Лекция 2
Координатные системы. Категории. Сингонии. Символика Шенфлиса, Германа-Могена

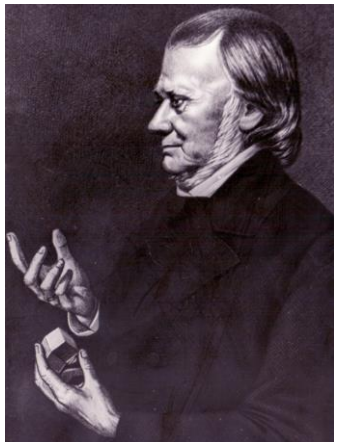
Разминка

Работая с кристаллами, исследователи обратили внимание на то, что элементы симметрии располагаются в них не случайно, а закономерным образом. Напомним, что полный набор элементов симметрии строго определенным образом располагающихся по отношению друг к другу называется ***классом симметрии***.

Число классов симметрии бесконечно, но в кристаллах, где могут существовать только оси определенных целочисленных порядков, число классов закономерно сокращается до тридцати двух.

Мориц Людвиг Франкенгейм (1801-1869)

В 1826 г. немецкий кристаллограф ***М. Л. Франкенгейм****(1801-1869 гг.) вывел 32 класса симметрии .*

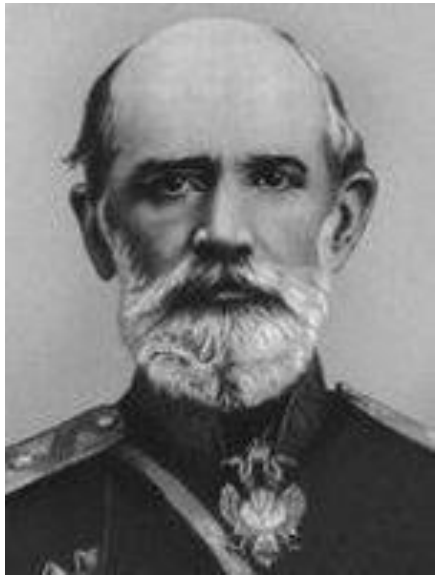


Иоганн Фридрих Христиан Гессель (1796-1872)

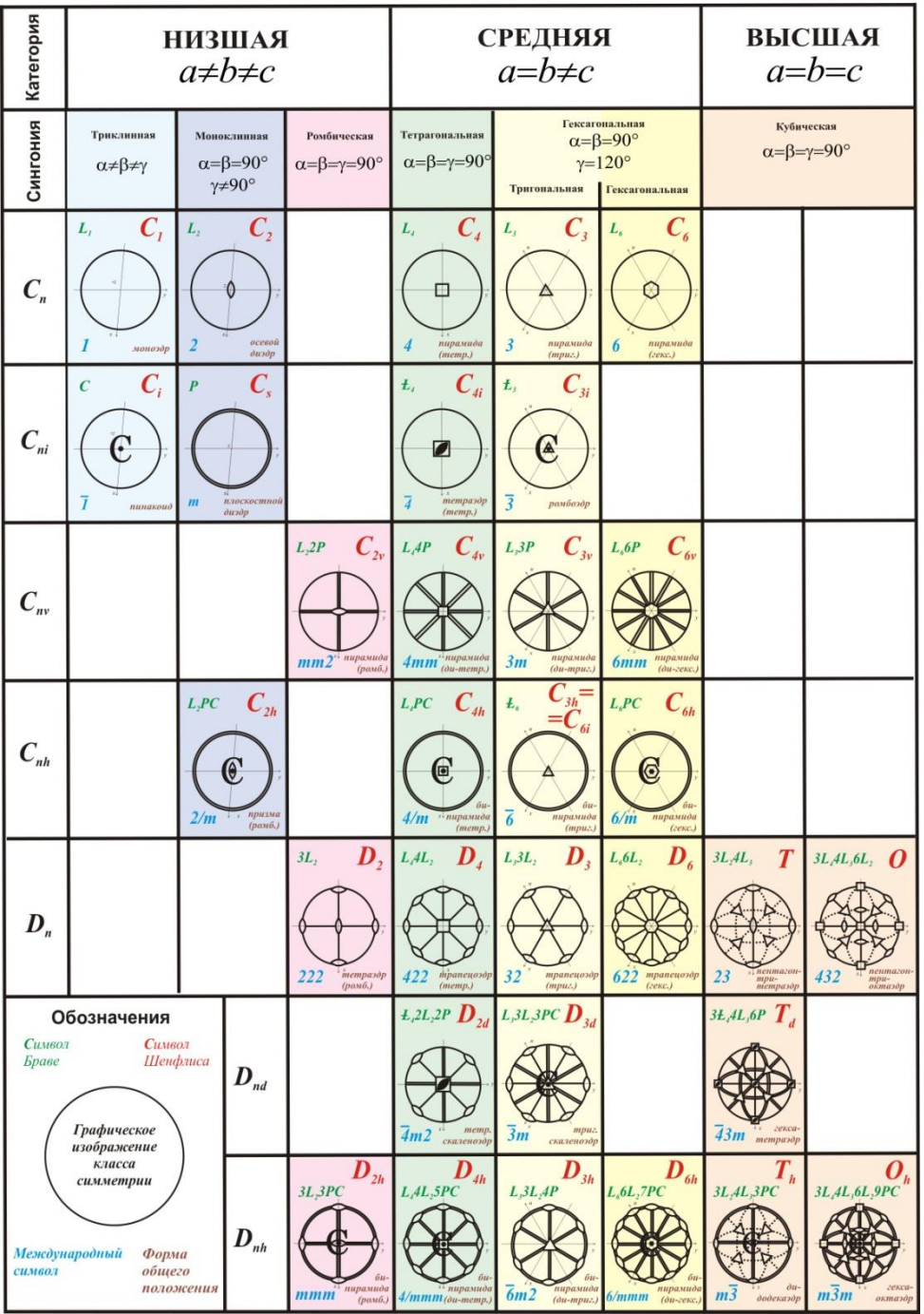
И. Ф. Х. Гессель *(1796-1872 гг.) в 1830 г. вывел 32 класса симметрии*

Однако их работы были недопоняты и забыты.

В 1867 г. Аксель Вильгельмович Гадолин **дал строгий математический вывод** *32 групп симметрии*.
(Петербургская АН в 1868 присудила ему за это Ломоносовскую премию).



32 КЛАССА СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

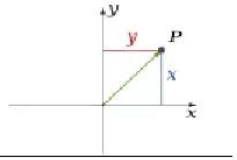


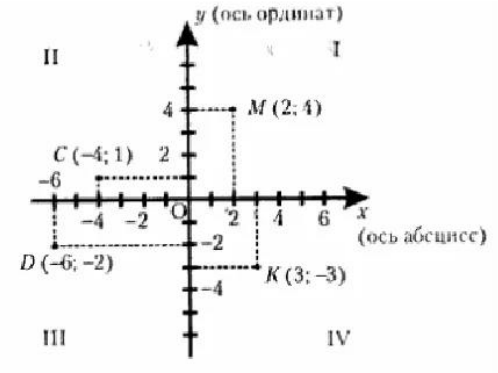
Скачать оригинал этой таблицы в формате А4 можно по гиперссылке http://cryst.geol.msu.ru/appliances/pics/32.jpg.

