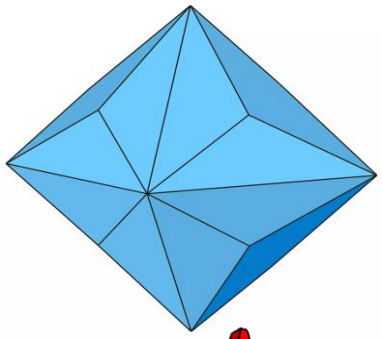
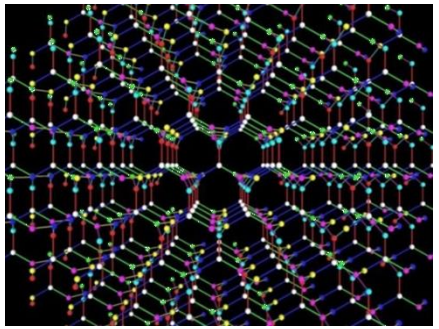
Семинар 2 МИКРОСИММЕТРИЯ

1. Открытые элементы симметрии. Операции симметрии, содержащие трансляции.
2. Способы представления открытых элементов и операций симметрии
3. Взаимодействие открытых элементов симметрии.



СИММЕТРИЯ

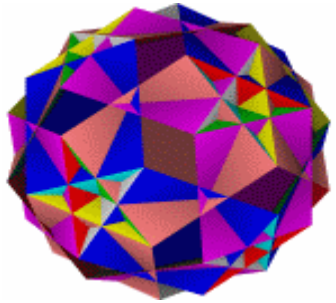


МАКРОСИММЕТРИЯ

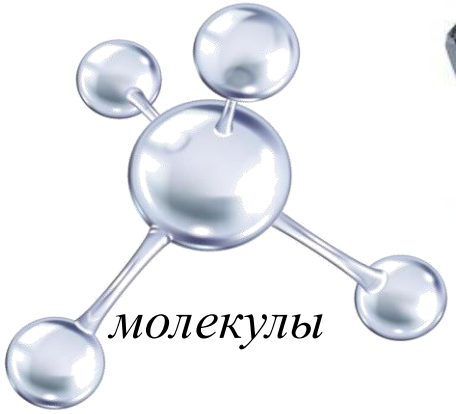
Описывает симметрию *конечных объектов*, не имеющих бесконечной протяженности ни в одном направлении

МИКРОСИММЕТРИЯ

Описывает симметрию *бесконечных объектов*, имеющих бесконечную протяженность в одном, двух или трех направлениях



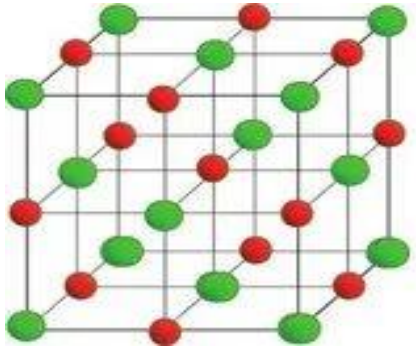
многогранники

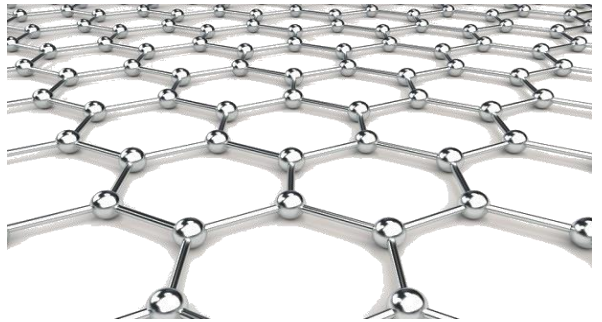


молекулы



кристаллы





1 м – единицы измерения

•Пьер Симон Лаплас во время французской революции предложил ввести новую «революционную» единицу длины – метр – равную 1/40,000,000 части длины парижского меридиана.





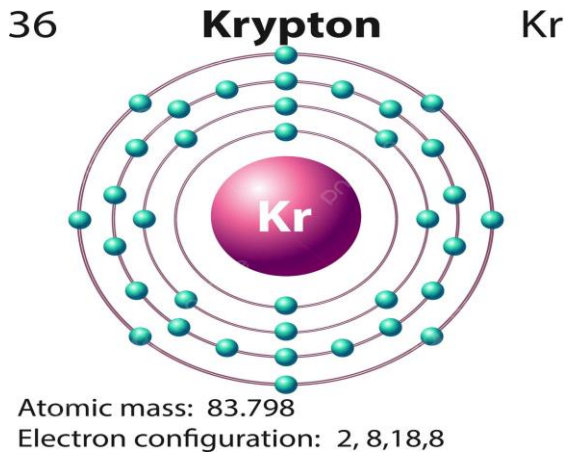
• Именно такая интерпретация метра дала Лапласу возможность изыскать необходимые средства для измерения на самом деле интересовавшей его величины – длины парижского меридиана.

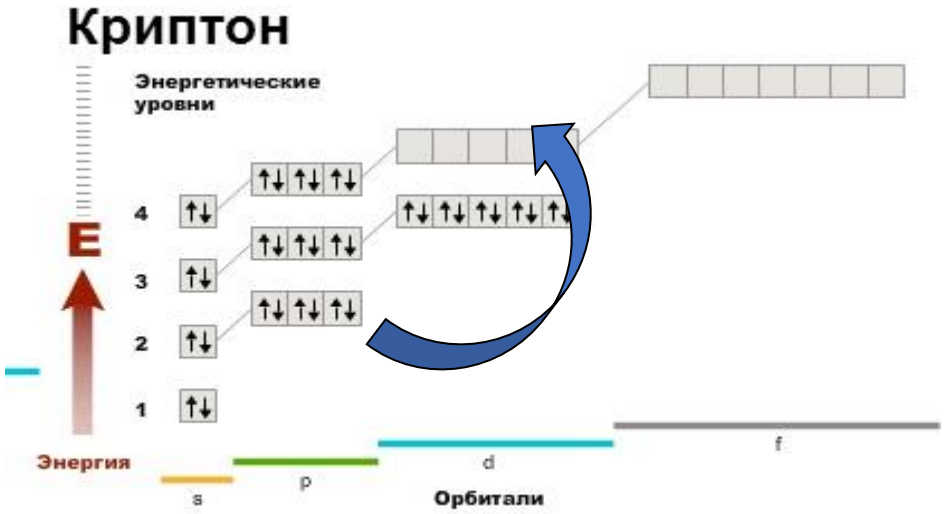


Результат измерения был принят за эталон единицы длины. Эталонный метр сделан из сплава платины и иридия. Он хранится в Палате мер и весов в Севре (Франция).

1 м – единицы измерения СИ

• Много позднее (1983) было предложено определение метра, связанное с консервативным природным процессом: 1.650.736.73 длин волн излучения в вакууме при переходе от уровня $2p^{10}$ к уровню $5d^5$ атома криптона-86.





• С 2002 году метр определяется как длина пути, пройденного светом в вакууме за 1/299792458 секунд. Таким образом метр теперь привязан к фундаментальной физической константе — скорости света.

1 м – стандартная единицы измерения

В 1875 в России система СИ (Международная система **единиц)**, использующая метр как единицу длины, стало обязательным. Естественно, возникли производные единицы длины: 1 км, 1 см, 1 мкм, 1 нанометр и т. д.

В настоящее время метрическая система официально принята практически во всех государствах мира, кроме некоторых (США, Либерии и Мьянмы, Филлипины)

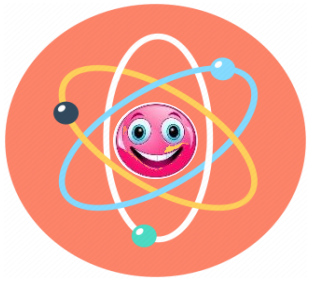


В американском праве метрика считается предпочтительной для науки и федеральных структур, а во многих отраслях — от фармацевтики до военной техники — она фактически обязательна.

В повседневной жизни температуру в новостях озвучивают в градусах Фаренгейта, скорость на дорогах измеряется в милях в час, а рост человека, площадь дома и дальность броска в спорте описываются в футах, ярдах и милях.



Метрическая система перестала быть французским экспериментом и стала языком, на котором современная цивилизация описывает мир.



Привет! Я – атом – мельчайшая химически неделимая частица.

В чем измеряется размер атома?

В кристаллохимии, оптике, атомной и молекулярной физике, чаще используется внесистемная единица длины – ангстрем:

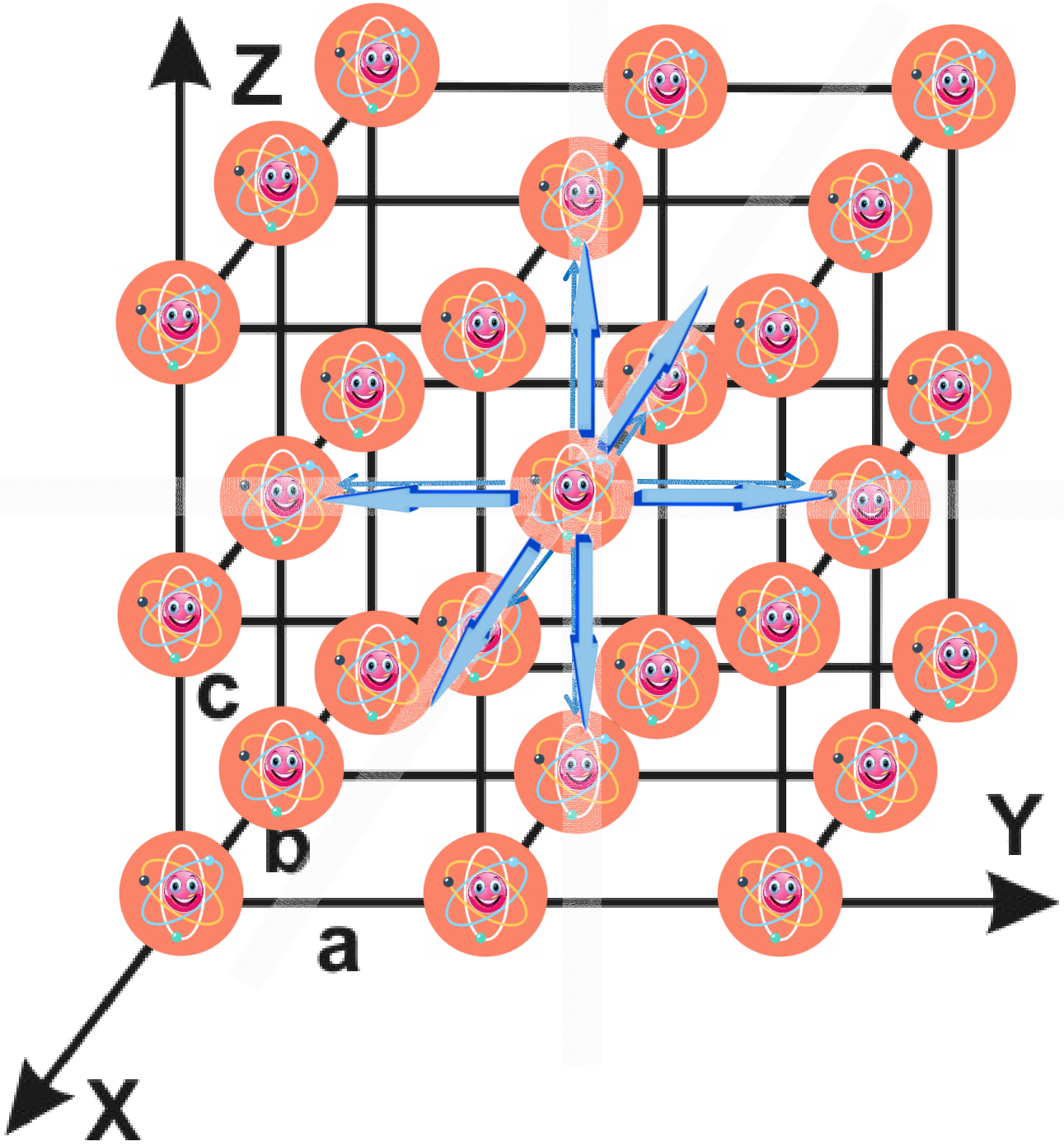
$$\mathbf{1\ Å} = 10^{-10}\ м = 10^{-8}\ см,$$

наилучшим образом соизмеримая с размерами атомов и длинами межатомных расстояний.

1Å – удобная единицы измерения как размеров атомов, так и межатомных расстояний



Это не обозначение ангстрема на дороге, а название скандинавской деревни





В кристалле я с удивлением вижу, что на одинаковом расстоянии передо мной и позади меня, слева и справа, сверху и снизу, от меня таких же приятелей. Возникает **атомная решетка**

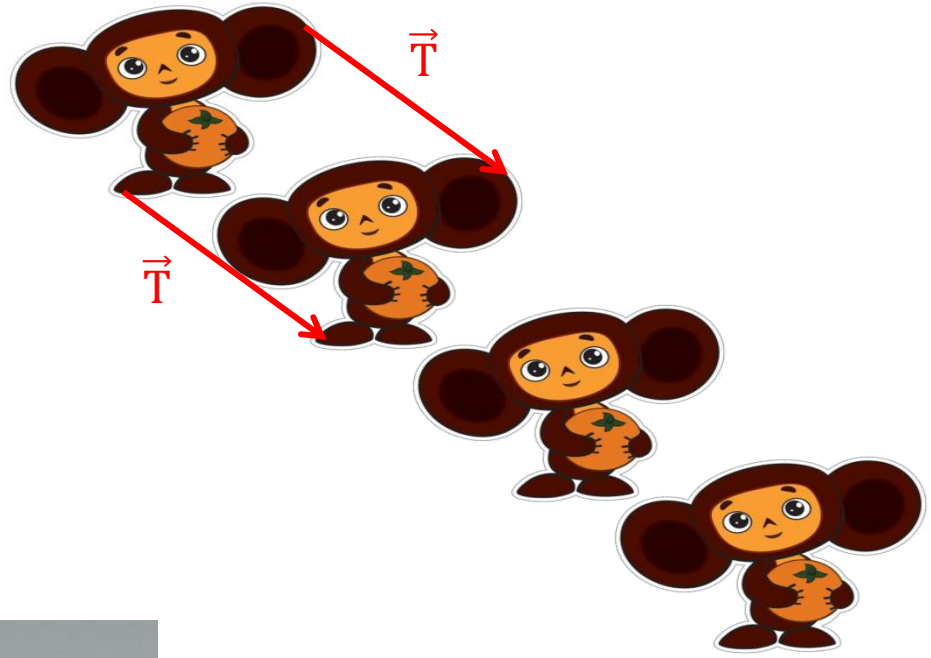
Атомной или узловой решеткой управляет новый элемент симметрии- трансляция $\vec{T}$ – векторная величина, характеризующаяся направлением и линейным размером . Математический образ называется узловой сеткой или решеткой.

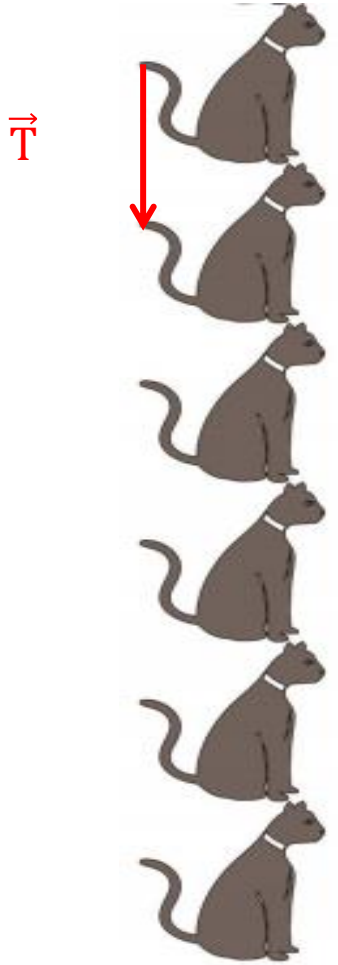
В этом заключается главная особенность, отличающая кристалл от некристаллических (аморфных) тел, - ***трехмерная периодичность*** в расположении слагающих его структуру эквивалентных материальных частиц: атомов, ионов, **итд.**

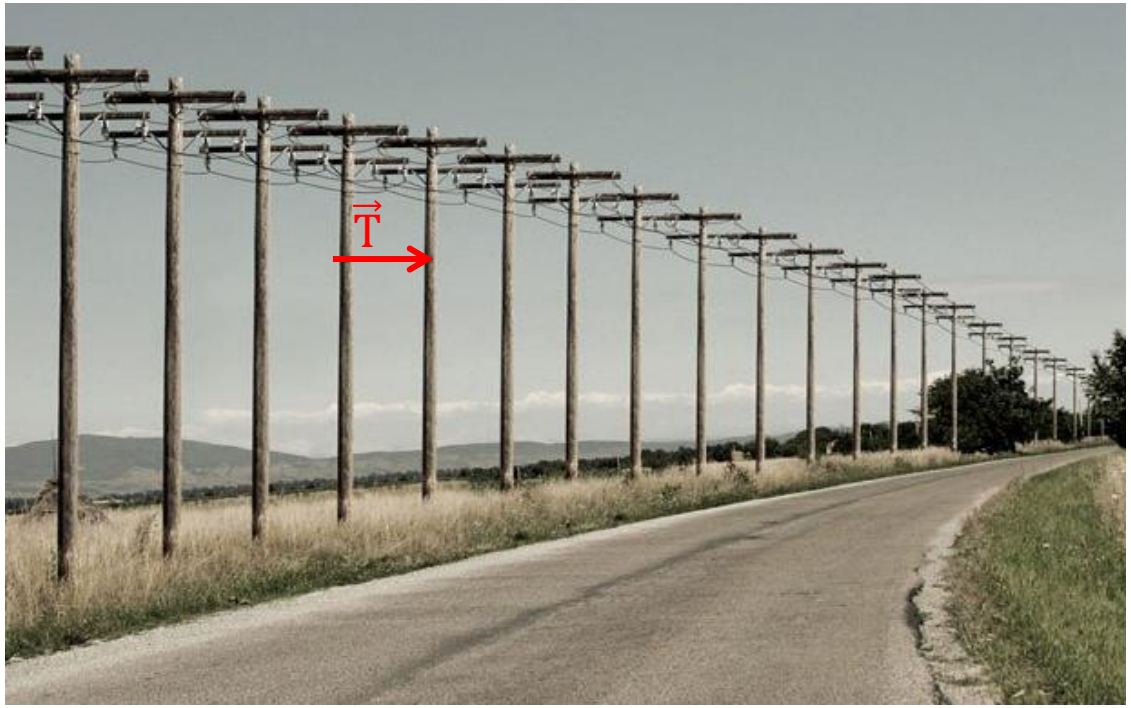
Трансляция задает периодичность:

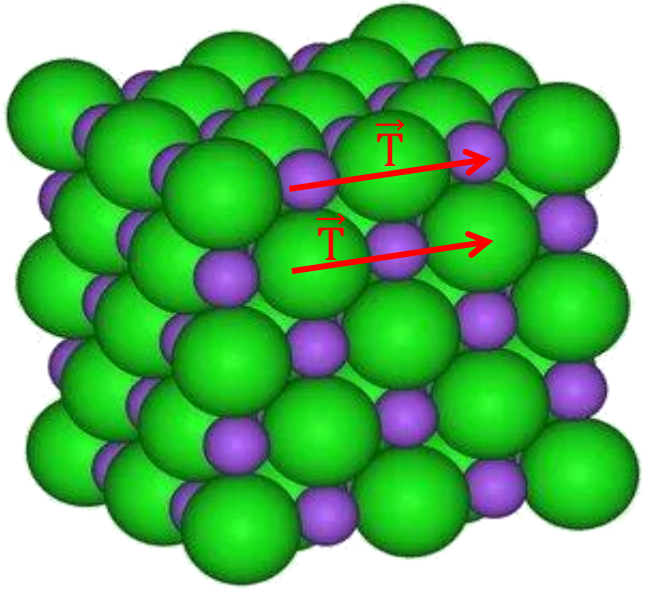
связывает параллельным переносом

эквивалентные точки







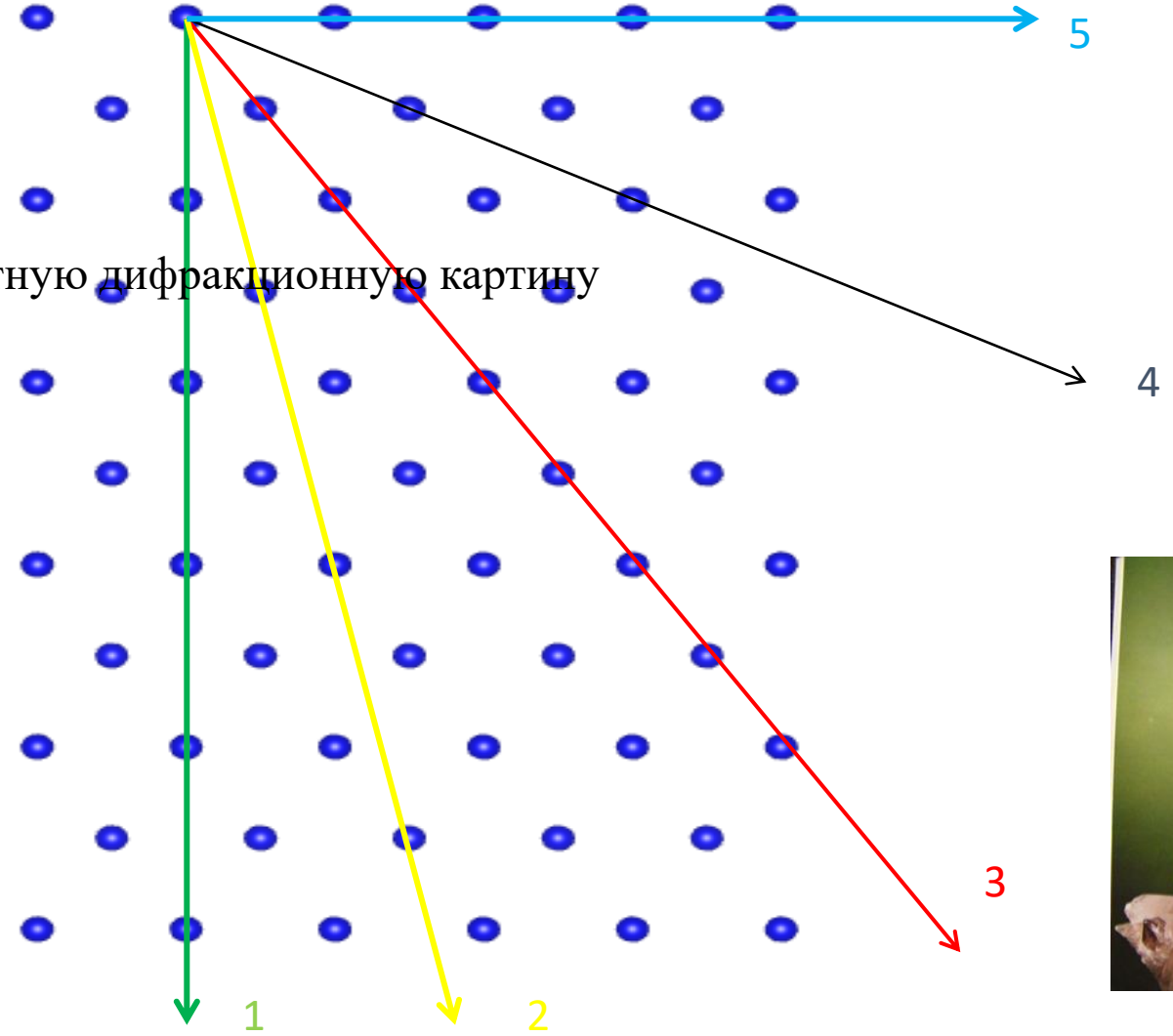


Кристалл – «вещество, в котором составляющие атомы, молекулы или ионы упакованы в регулярно упорядоченный, повторяющийся трёхмерный рисунок» (старое определение) .
Из этого следуют **три основные свойства кристаллического вещества:**

-однородность
-анизотропность
-плоскогранность

Кристалл – физическая среда, дающая дискретную дифракционную картину







В 1992 году **Комиссия по апериодическим кристаллам IUCr** (Ad Interim Commission on Aperiodic Crystals) при Международном союзе кристаллографии (International Union of Crystallography, IUCr) официально переопределил, что такое «кристалл».
Новая формулировка звучит как «any solid, having an essentially discrete diffraction diagram», то есть «**любое твердое вещество, обладающее отчетливо дискретной дифракционной картиной**».

24-й Конгресс Международного союза кристаллографии Хайдарабад (Индия)
21–28 августа 2017 года

25-й Конгресс Международного союза кристаллографии Прага (Чешская республика)
14–22 августа 2021г.

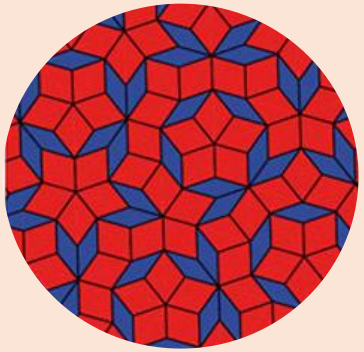
26-й Конгресс Международного союза кристаллографии Мельбурн (Австралия)
22–29 августа 2023г.

