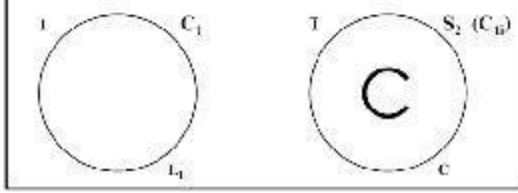
гексагональная, $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$

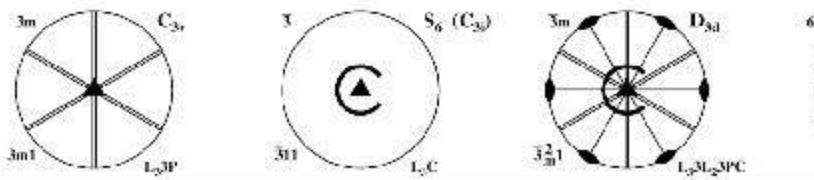


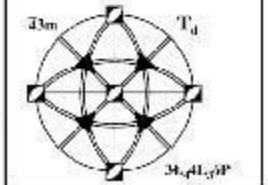
кубическая, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



триклинная, $\alpha\neq\beta\neq\gamma$



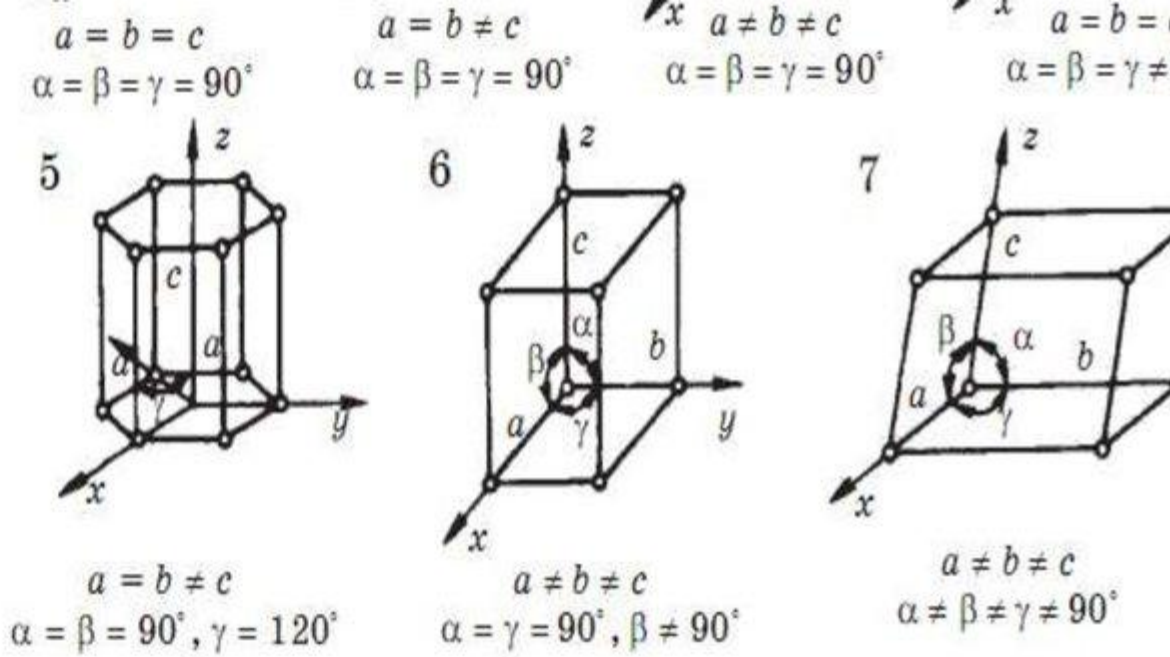


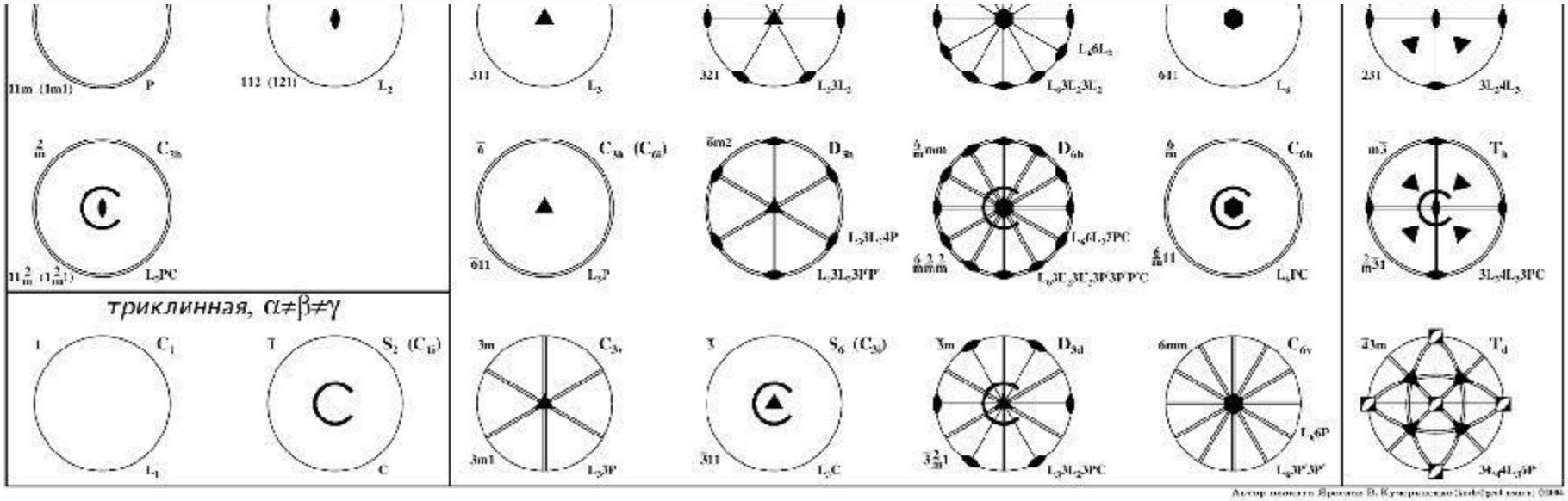


Автор пособия Ярошев В. Кучерявский (kuch@pel.sscc) 2006

- 5.Гексагональная
- 6. Моноклинная
- 7. Триклинная.