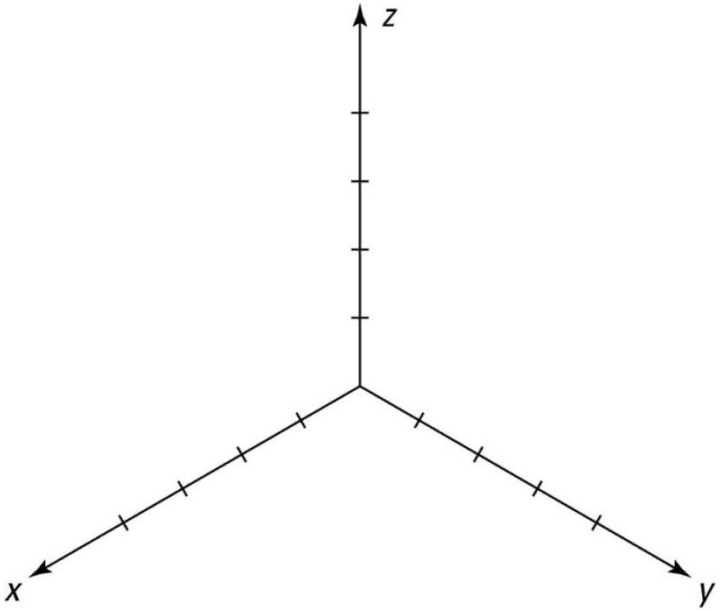
Координатные системы. Категории. Сингонии

Упорядоченная система двух или трёх пересекающихся перпендикулярных друг другу осей с общим началом отсчёта и ***общей единицей длины*** называется ***декартовой системой координат***. Из математики хорошо известна прямоугольная декартова система.

Рене Декарт
(1596-1659)

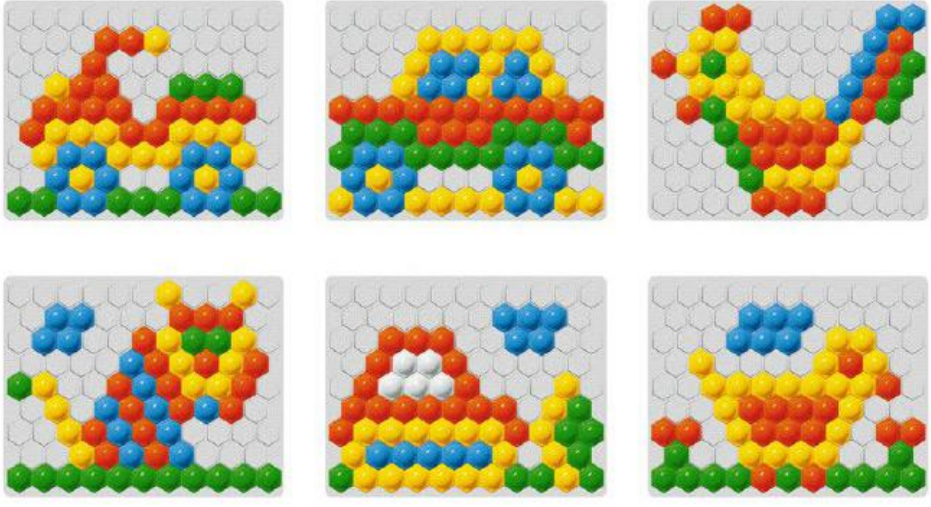






В кристаллографии такой координатной системой пользоваться **неудобно**, так как прямоугольная система координат с одинаковыми масштабами по осям часто **не соответствует реальной симметрии кристалла.**

Что бы не было противоречия между координатной системой и симметрией координатные оси выбирают по **особым направлениям** в кристалле

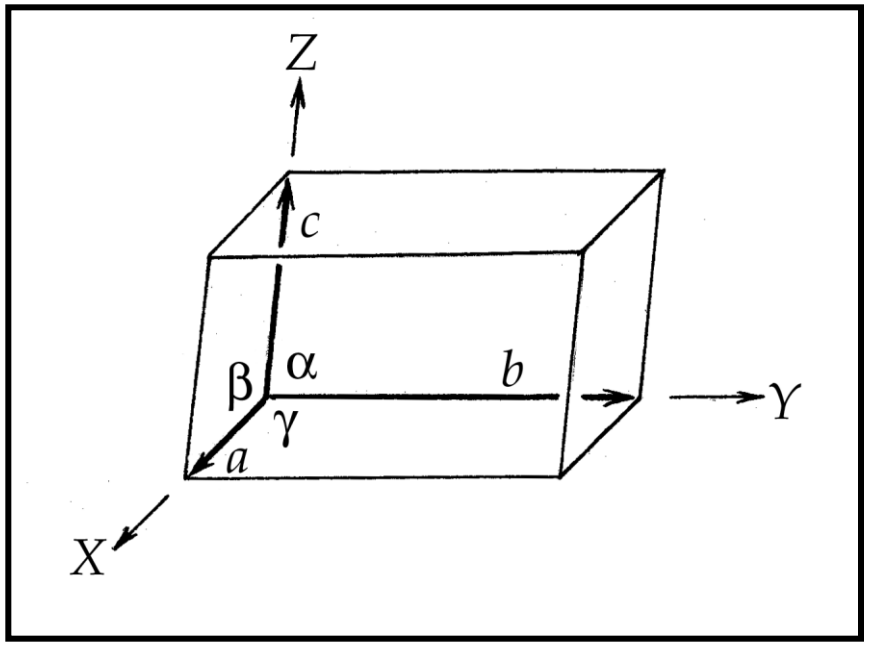


В кристаллографии **координатные оси совмещаются с *особыми направлениями* в кристалле.** При недостаточном их количестве (т.е. меньше трех) координатные оси выбираются по действительным или возможным ребрам кристалла.

Особые направления – оси симметрии (поворотные и инверсионные). Причем предпочтение отдается инверсионным осям.

Единичные направления – особые направления, не повторяющиеся в кристалле

Таким образом, в кристаллографии масштабы и углы между координатными осями ***задают элементы симметрии***