27-й Конгресс Международного союза кристаллографии Калгари (Канада, провинция Альберта)
11-18 августа 2026 года в

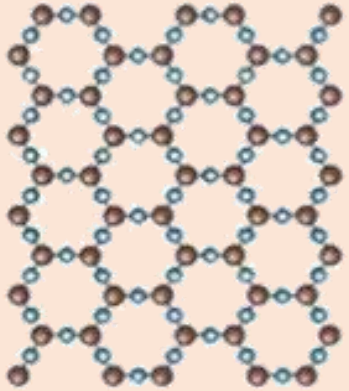
Закономерное расположение объектов

Хаотичное расположение объектов

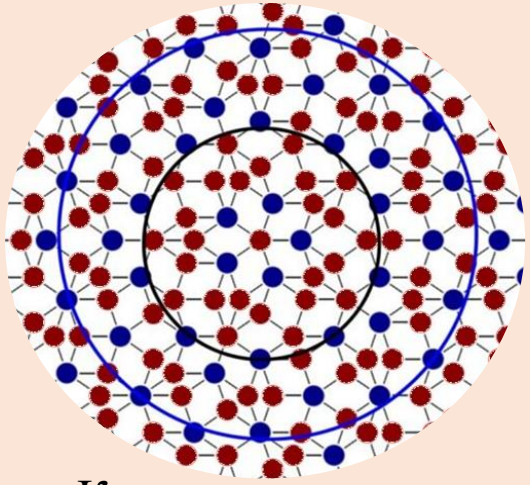




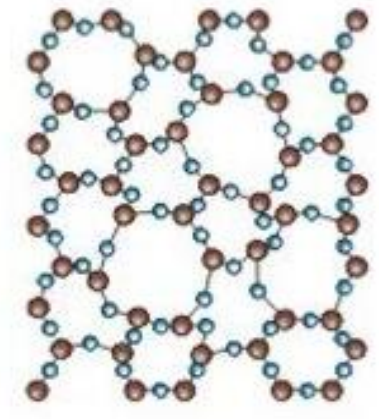




Кристалл

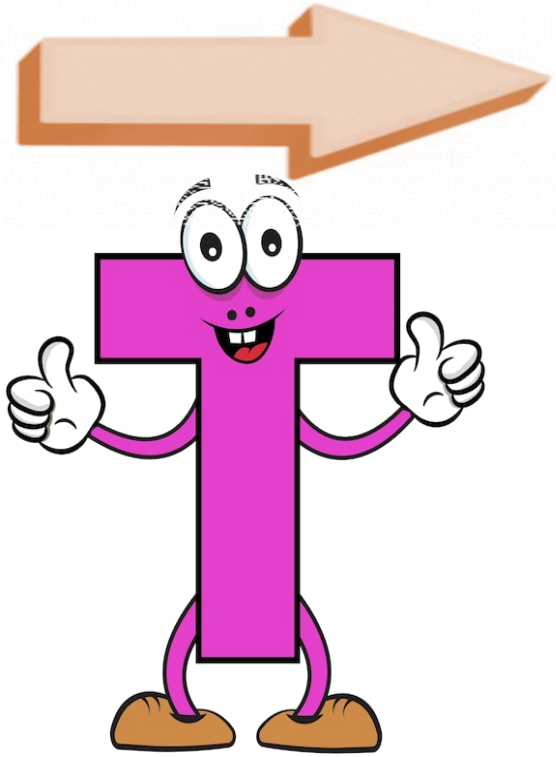


Квазикристалл



Аморфное тело

Я – трансляция самый главный элемент симметрии пространственных групп!

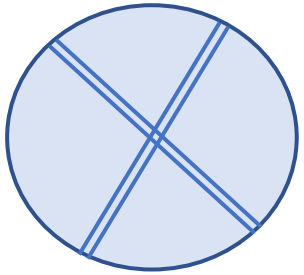


Иногда совокупность трансляций называют *решеткой*. Поэтому все мои друзья - другие элементы симметрии пространственных групп - называются *подрешеточными*

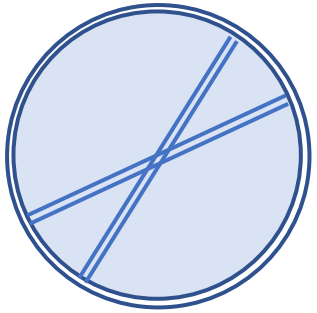
$\vec{T}$ Расстояние между эквивалентными положениями



Любое симметрическое преобразование можно представить как последовательное отражение в плоскостях. Причем таких плоскостей не более четырех Г.В. Вульф, Г.М.Попов, И.И.Шафрановский). Такое уникальное свойство плоскости зеркального отражения связано с тем, что это единственная сложная ось, не имеющая особой точки!



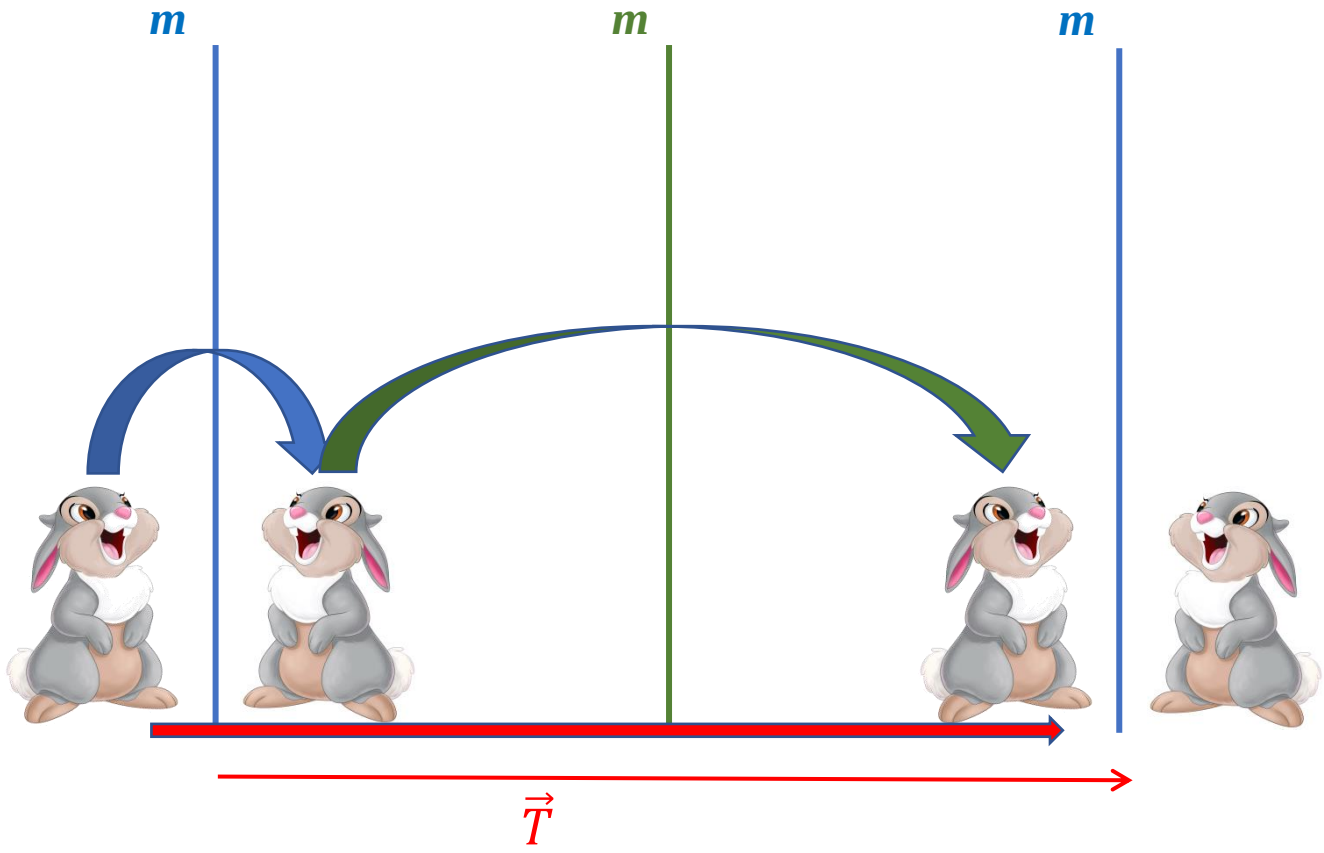
Последовательное отражение в двух пересекающихся плоскостях приводит к появлению результирующей операции поворота вокруг оси, проходящей по линии пересечения плоскостей.

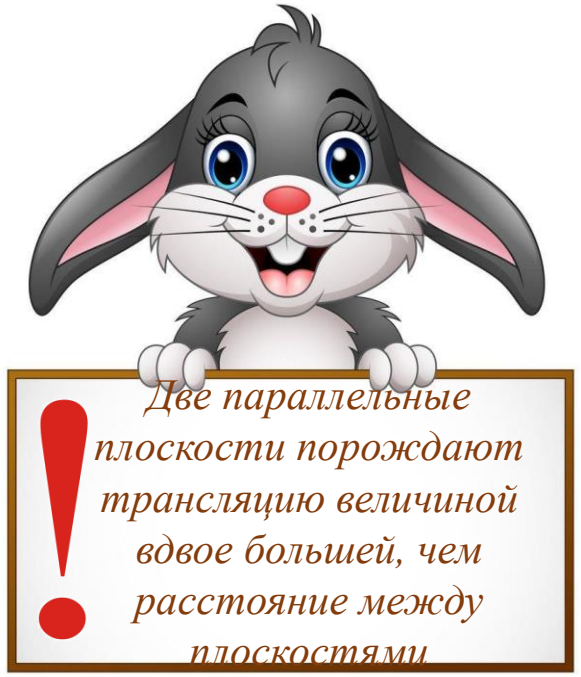


Пересечение трех плоскостей, одна из которых перпендикулярна двум другим приводит к появлению сложной оси, зеркально-поворотной, либо инверсионно-поворотной

А что же будет, если плоскости будут параллельны?



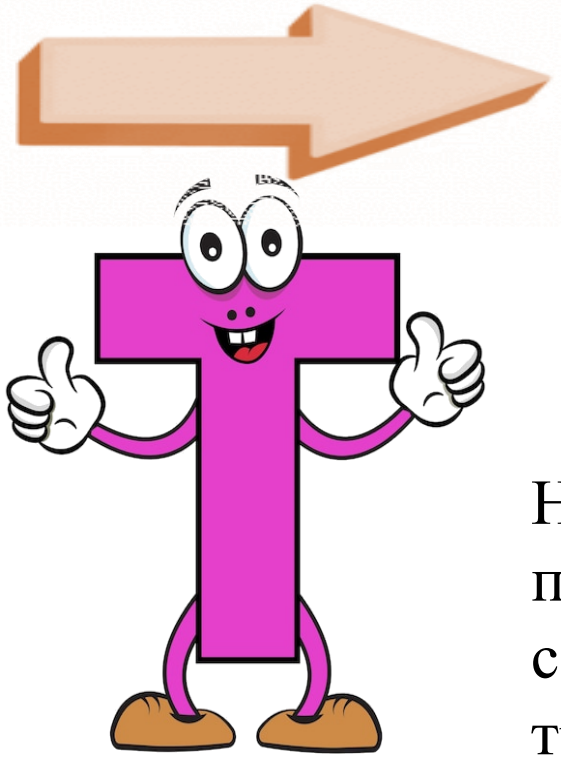


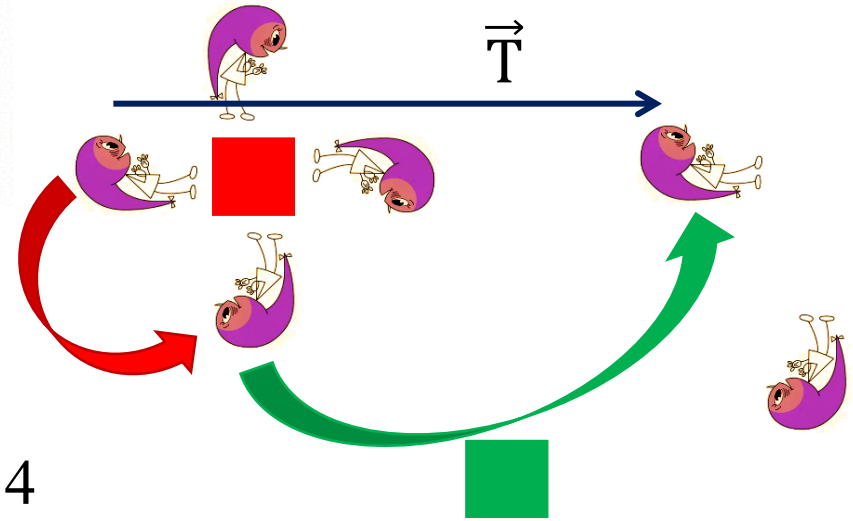


Последовательное отражение в двух параллельных плоскостях приводит к появлению трансляции

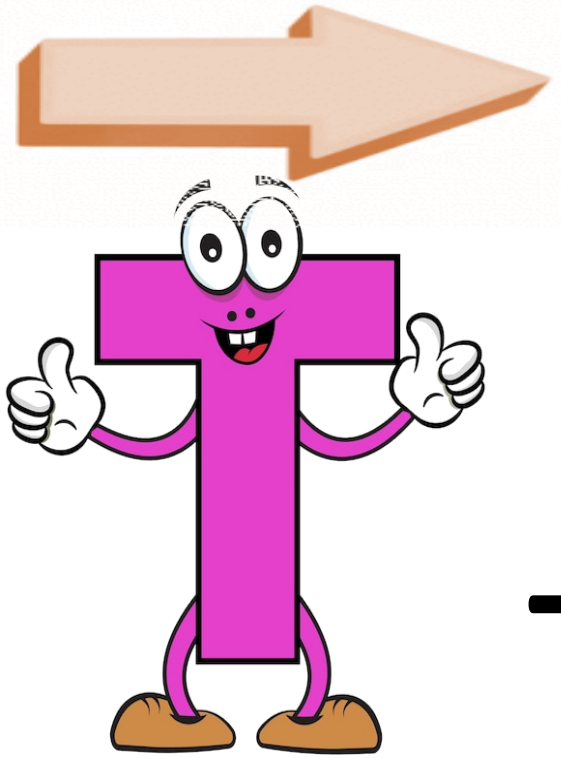
Если в макросимметрии (или точечной симметрии) по крайней мере одна точка остается инвариантной ко всем симметрическим преобразованиям системы, то в микросимметрии одна и та же позиция повторяется бесконечное количество раз.

Но не только параллельные плоскости влекут за собой появление трансляции. Любые два непересекающиеся элемента симметрии (не имеющие общей точки) порождают трансляцию

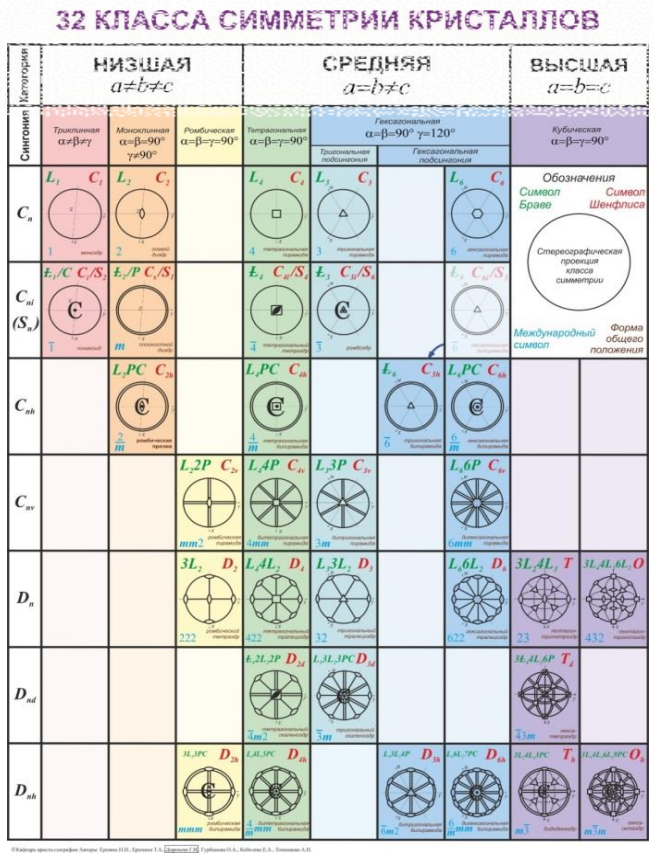




Например две параллельные оси 4 порождают трансляцию, поскольку сами связаны взаимодействием трансляции с одной из них



+



= 73

пространственные группы

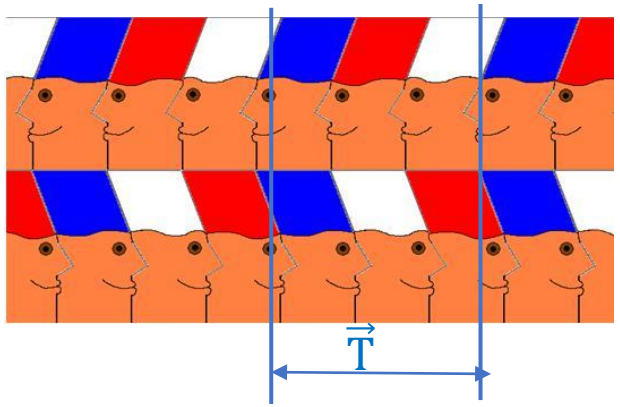
Простая суперпозиция трансляции и 32 точечных классов приведут только к 73 пространственным группам.
Такие пространственные группы называются *симорфными*
Откуда же берутся остальные?



ОТКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ.

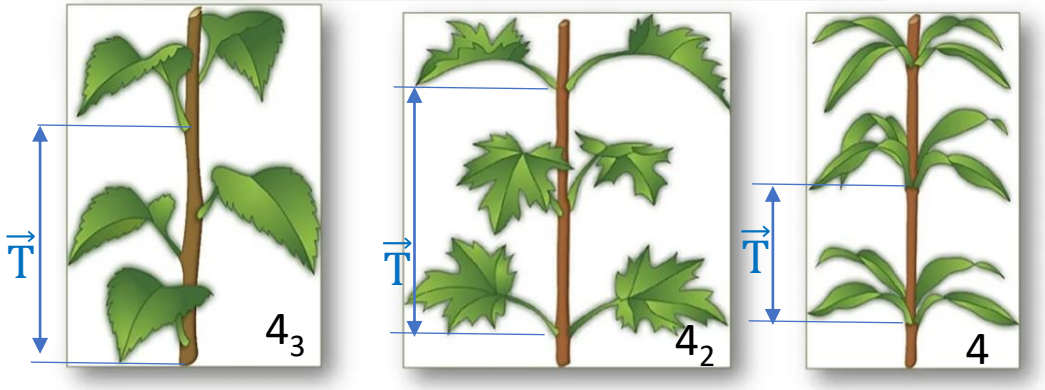
Среди открытых элементов симметрии, помимо трансляции, существуют такие, которые представляют собой *синтез* трансляции и макроэлементов симметрии (закрытые элементы)

Трансляция





Винтовые оси



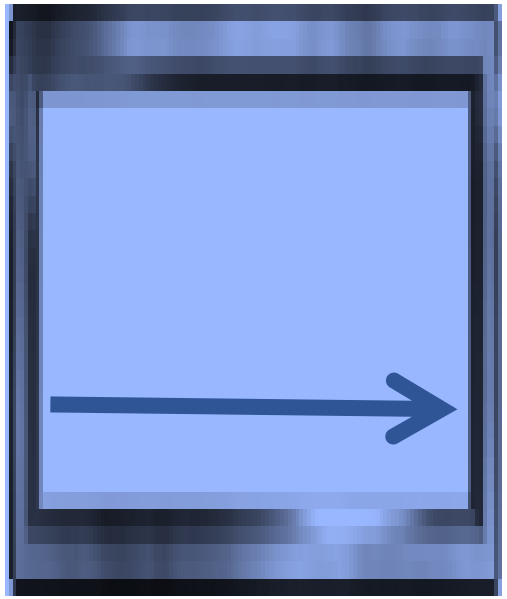
Очередное (спиральное)	Супротивное	Мутовчатое
Береза	Сирень	Вороний глаз
Липа	Клен	Олеандр
Дуб	Крапива	Элодея
		Барбарис

Плоскости скользящего отражения



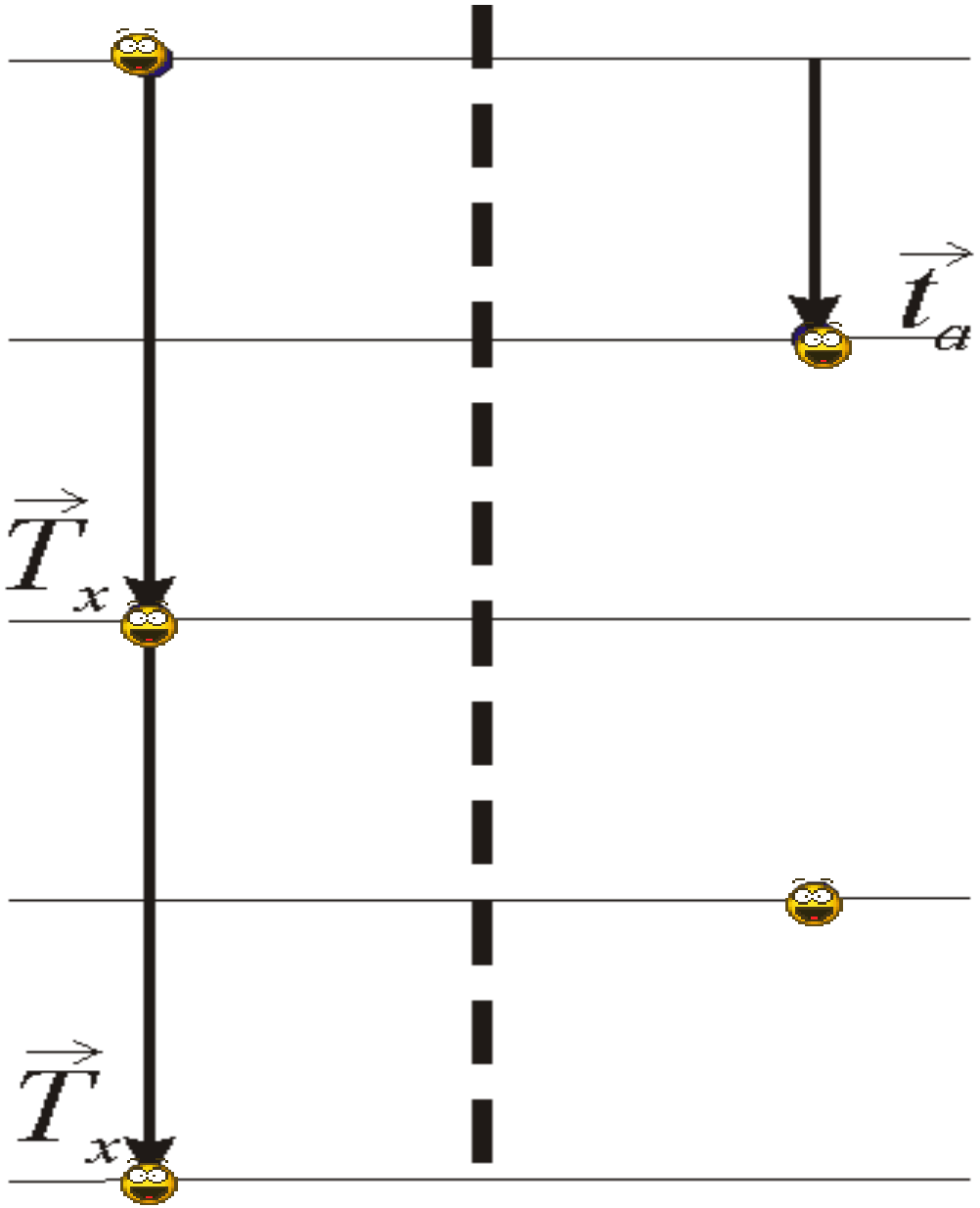
Клиноплоскости





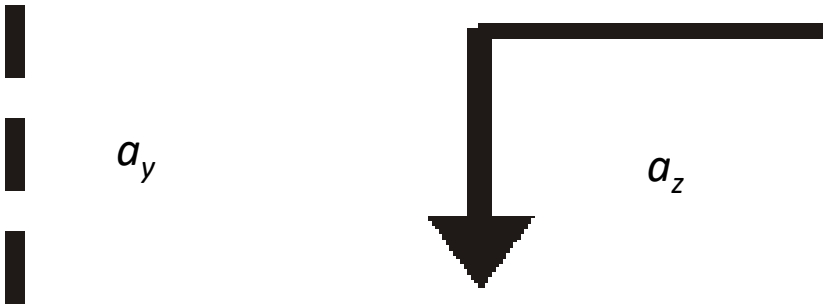
Волшебная плоскость скользящего отражени

$$\boldsymbol{a = m + \vec{t}_x}$$

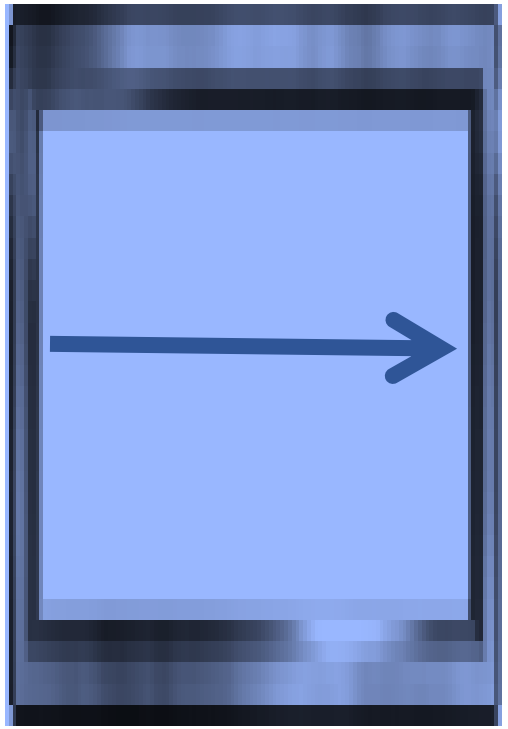


Фигурка отражается в плоскости и входит в портал, выскочив из него через половину трансляции по координате x

