МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ

РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ТАГАНРОГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра «Технологии микро- и наноэлектронной аппаратуры»

ПОСОБИЕ ПО ПРАКТИЧЕСКИМ ЗАНЯТИЯМ ПО КУРСУ "КРИСТАЛЛОГРАФИЯ"

Блинов Ю.Ф., Серба П.В., Московченко Н.Н.

Таганрог – 2005

СОДЕРЖАНИЕ

1. Геометрия кристаллической решетки. 3
2. Кристаллографические индексы. 4
3. Кристаллографические проекции. 7
4. Преобразования симметрии....10
5. Матричное описание операций симметрии. 13
6. Предельные группы....16
7. Пространственные группы симметрии....17
8. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. 20
Ответы, указания, решения. 21
Приложения 39
Приложение 1 Точечные группы и их подгруппы 39
Приложение 2 Обозначения точечных групп симметрии 40
Приложение 3 Точечные группы симметрии. 42
Приложение 4 Предельные группы. 44
Приложение 5 Пространственные группы симметрии. 47
Литература 51

1. Геометрия кристаллической решетки.

Идеальный кристалл есть однородная симметричная конденсированная среда, обладающая трансляционно-упорядоченным атомным строением.

Элементарная ячейка – это параллелепипед, ребра которого образованы векторами $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$.

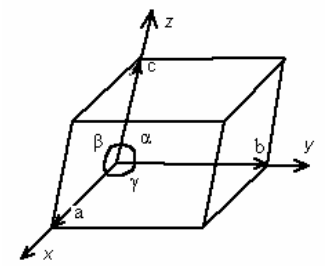


Рисунок 1 Элементарная ячейка $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ - элементарные трансляции соответственно по осям x, y, z; α – угол лежащий против оси x, β - против оси y; γ -против оси z.

Существует 14 элементарных ячеек Браве. Эти решетки подразделяются на 7 сингоний

Таблица 1 Решетки Браве

Сингония	Число ячеек	Символ ячейки	Характеристика ячейки
Триклинная	1	P	$\lvert\bar{a}\rvert \neq \lvert\bar{b}\rvert \neq \lvert\bar{c}\rvert,\ \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Моноклинная	2	P, C	$\lvert\bar{a}\rvert \neq \lvert\bar{b}\rvert \neq \lvert\bar{c}\rvert,\ \alpha = \gamma = 90^o \neq \beta$
Ромбическая	4	P, C, I, F	$\lvert\bar{a}\rvert \neq \lvert\bar{b}\rvert \neq \lvert\bar{c}\rvert,\ \alpha = \beta = \gamma = 90^0$
Тетрагональная	2	P, I	$\lvert\bar{a}\rvert = \lvert\bar{b}\rvert \neq \lvert\bar{c}\rvert,\ \alpha = \beta = \gamma = 90^0$
Кубическая	3	P, I, F	$\lvert\bar{a}\rvert = \lvert\bar{b}\rvert = \lvert\bar{c}\rvert,\ \alpha = \beta = \gamma = 90^0$
Тригональная	1	P	$\lvert\bar{a}\rvert = \lvert\bar{b}\rvert = \lvert\bar{c}\rvert,\ \alpha = \beta = \gamma < 120^0 \neq 90^o$
Гексагональная	1	P	$\lvert\bar{a}\rvert = \lvert\bar{b}\rvert \neq \lvert\bar{c}\rvert,\ \alpha = \beta = 90^0,\ \gamma = 120^0$
P – примитивная, C – базоцентрированная, I – объемноцентрированная, F – гранецентрированная			

Вектор трансляции $\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$, где u, v, w – любые целые числа, определяет положение узлов кристаллической решетки.

Базис кристаллической структуры – есть группа атомов, которые идентичны по составу расположению и ориентации.

Кристаллическая структура = кристаллическая решетка + базис.

Примитивная ячейка – есть ячейка с минимальным объемом. На примитивную ячейку приходится только один узел кристаллической решетки. Частным случаем примитивной ячейки является примитивная ячейка Вигнера-Зейтца. Порядок построения ячейки Вигнера-Зейтца:

1. Выбирается узел решетки
2. Проводятся линии, соединяющие этот узел с соседними узлами
3. Через середины построенных линий проводятся плоскости, перпендикулярные к ним.