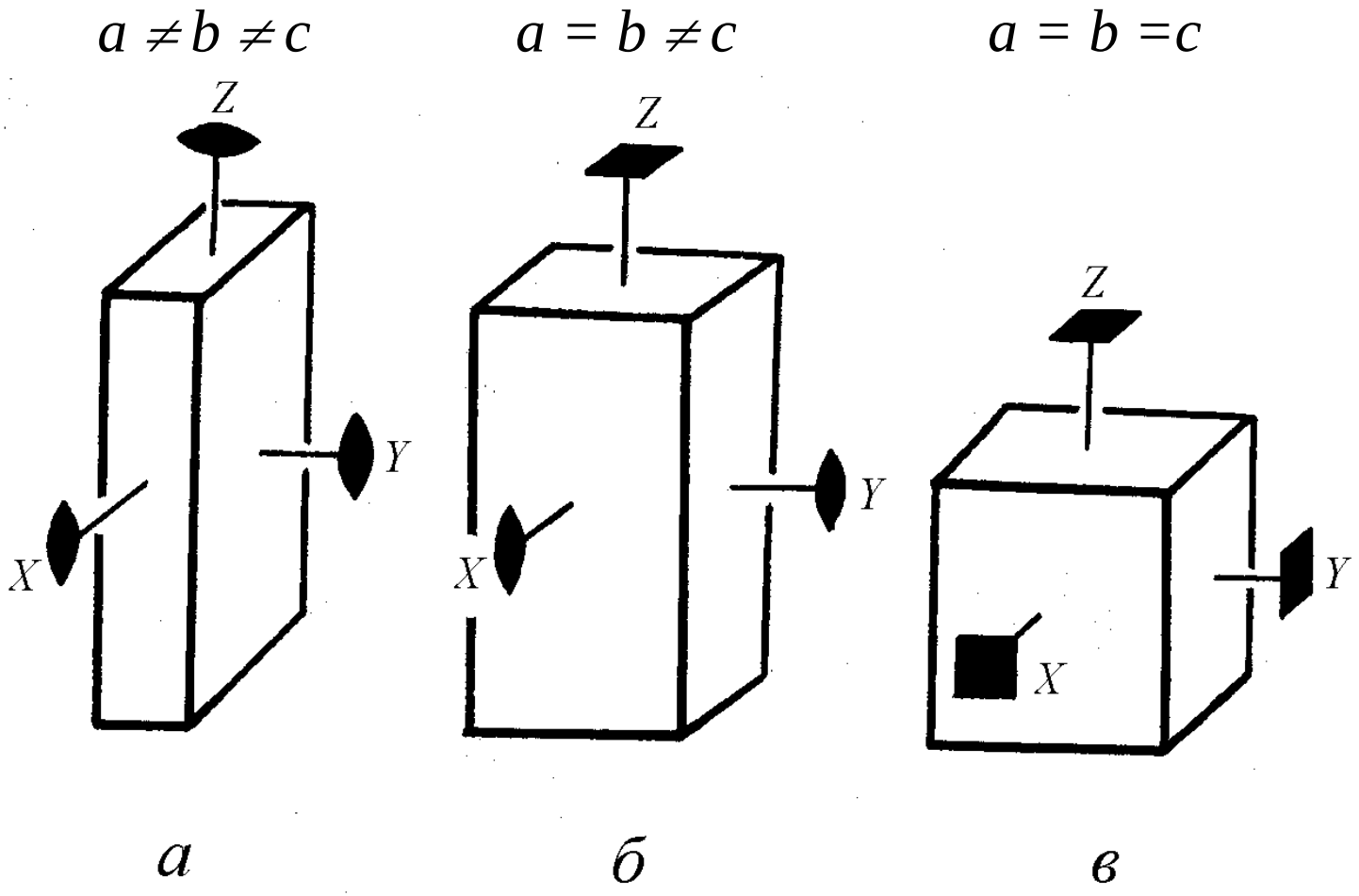


<u>Основные характеристики координатной системы:</u>

Метрические параметры (масштабные отрезки по координатным осям): ***a, b, c***

Угловые параметры (углы между координатными осями) ***α, β, γ***

По степени эквивалентности координатных направлений (условно ***равенство единичных векторов – масштабов a, b, c*** – по соответствующим координатным осям X, Y, Z) все 32 класса симметрии можно разделить на три группы: **3 категории.**



Категория *– объединение классов симметрии по принципу соотношения масштабных отрезков*

1) низшая категория $a \neq b \neq c$

полная неэквивалентность координатных направлений (которая объясняется отсутствием в них ***осей высшего порядка*** (>2)).

2) средняя категория $a = b \neq c$

частичная эквивалентность (присутствие в их группах симметрии одной ***оси высшего порядка***)

3) высшая категория $a = b = c$

полная эквивалентность (несколько ***осей высшего порядка***)

Категории, в свою очередь, по угловым характеристикам делятся на ***сингонии*** *- семейство классов симметрии* ***с единой координатной системой:*** **всего 6 сингоний.**

Низшая категория a ≠ b ≠ c

1) $\alpha = \beta = \gamma = 90°$, $a \neq b \neq c$

Ромбическая сингония

2) $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$ и углом моноклинности $\gamma \neq 90°$

Моноклинная сингония

3) $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$.

Триклинная сингония

Средняя категория a = b ≠ c

1) ***Тетрагональная сингония***

$a = b \neq c,\ \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

2) ***Гексагональная сингония***

$a = b \neq c,\ \alpha = \beta = 90^\circ,\ \gamma = 120^\circ$

Внутри **гексагональной сингонии** выделяют две подсингонии:

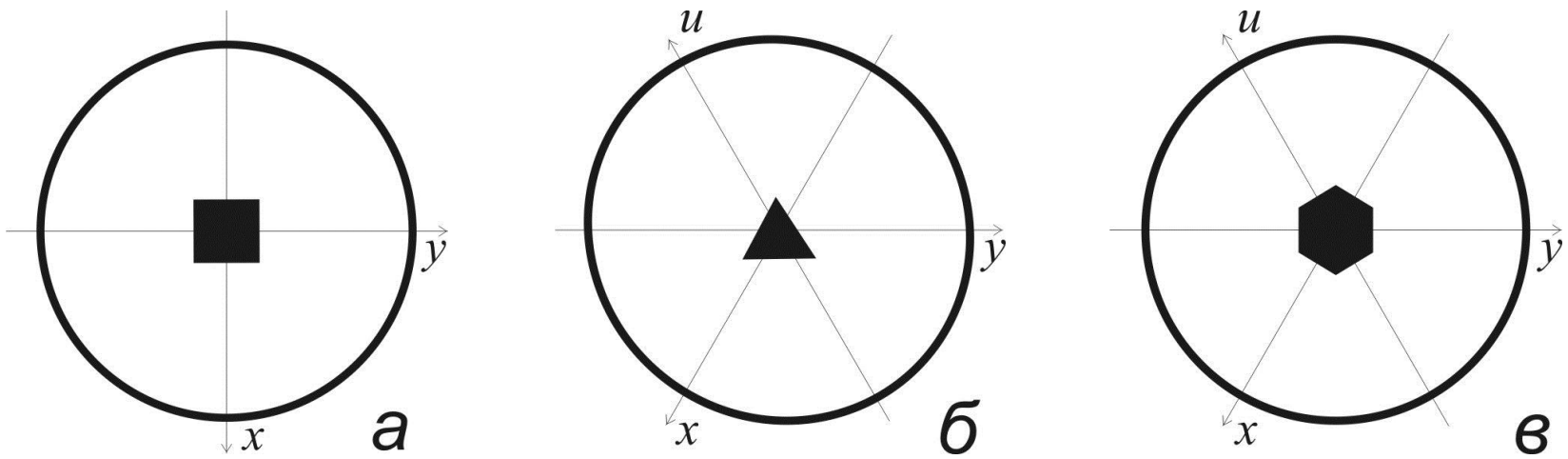
2а) **собственно гексагональную** подсингонию
(если порядок главной оси равен 6)

2б) **тригональную** подсингонию
(если порядок главной оси равен 3).

Средняя категория a = b ≠ c

Из условия эквивалентности двух горизонтальных координатных направлений ($a = b$) следует, что симметрия кристаллов средней категории описывается группами с единственной осью высшего порядка. С этой осью совмещают координатное направление Z, ориентируя его вертикально. Две другие оси – X и Y – выбирают в плоскости, перпендикулярной главной оси, по осям 2-го порядка или нормалям к плоскостям. Если же горизонтальных особых направлений в кристалле нет, то координатные оси выбирают по ребрам. Угол γ между осями X и Y определяется порядком главной оси и равен 90° в случае присутствия оси 4-го порядка и 120°, если присутствуют оси 3-го и 6-го порядков.

Средняя категория a = b ≠ c



Обратим внимание, что в координатной системе в гексагональной сингонии появляется еще одна ось (u) в горизонтальной плоскости, перпендикулярная оси z. С осями x и y эта ось u образует угол в 120˚.

На первый взгляд это глупость: пространство однозначно описывается тремя различными координатными направлениями. Но как выяснится позже, введение этой дополнительной оси **СИЛЬНО** облегчает дальнейшую жизнь в кристаллографии и ее введение просто необходимо.