$$\vec{r} = m\,\vec{a}_0 + n\,\vec{b}_0 + p\,\vec{c}_0,$$

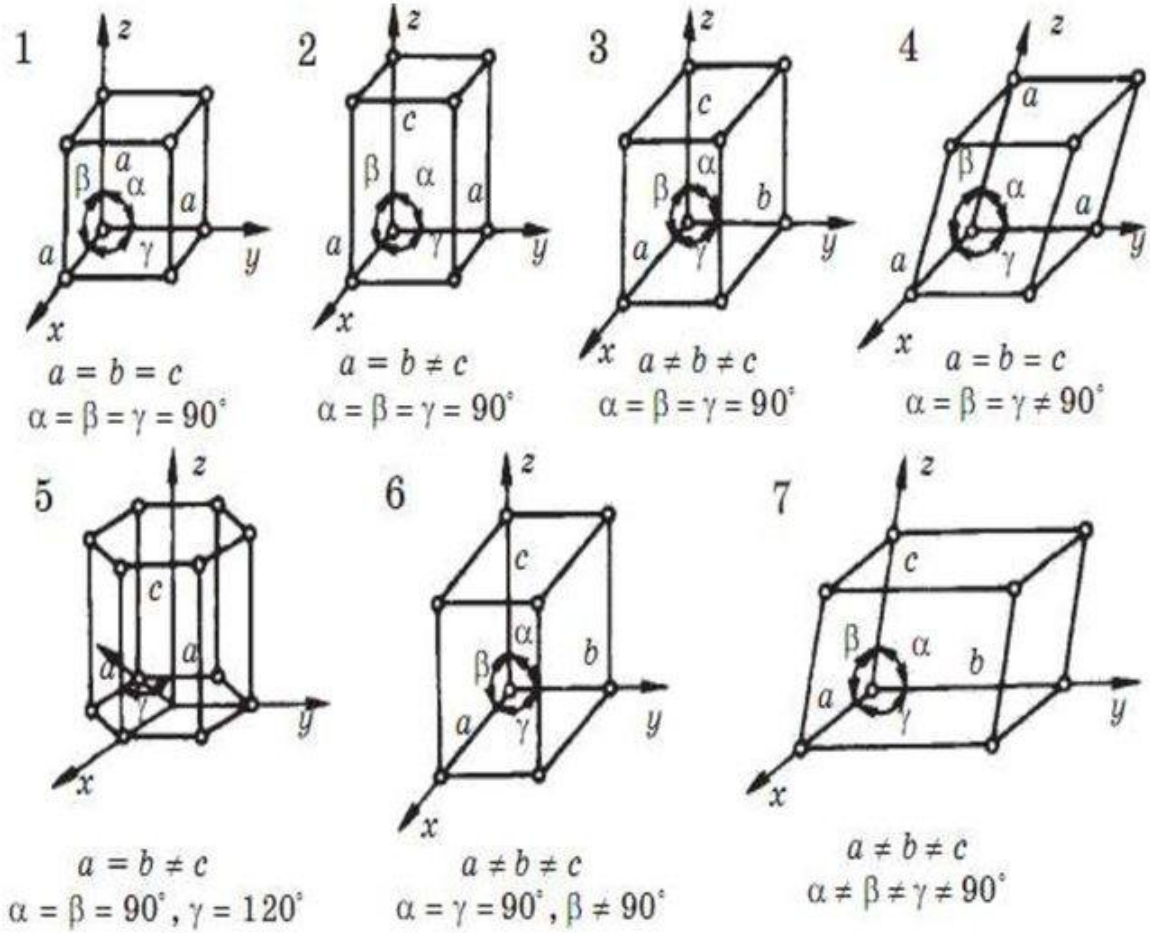




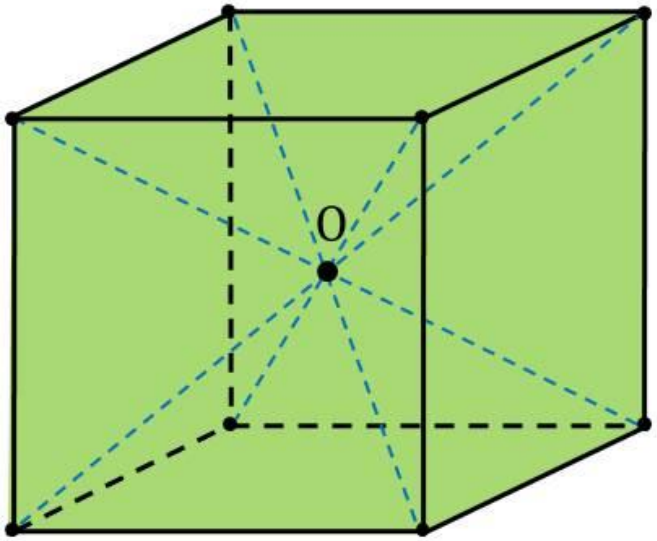
Типы кристаллических решеток (сингонии)

- 1. Кубическая
- 2. Тетрагональная
- 3. Ромбическая
- 4. ромбоэдрическая
- (тригональная)
- 5.Гексагональная
- 6. Моноклинная
- 7. Триклинная.

