ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

имени М.В. ЛОМОНОСОВА»

ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ 05.03.01 ГЕОЛОГИЯ

КАФЕДРА КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОХИМИИ

КУРСОВАЯ РАБОТА

“Одномерные дисконтинуумы”

Выполнила студентка:

105 группы

Коваленко А.В.

Научный руководитель:

Кандидат химических наук доцент Еремина Т. А.

Москва 2024

Содержание

Введение.. 3

1.1. Определение симметрии.. 4

2.1 Элементы и операции макросимметрии.. 5

2.2. Взаимодействие операций симметрии.. 6

3.1. Фигуры с особенной точкой.. 7

4.1 Элементы симметрии в бесконечных фигурах. Элементы микросиммерии.. .. .. .10

5. Пространства разной мерности.. 12

5.1. Одномерные фигуры.. .. .. .12

5.2. Двухмерные фигуры.. 12

5.3. Трёхмерные фигуры.. .. .. .13

6. Трёхмерные фигуры с бесконечной протяжённостью в одном направлении.. .. .14

6.1. Симметрия бордюров.. 14

6.2. Симметрия лент.. 18

6.3. Симметрия стержней.. 25

7. Практическая часть.. .. .. .27

7.1. Знакомство с программой SHAPE.. 27

7.2. Построение тетраэдра.. 28

Заключение.. 29

Литература.. 30

Приложения.. 31

Введение

Кристаллографию изучают на многих факультетах, рассматривая её с позиции разных наук, и с каждым годом интерес к кристаллографии растёт, ведь эта наука позволяет изучать строение веществ и прогнозировать их свойства на его основе. Эта наука активно развивающаяся, наполненная большим количеством нераскрытых тем, например одномерные пространства, которые важны для изучения более-мерных пространств, а также при производстве техники и материалов.

Цель работы:

Изучение одномерных пространств. Визуализация двусторонних лент, путём их построения в программе “SHAPE” и созданием макета. Популяризация кристаллографии.

Задачи работы:

1) Дать определение симметрии и описать фигуры точечных групп симметрии;
2) Рассказать об элементах макро- и микросимметрии;
3) Описать одно-, двух- и трёхмерные пространства;
4) Дать описание одномерных дисконтинуумов.
5) Ознакомится с программой “SHAPE”.
6) Построить в программе “SHAPE” тетраэдры для иллюстрации одномерных групп.
7) Изготовить модель пространственных групп односторонних и двусторонних лент на основе построенных в программе моделей.

Благодарности:

Хочу выразить благодарность своему научному руководителю кандидату химических наук доценту Ереминой Т. А., а также декану геологического факультета член-корр. РАН Ерёмину Н. Н. Особенную благодарность выражаю кафедре кристаллографии за предоставления технических возможностей кафедры для выполнения практической части.

1.1. Определение симметрии

Красота считается субъективным понятием. Каждый человек может отнести к красоте разные вещи, но для любого человека вне зависимости от происхождения, окружения и насмотренности, красивыми будут казаться симметричные фигуры. Однако не каждый человек понимает значение этого слова в полной мере и придаёт этому значение. Для кристаллографии симметрия является основным инструментом изучения, так как она в полной мере описывает структуры, отражая их свойства. Изучая её, изучается симметрия.

Симметричными объектами считаются такие системы, части которых по какому-либо признаку или набору характеристик равных друг другу (совпадают). Симметрия же инвариантность системы к преобразованиям различного рода. Чаще всего рассматривается геометрическая инвариантность. Кристаллографические пространства всегда инварианты, а соответственно всегда симметричны.

Симметрию разделяют кристаллографическую и некристаллографическую. Кристаллографическая ограничена из-за того, что кристаллах может существовать только симметрия характерная для кристаллических решёток. Некоторые симметричные фигуры (такие как пятиугольник) не могут заполнить пространство максимально плотно, как делают это четырёхугольники или шестиугольники, поэтому не образуются такие кристаллические системы.

2.1 Элементы и операции макросимметрии

Различают общую и классическую симметрию, в которой при преобразованиях не изменяется расстояние между объектами. Геометрические образы, с помощью которых задаются или осуществляются преобразования, называются элементы симметрии (место инвариантных точек). Выделяют четыре вида таких преобразований:

1) Поворот вокруг оси.

Ось, вокруг которой поворачивается фигура и совмещается сама с собой n-раз, называется осью n-ого порядка. В кристаллографической симметрии рассматриваются оси 1, 2, 3, 4 и 6-ого порядка. Минимальный угол, на который нужно повернуть фигуру, для того чтобы она совместилась сама с собой, рассчитывается как:

$$\frac{360°}{n} = m$$

Где m -минимальный, необходимый угол.

Так для треугольника такой угол равен 120° , для квадрата 90° и т.д.

Поворотные оси делят на низшего порядка 1-2 и высшего порядка $n > 2$.

2) Зеркальное отражение в плоскости.

Часто симметричным называют именно фигуры с плоскостью зеркального отражения. Симметричное лицо, симметрично расставленный декор и т.д., так говорят об объектах, которые визуально можно разделить пополам и наложить половинки друг на друга. Чтобы вырезать фигуру с этим элементом симметрии можно сложить пополам лист и вырезав, получится фигура с равными половинками. При накладывании их друг на друга, они кажутся идентичными, но при раскрытии ясно, что они отличаются. Так объекты, между которыми есть плоскость зеркального отражения, можно обозначить как левые и правые.

3) Отражение относительно точки.

Так же, фигура из правой в левую может перейти за счёт центра инверсии, но в то же время фигура переворачивается.