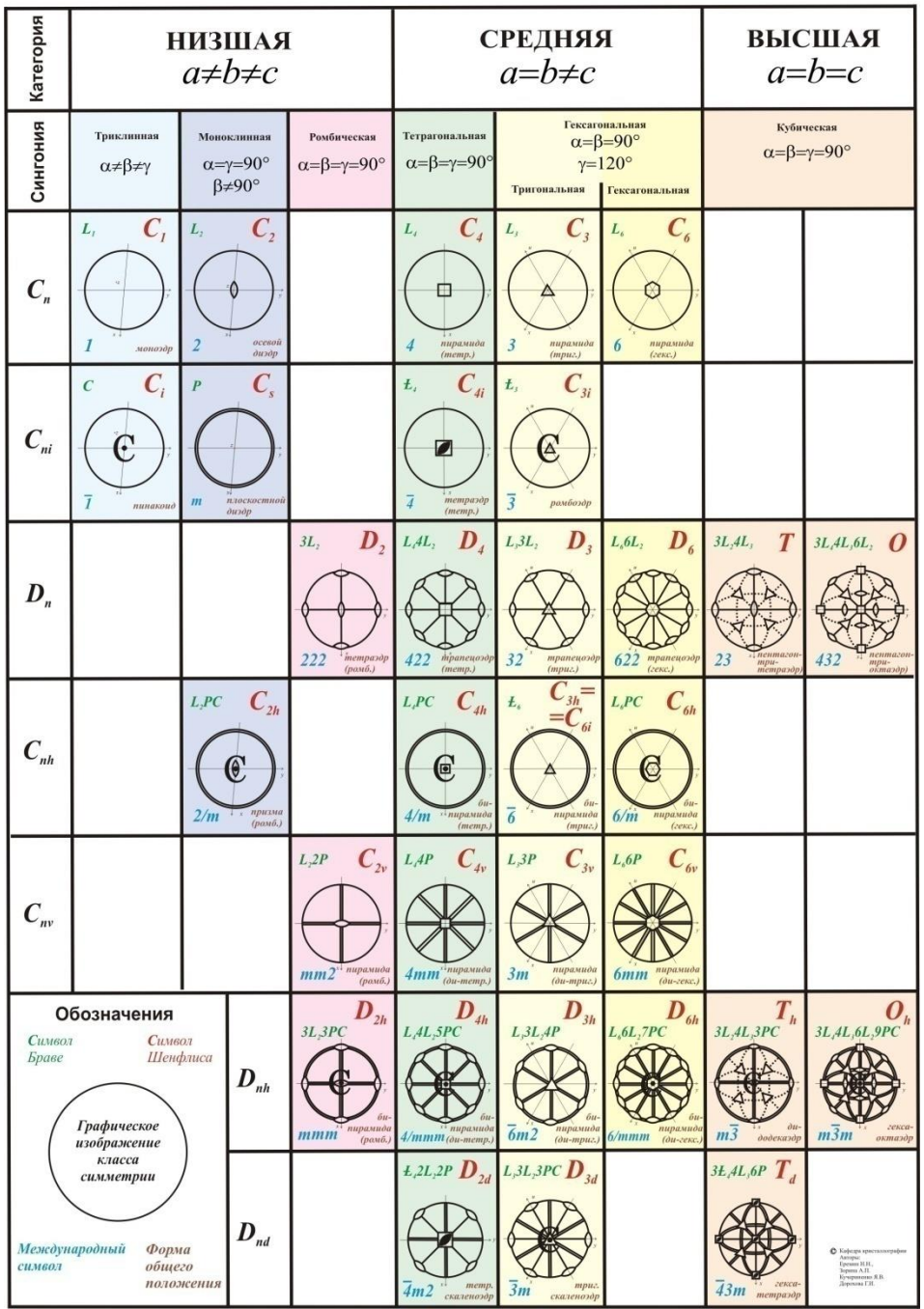
Высшая категория a = b = c

1) ***Кубическая сингония***:

$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

Равенство координатных осей приводит к тому, что равнонаклонно к координатным направлениям возникает наклонная ось третьего порядка, Если размножить ее элементами симметрии, находящимися в координатных осях, то получится 4 наклонные оси третьего порядка, **равноудаленных** от различных выходов координатных направлений.

32 КЛАССА СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ



Распределение классов по сингониям

Триклинная – 2
Моноклинная – 3
Ромбическая – 3
Тетрагональная - 7
Гексагональная - 12 (7+5)
Кубическая - 5

Символики

Учебная символика Браве громоздка и не экономна

Учебная символика Браве не несет информации о направлениях, с ней можно легко потеряться

Символика Шенфлиса

Символика точечных групп симметрии, предложенная немецким математиком А. Шенфлисом, позволяет одной буквой с соответствующим нижним индексом не только охарактеризовать весь набор элементов симметрии конкретной точечной группы, но и объединить родственные группы в отдельные семейства.

Для не кубических классов симметрии достаточно всего двух букв: C и D. Подстрочный цифровой индекс указывает на порядок главной оси, а буквенный на расположение плоскостей (при наличии).

Символика Шенфлиса

v (*vertical* – вертикальный) – для плоскостей, расположенных вдоль единственной или главной оси симметрии, которая всегда мыслится вертикальной

h (*horisontal* – горизонтальный) – для плоскости, перпендикулярной к главной оси симметрии

d – (*diagonal* - для вертикальных плоскостей симметрии, делящих пополам угол между побочными осями 2-го порядка – плоскости делители

s (от нем. *spiegel* - зеркало) – для плоскости неопределенной ориентации, т.е. не фиксированной ввиду отсутствия в группе иных элементов симметрии

Символика Шенфлиса

1) Циклические группы – группы с единственным особым направлением, представленным поворотной осью симметрии, – обозначаются буквой ***C****, с нижним цифровым индексом* ***n****, соответствующим порядку этой оси (например, класс* C_4 *содержит только ось* L_4 *;* C_1 *– только ось* L_1*).*

2) Группы с единственной инверсионной осью симметрии сопровождаются нижним индексом **i***, например* C_{3i} = $Ł_3$. *Если же инверсионной оси предпочитают ее зеркальный эквивалент, то группа с такими осями обозначается* S_n

3) Группы симметрии с побочными (горизонтальными) – перпендикулярными главному направлению – осями 2-го порядка обозначаются D_n*, где нижний индекс* **n** *соответствует не только порядку главной поворотной оси, но и количеству побочных осей 2-го порядка*

Переход от учебной символики Браве к символам Шенфлиса предполагает владение правилами взаимодействия элементов симметрии. Все сочетания элементов симметрии можно разделить на два типа:

Единственную (или главную) ось Шенфлис мыслил вертикальной.

К этой оси можно добавлять элементы симметрии:

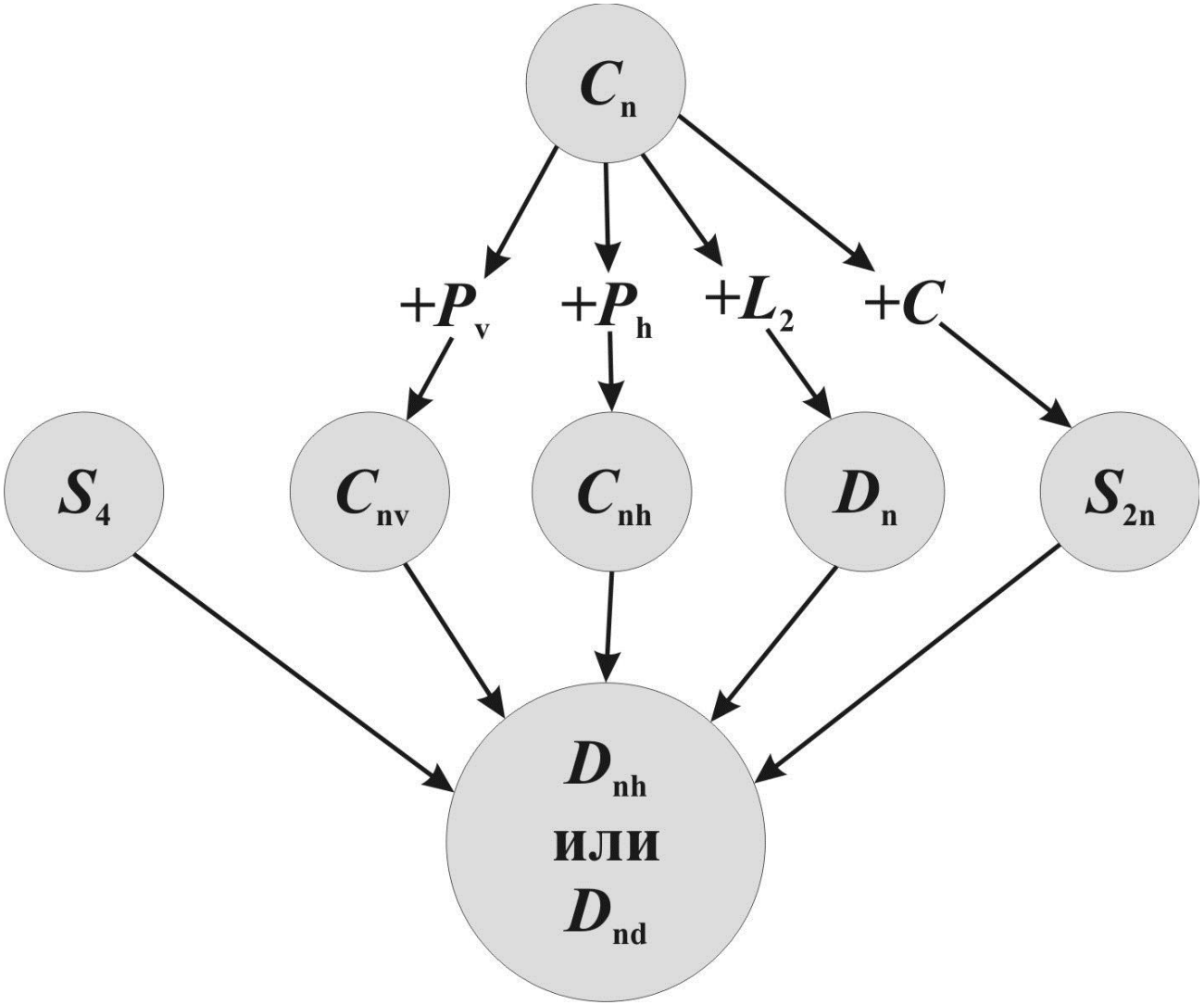
-перпендикулярную плоскость ***P*** – получим классы C_{nh} (при n=2k характер оси не изменится, добавится центр инверсии, а если n=2k +1, то ось станет зеркальной $L_3P_{\perp}$. Шенфлис обозначил такие классы ***Sn***, а соответствующие им инверсионные оси - ***Cni***

-Параллельные плоскости ***P***– получим классы C_{nv}

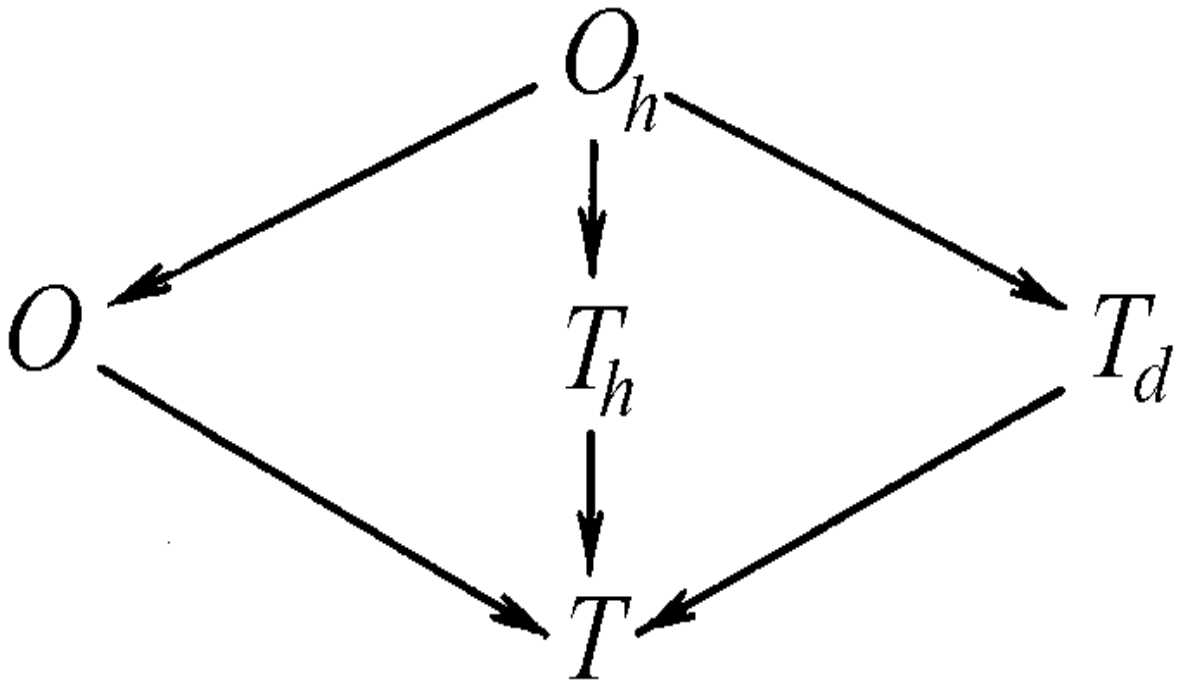
- $C_{1h} = C_{1v} = C_S$

-Перпендикулярные оси L_2 – получим классы D_n

Взаимосвязь классов симметрии с единичным направлением



Для кубических кристаллов используются две буквы: T и O, которые обозначают осевой набор тетраэдра и октаэдра соответственно.