$$\vec{r} = m\,\vec{a}_0 + n\,\vec{b}_0 + p\,\vec{c}_0,$$



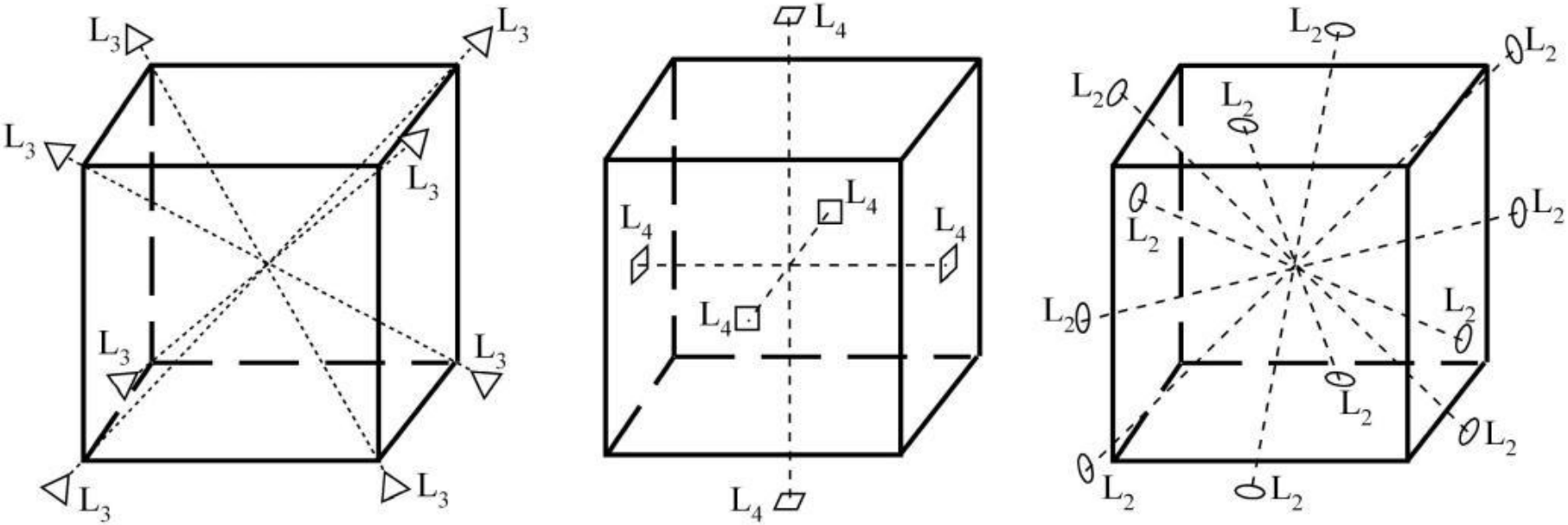
Симметрия куба

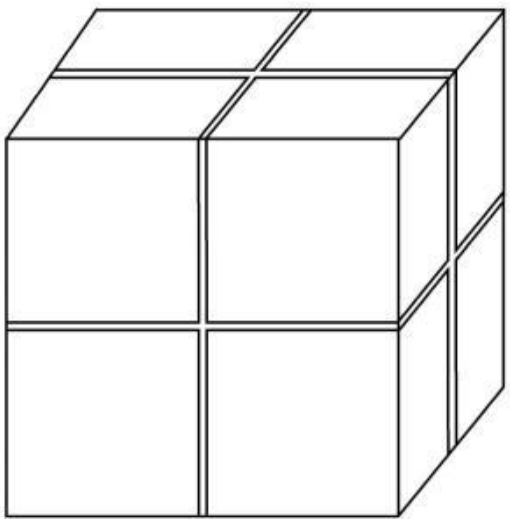


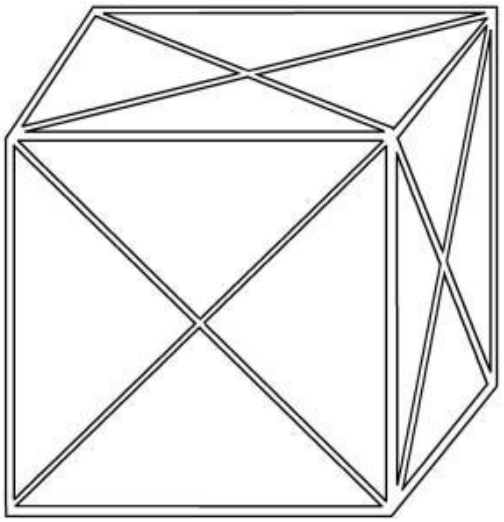
Ку
б

Операции симметрии

Элементы симметрии

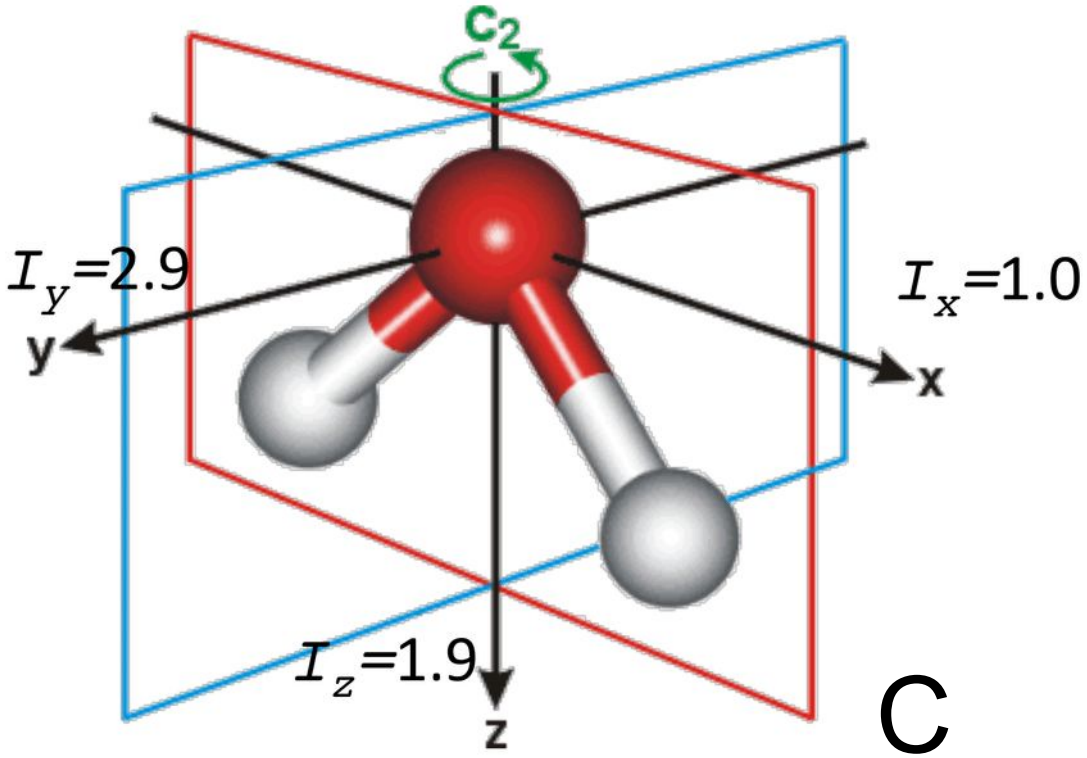






+
E

Поворотные оси



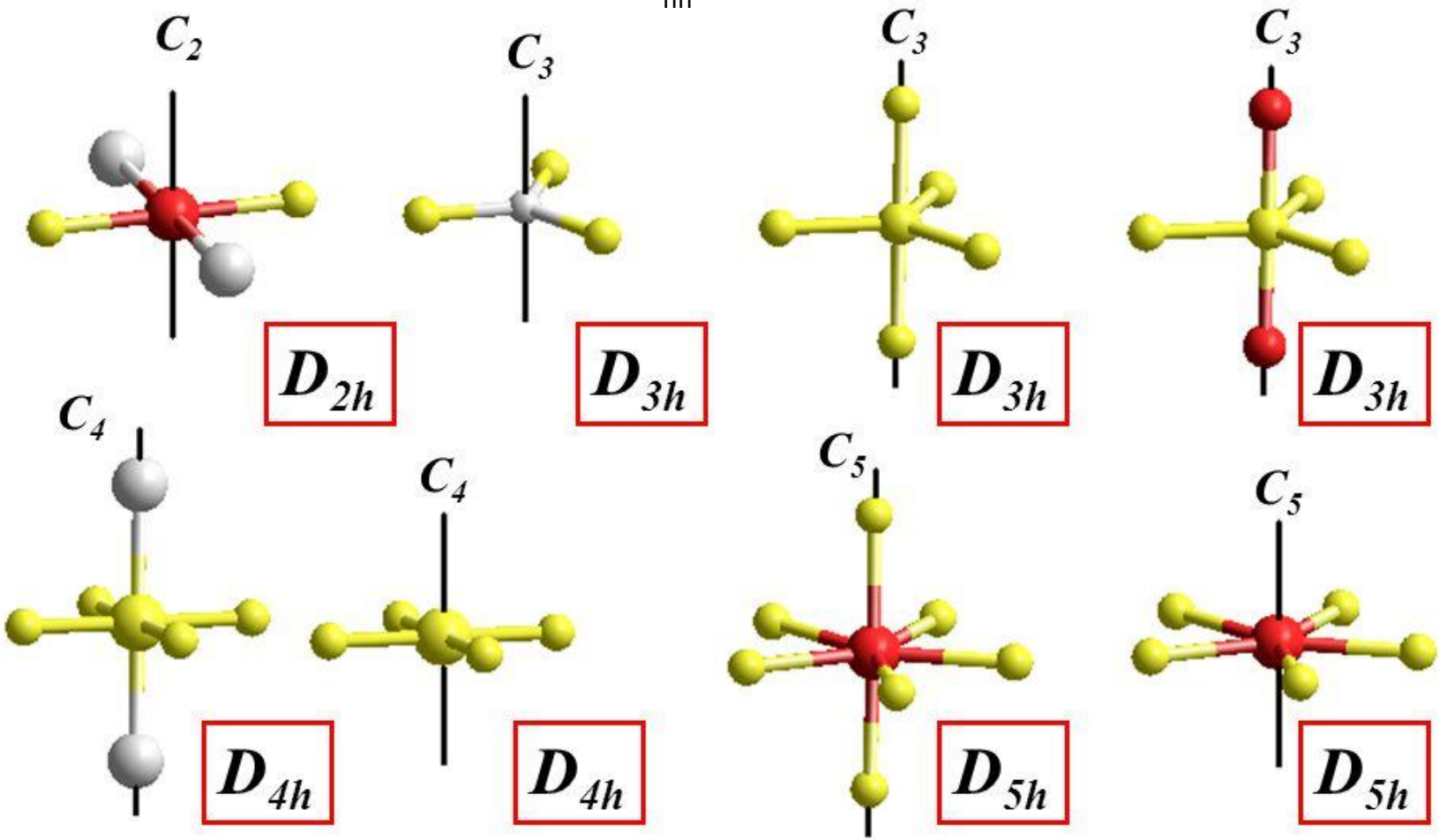
C

n

n = количество углов в основании

Оси отражения

Группы D_{nh}



Символы Шенфлиса

C_n^k - Поворот на 360/порядок оси