4) Параллельный перенос пространства как целого.

Такое преобразование не изменяет вид симметрии.

2.2. Взаимодействие операций симметрии

У любого элемента симметрии есть размножающая способность, ей называют то количество гомологичных фигур, которые связаны элементом симметрии, т.е. образованны им. Элементы симметрии могут взаимодействовать с друг другом, так как они действуют не только на объекты симметрии, но и размноживают элементы в них.

1) Взаимодействие поворотных осей с друг другом.

Результат взаимодействия осей зависит от их расположения относительно друг друга. Если оси совпадают, как ось четвёртого порядка включает в себя ось второго, они не взаимодействуют.

Группы симметрии можно разделить на кубические и некубические. Для кубических групп характерно иметь несколько осей высшего порядка, в то время как у некубических фигур есть только одна ось выше других. Помимо оси n > 2 в таких фигурах может быть ось второго порядка и плоскость отражения, при том условии, что они либо параллельны главной оси, либо перпендикулярна ей. У кубических групп оси и плоскость могут располагаться под любым угол относительно оси.

Фигуры вокруг поворотной оси размноживаются на её порядок, разворачиваясь на её элементарный угол, так же размножаются и оси. Надо помнить о том, что оси размноживают друг друга в равной степени.

2) Взаимодействие осей с плоскостями симметрии.

Поворотные оси размноживают плоскости, как и другие оси, при этом плоскости также размноживают оси отражая в себе. Оси с перпендикулярными к ним плоскостями отражения выделяют как фигуры со сложным элементом симметрии, называя зеркально-поворотной осью.

3) Взаимодействие осей с центром инверсии.

Поворотные оси, взаимодействуя с центром инверсии образуют сложный элемент симметрии - инверсионная ось.

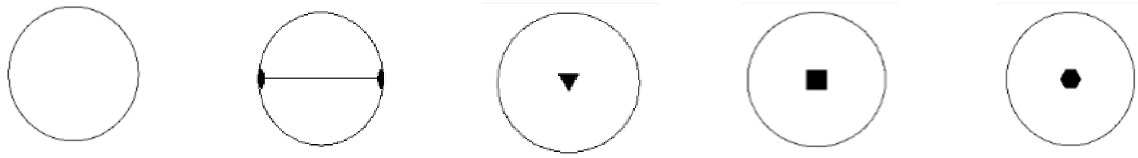
Так как кристаллография изучает только элементы симметрии характерные для кристаллических решёток (кристаллографическая симметрия). Мы имеем конечное количество возможных фигур.

3.1. Фигуры с особенной точкой

Путём взаимодействия элементов симметрии можно получить группы симметрии. Рассмотрим группы симметрии, имеющие особенную точку

1) C_n – одна поворотная ось (n - порядок группы). Фигуры с такой симметрией называются розетками, их отличие от других, наличие хотя бы одной полярной плоскости. Односторонних розеток этой группы выделяют пять типов:

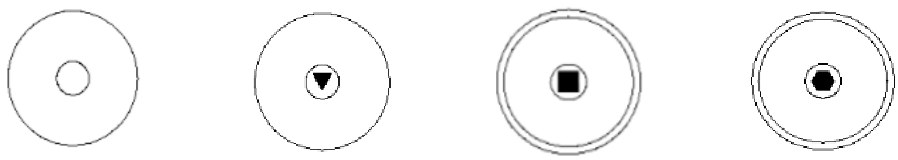
(C_1 / 1 / p1) (C_2 / 2 / p2) (C_3 / 3 / p3) (C_4 / 4 / p4) (C_6 / 6 / p6)



2) S_n (C_s) – зеркально-поворотная ось. Выделяют четыре типа, так как симметрия $\bar{2}$ аналогична 2m, её не выделяют:

(S1/ $\bar{1}$ / p$\bar{1}$); (S3 / $\bar{3}$ / p$\bar{3}$); (S4 / $\bar{4}$ / p$\bar{4}$); (S6 / $\bar{6}$ / p$\bar{6}$)

(S1/ $\bar{1}$/ p$\bar{1}$) (S3 / $\bar{3}$ / p$\bar{3}$) (S4 / $\bar{4}$ / p$\bar{4}$) (S6 / $\bar{6}$ / p$\bar{6}$)

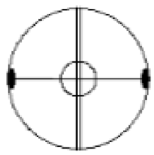


3) C_{nv} – одна поворотная ось и плоскости параллельные ей (n - порядок группы). Их, как и C_n называют розетками, так как в них нет переворачивающих элементов симметрии. Выделяют пять типов:

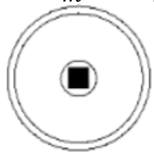
(C_s / m / pm) (C_{2v} / mm2 / pmm2) (C_{3v} / 3m / p3m) (C_{4v} / 4mm / p4mm) (C_{6v} / 6mm/ p6mm)

4) C_{nh} – одна поворотная ось и плоскость перпендикулярная ей (n - порядок группы). Выделяют четыре типа, так как поворотная ось третьего порядка и перпендикулярная ей плоскость образуют тип симметрии идентичный $\bar{6}$:

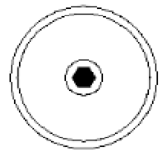
(C_{2h} / $\frac{2}{m}$ / $\not{p}11\frac{2}{m}$)



(C_{4h} / $\frac{4}{m}$ / $\not{p}11\frac{4}{m}$)



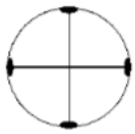
(C_{6h} / $\frac{6}{m}$ / $\not{p}11\frac{6}{m}$)



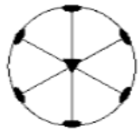
5) D_n – поворотная ось и перпендикулярные ей оси второго порядка. Выделяют четыре типа, так как ось второго порядка, с осью первого, будет главной. Такой тип симметрии идентичен симметрии (222).