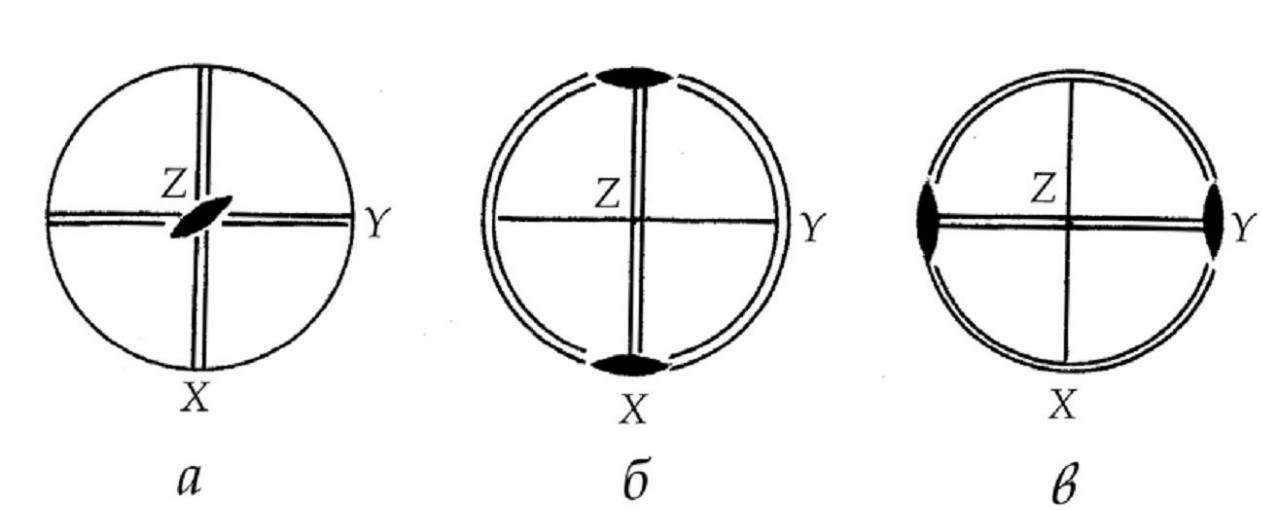


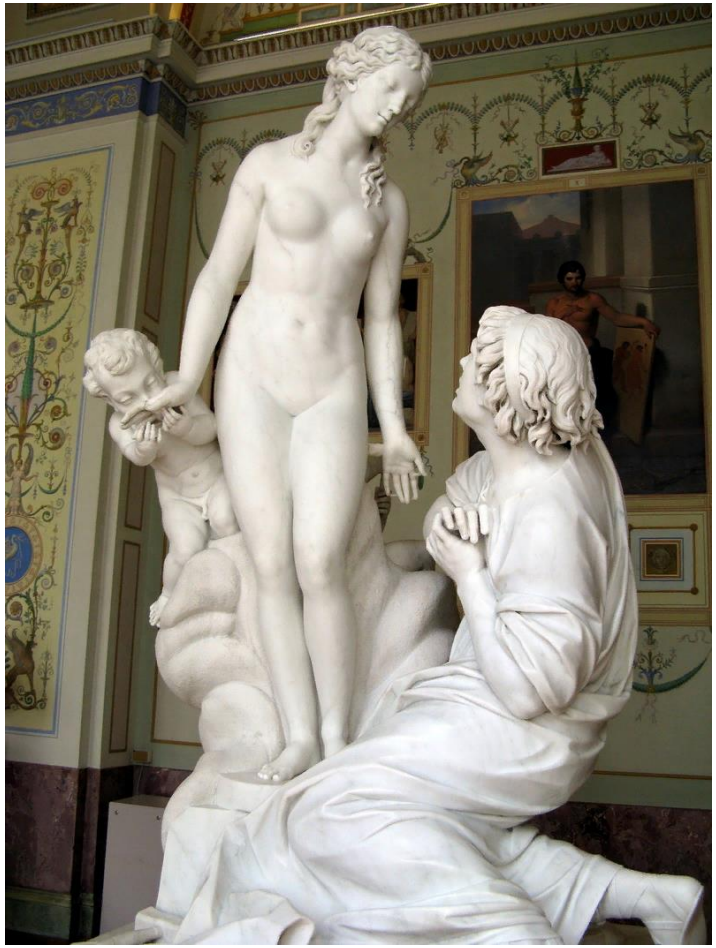
Главный недостаток как символики Шенфлиса, так и учебной символики Браве – *отсутствие привязки к координатной системе*.

Это, в принципе, одно и тоже!

C_{2v}

$L_2PP`$





Этого недостатка лишена используемая в настоящее время в кристаллографии

международная символика (***символика Германа – Могена***),

Эта символика практически лишена недостатков: изящна, компактна, однозначно привязана к координатным осям

Символика Германа-Могена (международная)

Была предложена немецким кристаллографом Карлом Германом в 1928 году и модифицированы французским минералогом Шарлем Могеном в 1931 году. Также называются международными символами, поскольку используются в International Tables for Crystallography, начиная с их 1-ого издания в 1935 году.

Международный символ класса также как и символ Шенфлиса, достаточно компактен и предполагает знание теорем взаимодействия элементов симметрии. В отличие от символов Браве и Шенфлиса он четко указывает на ориентацию кристалла относительно выбранных координатных осей.

Международный символ фиксирует элементы симметрии на всех не эквивалентных особых направлениях.

Символика Германа-Могена (международная)

Поворотные оси обозначаются арабскими цифрами: 1, 2, 3, 4, 6

Инверсионные оси - арабскими цифрами с верхним подчеркиванием: $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$

Плоскости зеркального отражения обозначаются маленькой латинской буквой ***m*** и **фиксируются нормалью!!!**

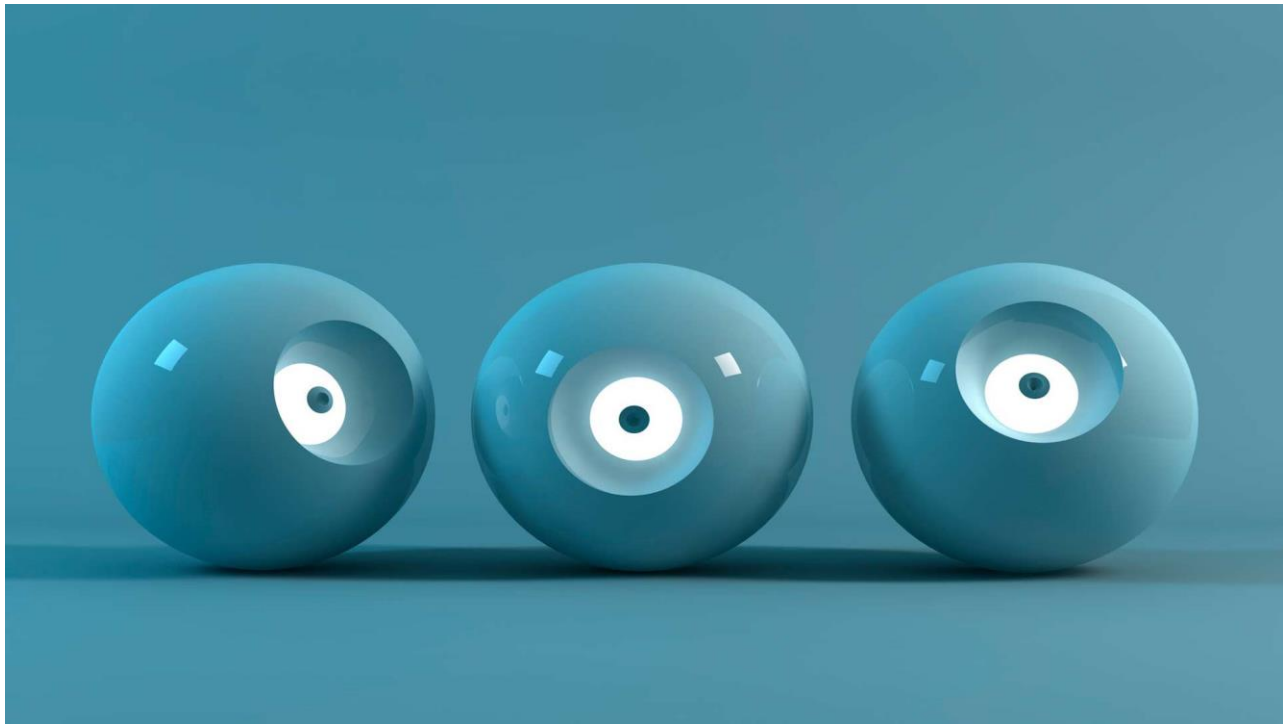
Центр инверсии обозначается как инверсионная ось: $\bar{1}$