S_n^k - Поворот на 360/порядок оси + перпендикулярная плоскость (центр инверсии !)

σ – горизонтальная (h), вертикальная (v) или диагональная по отношению к оси наибольшего порядка σ отражения

Семейство C_n

Семейство S_n n - четное

C_n

+горизонтальная плоскость C_n

+вертикальная плоскость C_{nv}^h (пирамида)

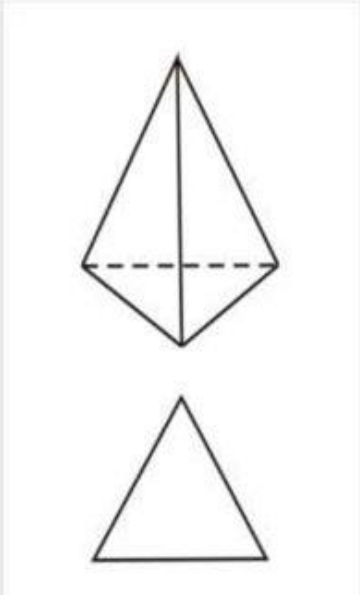
+перпендикулярные оси D_n (бипирамида)

+горизонтальная плоскость и перпендикулярная ось D_{nh} (призма)

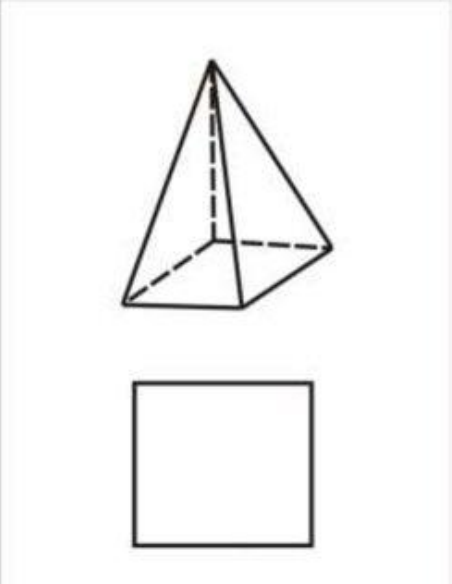
+перпендикулярная ось и горизонтальные оси D_{nd} (антипризма)