; ; ; ;

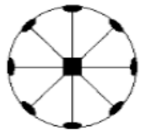
(D_2 / 222 / $\not{p}$222)



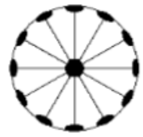
(D_3 / 32 / $\not{p}$32)



(D_4 / 2mm / $\not{p}$2mm)

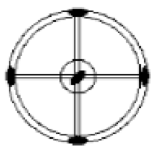


(D_6 / 6mm / $\not{p}$6mm)

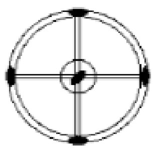


6) D_{nh} – есть главная ось, оси второго порядка, параллельные ей и лежащие в плоскостях симметрии. Выделяют четыре типа, так как так как ось второго порядка, с осью первого, будет главной. Такой вид симметрии будет идентичен симметрии (mmm).

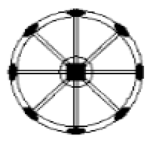
(D_{2h} / mmm / $\not{p}$mmm)



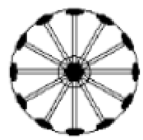
(D_{3h} / $\bar{6}$m2 / $\not{p}\bar{6}$m2)



(D_{4h} /$\frac{4}{m}$mm / $\not{p}\frac{4}{m}$mm)



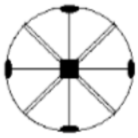
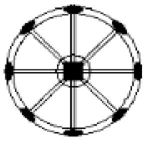
(D_{6h} / $\frac{6}{m}$mm / $\not{p}\frac{6}{m}$mm)



7) D_{nd} – есть главная ось, оси второго порядка, параллельные ей и не лежащие в плоскостях симметрии. Выделяют два типа, так как так как ось второго порядка, с осью первого, будет главной. Такой вид симметрии будет идентичен симметрии ($\bar{4}$m2), как и тот, который создаёт ось четвёртого порядка при взаимодействии с плоскостями и осями второго порядка. Ось шестого порядка с плоскостями и осями второго порядка образует вид симметрии идентичный $\bar{3}$m.

(D_{2d} / $\bar{4}$m2 / $\not{p}\bar{4}$m2)

(D_{3d} / $\bar{3}$m / $\not{p}\bar{3}$m)

В к некубическим (фигурам с особенной точкой) относя 27 видов.

4.1 Элементы симметрии в бесконечных фигурах. Элементы микросиммерии

Бесконечные фигуры отличаются от конечных, простейшим преобразованием параллельным переносом вдоль самой фигуры на конечный отрезок, такая прямая называется осью переноса (особенная прямая).

Для бесконечных фигур, так же характерны элементы симметрии конечных, которые могут присутствовать и в кристаллических решётках. Они представляются как бесконечное множество параллельных элементов симметрии. Но в бесконечных фигурах возможны и такие элементы симметрии, которые в конечных фигурах невозможны. Таковыми являются оси поступания, плоскости скользящего отражения и винтовые оси симметрии.

Нельзя не отметить то, что модель бесконечных фигур прежде всего модель микро-симметричных фигур.

1) Осью поступания (или осью трансляции, переноса) называется такое направление в бесконечной фигуре, при перемещении параллельно которому этой фигуры на некоторое определённое расстояние фигура совмещается сама с собой. Так размноживаются и элементы симметрии, в том числе и характерные для макро-симметрии. Таким способом и образуются бесконечные фигуры.

Наименьшее расстояние, на которое надо переместить бесконечную фигуру в направлении оси трансляции, чтобы фигура совместиться сама с собой, называется шагом поступания (переноса), или периодом трансляции.

Вид фигуры зависит от периода трансляции. В не кристаллографической симметрии существуют виды схожие с кристаллографическими, но с бесконечно малыми трансляциями.

2) Плоскостью скользящего отражения называется такая плоскость в бесконечной фигуре, при отражении в которой и при совместном параллельном этой плоскости перемещении на определённое расстояние фигура совместиться сама с собой. Комбинация переноса фигуры и в её последующем отражении. (такую ось, в зависимости от её расположения относительно осей координат, могут обозначать a, b, c и т. д., но в работе раскрываются одномерные системы, в которых только одно направление, плоскость, преобладающая в таких системах, имеет обозначение a)
3) Винтовой осью симметрии называется такая прямая в бесконечной фигуре, при повороте вокруг которой на некоторый определённый угол и совместном перемещении вдоль которой на некоторое определённое расстояние фигура совмещается сама с собой. Элементарный угол винтовой оси определяет число

совмещений фигуры при обороте 360°, которое называется порядком винтовой оси симметрии. Само совмещение фигуры при помощи винтовой оси симметрии связано с перемещением этой фигуры вдоль оси. Величина этого перемещения Т, отвечающая элементарному углу поворота оси, называется ходом винтовой оси симметрии (или её элементарной трансляцией).

Если смотреть в направлении переноса и если это вращение вокруг оси происходит по часовой стрелке, то такая винтовая ось симметрии называется правой, против часовой стрелки - левой.

5. Пространства разной мерности

При описании мира можно использовать n-мерные пространства. Для нас более привычно трёхмерное (геометрически) пространство, но также можно говорить о менее- и более-мерных пространствах. В кристаллографии раскрывается тема одномерных, двумерных и трёхмерных пространств. При описании симметрии в трёхмерном пространстве речь идёт не о просто объёмных фигурах, а о фигурах имеющие элементы симметрии в этом пространстве.