Не эквивалентных особых направлений не может быть больше трех

№1

№2

№3



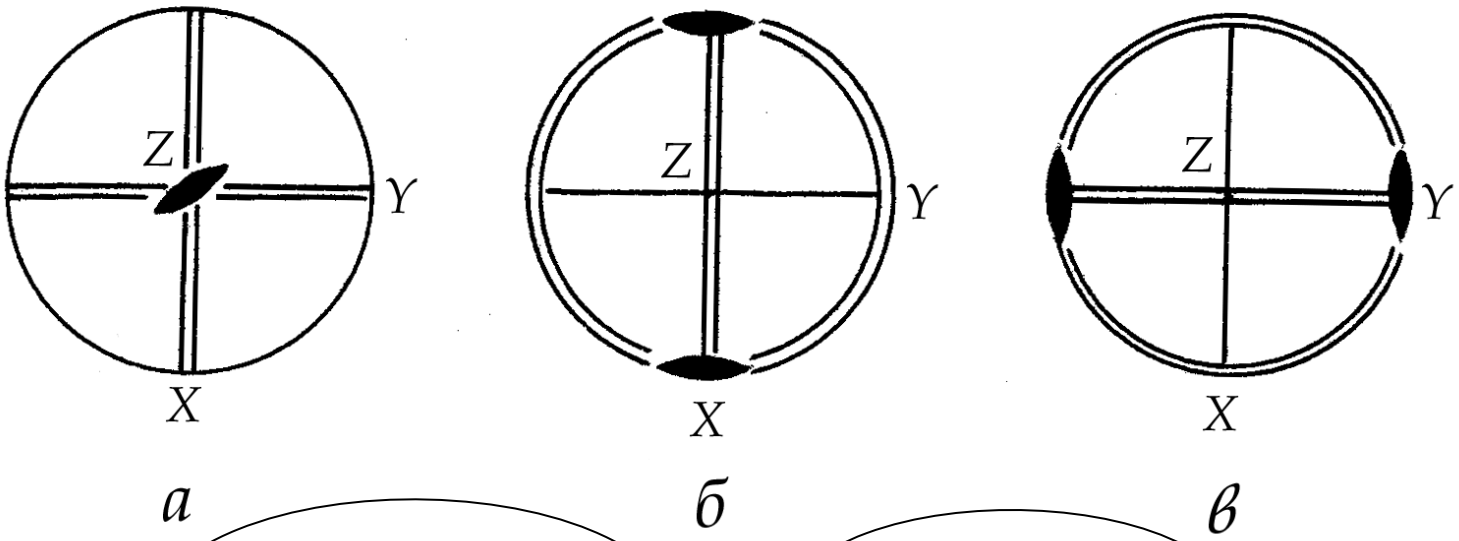
Специальные 3 глаза, которые видят поворотные и инверсионные оси симметрии

Символика Германа-Могена (международная)

Вид международного символа зависит от категории.

		I позиция ***Глаз 1***	II позиция ***Глаз 2***	III позиция ***Глаз 3***
Низшая категория	$a \neq b \neq c$	X	Y	Z
Средняя категория	$a = b \neq c$	Z	X = Y (=*U*)	α/2
Высшая категория	$a = b = c$	X = Y = Z	3	α/2

Символика Германа-Могена



Это одно и тоже! C_{2v}!

Это не одно и тоже!

Зависимость международного символа группы симметрии $L_2 2P$ от ее ориентации относительно выбранных координатных осей:

а – ***mm2***, *б* – ***2mm***, *в* – ***m2m***

Символика Германа-Могена (международная)

Если по выбранному направлению располагается и поворотная ось и нормаль к плоскости, то их записывают в виде дроби: в числителе – ось, в знаменателе – нормаль к плоскости

например: $L_2PC = \dfrac{2}{m}$

Обратим внимание, что центр в записи **отсутствует**. Предполагается, что читатель понимает, что если ось второго порядка перпендикулярна к плоскости, то центр неизменно возникнет (L_2 –P – C), то есть центр заложен в записи в неявном, скрытом виде! Опускают в записи так же оси 2, если являются порожденными. Оси высших порядков пишутся **всегда (почти)!**

Символика Германа-Могена (международная)

Координатные оси всегда выбираются по перпендикулярам к плоскостям

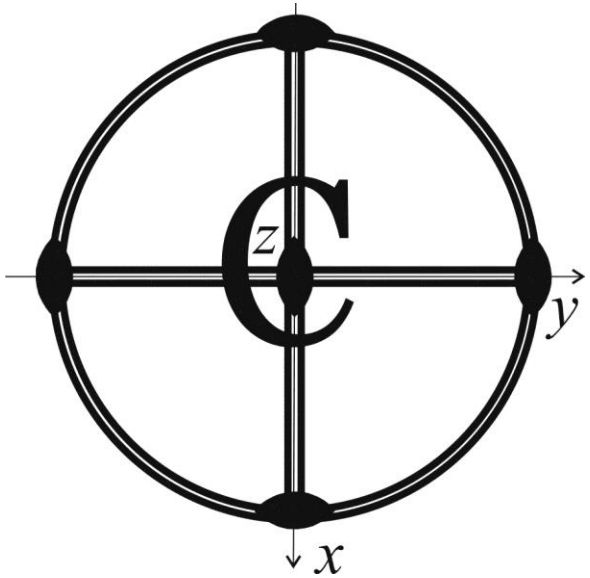
В случае отсутствия плоскостей – по осям симметрии

Символика Германа-Могена (международная)

Таким образом, построение международного символа состоит из **двух этапов**:

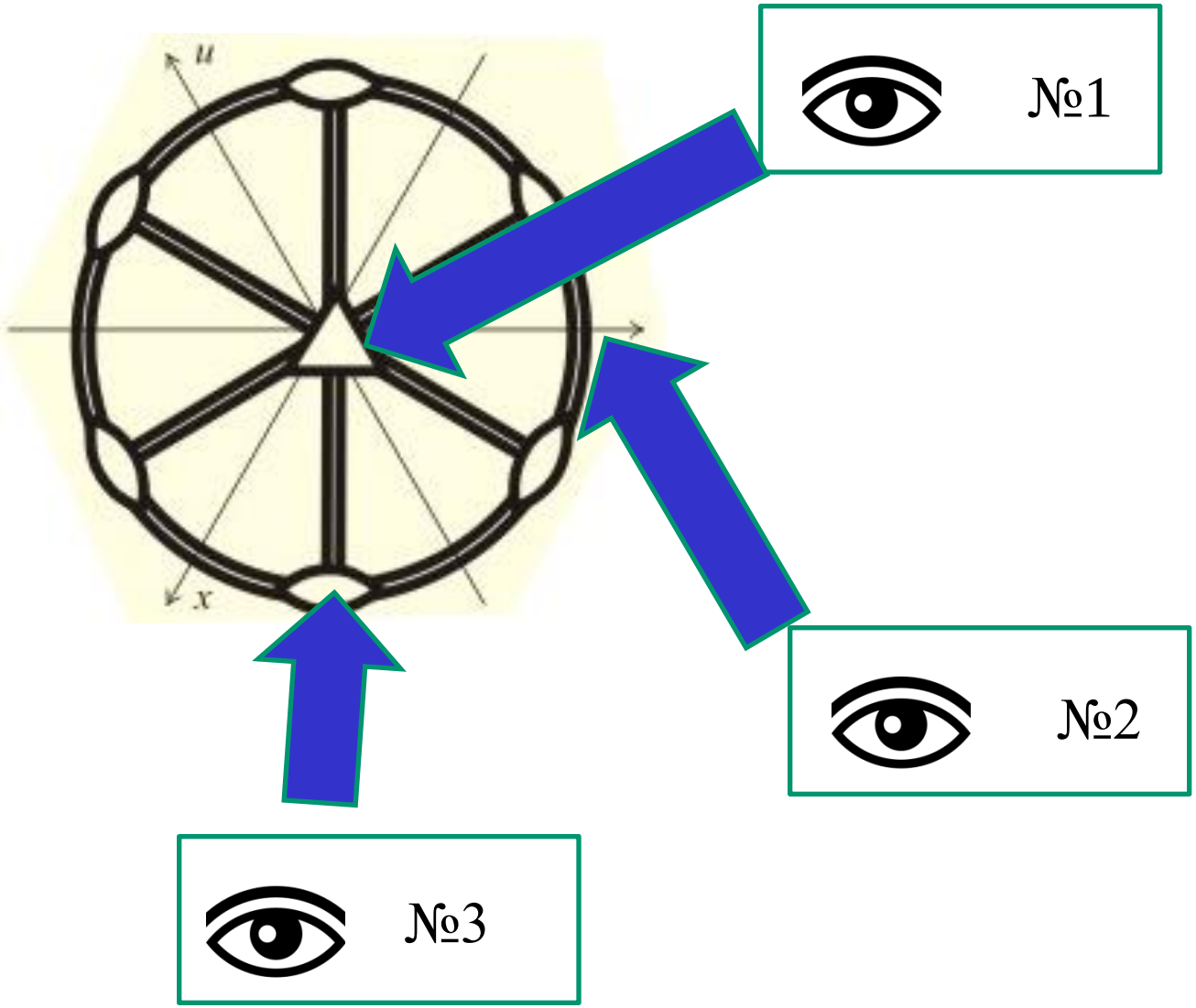
на первом записываются все элементы симметрии, которые фиксируются по трем особым направлениям,