C_{nv}

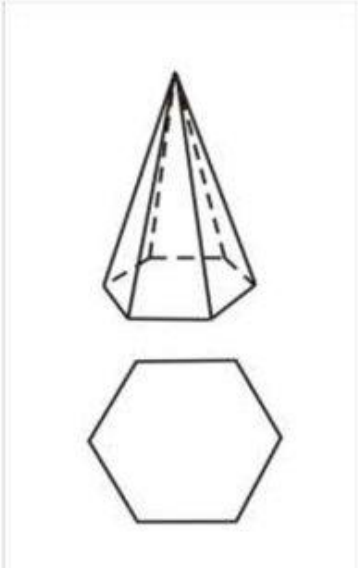
Тригональная



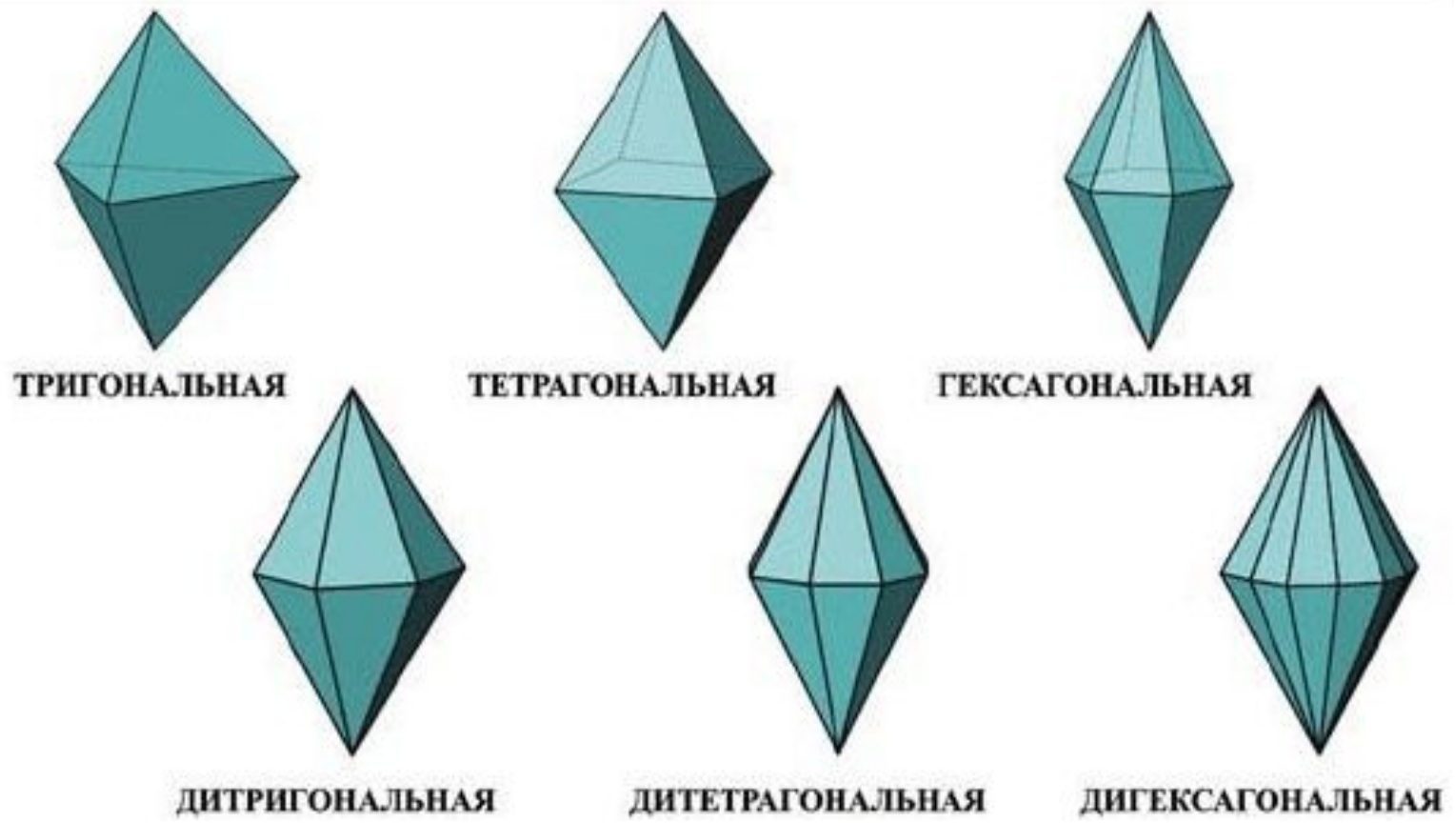
Тетрагональная



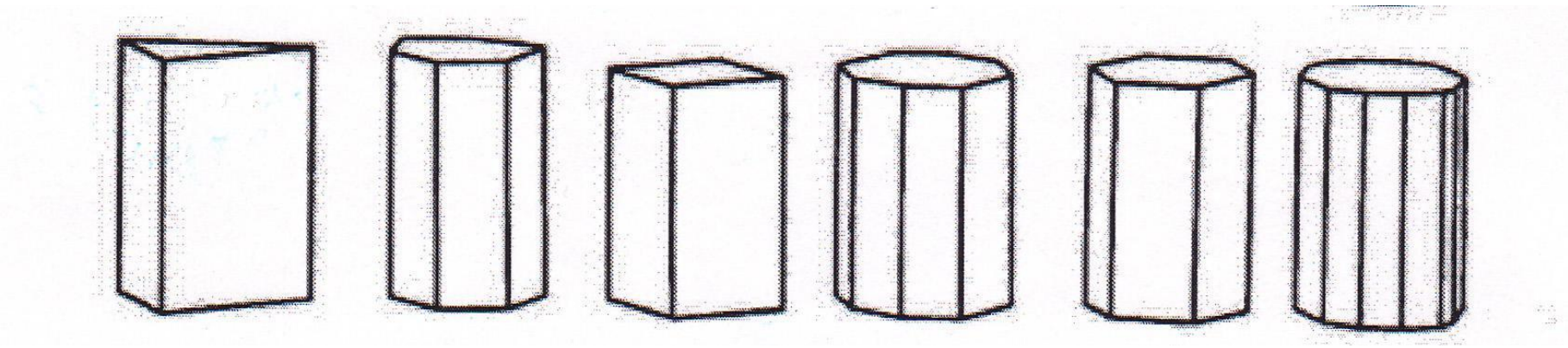
Гескагональная



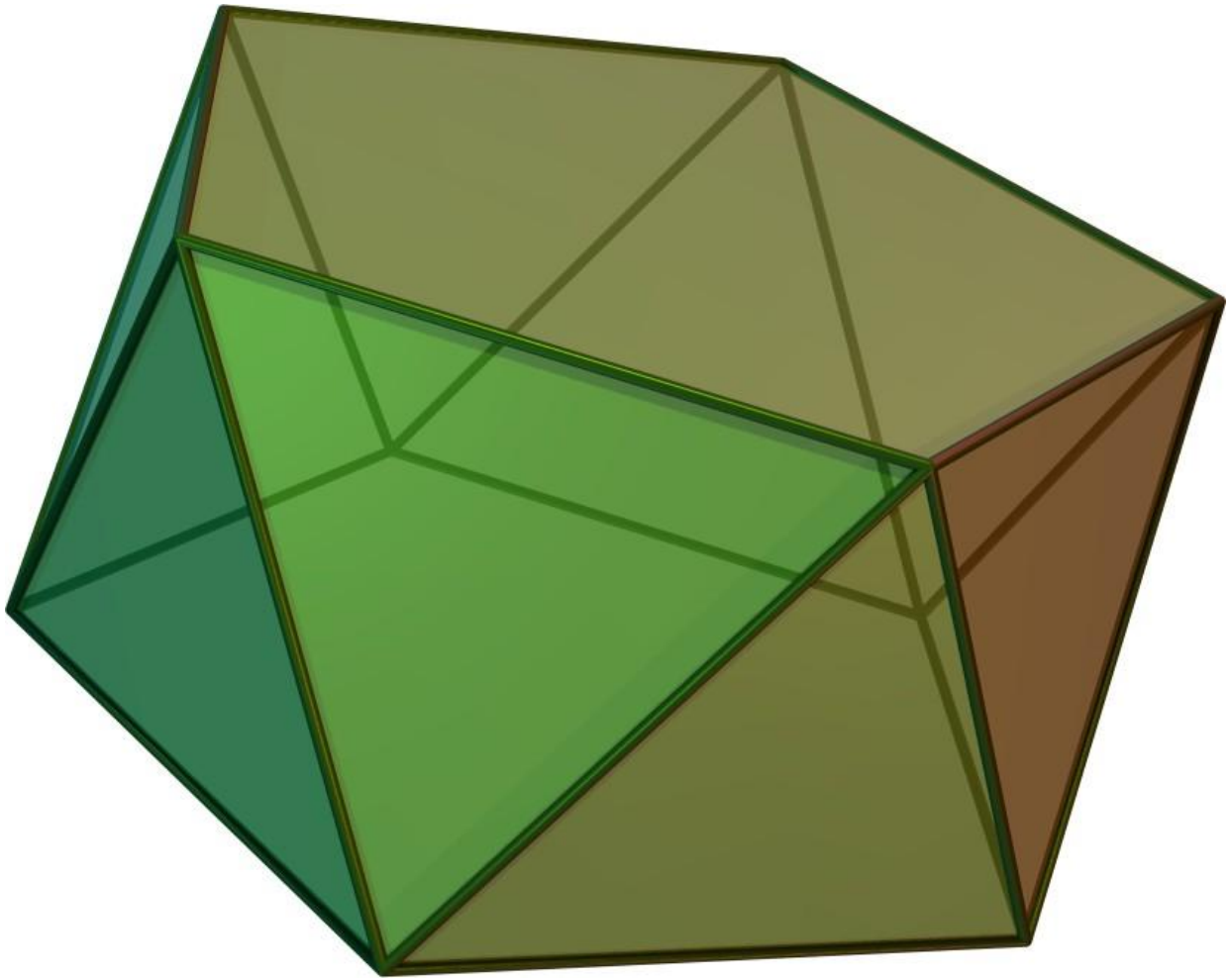
D_n


ТРИГОНАЛЬНАЯ
ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ
ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ
ДИТРИГОНАЛЬНАЯ
ДИТЕТРАГОНАЛЬНАЯ
ДИГЕКСАГОНАЛЬНАЯ

D_n



D_{nd}



Категории полиэдров

1. Низшая категория (Порядок оси не выше 2)

Семь групп: C_1, C_2, S_2, C_{2h}, C_{2v}, D_2, D_{2h}

2. Средняя категория (Одна ось порядка выше 2)

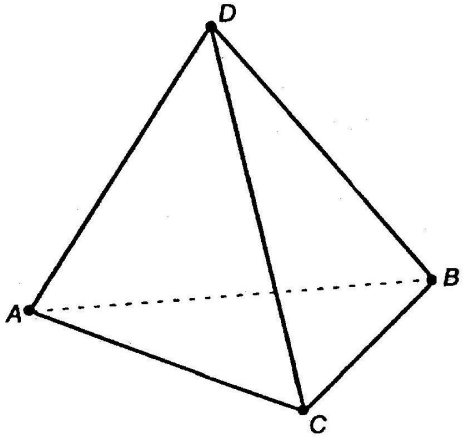
Семь семейств: C_n, S_n, C_{nh}, C_{nv}, D_n, D_{nh}, D_{nd}

3. Высшая категория (Больше 1 оси более высокого порядка, чем 2)