5.1. Одномерные фигуры

Когда говорится об одномерных фигурах, имеется в виду фигуры с элементами симметрии, расположенными в одномерном пространстве, связанные одной координатной прямой (базис содержит один вектор).

Разделяют одномерные фигуры на две группы, не имеющую трансляционный элемент (G_0^1) и имеющую его (G_1^1). Первая группа представляет собой конечные фигуры, а во второй фигуры имеют ось трансляции. К конечным одномерным фигурам относят C_1 и C_s. В это время фигуры с бесконечными переносами разделяют на:

- Бордюры – фигуры без переворачивающих элементов (полярной плоскость) и с бесконечным переносом в одном направлении;
- Ленты – фигуры с переворачивающими элементами (кроме поворотных и винтовых осей, в которых $n > 2$) и бесконечным переносом в одном направлении;
- Стержни – фигура с бесконечным переносом в одном направлении.

5.2. Двухмерные фигуры

В двумерном пространстве любой элемент описывается набором именно двух линейно независимых векторов. Другая размерность базиса будет описывать другую размерность пространства. Одномерные являются подмножеством двумерных фигур, поэтому могут описываться в этом пространстве двумя координатами, но между ними будет взаимно однозначное соответствие. Аналогично для n-мерных и (n-1)-мерных пространств.

Двумерные фигуры так же, как одномерные можно разделить на конечные (G_0^2) и бесконечные в одном направлении (G_1^2) и в двух (G_2^2). Среди фигур с особенной точкой к двумерным относятся C_n и C_{nv}. Среди фигур с бесконечными переносам:

- Бордюры (те же, что ив одномерных фигурах);
- Сетки орнаментов – фигуры, образованные переносами по координатным прямым;
- Параллелогоны – заполнение плоскости фигурами расположенными (могут быть только параллелограммы всех видов или шестиугольники);
- Планигоны – частный случай параллелогонов, при котором фигуры разделяются на равные части, для обретения нужной симметрии;
- Изогоны и изоэдры – фигуры которые повышают симметричность сетчатых орнаментов. В вершинах изогон сходится одинаковое количество рёбер.
- Слои – фигуры включающие себя ленты и подобные им, но распространяющиеся по двум осям координат, фигуры;

5.3. Трёхмерные фигуры

Трёхмерные фигуры – это группы фигур, в которых любой элемент симметрии описывается именно тремя линейно независимыми векторами. Как было сказано выше, трёхмерные фигуры подобно двумерным, могут описывать пространства меньшей мерности. Среди трёхмерных фигур так же есть конечные (G_0^3), с бесконечными переносами вдоль одной оси (G_1^3), с переносами вдоль двух осей (G_2^3) и, отличающиеся от одномерных и двумерных фигур, системы с переносами вдоль трёх осей (G_3^3). Все эти системы можно обозначить как пространственные решётки. В трёхмерных фигурах большой интерес вызывают плотнейшие упаковки.

6. Трёхмерные фигуры с бесконечной протяжённостью в одном направлении

Трёхмерные фигуры с бесконечной протяжённостью в одном направлении – это трёхмерные фигуры, имеющие бесконечный перенос вдоль одного направления.

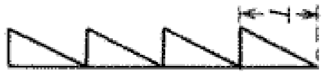
6.1. Симметрия бордюров

Если при параллельном переносе, вдоль особенной прямой переноситься и односторонняя плоскость (полярная), то такая бесконечная фигура называется бордюром. Так в бордюрах отсутствуют особые точки, но имеются особенная ось и плоскость (серия параллельных плоскостей, повернутая одной стороной к зрителю, “вверх” и “низ” отличаются друг от друга). Бордюры ошибочно относят к плоским фигурам, но многие, например лепные бордюры, имеют объём.

Выделяют семь видов бордюров:

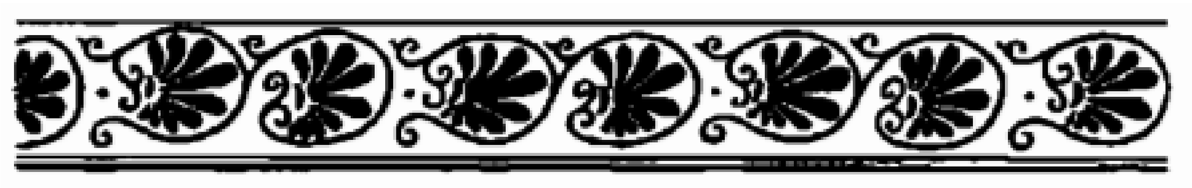
1) Бордюры с одной осью переносов.

а) Симметрия ($\not{p}1$).



б)

в)



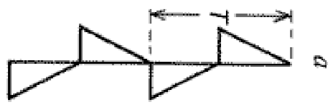
а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии; в) Пример вида ленты из “Теории групп симметрии”

Ось переносов - основной элемент симметрии в бордюрах. Бордюры с этим элементом симметрии пригодны для изображения поступательного движения. Перемещение фигур может осуществляться в одном и в обратном направлении, при этом с тем же результатом, поэтому важно не количество переносов, а их направление.

2) Бордюры с плоскостью скользящего отражения.

б)

а) Симметрия ($\mathscr{p}$11а).