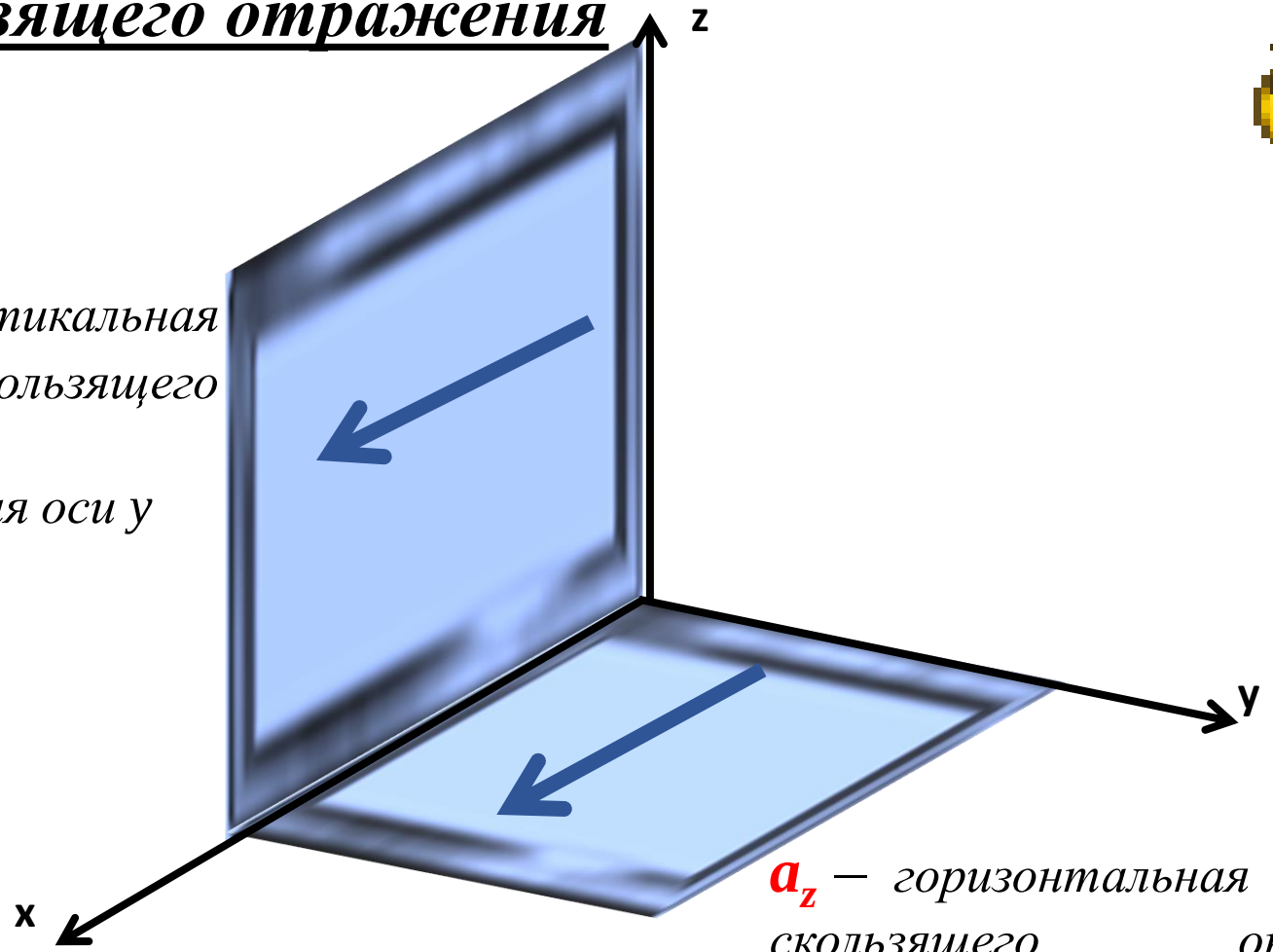
Обозначения :



Волшебная плоскость скользящего отражения



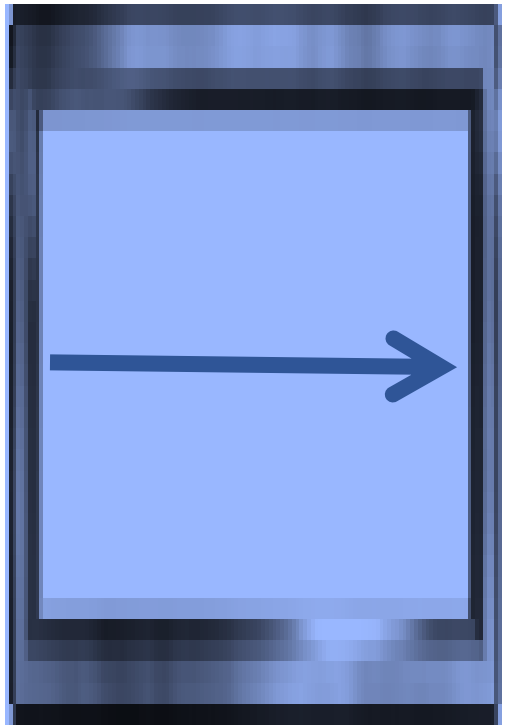
a_y — *вертикальная плоскость скользящего отражения, перпендикулярная оси y*



a_z — *горизонтальная плоскость, скользящего отражения; нормаль перпендикулярна оси z*



a_x — *не существует, так как нельзя осуществлять скольжение в направлении, перпендикулярном плоскости. Скользить можно только параллельно плоскости*

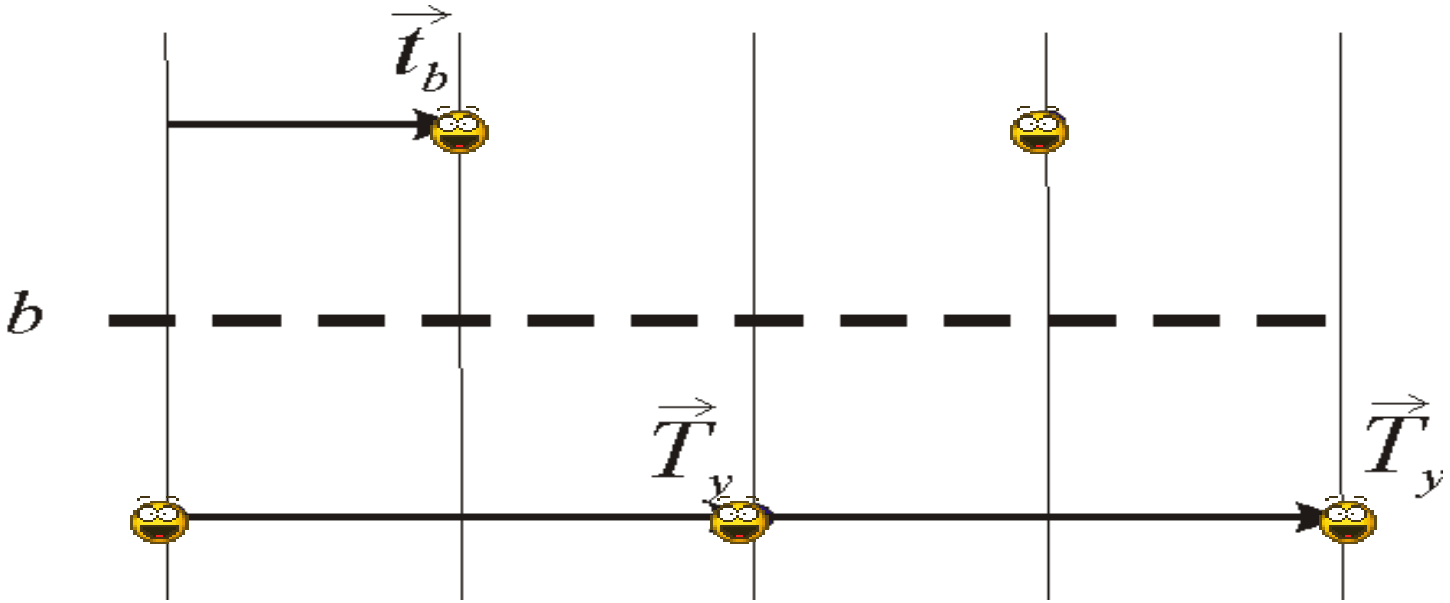


Волшебная плоскость скользящего отражения

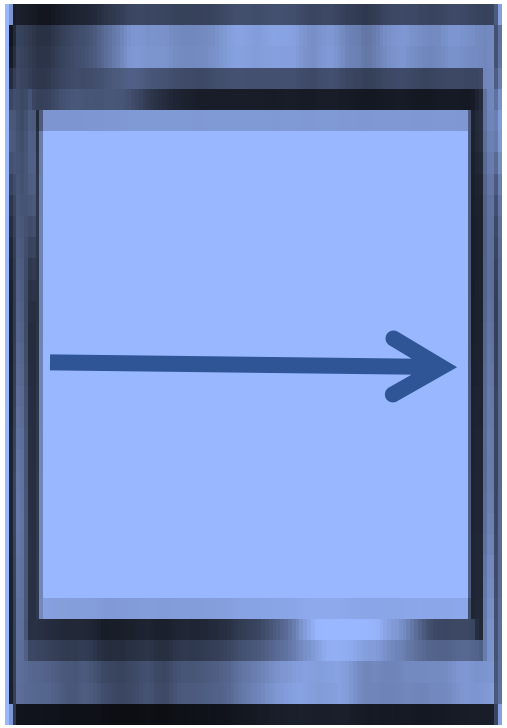
$$b = m + \vec{t}_y$$

Фигурка отражается в плоскости и входит в портал, выскочив из него через половину трансляции по координате y

Обозначения :

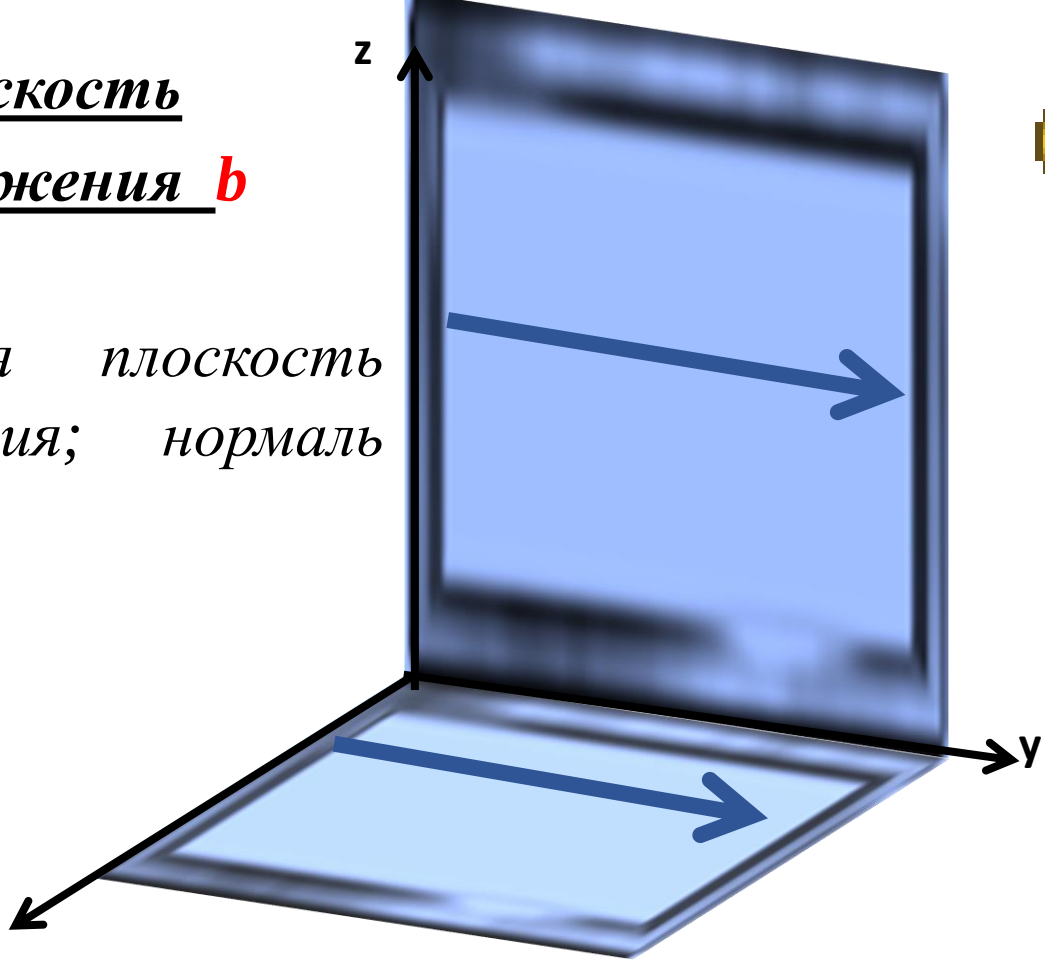






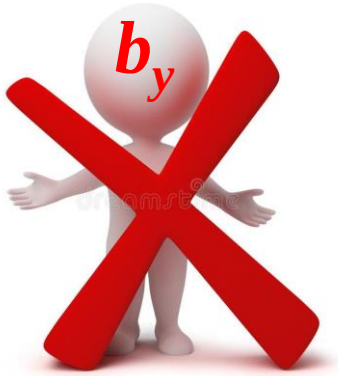
Волшебная плоскость скользящего отражения b

b_x – *вертикальная плоскость скользящего отражения; нормаль перпендикулярна оси x*

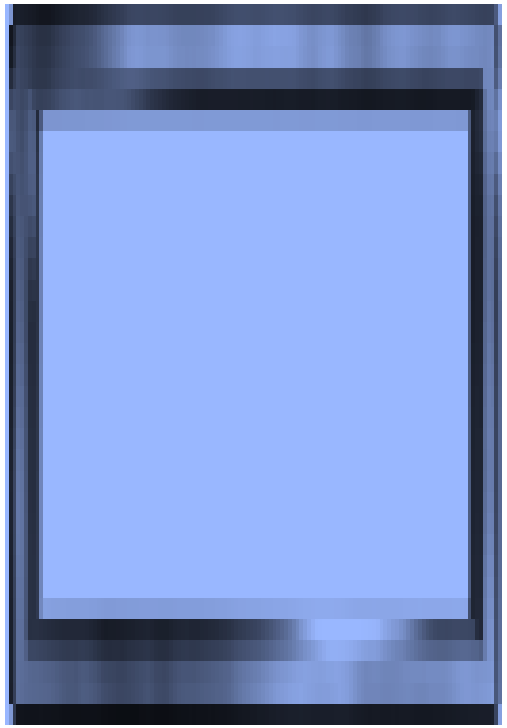




b_z^x – *горизонтальная плоскость скользящего отражения; нормаль перпендикулярна оси z*



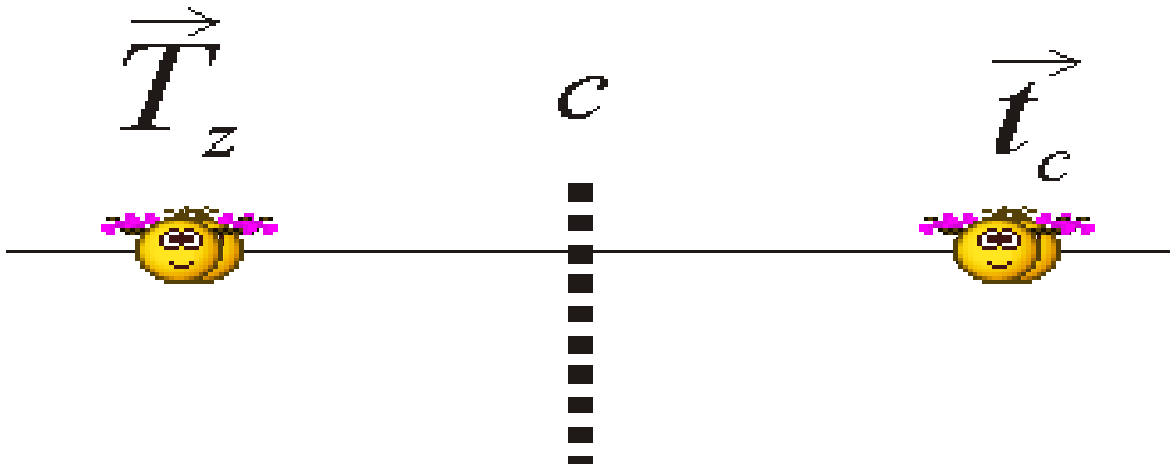
b_y – *не существует, так как нельзя осуществлять скольжение в направлении, перпендикулярном плоскости. Скользить можно только параллельно плоскости*

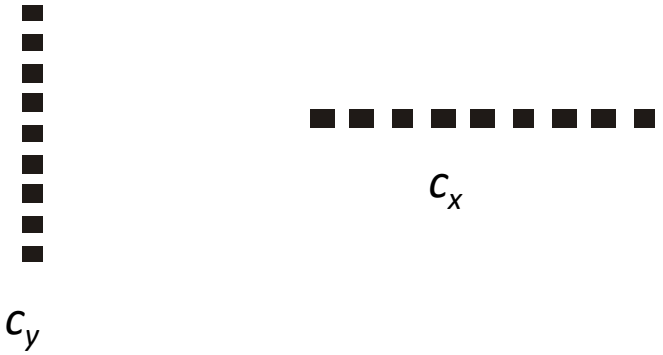


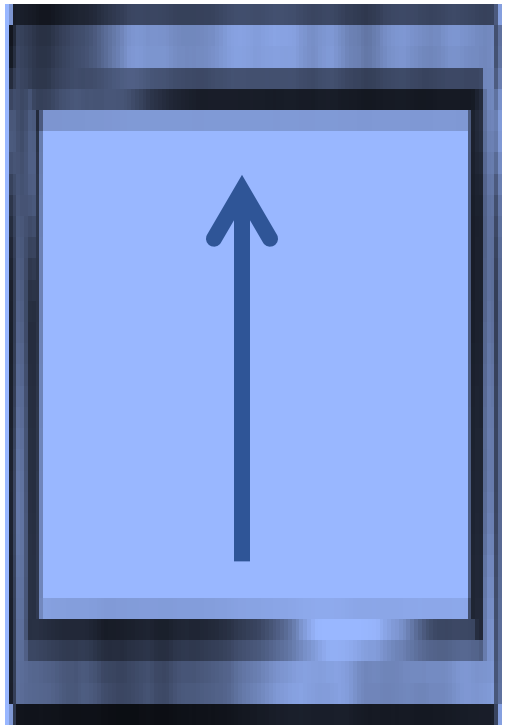
Волшебная плоскость скользящего отражения c

Фигурка отражается в плоскости и входит в портал, выскочив из него через половину трансляции по координате z

Обозначения :





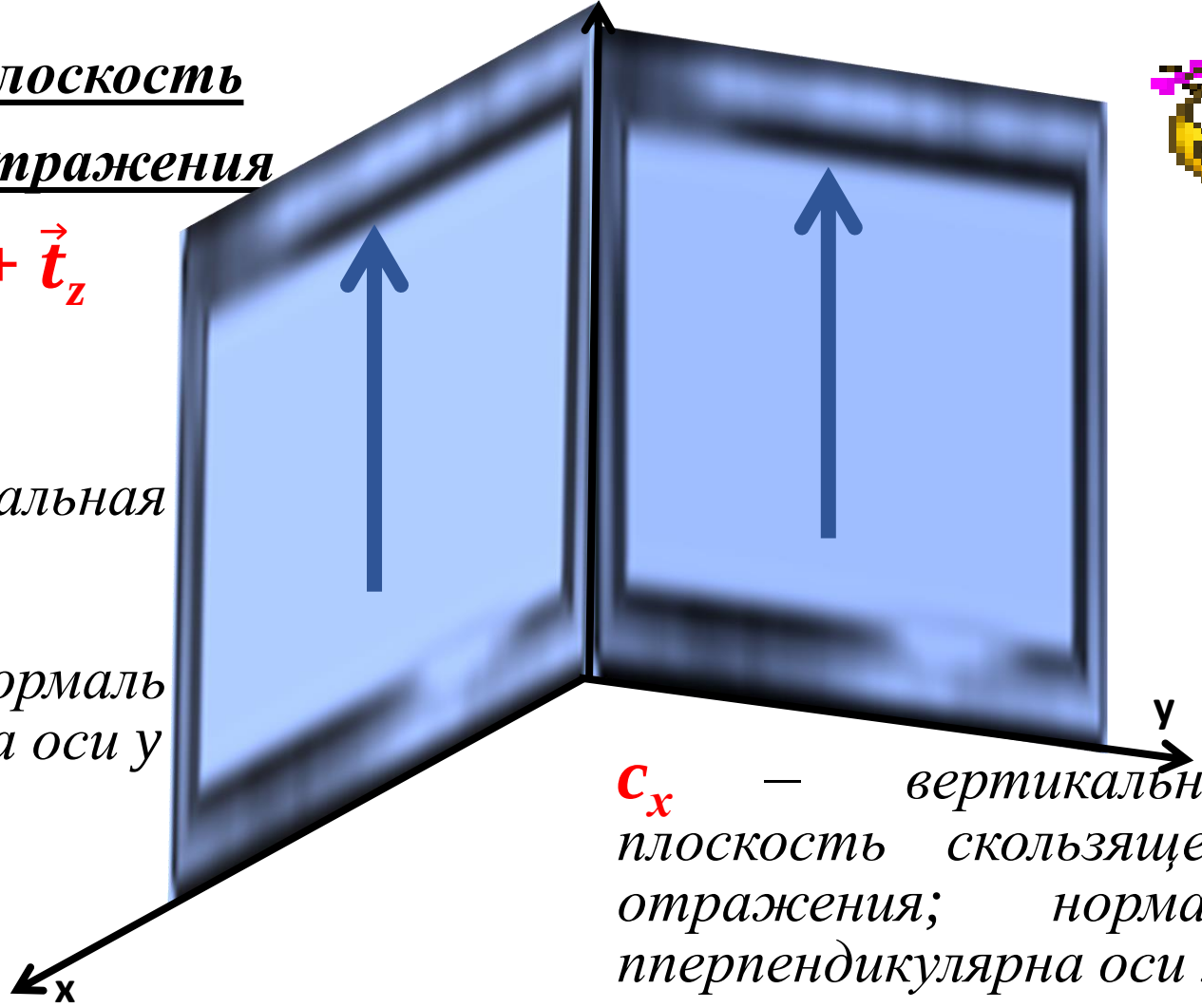


Волшебная плоскость скользящего отражения

$$c = m + \vec{t}_z$$



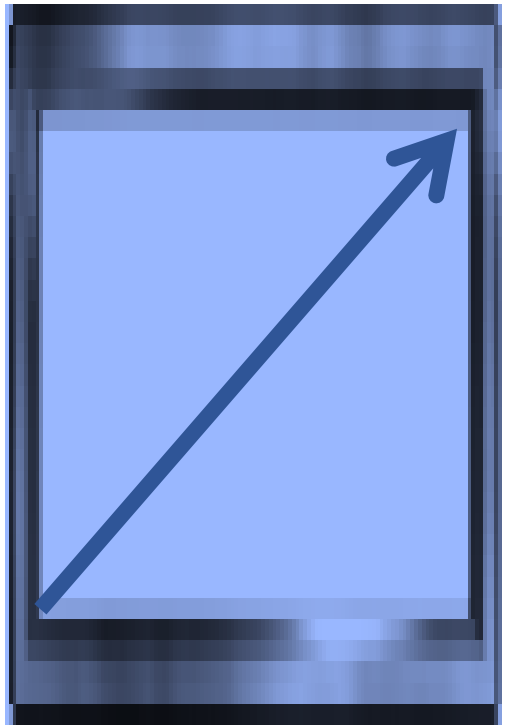
c_y – *вертикальная плоскость скользящего отражения; нормаль перпендикулярна оси y*



c_x – *вертикальная плоскость скользящего отражения; нормаль пперпендикулярна оси x*

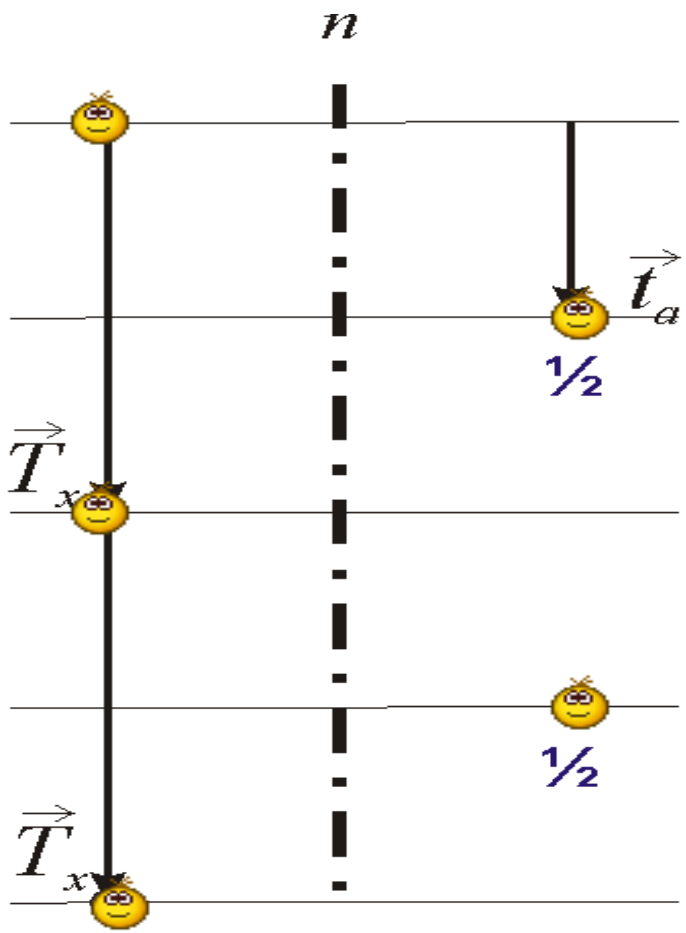


плоскость c_z горизонтальной быть не может!