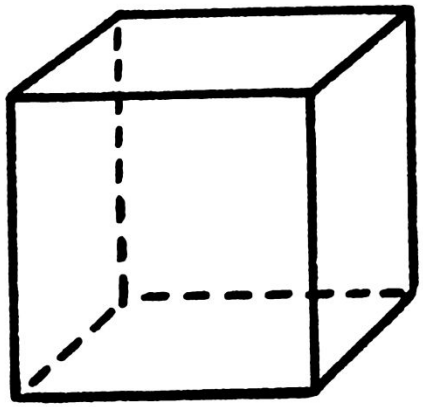
Семь групп: T, T_h, T_d, O, O_h, I, I_h

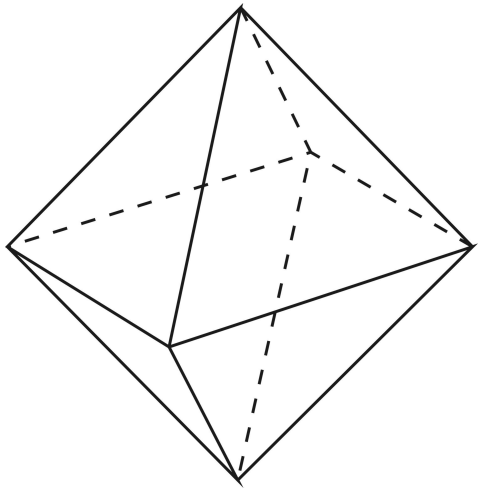
Платоновы тела

Дуализм полиэдров

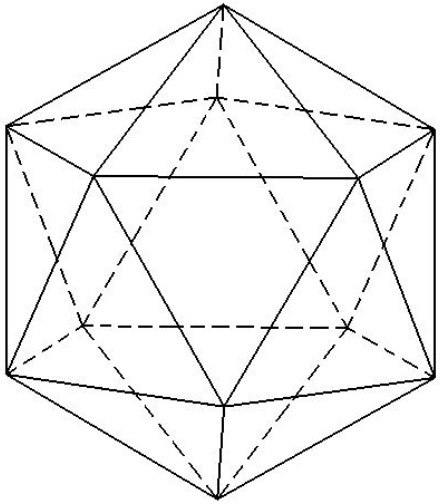


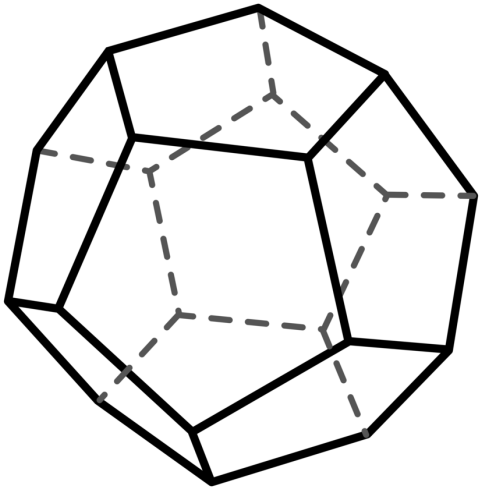
Тетраэдр T_d





O_h Куб-октаэдер

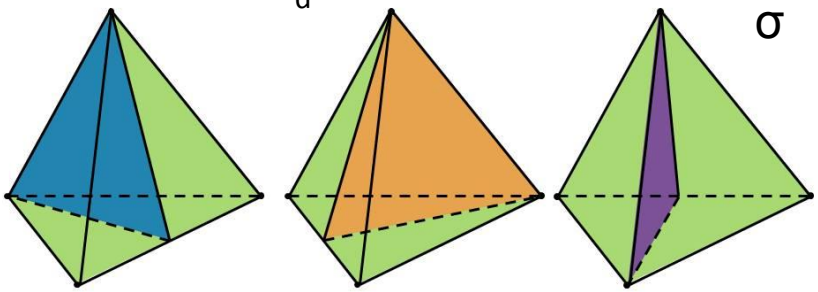


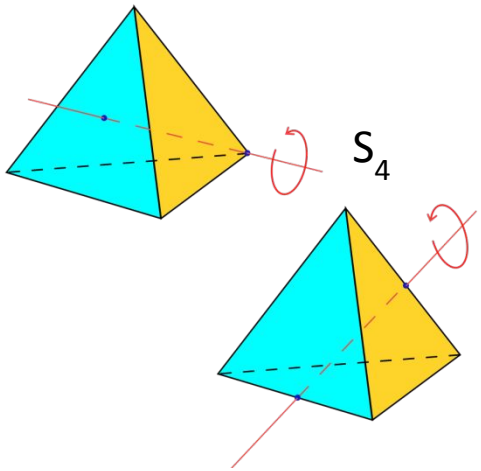


Икосаэдер – пентагон-додекаэдер I_h

Группы

T_d

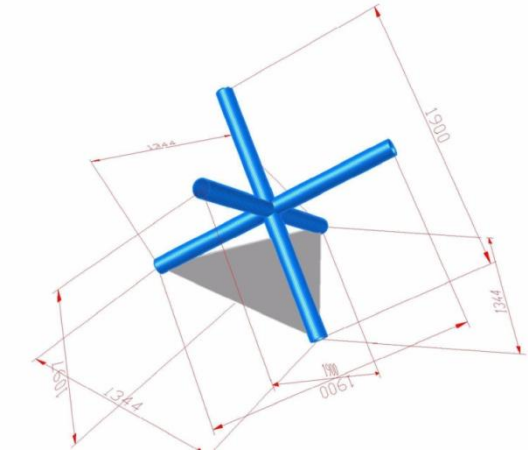




+ центр инверсии -

T_h

C

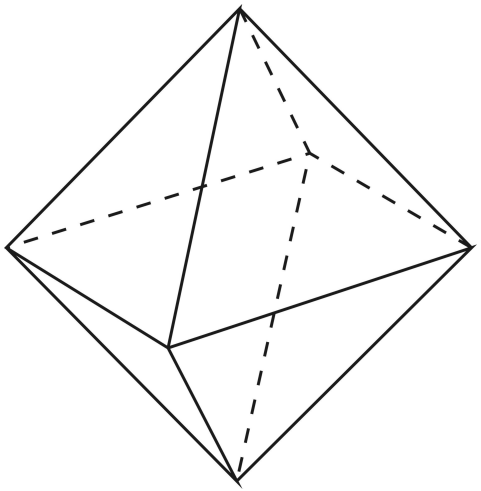