в)

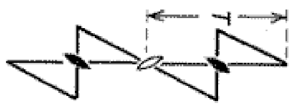
а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии; в) Пример вида ленты из “Теории групп симметрии”

Бордюры изображают волнообразное движение, схожее движению змеи. Комбинированные симметрические преобразования фигур состоит в их переносе на отрезок t/2 и последующем отражении в плоскости. Двукратное повторение операции скользящего отражения эквивалентен переносу вдоль оси.

3) Комбинация осей переноса и поперечных осей второго порядка.

б)

а) Симметрия ($\mathscr{p}$211).



в)

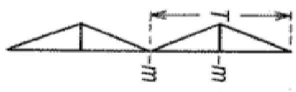
а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии; в) Пример вида ленты из “Теории групп симметрии”

Это действие можно представить как параллельный перенос фигуры, состоящей из двух частей, переходящих одна в другую поворотом вокруг оси на 180°. Всякий бордюр с такой симметрией может разделён на два первичных с симметрией а или на два конгруэнтных ряда фигур. Особенная ось бордюра этого типа неполярная, за счёт антипараллельно наложенных осей первичных бордюров. Данный вид симметрии может встречаться и в конечных фигурах, при бесконечно малой трансляции.

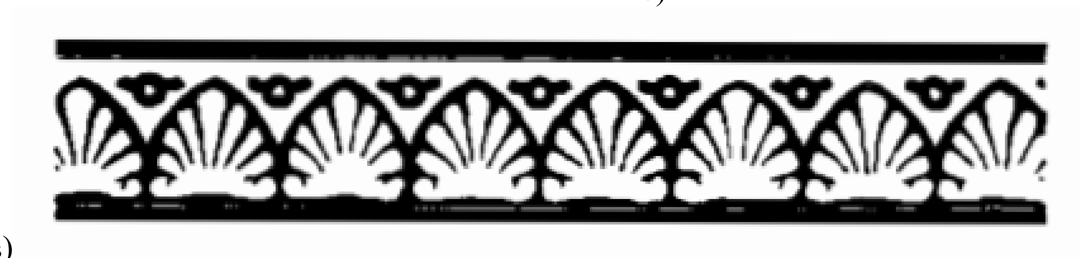
Кроме трёх предыдущих вида бордюра, можно вывести ещё четыре при помощи комбинирования оси переноса и поперечной плоскости симметрии.

4) Бордюры с поперечными плоскостями симметрии.

а) Симметрия (p̸1m1)



б)



в)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии; в) Пример вида ленты из “Теории групп симметрии”

Ось переноса параллельная плоскости m.

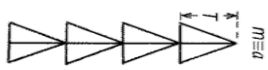
Такой вид бордюров используется в декоративных элементах, например в горизонтальных карнизах, для него характерно, что оба направления оси зеркальны-равны друг другу.

Предельный вид симметрии.

Ось непрерывных переносов перпендикулярна плоскости симметрии m.

5) Бордюры с симметрией (p̸11m).

а) (p̸11m)



б)

в)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии; в) Пример вида ленты из “Теории групп симметрии”

В отличии от симметрии (p̸1m1) такой вид бордюров используется в декоративных элементах направленных вертикально, а не горизонтально, например пилястры и колоны.

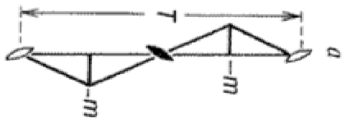
Предельный вид симметрии.

Предельный случай этого вида симметрии можно представить как ленточный конвейер или из не движущихся предметов имеет лента сукна с ворсом, направленным в одну сторону.

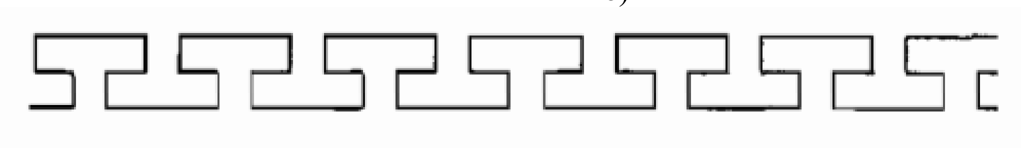
Ось симметрии параллельна оси переноса.

6) Бордюры с симметрией (ꝑ2mn).

а) (ꝑ2mn)



б)



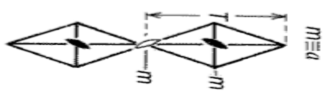
в)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии; в) Пример вида ленты из “Теории групп симметрии”

Получается в результате комбинировании плоскости скольжения отражения с осью второго порядка, которые располагаются перпендикулярно оси переноса. Предельный случай этого вида симметрии не отличается от предельного вида симметрии (ꝑ11m).

7) Бордюры с симметрией (ꝑ2mm).

а) (ꝑ2mm)



б)

в)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии; в) Пример вида ленты из “Теории групп симметрии”

Возникает при комбинировании оси трансляции с поперечной и продольной плоскости симметрии. Это самый распространённый и одновременно самый скудный вид симметрии бордюров.

Предельный случай этого вида симметрии осуществляется как сплошная полоса обе стороны которые выкрашены в разные цвета.

Виды симметрии (℘1m1) и (℘211) можно получить калейдоскопически с помощью зеркал. Для получения бордюра вида (℘1m1) можно получить с помощью двух зеркал, между которыми расположена фигура. Способ получения (℘211) похож на предыдущий, но к двум зеркалам добавляется третье, перпендикулярное предыдущим.

6.2. Симметрия лент

Лента - бесконечно периодичная фигура с особенными осью переноса и плоскостью симметрии, которая может быть полярной и неполярной, то есть “вверх” и “низ” могут отличаться друг от друга или нет, таким образом бордюр частный вид лент. К известным 7 видам бордюрам добавляется 24 с неполярными плоскостями, так их будет 31 вид.