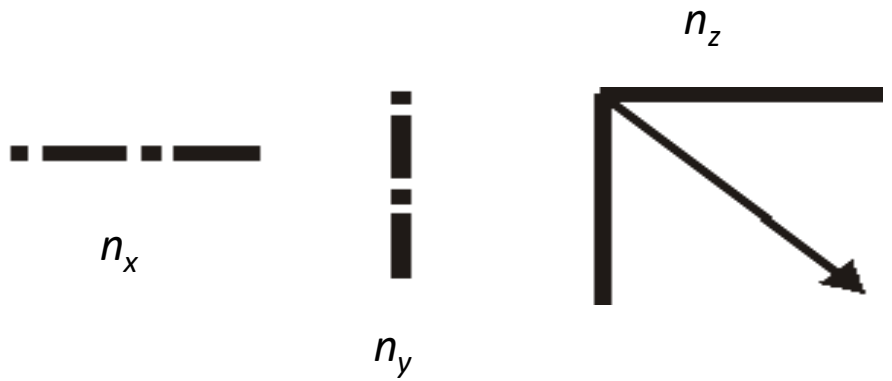
Волшебная клиноплоскость

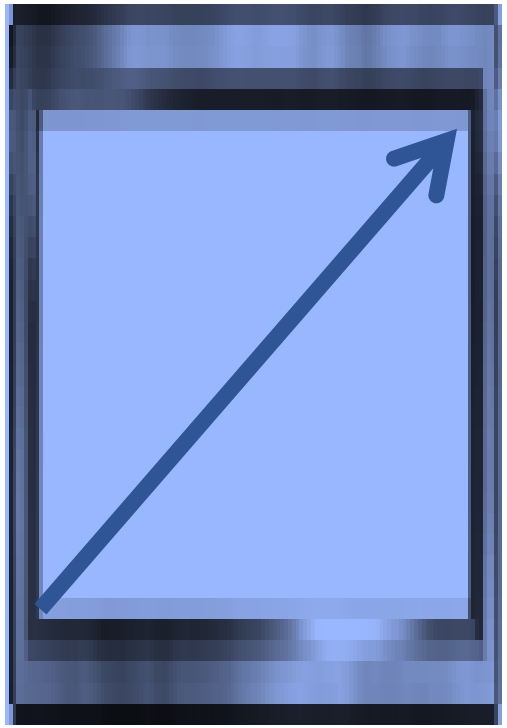
n



Фигурка отражается в плоскости и входит в портал, выскочив из него через половину трансляции по двум координатам, параллельным этой плоскости

Обозначения :





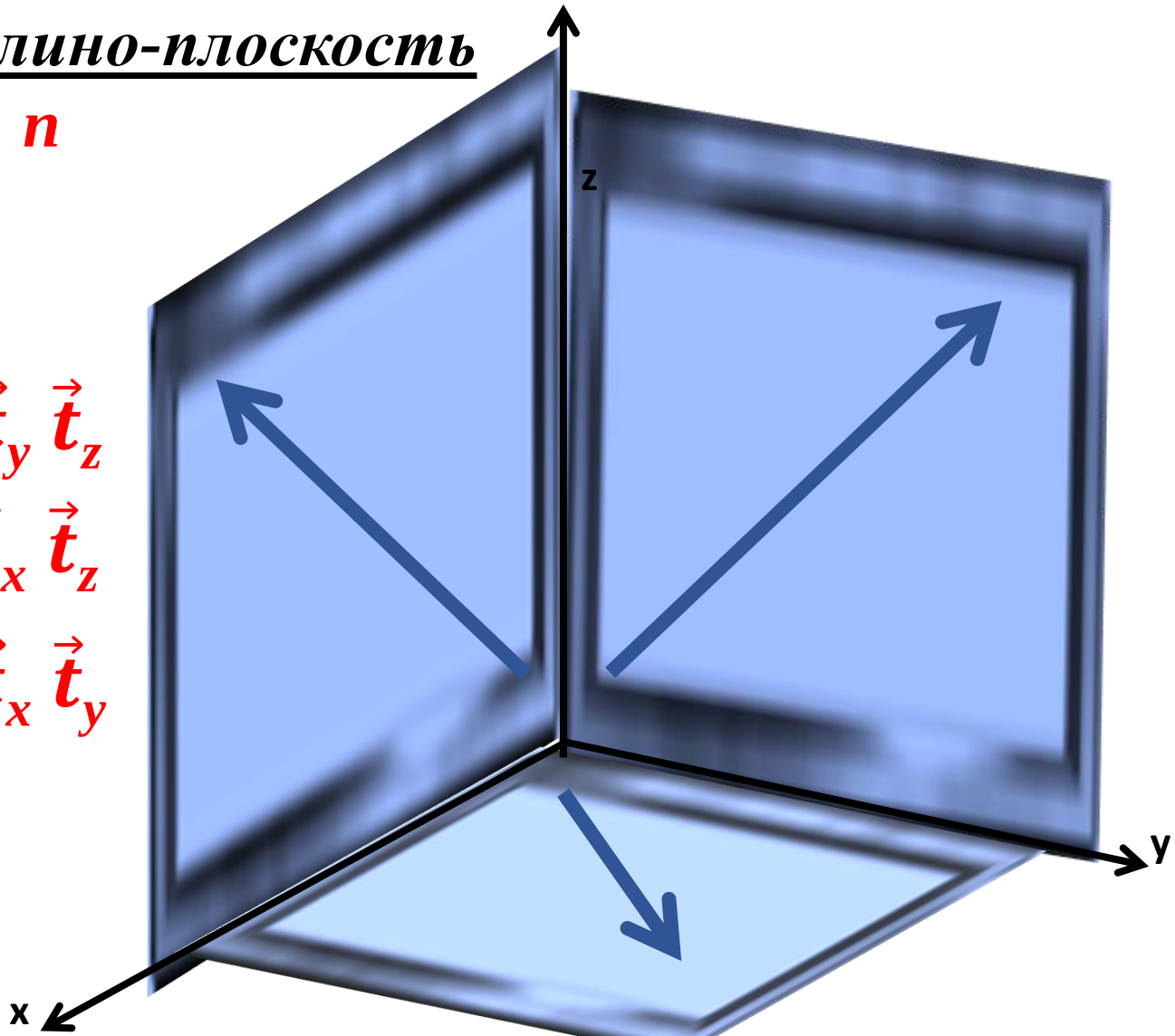
Волшебная клино-плоскость

n

$$n_x = m_x + \vec{t}_y\,\vec{t}_z$$

$$n_y = m_y + \vec{t}_x\,\vec{t}_z$$

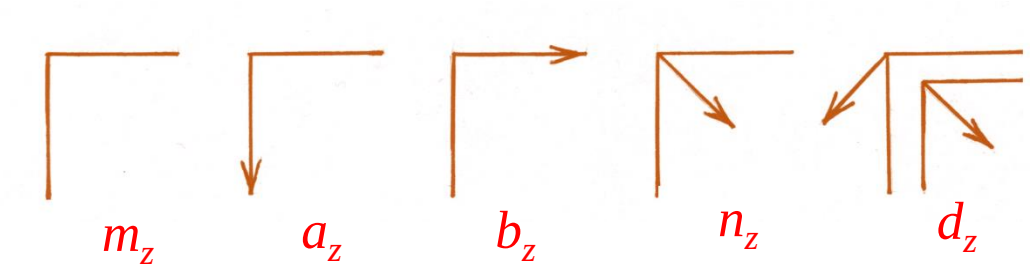
$$n_z = m_z + \vec{t}_x\,\vec{t}_y$$

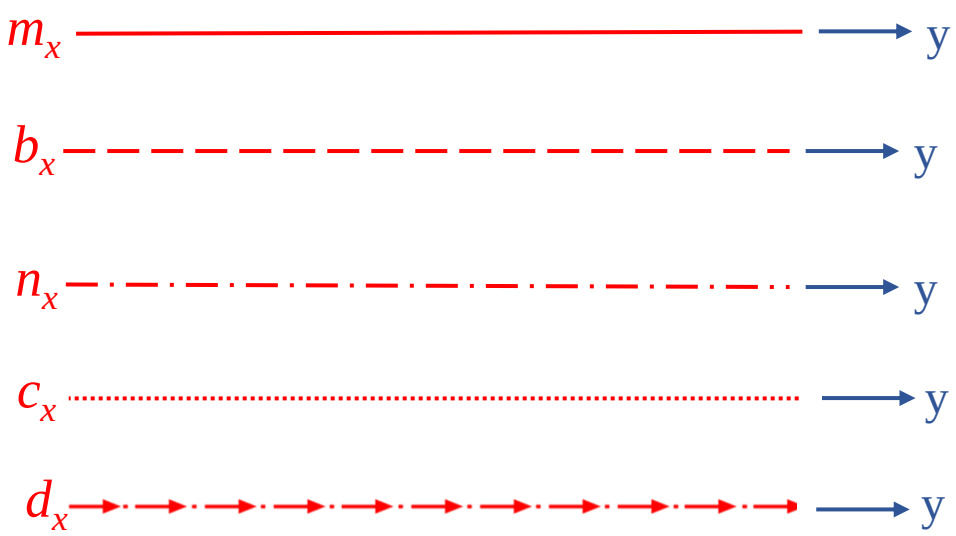


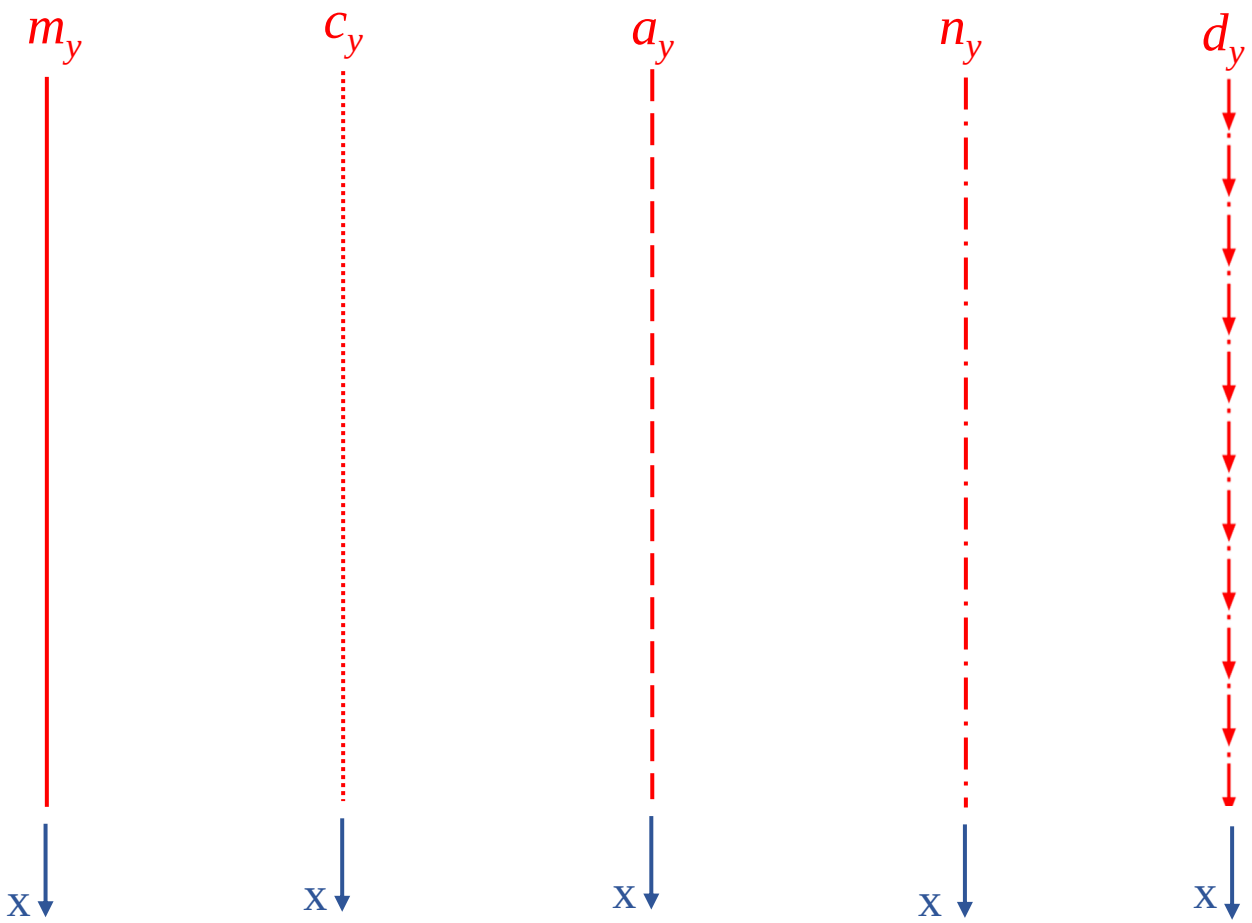


Плоскость **n** *может иметь три различные ориентации и не меняет своего названия в зависимости от ориентации относительно координатных осей. Поэтому ее часто называют «удобной» (Н.В.Белов)*

Плоскости скользящего отражения и клиноплоскости







Открытые элементы симметрии: плоскости скользящего отражения и клиноплоскости

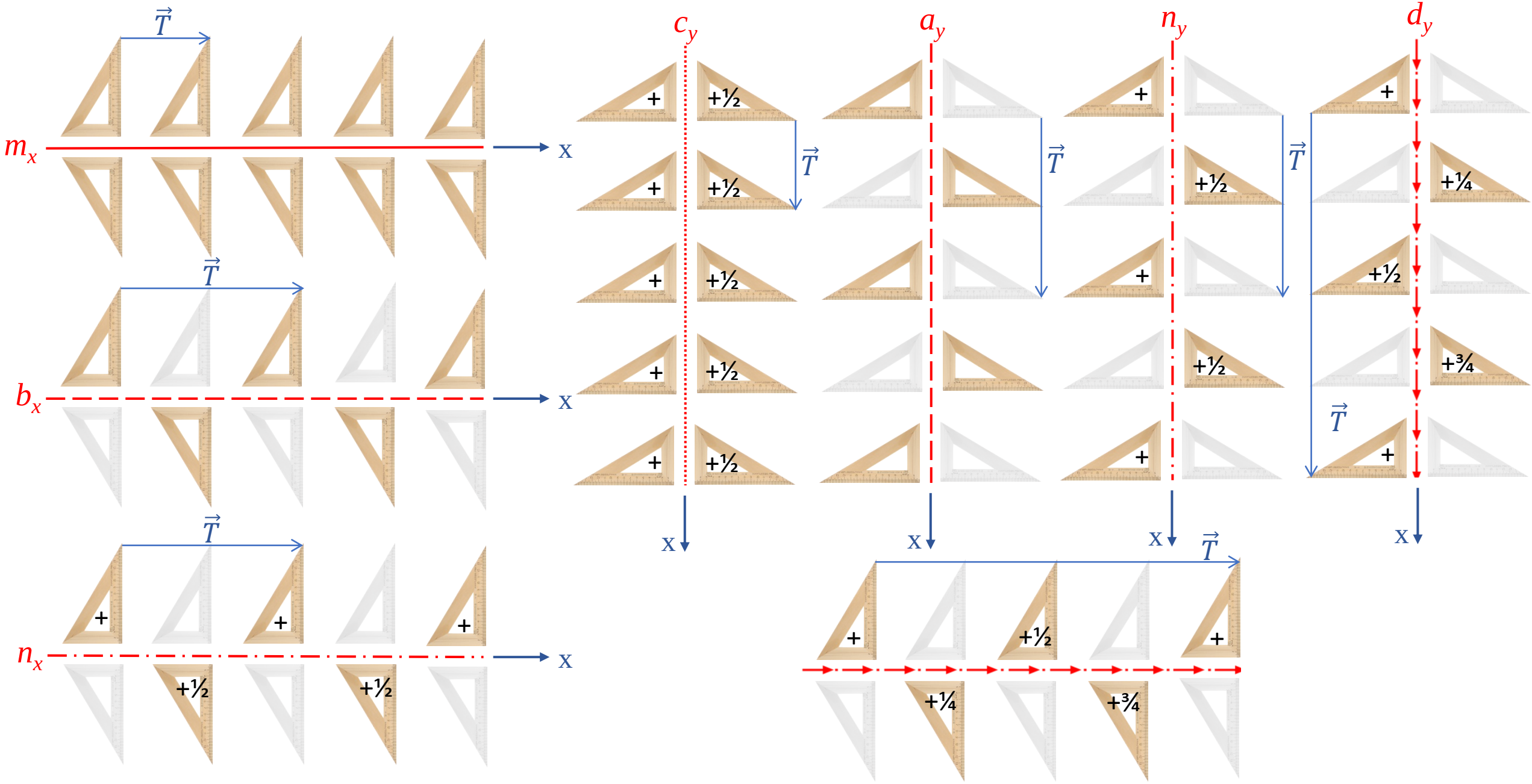


Иллюстрация действия плоскостей, перпендикулярных оси *y*

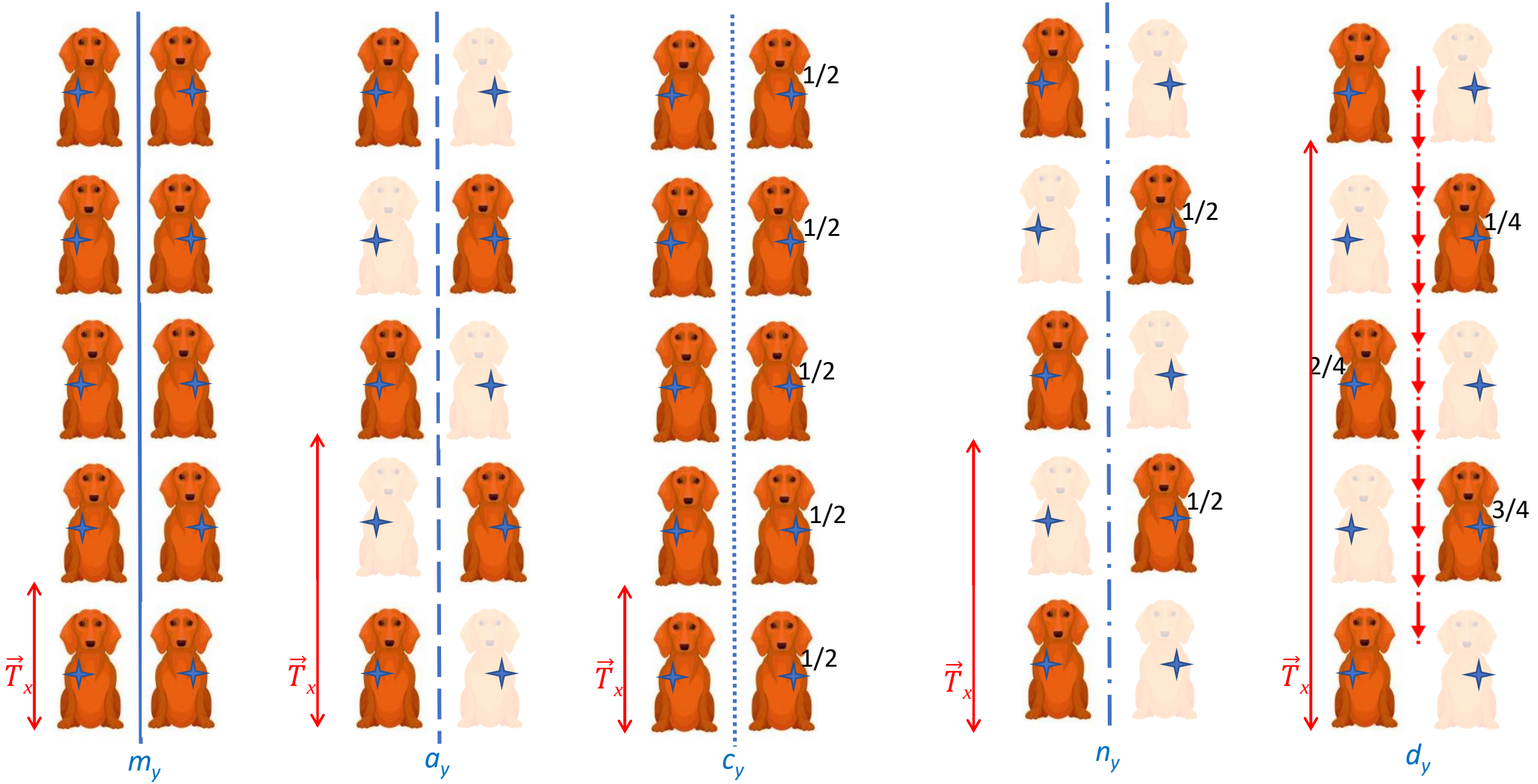
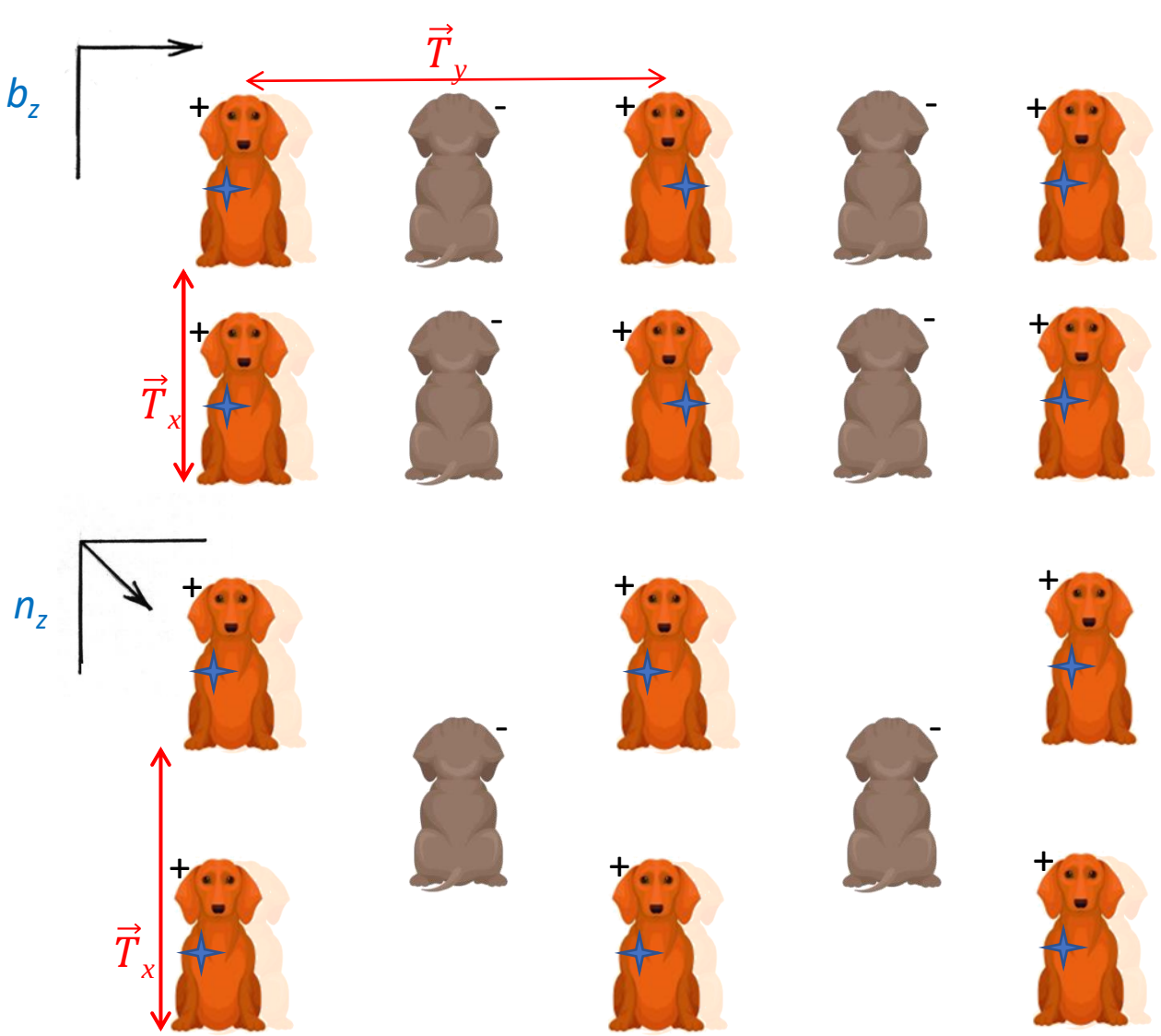
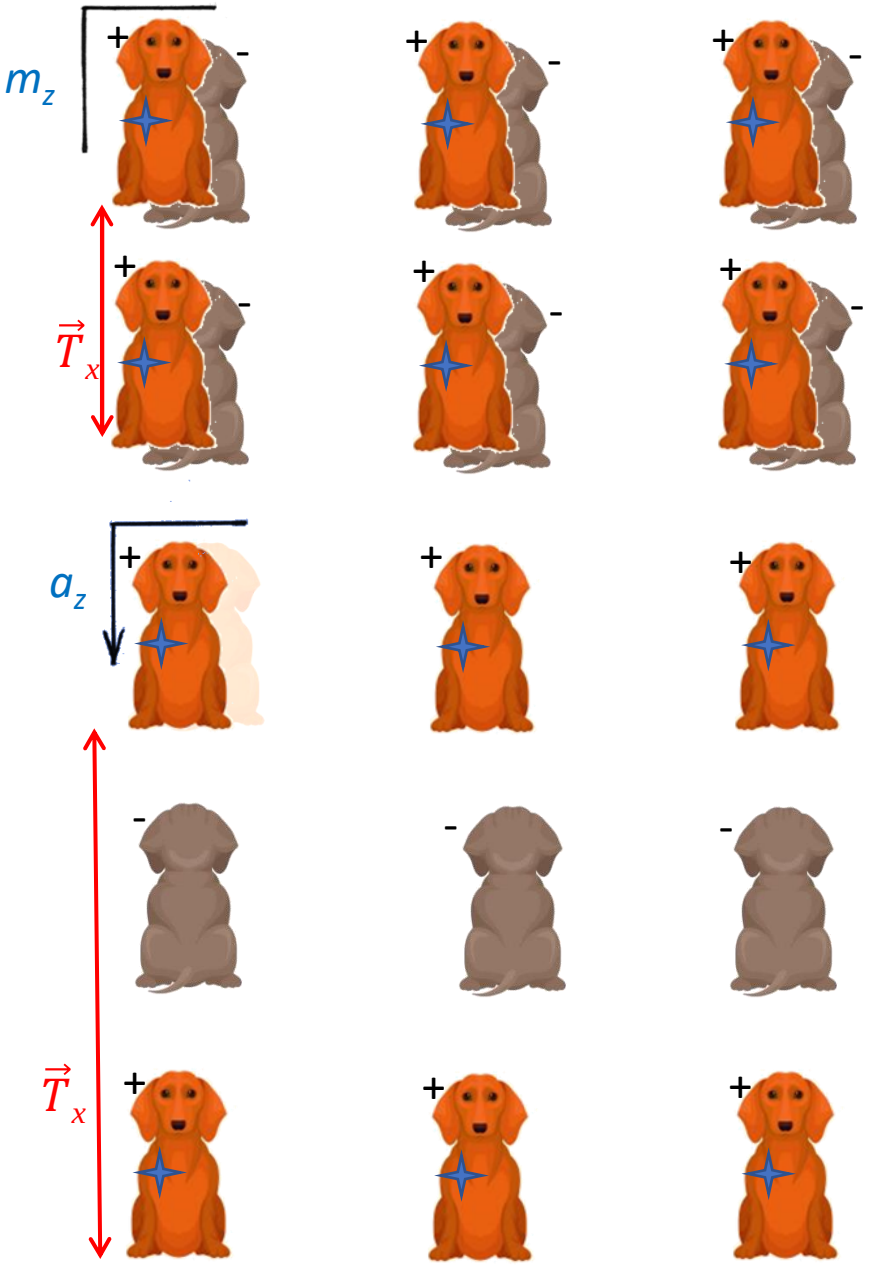
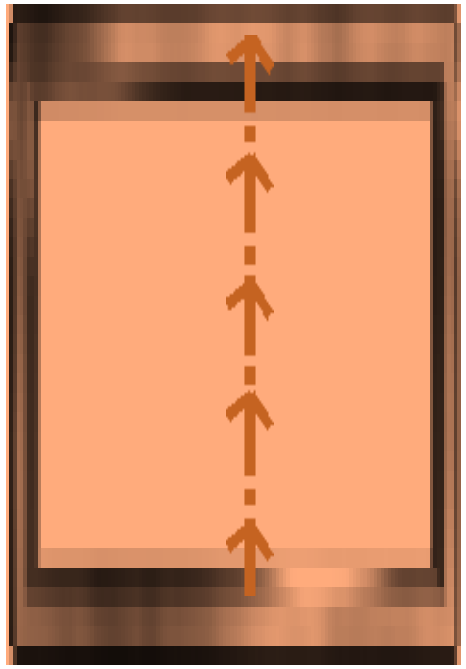