на втором из записи удаляется избыточная информация о тех элементах, которые могут быть получены путем взаимодействия между собой порождающих элементов, уже присутствующих в символе.

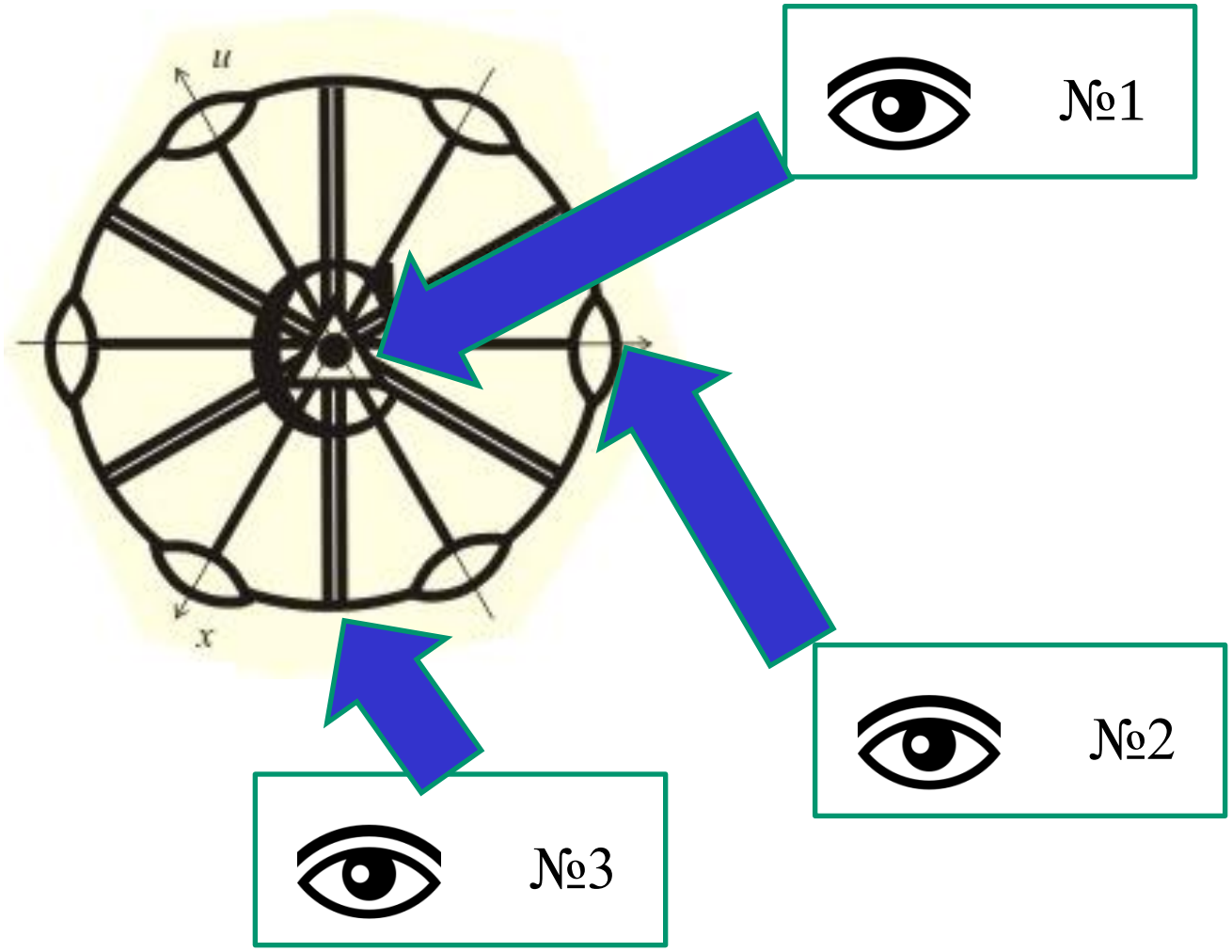


$$\frac{2}{m}\ \frac{2}{m}\ \frac{2}{m} = mmm$$

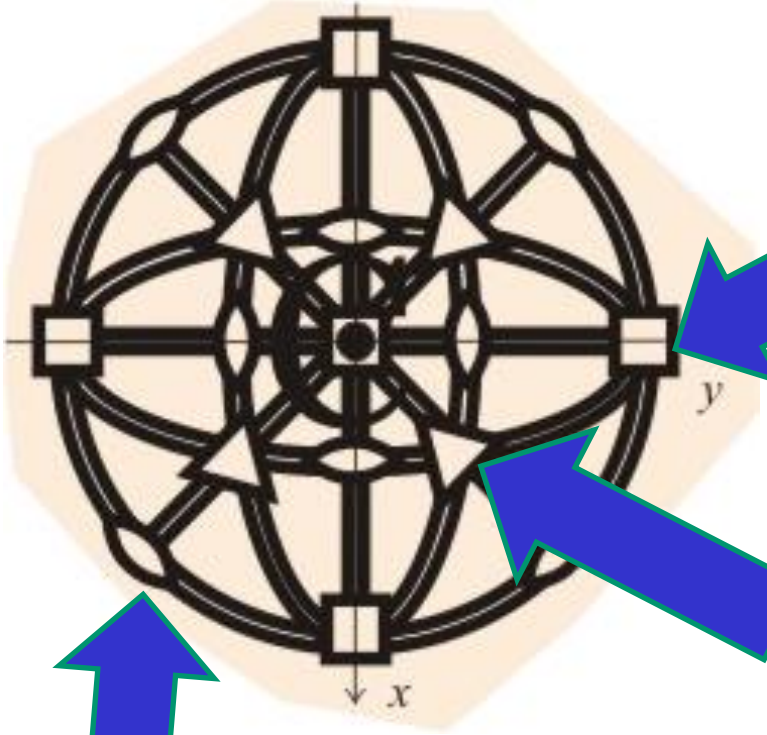
Потренируемся



Еще потренируемся



Еще потренируемся



№1

№2

№3

Лекция 3.

Пространственная решетка.
Вывод 14 типов решеток.
Основные характеристики структуры: координационные числа (КЧ) и координационные многогранники (КМ) (полиэдры), число формульных единиц (Z).
План описания кристаллической структуры.

! Материал опять думательный.
Чуть-чуть сложнее сегодняшнего..