Для лент большое значение имеет винтовая ось второго порядка (двойная винтовая ось обозначается 2_1), на рисунке не отражается то, какая ось левая или правая. При действии оси на фигуру образуется рисунок, схожий с рисунком образующийся при действии оси скольжения отражения на фигуру, но при действии оси образуется не правые или левые фигуры, а фигуры, расположенные “лицевой” стороной или “изнаночной”. Оси большего порядка размножат ось трансляции, из-за чего пропадёт одномерность.

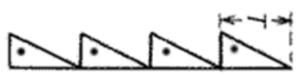
Виды симметрии лент:

1)-7) - выводятся так же, как и семь видов бордюров.

8)-14) - образуются при взаимодействии первых семи видов симметрии с плоскостью симметрии, расположенной вдоль оси трансляции. Такая плоскость будет неполярной, так как “лицевая сторона” и “изнаночная” не отличаются друг от друга.

8)

а) (℘11m)

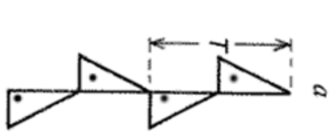


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

9)

а) (℘
21am)



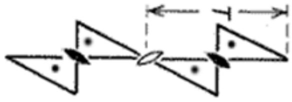
б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

10)

а) ✍

11$\frac{2}{m}$)



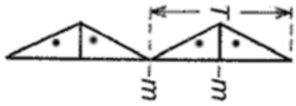
б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

11)

а) (✍

m2m)



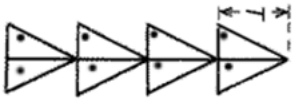
б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

12)

а)

(✍ 2mm)



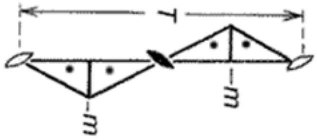
б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

13)

а) ✍

mam)

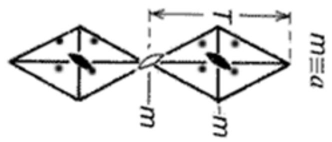


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

14)

а) (p mmm)



б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

15) Вид ленты с симметрией p11a, образуется при взаимодействии трансляции с плоскостью скольжения отражения, того же направление;

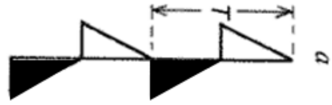
а) p11a

б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

16) Вид ленты с симметрией $p\,2_1 11$, образуется при взаимодействии трансляции с винтовой осью второго порядка, того же направления;

а) $p\,2_1 11$

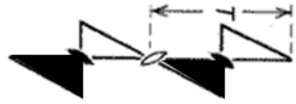


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

17) Вид ленты симметрией $p\bar{1}$, образуется при взаимодействии трансляции с инверсионной осью.

а) $p\bar{1}$

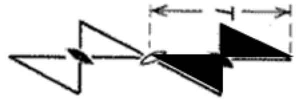


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

18) Вид ленты с симметрией *p*211, образуется при взаимодействии трансляции с осью второго порядка, того же направления;

а) *p*211

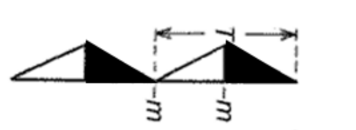


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

19) Вид ленты с симметрией *p*121, образуется при взаимодействии трансляции и поворотной оси второго порядка, того же направления.

а) *p*121

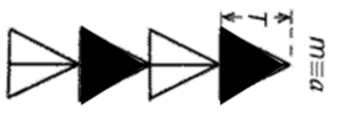


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

20) Вид ленты с симметрией *p*$2_1$22, образуется при взаимодействии трансляции с винтовой осью второго порядка параллельной ей и поворотной осью второго порядка перпендикулярной ей;

а) *p*$2_1$22

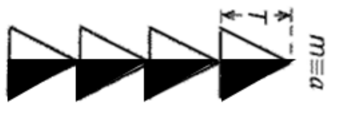


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

21) Вид ленты с симметрией *p*2aa, образуется при взаимодействии второго вида лент (*p*11n) с поворотной осью второго порядка с таким же направлением, что и у трансляции;

а) *p*2aa

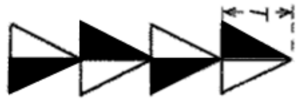


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

22) Вид ленты с симметрией $p1\frac{2}{a}1$, образуется при взаимодействии второго вида лент ($p11n$) с поворотной осью второго порядка;

а) $p1\frac{2}{a}1$

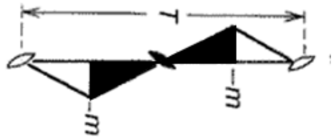


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

23) Вид ленты с симметрией $p11\frac{2}{a}$, образуется при взаимодействии третьего вида лент ($p211$) с плоскостью скольжения отражения, того же направления;

а) $p11\frac{2}{a}$

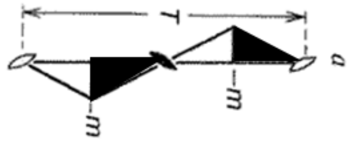


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

24) Вид ленты с симметрией $p222$, образуется при взаимодействии третьего вида лент ($p211$) с поворотной осью второго порядка, того же направления, что и трансляция;

а) $p222$

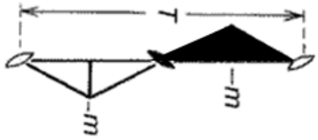


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

25) Вид ленты с симметрией $p\frac{2_1}{m}11$, образуется при взаимодействии четвёртого вида лент (1m1) с винтовой осью второго порядка, того же направления, что и трансляция;