Иллюстрация действия плоскостей, перпендикулярных оси z





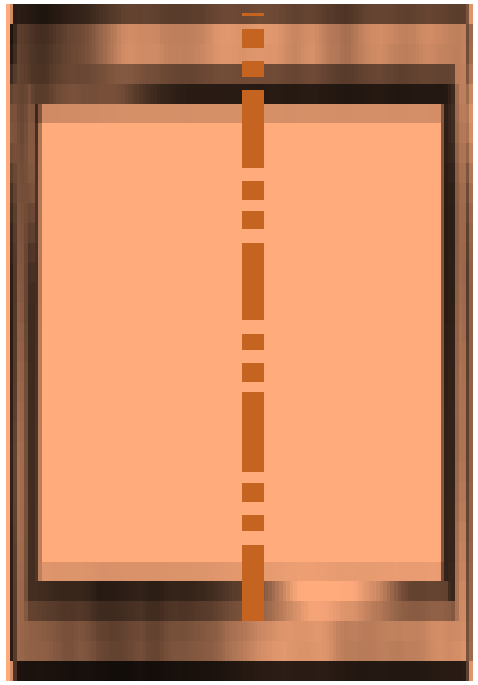
Есть еще плоскости:



Волшебная клиноплоскость

d





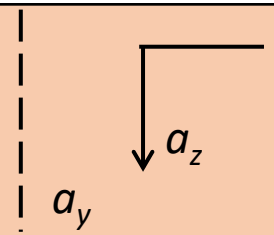
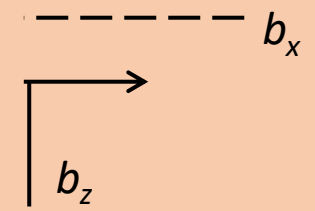
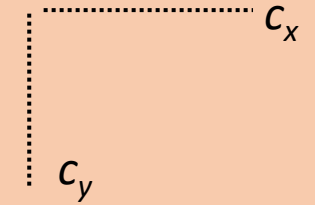
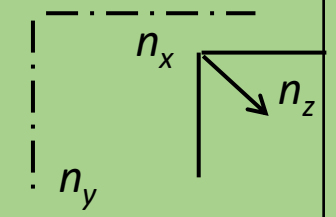
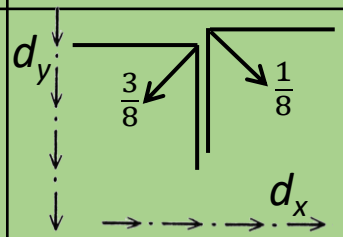
Волшебная плоскость скользящего отражения

e



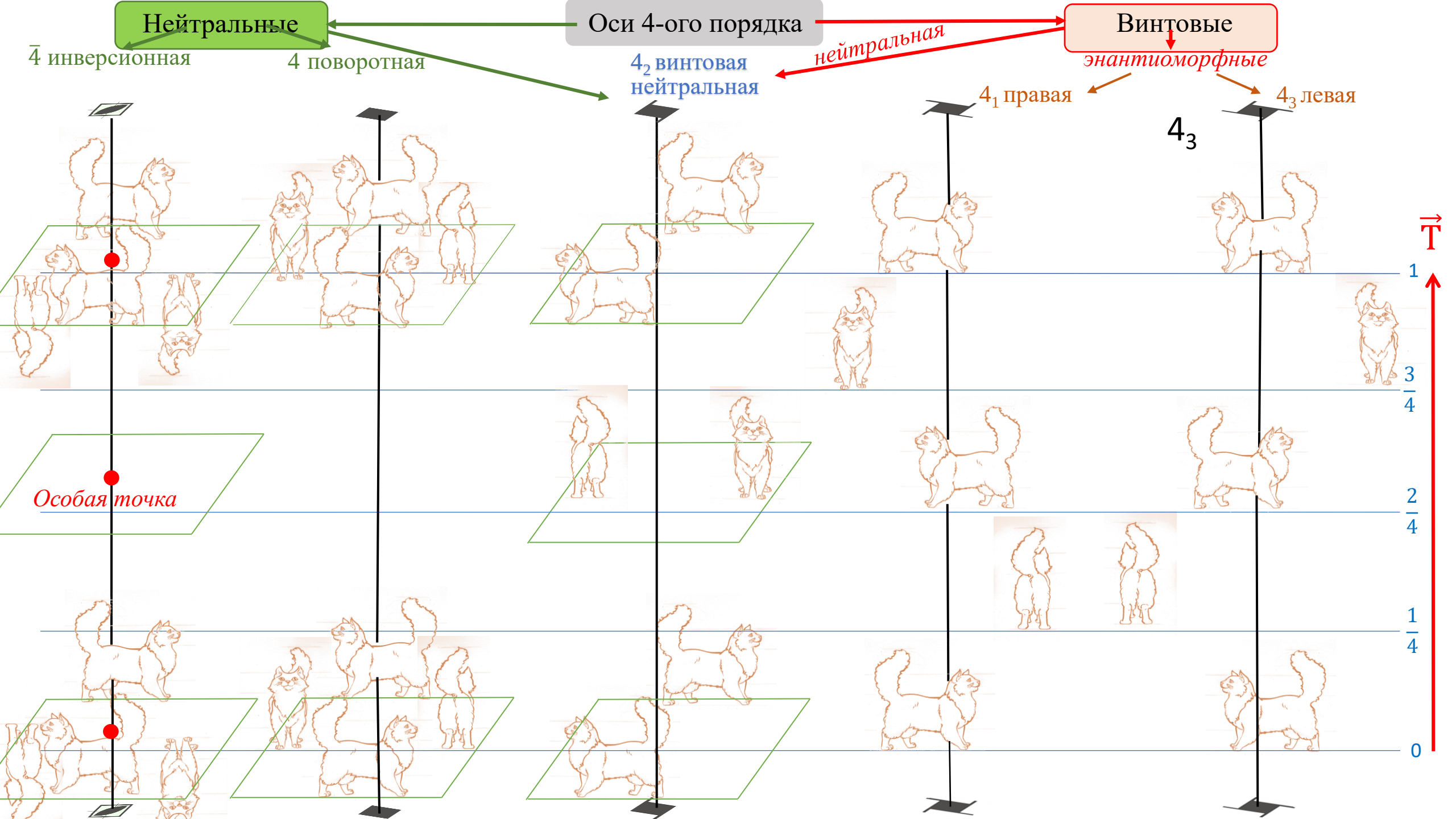
и это еще не все…

ОТКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ. ПЛОСКОСТИ

№	Эл. симм	Гр. знак	I/II род	Низш/ высш	Вел. симм.	Операции симметрии	Матрицы операций симметрии
1	a		II	Низш.	2	$\{e, a\}$	a_y $\begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
2	b		II	Низш.	2	$\{e, b\}$	b_x $\begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
3	c		II	Низш.	2	$\{e, c\}$	c_y $\begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
4	n		II	Низш.	2	$\{e, n\}$	n_y $\begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
5	d		II	Низш.	2	$\{e, d\}$	d_y $\begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 1/4 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$

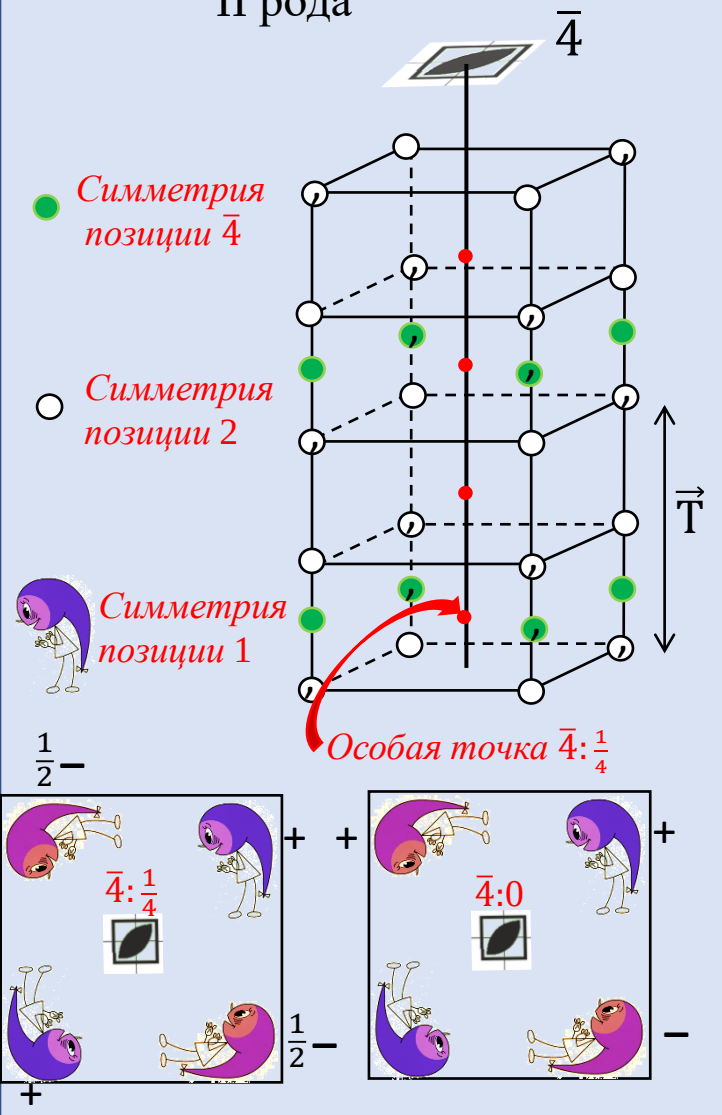
Плоскости скользящего отражения

Клино-плоскости

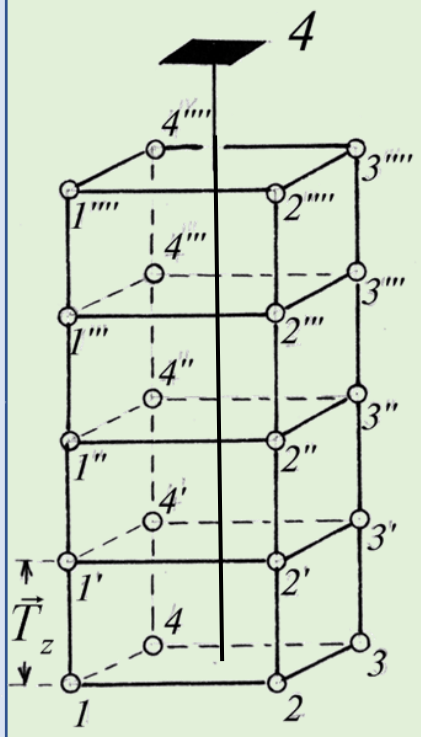

Нейтральные
Оси 4-ого порядка
Винтовые
$\bar{4}$ инверсионная
4 поворотная
4_2 винтовая нейтральная
нейтральная
энантиоморфные
4_1 правая
4_3 левая
4_3
Особая точка
$\vec{T}$
1
$\frac{3}{4}$
$\frac{2}{4}$
$\frac{1}{4}$
0

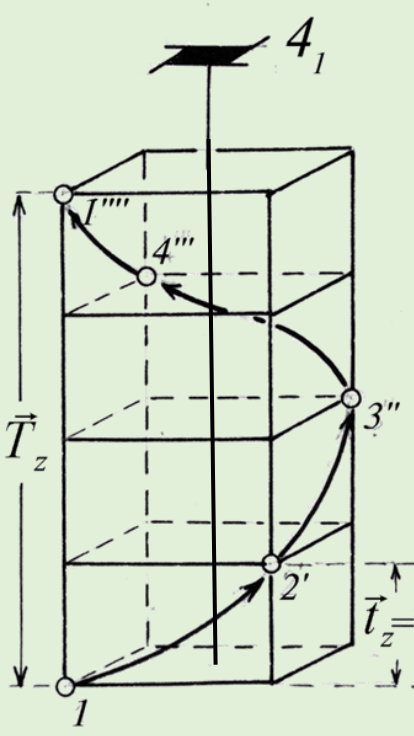
Оси 4-ого порядка

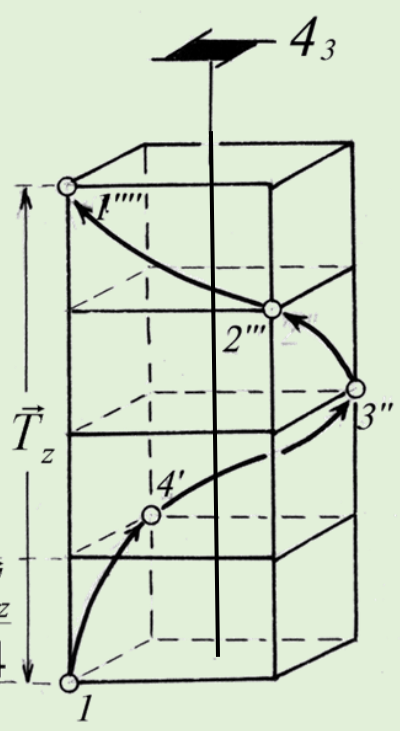
II рода

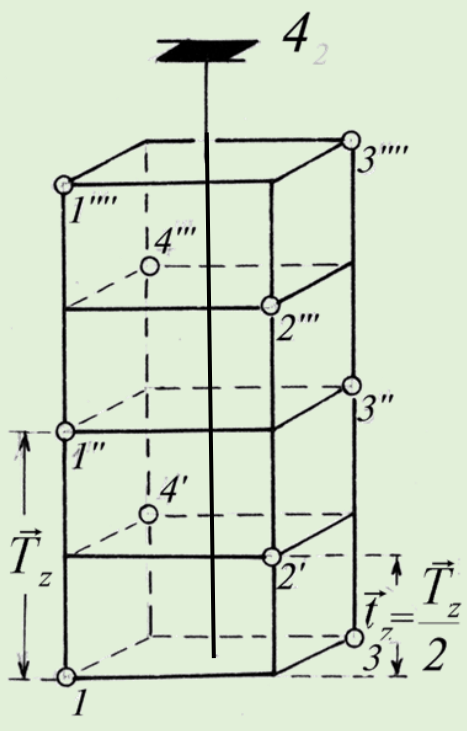


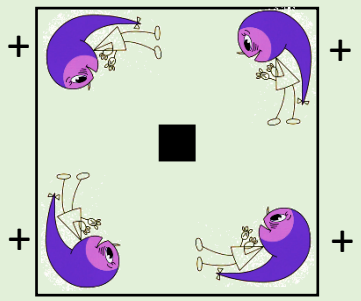
I рода

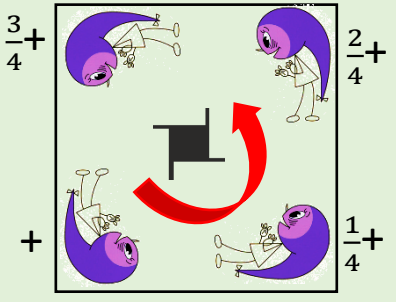


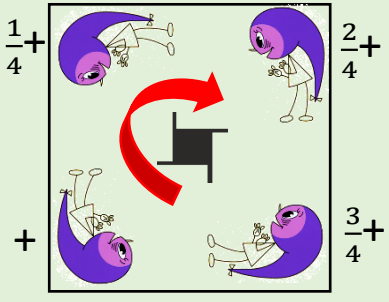


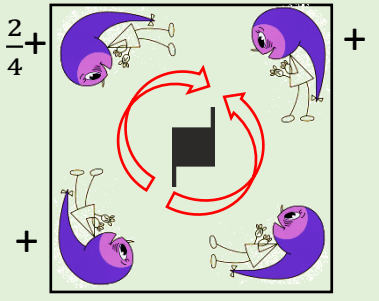




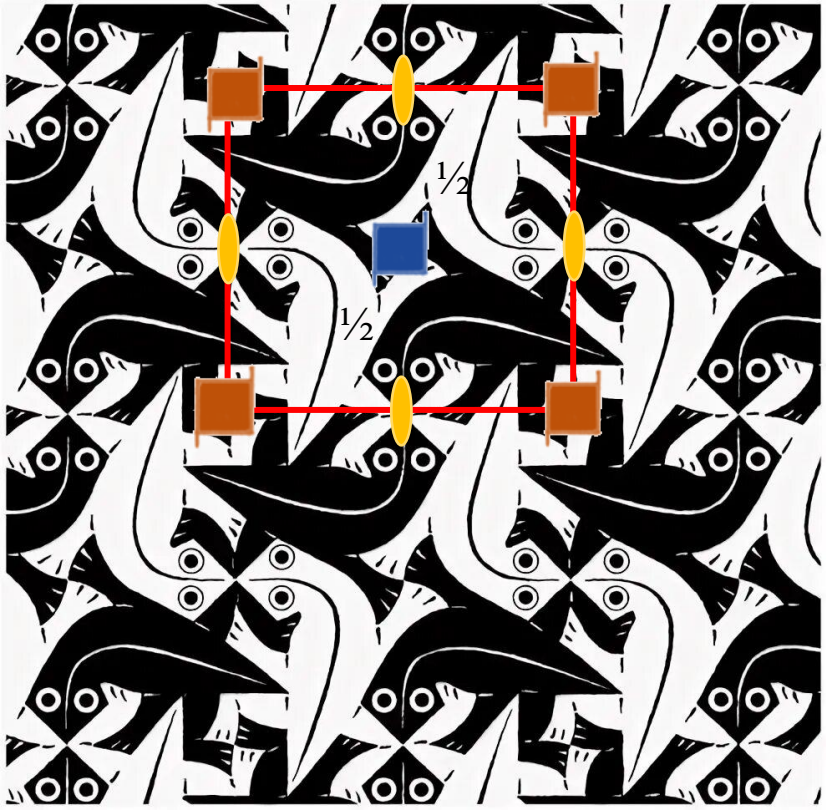




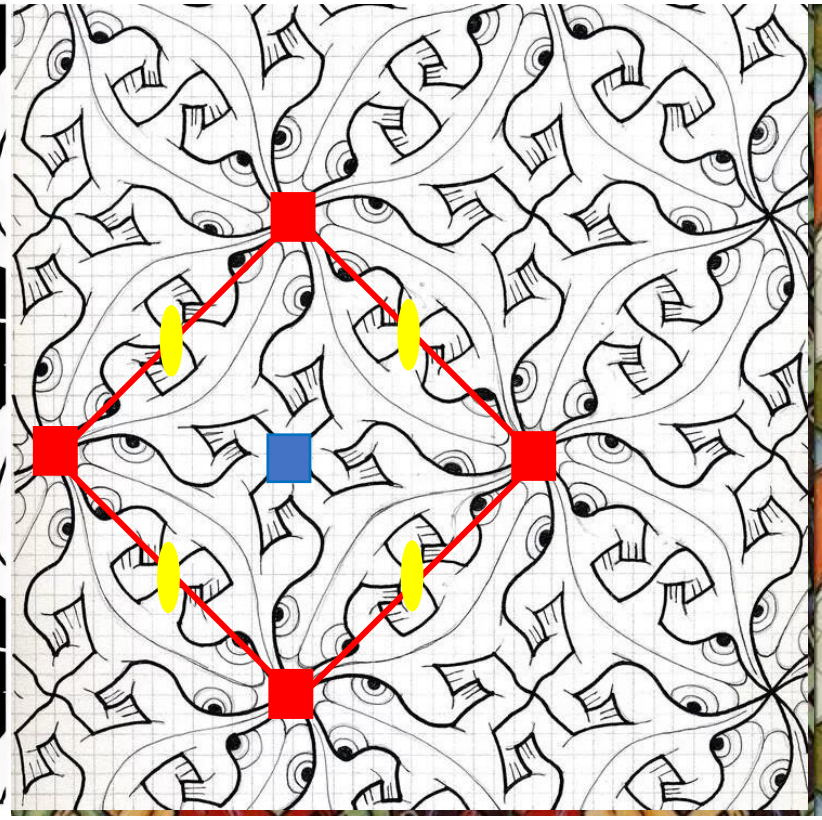




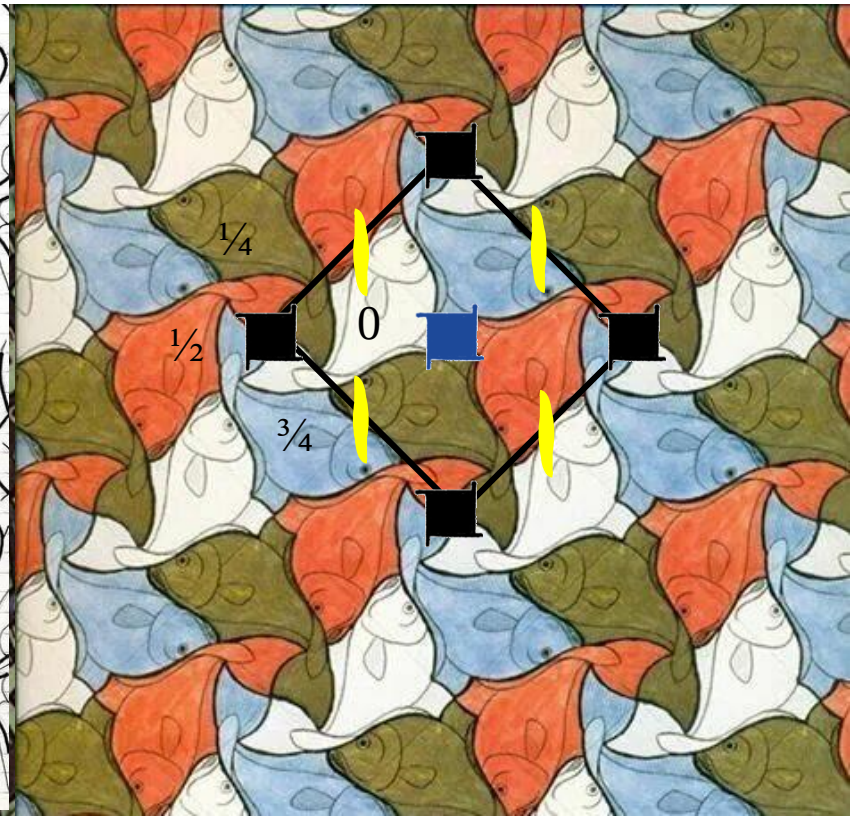
Паркеты художника М.Эшера могут иллюстрировать поворотные и винтовые оси 4-ого порядка, если цвету объектов придать значение координаты высоты *Z*.