O_h

Центр симметрии

9 осей

9 плоскостей

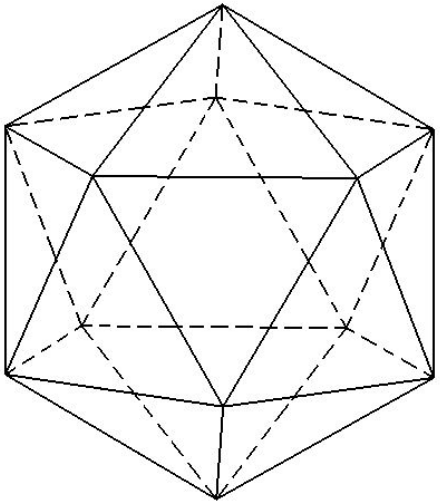


I_h

Центр симметрии

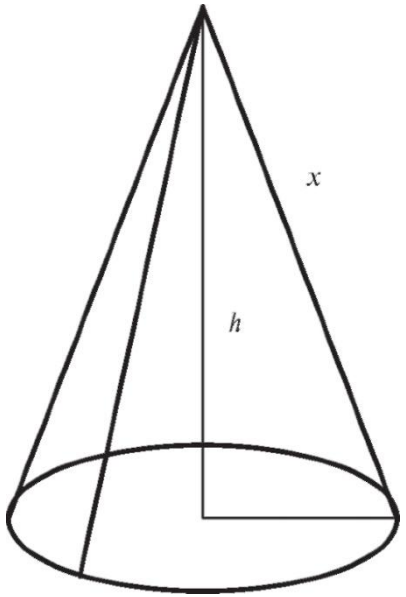
15 осей

15 плоскостей



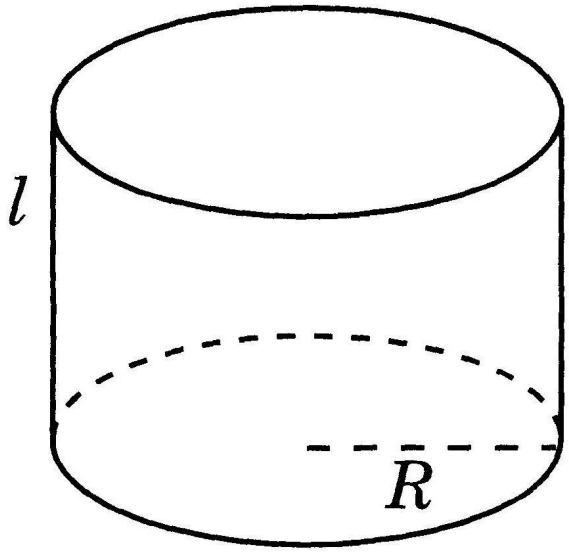
Предельные группы

$C_{\infty v}$

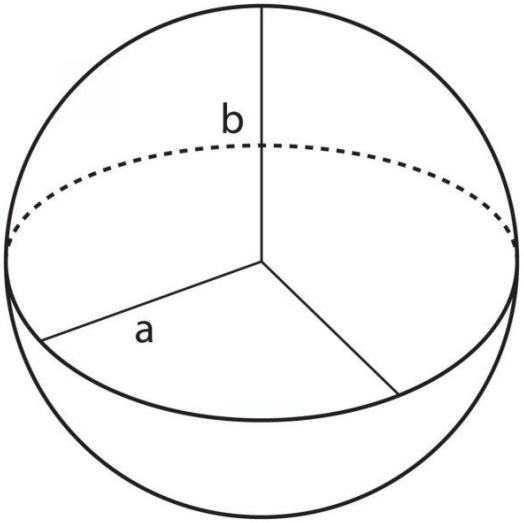


$D_{\infty h}$

+ производные от неё



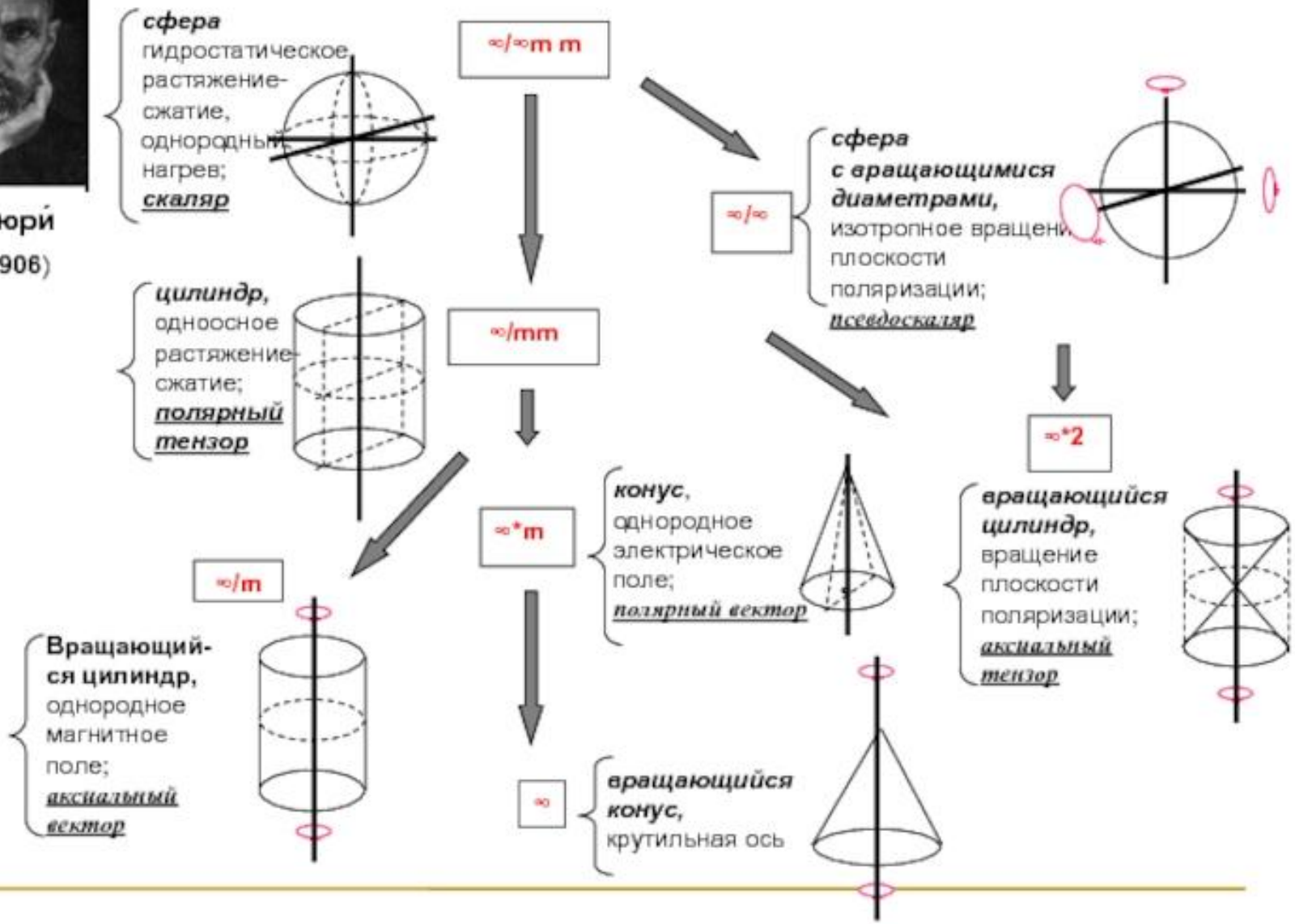
K_h



+ производные от неё

7 предельных групп

Пьер Кюри́

(1859—1906)

Блок- схема связей между предельными группами Кюри