а) $p\frac{2_1}{m}11$

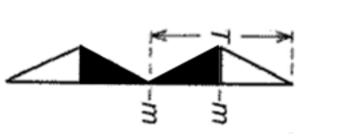


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

26) Вид ленты с симметрией $p\frac{2}{m}11$, образуется при взаимодействии четвёртого вида лент (p1m1) с поворотной осью второго порядка, того же направления, что и у трансляции;

а) $p\frac{2}{m}11$



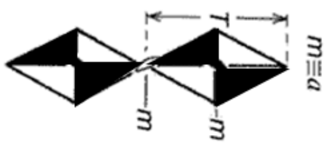
б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

27) Вид ленты с симметрией p2ma, образуется при взаимодействии четвёртого вида лент (pm11) с осью второго порядка;

а)

p2ma

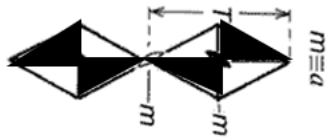


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

28) Вид ленты с симметрией $p2_1ma$, образуется при взаимодействии пятого вида лент (p11m) с винтовой осью второго порядка, перпендикулярно оси трансляции;

а) $p2_1ma$

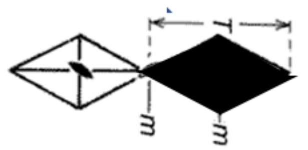


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

29) Вид ленты с симметрией $p1\frac{2}{m}1$, образуется при взаимодействии пятого вида лент (11m) с поворотной осью второго порядка, перпендикулярной трансляции;

а) $p1\frac{2}{m}1$

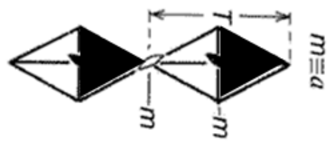


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

30) Вид ленты с симметрией $pmaa$, образуется при взаимодействии шестого вида лент с поворотной осью второго порядка ($p2mn$) с плоскостью симметрии, перпендикулярной трансляции;

а) $pmaa$

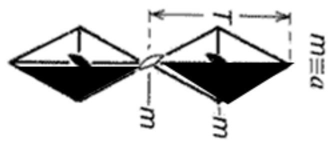


б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

31) Вид ленты с симметрией $pmma$, образуется при взаимодействии седьмого вида симметрии ($p2mm$) с винтовой осью второго порядка, перпендикулярной трансляции.

а) $pmma$



б)

а) Обозначение симметрии; б) Схема симметрии;

6.3. Симметрия стержней

Стержень — это фигура без особых точек и плоскостей, с единственным особенным направлением.

Примеры:

Трубы, нитки бус, стебли растений, полимеры, световые и звуковые лучи, силовые линии, тензоры, векторы и т. д.

Рациональные и иррациональные винтовые оси. Винт.

Если бесконечная фигура переходит сама в себя после двух последовательных или одновременных операций: поворота на угол α и смещения на расстояние t вдоль оси поворота α. Угол поворота не всегда равен 360°, если α = 360°/n, то винтовую ось называют n- порядка. Всякий винт представляет собой фигуру, обладающую винтовой осью симметрии наряду с другими элементами симметрии.

Винтовая ось характеризуется не только поворотом, но и переносом t (Равные отрезки, измеренные по оси α). Перенос t (трансляция) надо отличать от простого переноса a по оси α. Под каждым элементом симметрии, образованным углом, являющимся рациональной частью полного оборота, параллельно располагается, такой же элемент, на расстоянии a=(n/j)t. Следственно, поворотная ось содержит в себе ось переноса a. Если элементарный угол является иррациональной частью поворота, то винтовая ось не содержит в себе оси переносов, а имеет ось трансляции с бесконечным переносом.

Ход винтовой оси (h) — это расстояние между двумя ближайшими точками винтовой линии, располагающиеся одна под другой. Для однозначных осей a=h.

Винтовые оси бесконечного порядка (либо с бесконечно малым элементарным углом (α → 0), при конечном t, либо бесконечно малым переносом (t → 0)).

Обозначения:

∞^{+}_{t} – правый угол, конечный перенос;

∞^{-}_{t} – левый угол, конечный перенос;

∞_{t} – безразличный угол, конечный перенос;

∞^{+}_{0} – правый угол, бесконечный перенос;

∞^{-}_{0} – левый угол, бесконечный перенос;

∞_{0} – безразличный угол, бесконечный перенос.

Общая идея вывода всех видов стержней.

Симметричный стержень представляет собой фигуры, разным образом нанизанные на ось симметрии и не имеющие таких элементов симметрии, которые бы вызвали появления других осей симметрии (наклонные оси, плоскости), т. к. стержень имеет, только одну особенную ось. Поэтому при выводе видов стержней используют только семь типов симметрии с особенной точкой, исключая восьмой (правильные многогранники имеющие косые линии).

Размещение фигур производиться при использовании осей симметрии бесконечных фигур:

Оси переноса, винтовая ось, скользящее отражение.

При использовании этих элементов возникают дополнительные:

Центры симметрии. Плоскости и двойные оси, проходящие через серединную точку симметрии между фигурами перпендикулярно к оси стержня. Продольные плоскости и зеркально-поворотные оси, совпадающие с осью стержня.

Виды стержней.

Выделяют 75 видов стержней, 31 из которых были рассмотрены ранее, в качестве бордюров и лент. Отличные от них 44 вида, образованны за счёт симметрий с поворотными, инверсионными, винтовыми осями большего порядка.