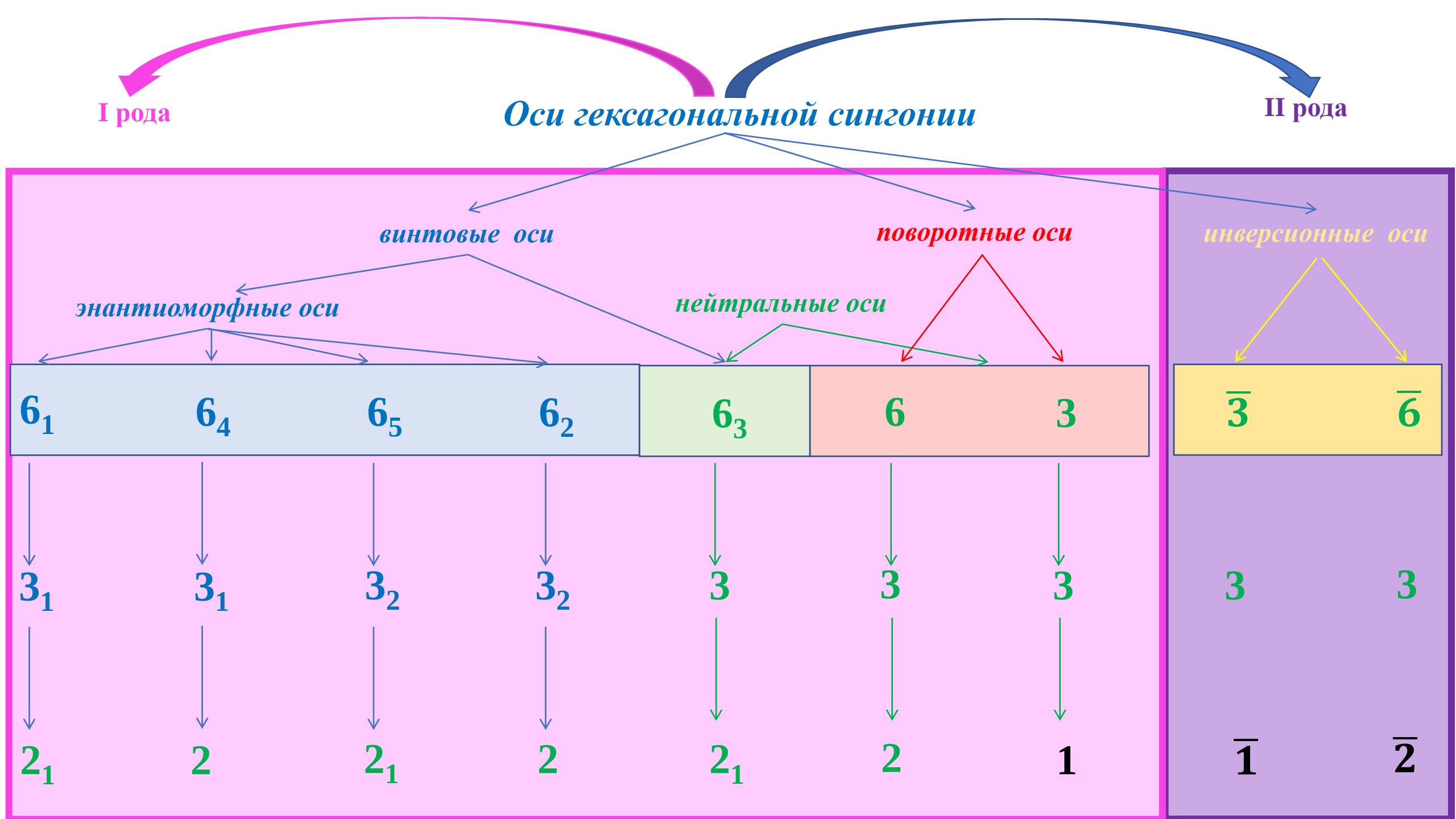
Ось 4_2: представим, что черная ящерица находится на высоте 0, а белая - на высоте ½. В центре ребер выбранной ячейки - оси 2.



Ось 4: Все ящерицы одного цвета, следовательно, располагаются на одной высоте. В центре ребер выбранной ячейки - оси 2



Ось 4_1 (или 4_3): представим, что рыбки разных цветов находятся на разных высотах: 0, ¼, ½, ¾. Тогда в центрах ребер ячейки – винтовые оси 2_1


I рода
Оси гексагональной сингонии
II рода
винтовые оси
поворотные оси
инверсионные оси
энантиоморфные оси
нейтральные оси
6_1 6_4 6_5 6_2 6_3 6 3 $\bar{3}$ $\bar{6}$
3_1 3_1 3_2 3_2 3 3 3 3 3
2_1 2 2_1 2 2_1 2 1 $\bar{1}$ $\bar{2}$

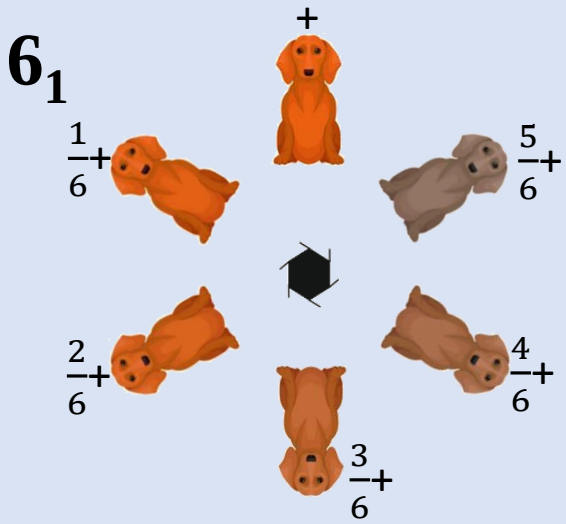
Оси 6-ого порядка I рода

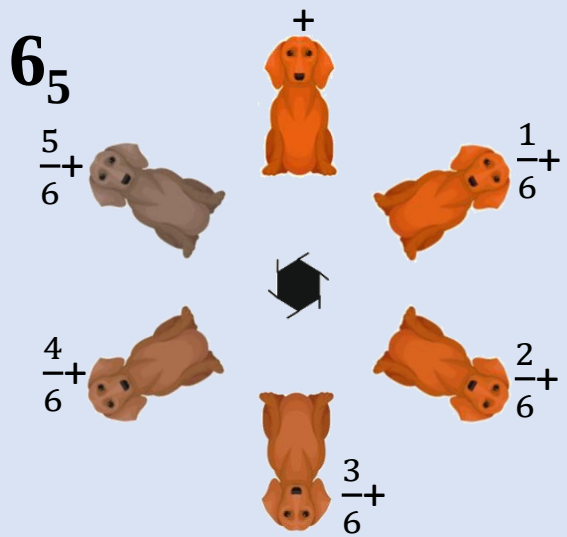
энантиоморфные оси

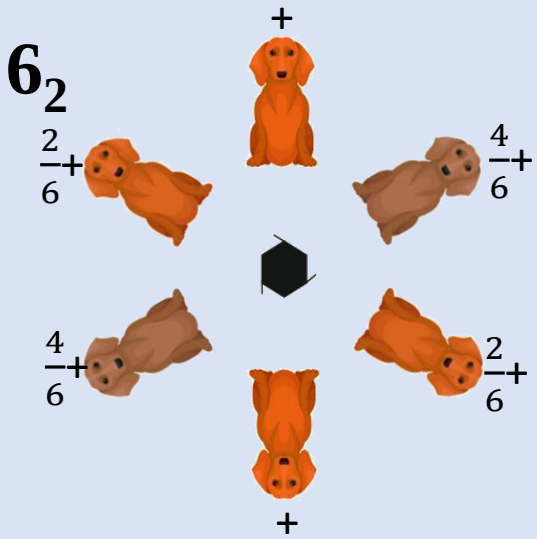
винтовые оси

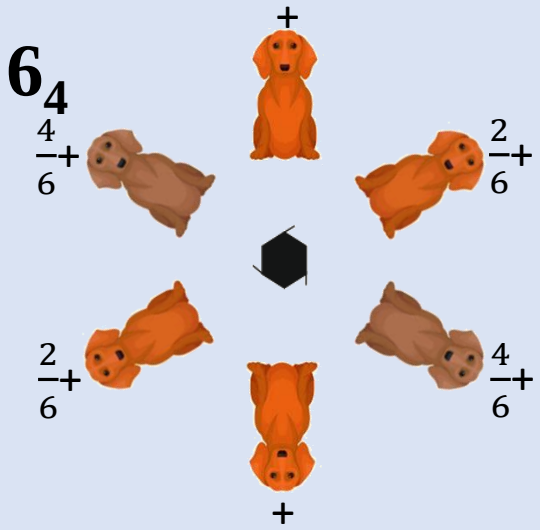
нейтральные оси

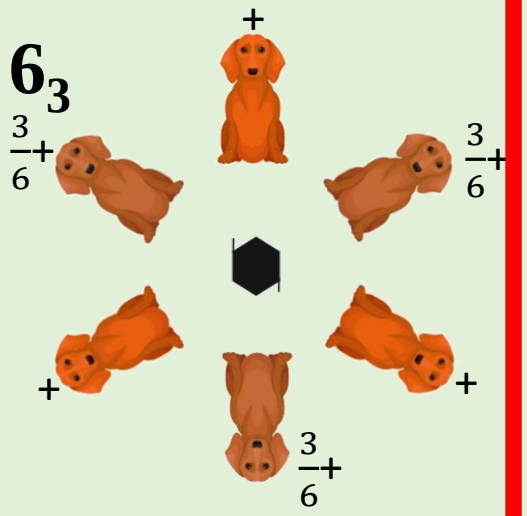
поворотная ось

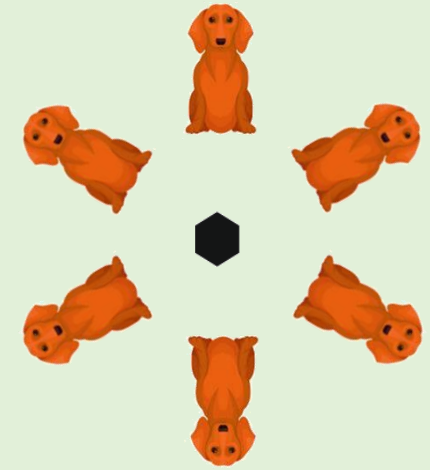








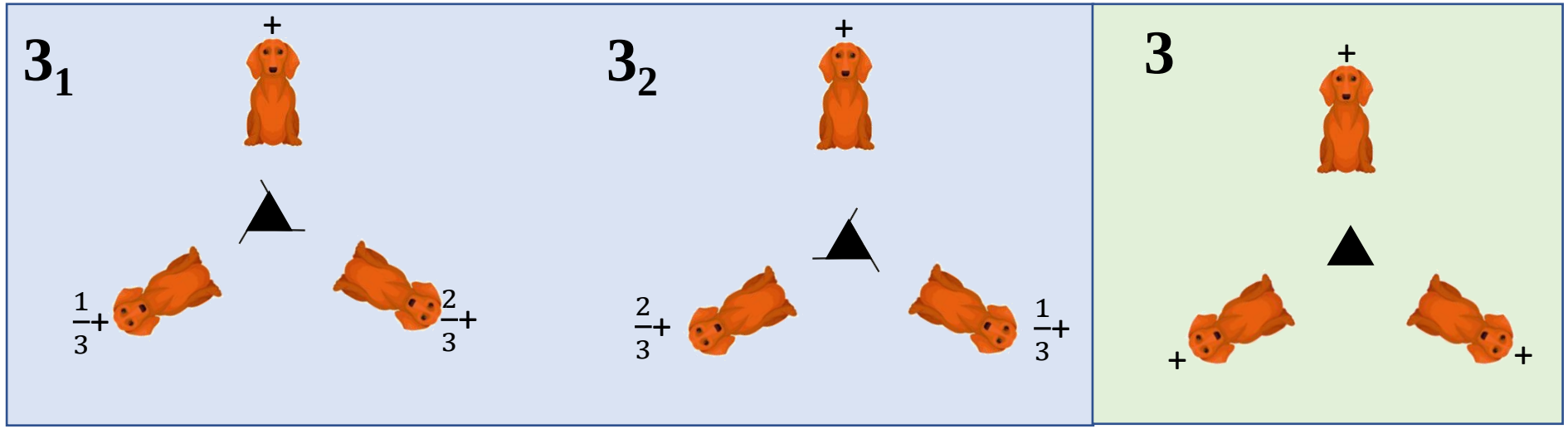




Оси 3-ого порядка I рода

Винтовые энантиоморфные оси

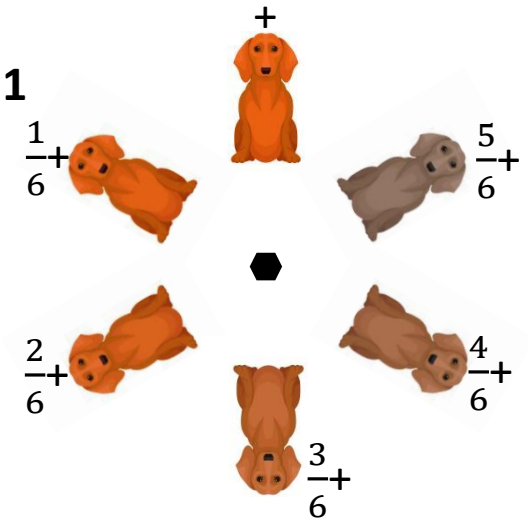
нейтральная поворотная ось



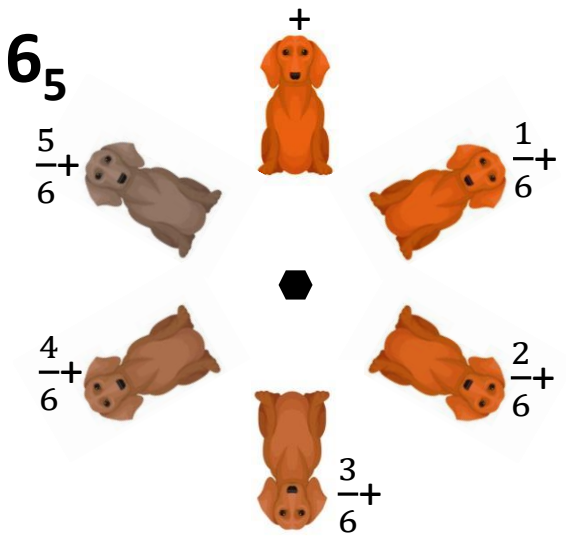
Единственными простыми элементами симметрии являются поворотные оси

Иллюстрация действия осей 6-ого порядка.

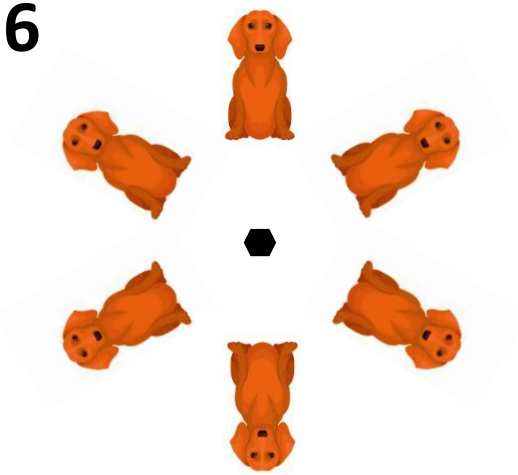
6_1



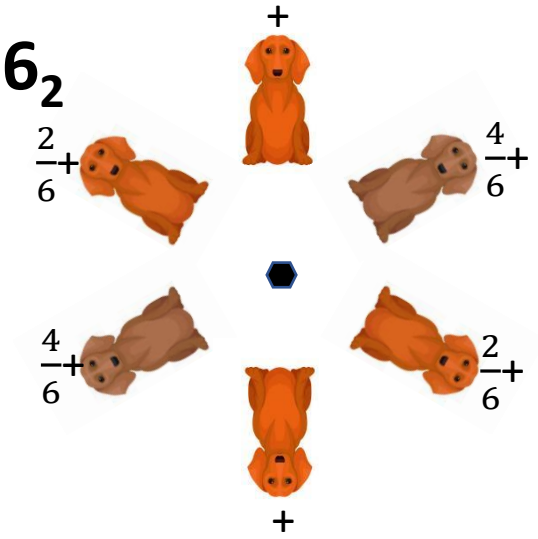
6_5



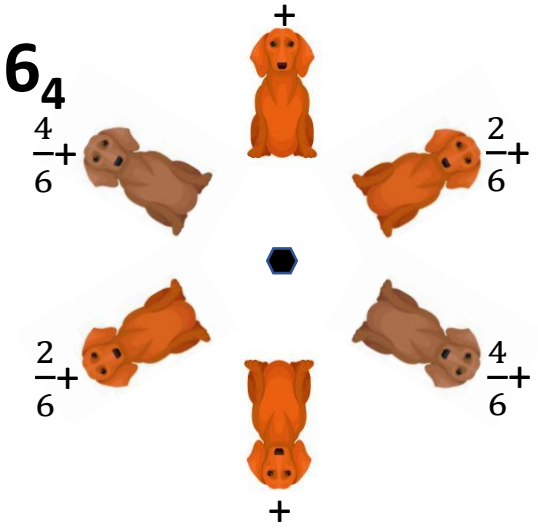
6



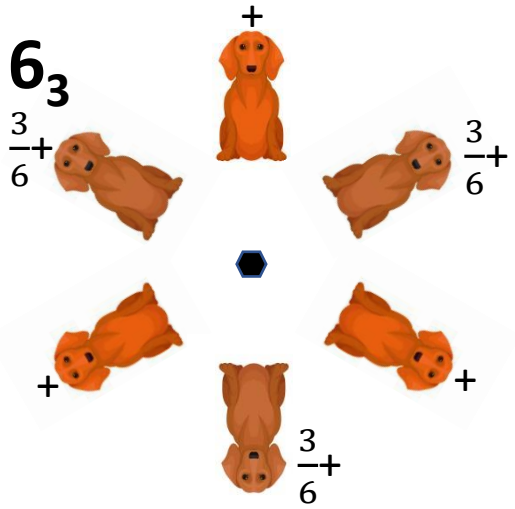
6_2



6_4

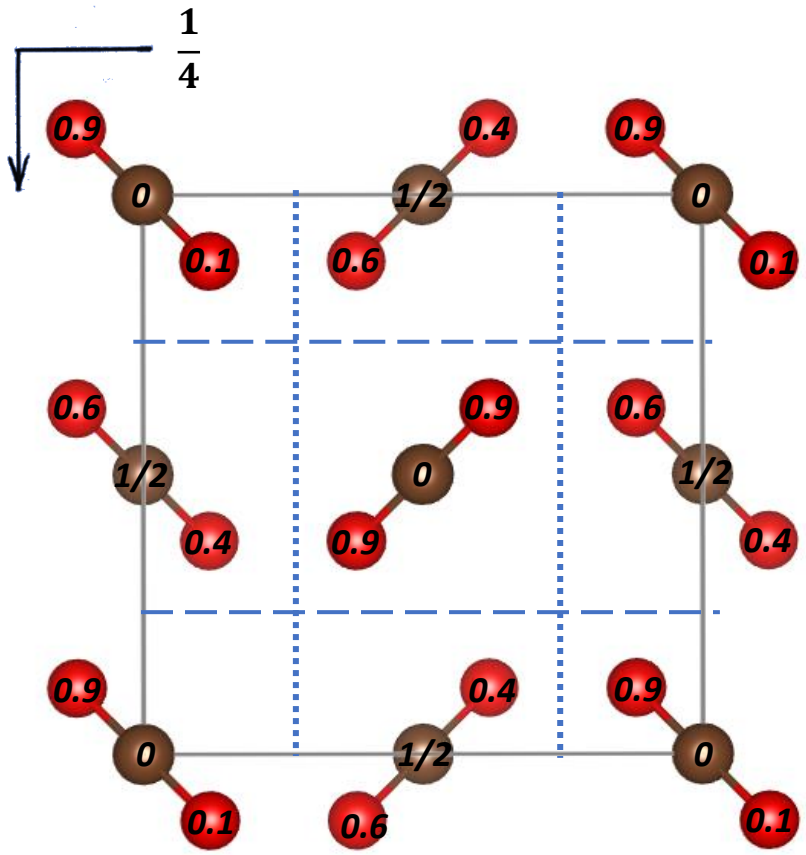


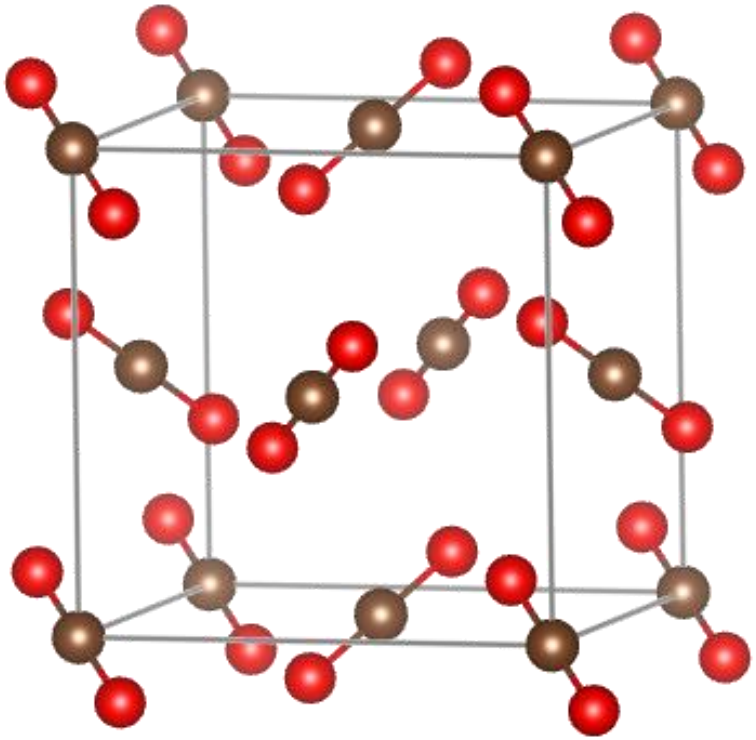
6_3



Примеры структур с плоскостями скользящего отражения и клиноплоскостями

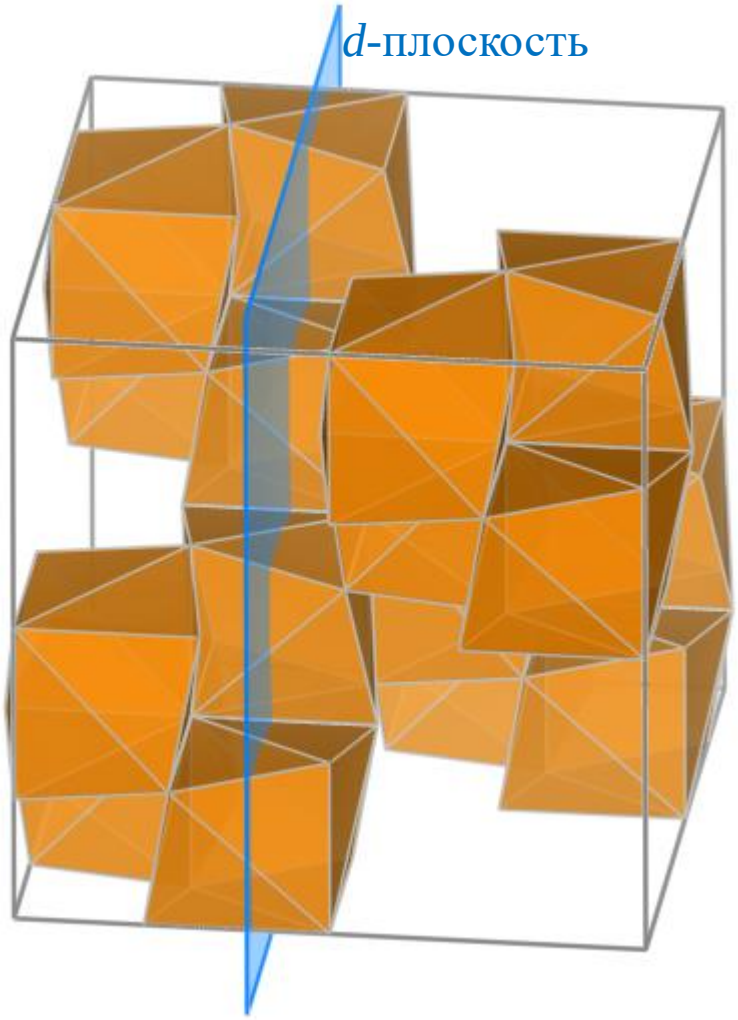
Структура CO_2

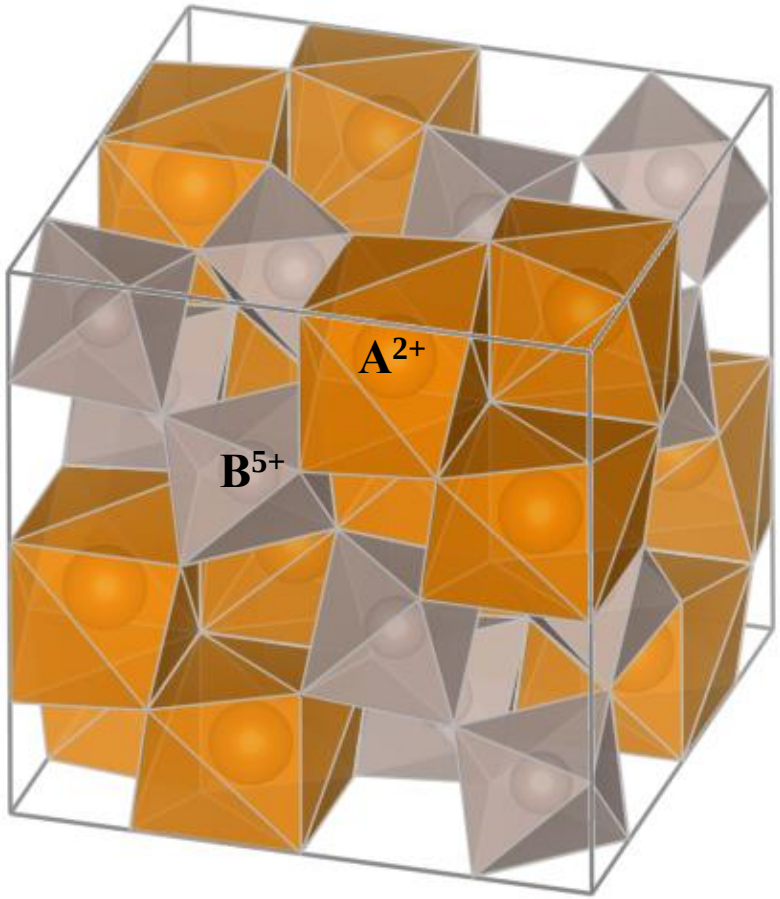


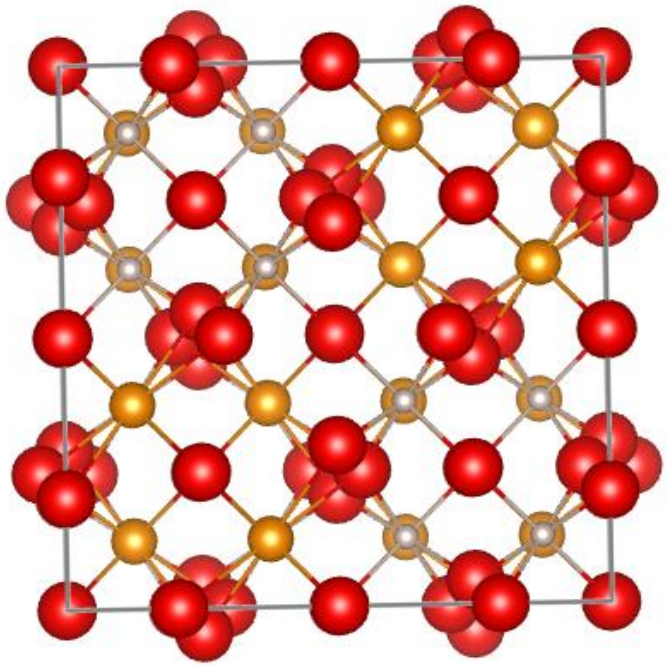


Пространственная группа $Pa\bar{3}$

Примеры структур с плоскостями скользящего отражения и клиноплоскостями

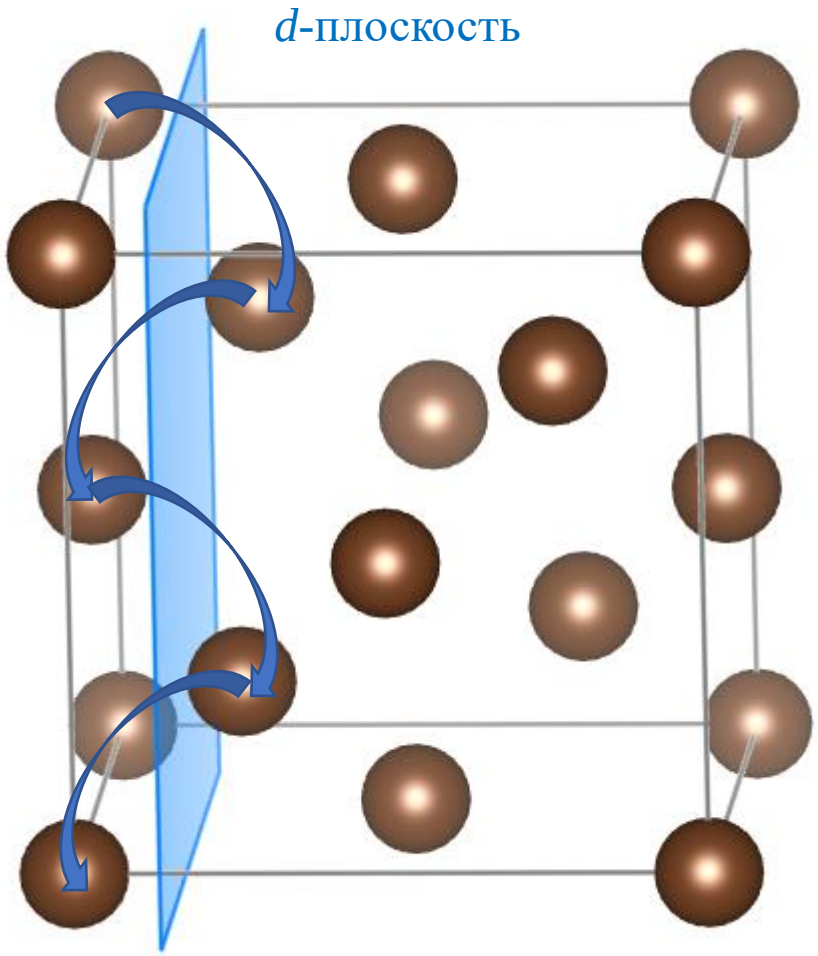


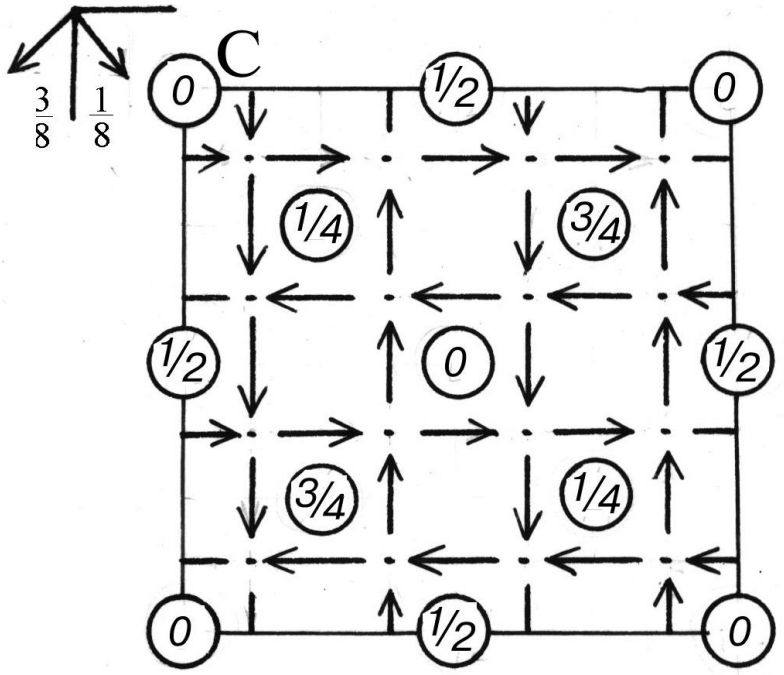




Структура пирохлора $A^{2+}_2B^{5+}_2O_7$

Примеры структур с плоскостями скользящего отражения и клиноплоскостями

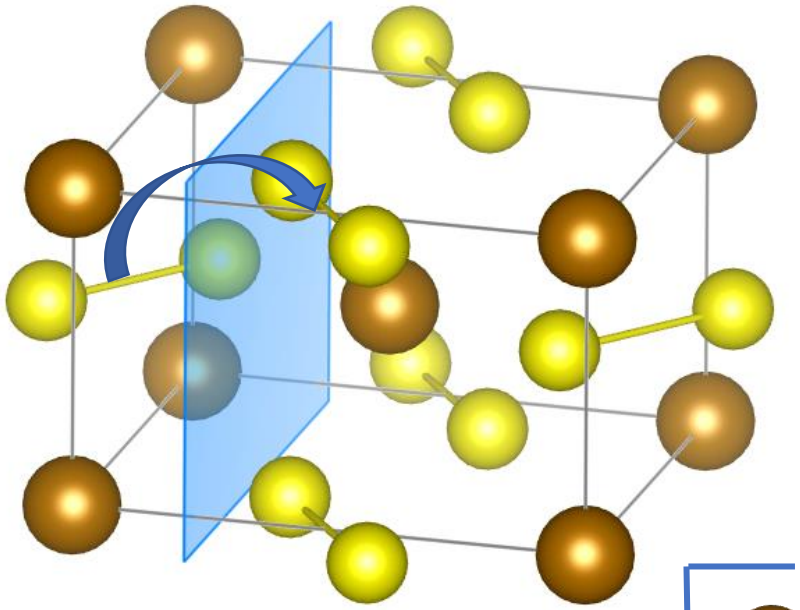


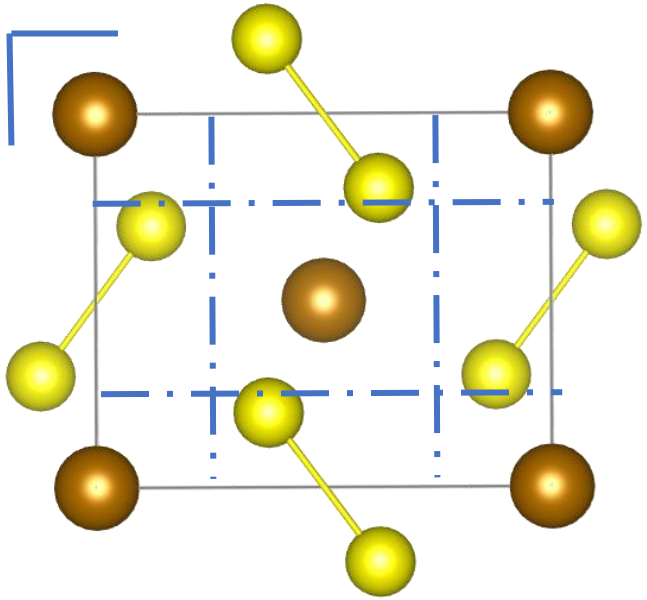


Структура алмаза. Пространственная группа $Fd\bar{3}m$

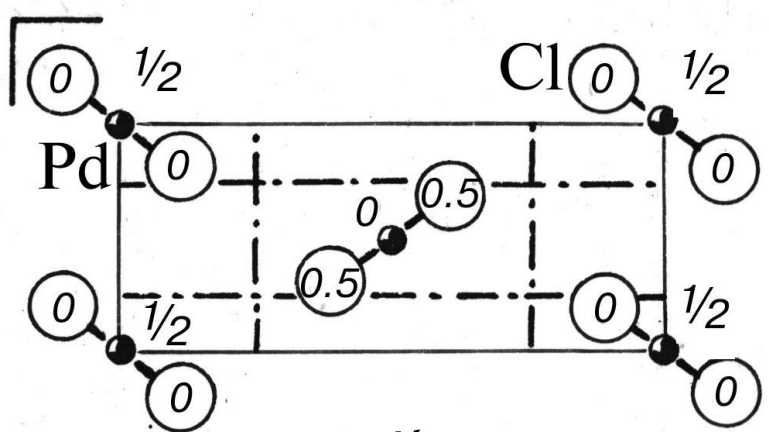
Примеры структур с плоскостями скользящего отражения и клиноплоскостями

n-лоскость

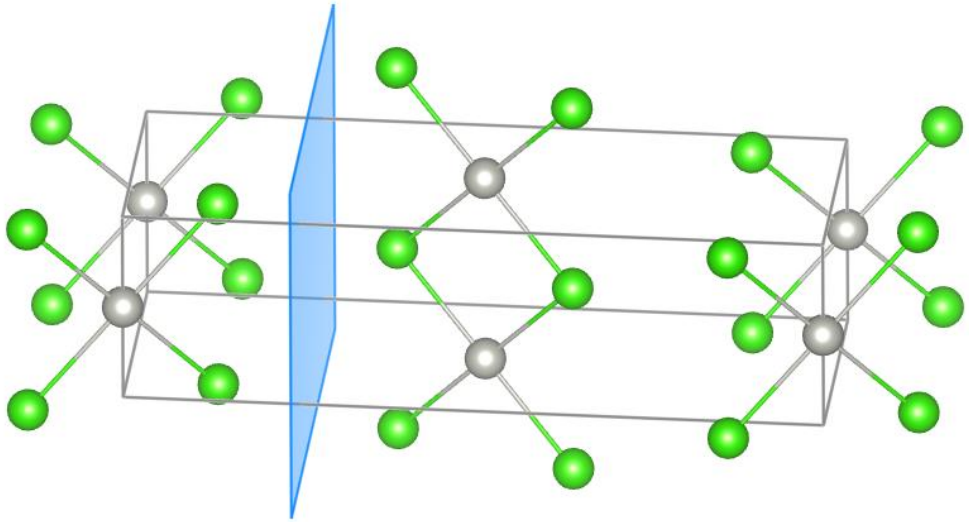




Структура марказита Пространственная группв *Pnnm*



n-плоскость



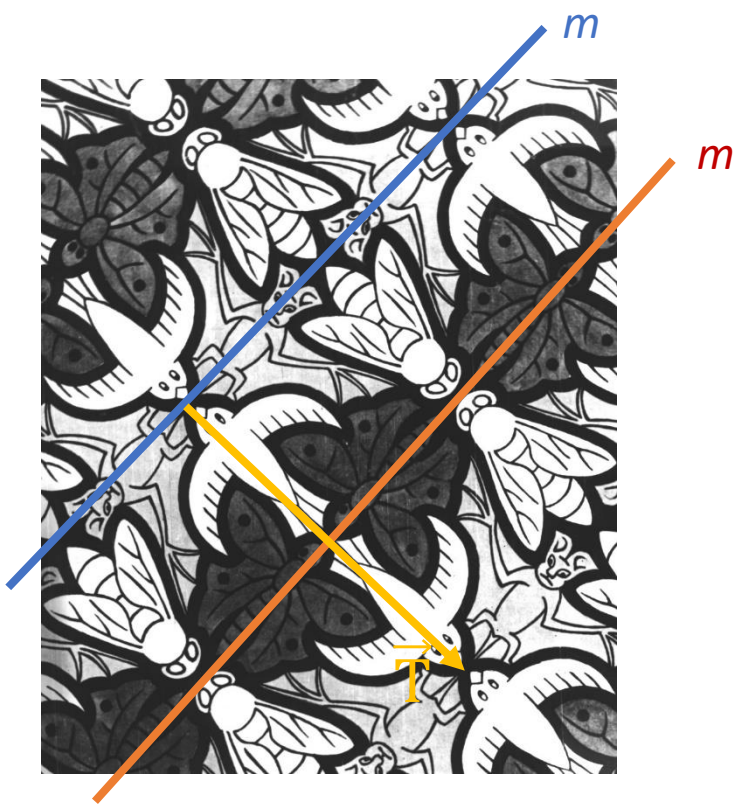
Структура $PdCl_2$ Пространственная группа *Pnnm*

Взаимодействие элементов симметрии и трансляции.

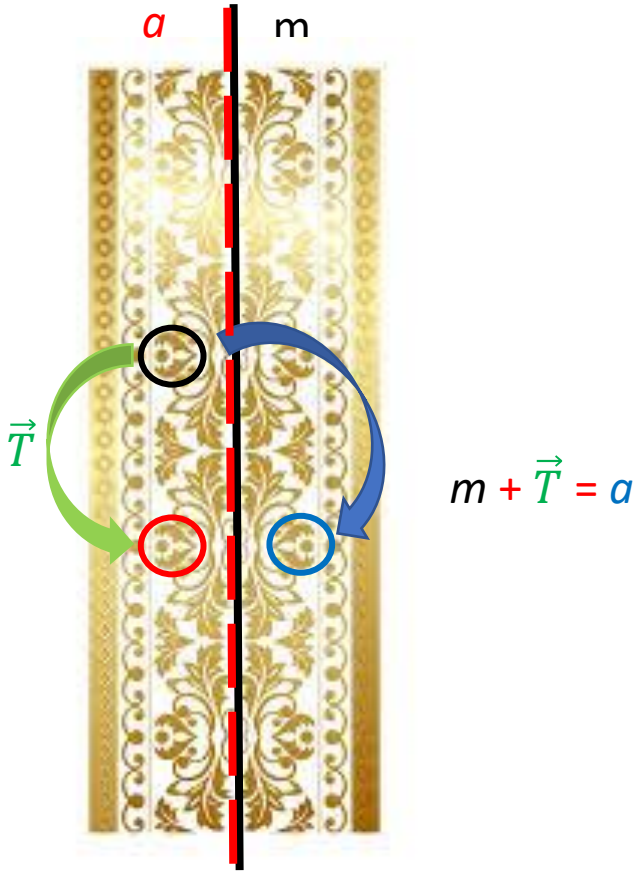
Трансляция перпендикулярная элементу симметрии	Трансляция параллельная элементу симметрии	Трансляция, косо расположенная к элементу симметрии
Переносит элемент симметрии в центр n-угольника, построенного на этой трансляции	*Меняет характер элемента симметрии*	*Переносит элемент симметрии в центр n-угольника, построенного на этой трансляции и меняет его характер*

Взаимодействие различных плоскостей с трансляцией

Трансляция перпендикулярная плоскости

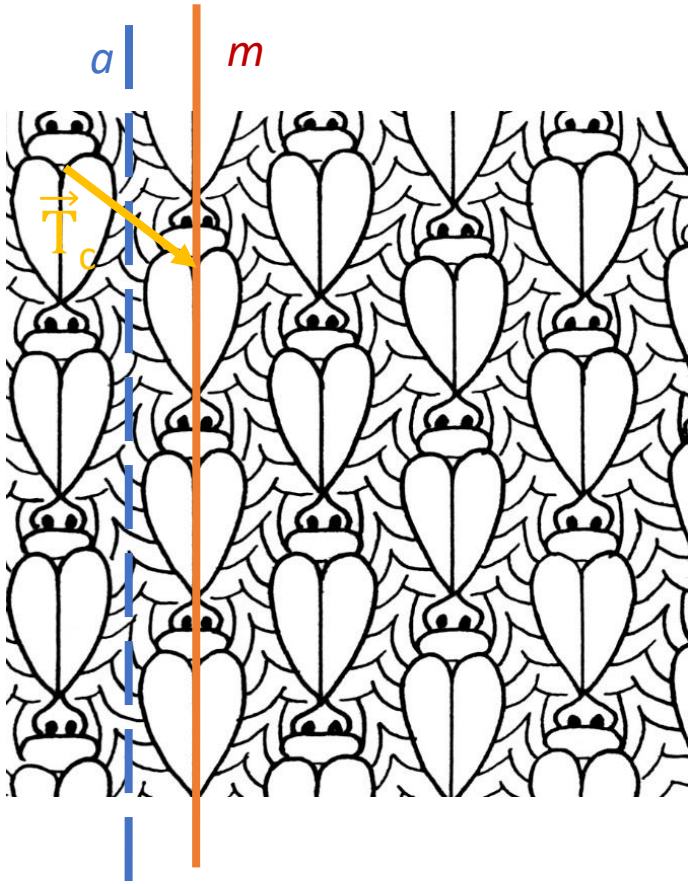


Трансляция параллельная плоскости



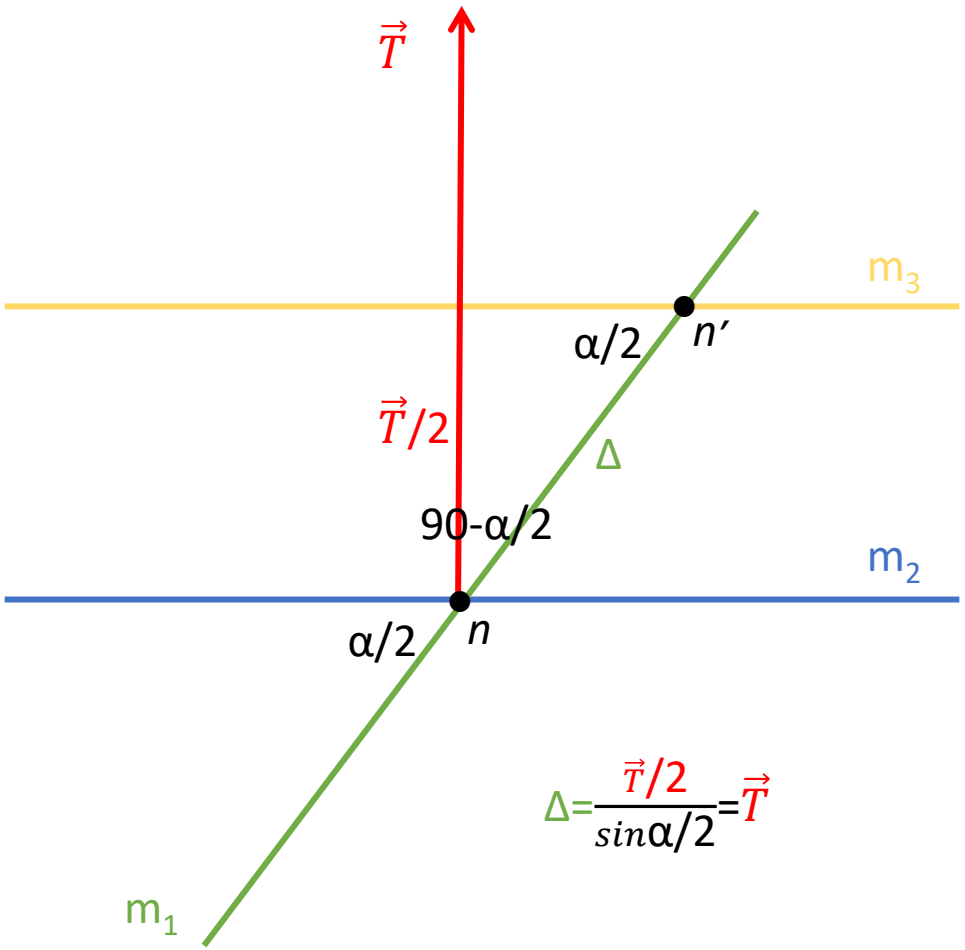
$m + \vec{T} = a$

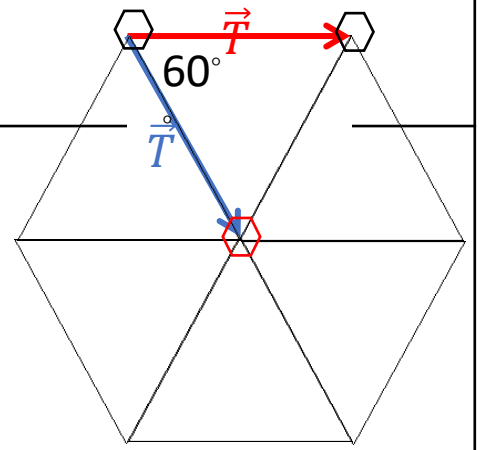
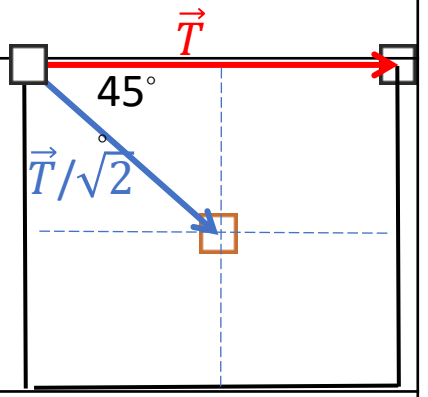
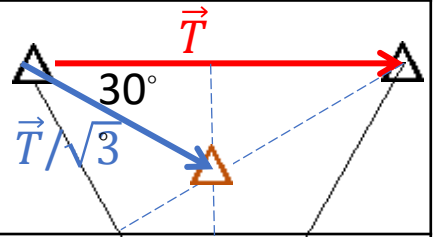
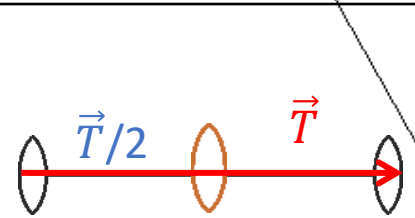
Трансляция, косо расположена к плоскости