Предельные виды стержней.

Стержни, называемые предельными, отличаются от рассмотренных ранее наличием либо бесконечно малого переноса, либо ось бесконечного порядка. Такие фигуры могут быть получены за счёт точечных групп и бесконечно малых переносов.

7. Практическая часть

Для визуализации структур можно использовать множество способов. С давних пор используются такие примитивные способы визуализации как изображение на листе или построение объёмных фигур (макет). С развитием технологий можно применить те же способы, но с более точными параметрами и менее затратно по времени.

Очевидно, что полное представление о структурах даёт объёмная фигура, но перед построением необходимо продумать параметры используемых частей общей формы. Для этого используются множество программ. Для представления кристаллических структур существуют отдельные программы, для построения макета в ходе исследовательской работы была использована программа “SHAPE”.

7.1. Знакомство с программой SHAPE

“SHAPE” разработана не только для визуализации на компьютере, но и для осуществления 3D-печати. Это программа для рисования внешней морфологии (граней) кристаллов и квазикристаллов, а также для рисования сечений кристаллов. Чтобы нарисовать отдельный кристалл, необходимо ввести только класс кристалла, элементарную ячейку, параметры, а также индексы и центральное расстояние для одной грани каждой формы. Рисунок кристалла можно поворачивать, перемещать и изменять масштаб, а также добавлять оси кристалла по желанию. Центральные расстояния, которые определяют площадь каждой формы, могут быть получены из элементарной ячейки и пространственной группы, используя морфологический закон Доннея-Харкера "law"(Способ прогнозирования роста граней в кристаллах без учёта внешнего влияния на них).

Для обозначения видов симметрии необходимы фигуры, не имеющие в себе дополнительной симметрии, такие как кубы и правильные тетраэдры. Для этой цели удобно использовать тетраэдры, в которых рёбра имеют разную длину, а грани разную площадь, соответственно углы между ними, так же не будут равными.

Нетрудно заметить, что фигуры имеют элементы как идентичные друг другу, так и отзеркаленные. Для построения “левой” фигуры используются те же длины, что и в “правой”, но взятые с обратным знаком.

Для получения фигур в виде макета можно так же использовать примитивные методы, которые хоть и рабочие, но на их изготовление уходит много времени и высока вероятность погрешностей, которые могут несильно отразиться на результат в этой работе, но имеют большое влияние для построения определённых кристаллов, фигур и сложных групп симметрии. Так же имеет значение материал, бумага, картон и даже дерево не могут обеспечить необходимую долговечность. Поэтому для получения макетов структур было выбрана 3D-печать. Как было сказано выше программа “SHAPE” приспособлена для этого.

7.2. Построение тетраэдра

Как было сказано ранее нужно построить такой тетраэдр, в котором не было бы симметрии, размножающей исходную для этого, были выбраны ось первого порядка и P-ячейка.

Не определённых индексов граней и параметров граней необходимых для построения нужного тетраэдра, главное, чтобы фигура была похожа на тетраэдр и имела разные грани, для того чтобы разница между левой и правой фигурой была принципиальна.

Для того чтобы распечатать тетраэдры на 3D - принтере, нужно создать файл с необходимым или максимально возможным количеством фигур, как левых, так и правых. Так же в файле должны быть необходимая температура для работы с принтером.

Сам макет помимо тетраэдров (выкрашенных, с одной стороны белым, с другой чёрным цветами) состоит из прозрачной подложки.

Заключение

В ходе исследования был изучен теоретический материал и на основе его дано определение симметрии, описаны элементы макро- и микросимметрии. Изучены их операции и взаимодействия. Дана характеристика пространств разной мерности, описание дисконтинуумов с протяженностью в одном направлении. Выполнен макет 31-формы симметрии лент.

Можно с уверенностью сказать, что кристаллография — это одна из самых красивых наук, но в то же время очень важная для познания мира. Изучая кристаллографию, понимаются те вещи, которые были загадкой до этого. Как говорилось ранее кристаллография - развивающаяся, подвижная наука, и она нуждается в активных людях. Эта работа направлена на популяризацию этой науки, и судить о том удалось это входе работы или нет, только вам.

Литература

Аншелес О.М., Начала кристаллографии - Ленинград, “Издательство Ленинградского государственного ордена Ленина университета имени А.А. Жданова”, 1952, 276с.

Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П. Редактор Урусов В.С., Теория симметрии кристаллов - Москва, “ГЕОС”, 2000 г., 410 стр.

Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия - Москва, “Книжный дом Университет” - 2005, 588с.

2017 Кристаллография - адаптированный курс для филиала МГУ Еремин Н.Н., Еремина Т.А., Салихов Ф.С., Никишаева Н.Д. место издания издательство филиала МГУ им.М.В.Ломоносова в г.Душанбе Душанбе, 221 с.

Серба П. В., Луговой Е.В., Редактор Проценко И.А., Теория симметрии кристаллов. Учебное пособие по курсу «Кристаллография» - Таганрог, “Издательство Технологического института Южного федерального университета”, 2009, 68с.

Чупрунов Е.В. Симметрия и псевдосимметрия кристаллов - Нижний Новгород, “Издательство Нижегородского госуниверситета”, 2015, 658с.

Шубников А.В., Копцик В.А. Симметрия в науке и искусстве. - Москва, Ижевск, “Институт компьютерных исследований”, 2004, 560с.

International Tables for Crystallography Volume A: Space-group symmetry First online edition A reviewed by P. Paufler, (2006), 562c

https://shapesoftware.com/00_Website_Homepage/