Трансляция перпендикулярная оси симметрии

$n \bullet \vec{T} = (m_1 \bullet m_2) \bullet (m_2 \bullet m_3) = m_1 \bullet m_3$

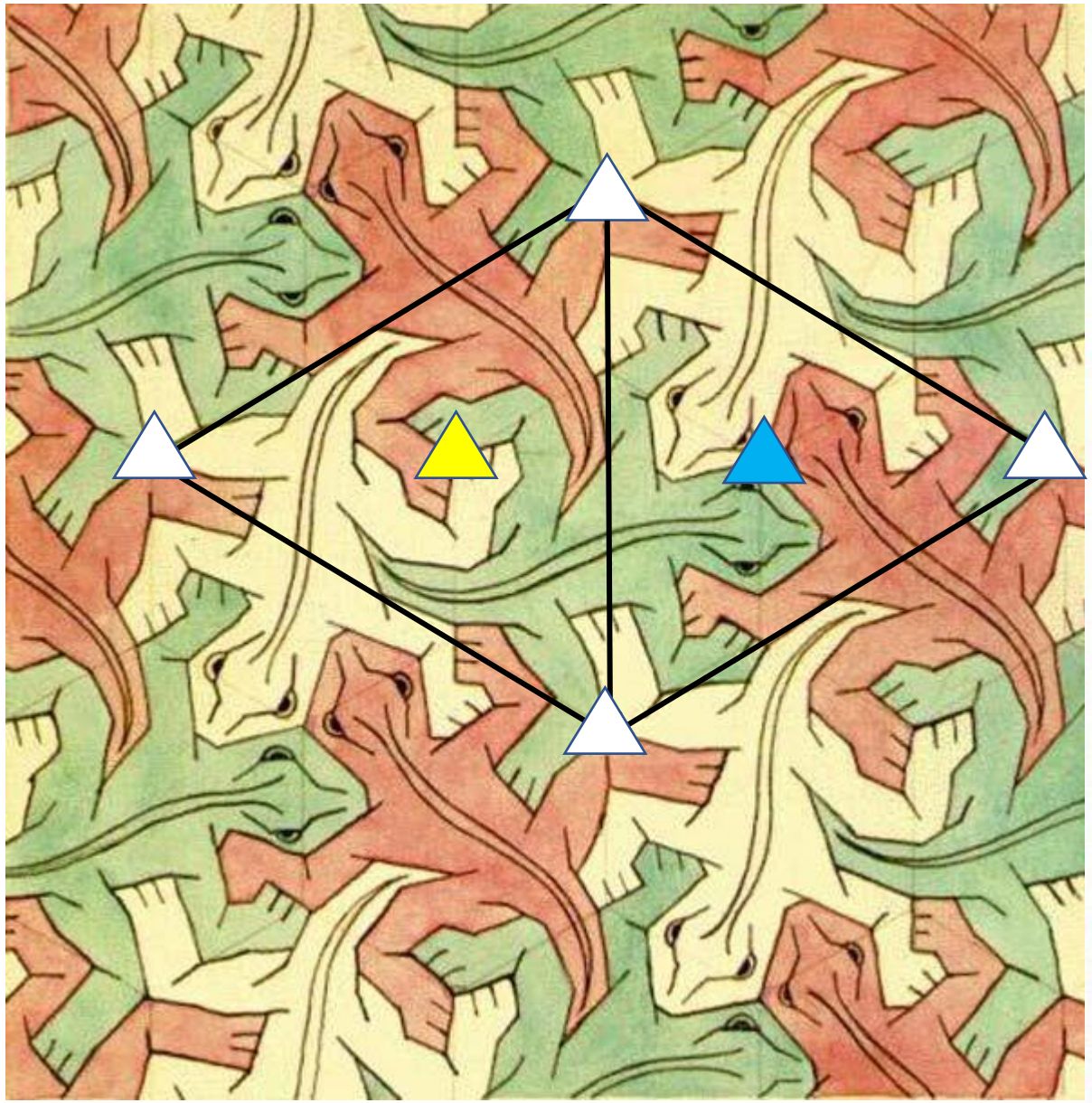


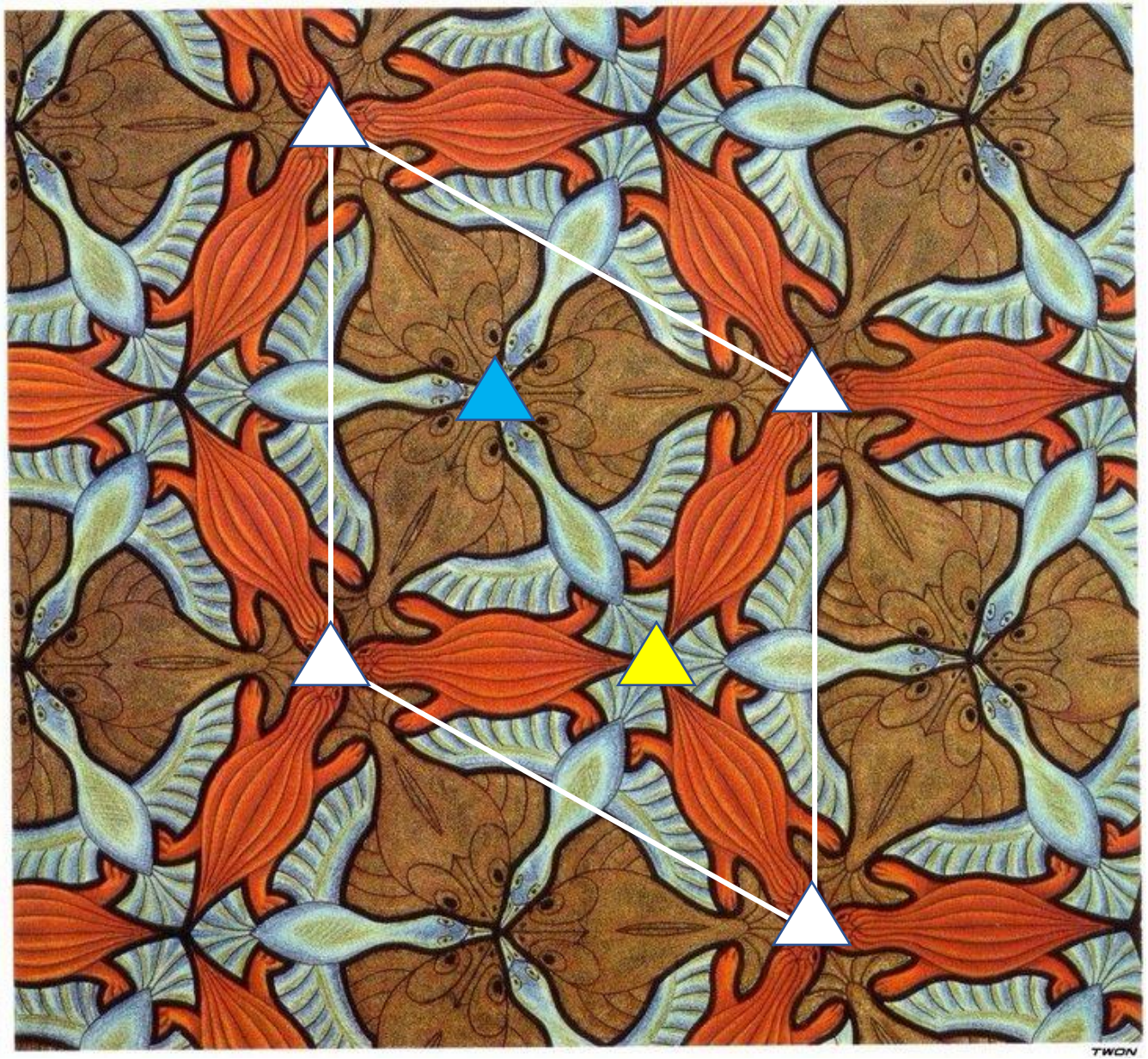
Ось	α	Δ	90-α/2	
6	60°	$\frac{\vec{T}/2}{sin30^\circ} = \vec{T}$	60°	
4	90°	$\frac{\vec{T}/2}{sin45^\circ} = \vec{T}/\sqrt{2}$	45°	
3	120°	$\frac{\vec{T}/2}{sin60^\circ} = \vec{T}/\sqrt{3}$	30°	
2	180°	$\frac{\vec{T}/2}{sin90^\circ} = \vec{T}/2$	0°	

Ось 2-ого порядка смещается в центр двуугольника, то есть в центр самой трансляции

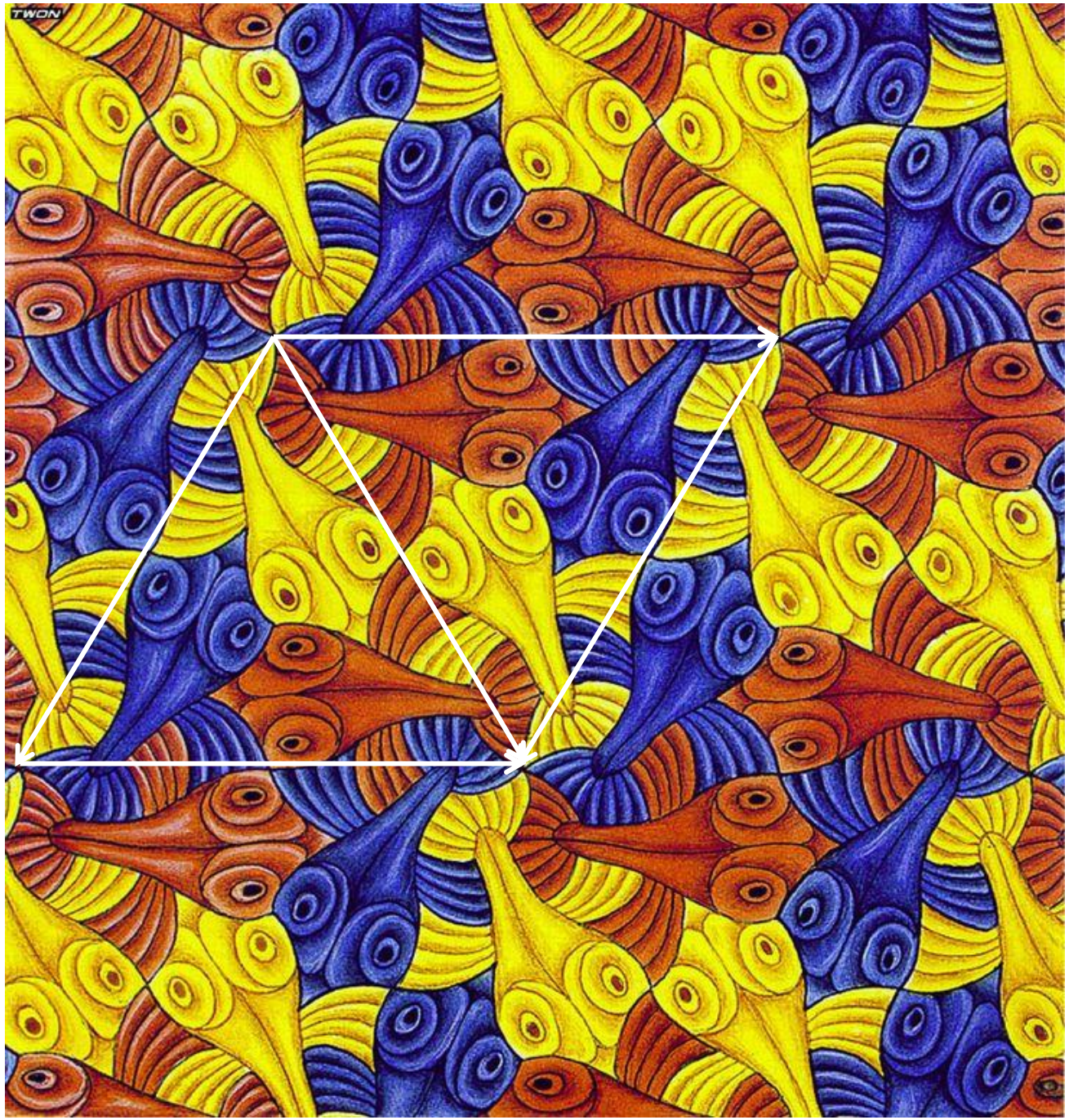


В результате взаимодействия изначальной оси 2 с трансляциями $\vec{\tau}_x$, $\vec{\tau}_y$ и $\vec{\tau}_{xy}$ возникают неэквивалентные оси второго порядка трех типов

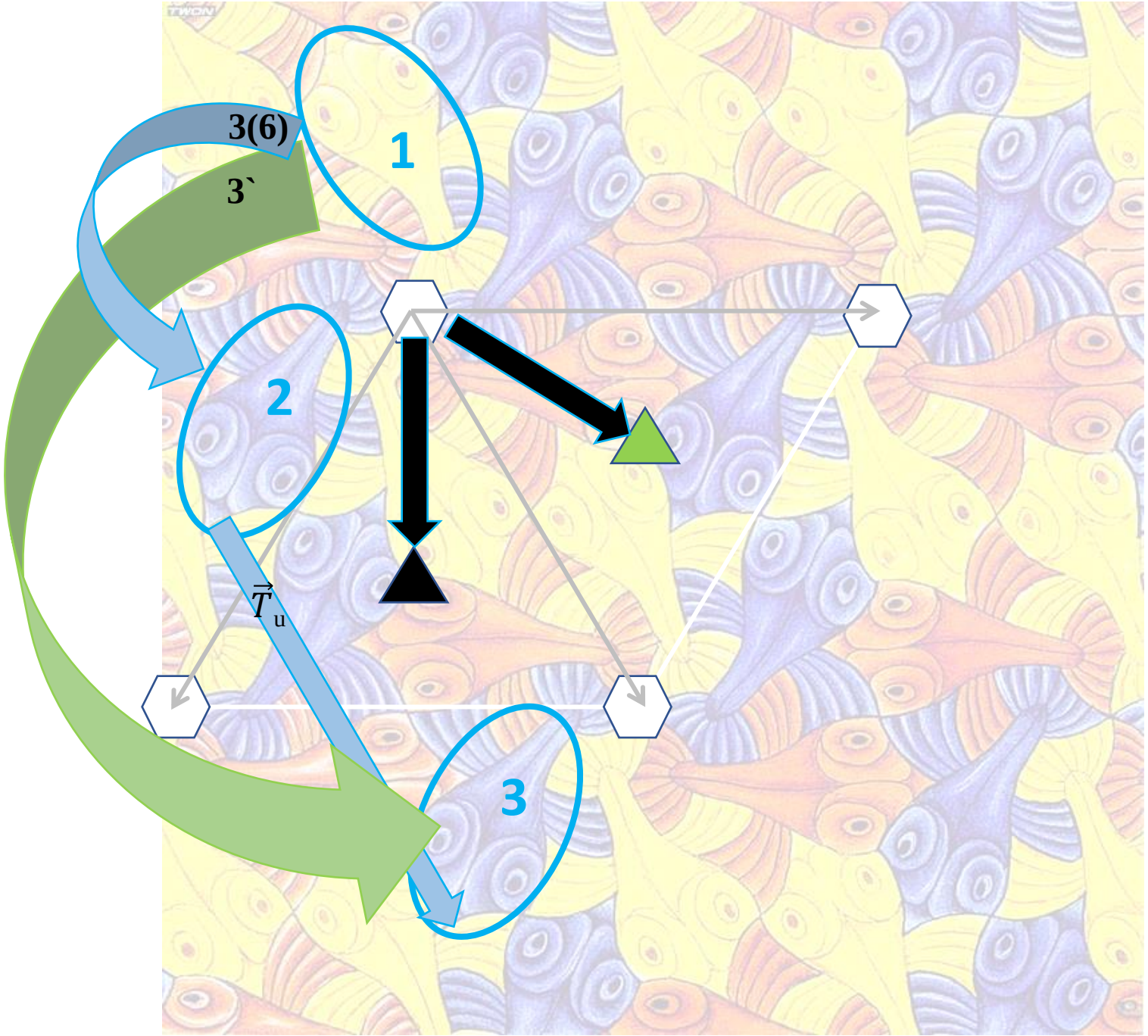



TWON

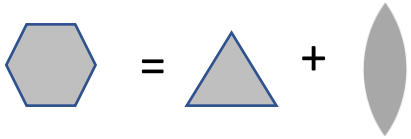

TWON



В мозаике М.Эшера «Рыбки» можно выделить гексагональную ячейку (если считать разноцветные рыбки эквивалентными)



Ось 6-ого порядка – это суперпозиция оси 3-его и 2-ого порядков



В результате взаимодействия оси 3, содержащейся в оси 6, с трансляциями $\vec{T}_x$, $\vec{T}_y$ и $\vec{T}_u$ получаются дополнительные оси **3`**, проходящих через центр треугольника, построенного на этих трансляциях.

Желтая рыбка в процессе симметрических преобразований переходит из положения 1, через положения 2, в положении 3:

$1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$:

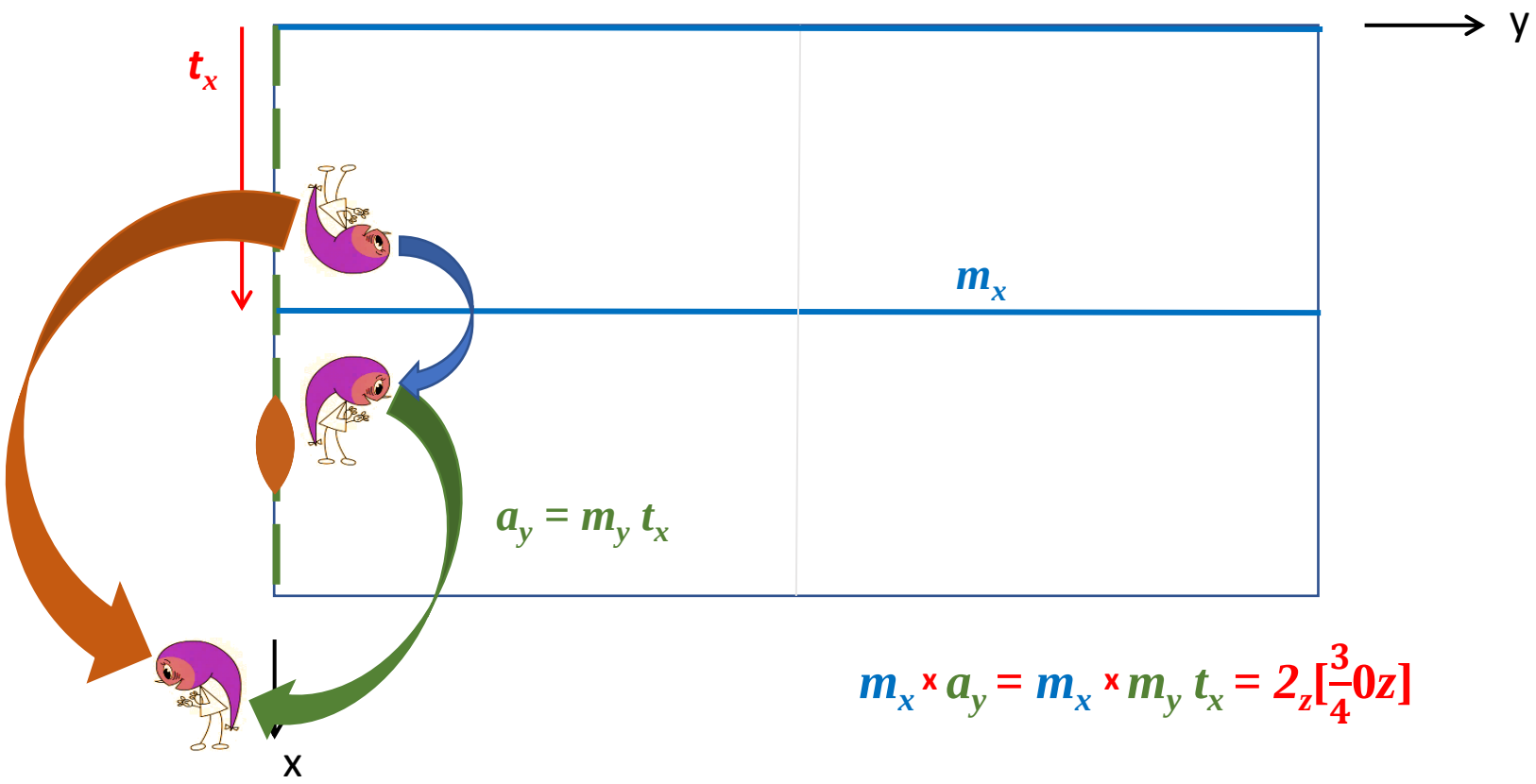
$3^1(6) \times \vec{T}_u = 3^{1`}$

Две последовательно проведенные операции порождают третью



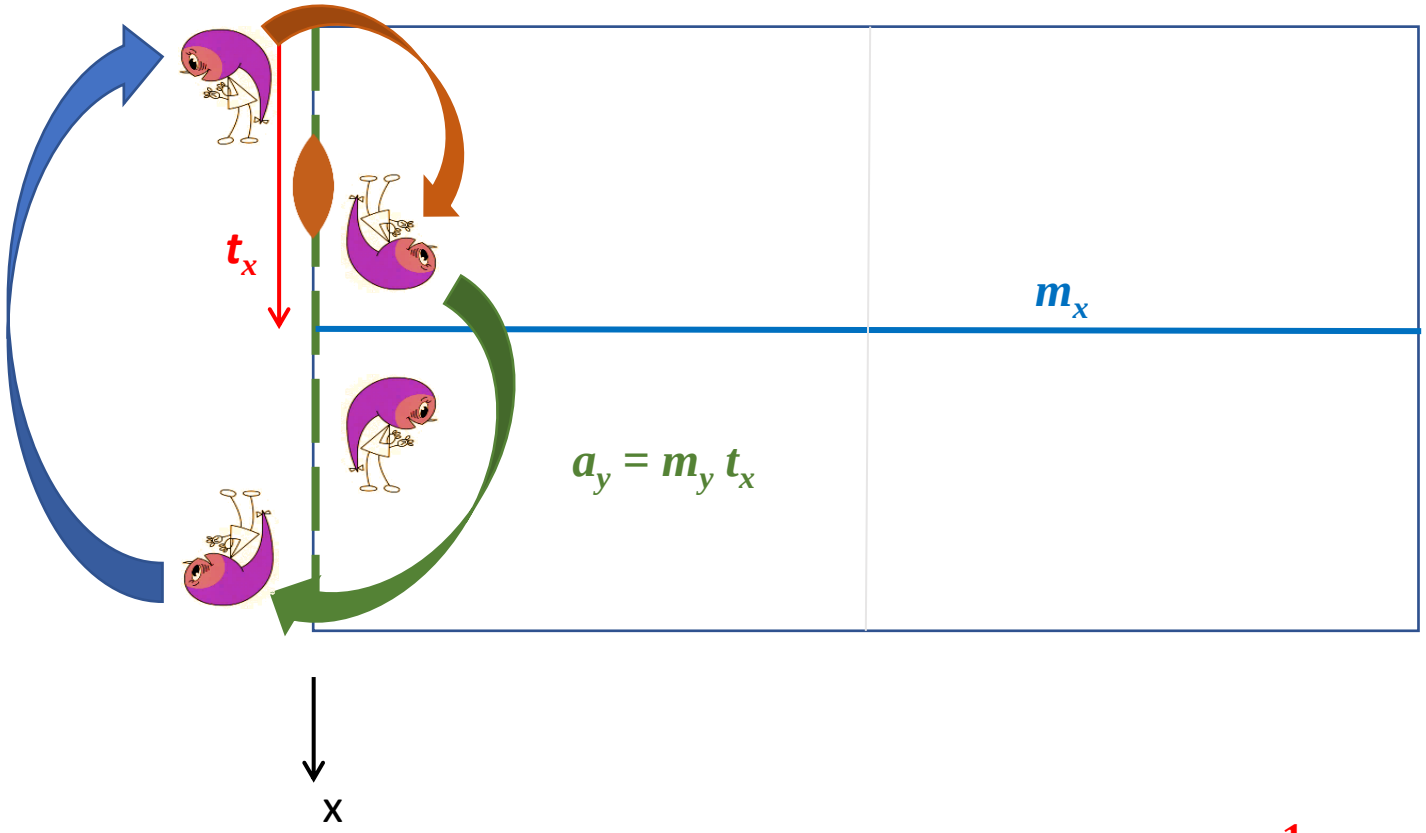
В результате взаимодействия оси 2, содержащейся в оси 6, с трансляциями $\vec{T}_x$, $\vec{T}_y$ и $\vec{T}_u$ получаются дополнительные оси **2`**, **2`**и **2`**, проходящих через центры этих трансляций (центры «двуугольников»).

При взаимодействии плоскостей симметрии, содержащих внутреннюю трансляцию, необходимо учитывать все операции симметрии плоскости скользящего отражения: отражение и скольжение!



$$m_x \times a_y = m_x \times m_y\, t_x = 2_z[\tfrac{3}{4}0z]$$

При взаимодействии плоскостей симметрии, содержащих внутреннюю трансляцию, необходимо учитывать все операции симметрии плоскости скользящего отражения: отражение и скольжение!



Операции a_y **и** m_x ***не коммутируют***

$$a_y \times m_x \neq m_x \times a_y$$

$$a_y \times m_x = m_y \times \vec{t}_x \times m_x = m_y \times m_x \times \vec{t}^{-}_x = 2_z[\tfrac{1}{4}0z]$$