Фигура, ограниченная этими плоскостями и есть ячейка Вигнера-Зейтца.

Базисные векторы обратной решетки вводят соотношениями

$$\vec{a}^* = \frac{\left[\vec{b}\vec{c}\right]}{\left(\vec{c}\left[\vec{a}\times\vec{b}\right]\right)}, \qquad \vec{b}^* = \frac{\left[\vec{c}\vec{a}\right]}{\left(\vec{a}\left[\vec{b}\times\vec{c}\right]\right)}, \qquad \vec{c}^* = \frac{\left[\vec{a}\vec{c}\right]}{\left(\vec{b}\left[\vec{c}\times\vec{a}\right]\right)} \qquad (1.1)$$

Решетка, построенная на этом базисе, - есть обратная решетка.
Угловые параметры ячеек прямой и обратной решеток связаны уравнениями

$$\cos\alpha^* = \frac{\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha}{\sin\beta\sin\gamma} \quad \cos\beta^* = \frac{\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta}{\sin\gamma\sin\alpha} \quad \cos\gamma^* = \frac{\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha\sin\beta}. \qquad (1.2)$$

Скалярное произведение векторов прямой и обратной решетки

$$\begin{array}{lll} \left(\vec{a}\cdot\vec{a}^*\right)=1 & \left(\vec{a}\cdot\vec{b}^*\right)=0 & \left(\vec{a}\cdot\vec{c}^*\right)=0 \\ \left(\vec{b}\cdot\vec{a}^*\right)=0 & \left(\vec{b}\cdot\vec{b}^*\right)=1 & \left(\vec{b}\cdot\vec{c}^*\right)=0 \\ \left(\vec{c}\cdot\vec{a}^*\right)=0 & \left(\vec{c}\cdot\vec{b}^*\right)=0 & \left(\vec{c}\cdot\vec{c}^*\right)=1 \end{array} \qquad (1.3)$$

Вектор трансляции обратной решетки
$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$, где h, k, l - целые числа.
Произведение вектора трансляции обратной решетки на вектор трансляции прямой решетки
$\vec{T}\vec{G} = 2\pi \times целое \quad число$
Первая зона Бриллюэна есть ячейка Вигнера-Зейтца в обратном пространстве.

Задача 1.1. Определить базис ячеек следующих кристаллов: Ge, $PbTe$, V, W, Mg, $GaAs$. Указать тип ячеек Браве для решеток этих веществ, их базис и координаты нулевых узлов.
Задача 1.2. Построить примитивную ячейку для объемноцентрированной кубической решетки.
Задача 1.3. Построить примитивную ячейку для гранецентрированной кубической решетки.
Задача 1.4. Доказать, что обратная решетка обратной решетки есть прямая решетка.
Задача 1.5 Дана двумерная решетка элементарной ячейкой которой является ромб, острый угол которого 60°. Построить обратную решетку и первую зону Бриллюэна.
Задача 1.6. $a = 10$ Å , $b = 17$ Å, $c = 20$ Å,, $\alpha = \beta = 90°$, . $\gamma = 110°$. Найти параметры и объём ячейки обратной решётки, и объём ячейки кристалла.
Задача 1.7. $a = 5$ Å, $b = 7$ Å, $c = 10$ Å , $\alpha = 100°$, $\beta = 90°$, . $\gamma = 104°$. Найти объём ячейки кристалла и объём ячейки обратной решётки.
Задача 1.8. Определить элементарную ячейку обратной решётки для ромбоэдрического кристалла (параметры прямой решётки: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$) и для ромбического кристалла (параметры прямой решётки: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$).
Задача 1.9. Элементарная ячейка триклинного кристалла имеет параметры: $a = 6{,}64$ Å, $b = 8{,}31$ Å, $c = 11{,}18$ Å, $\alpha = 64.0°$, $\beta = 46.3°$, . $\gamma = 77.4°$. Вычислить параметры обратной решётки.
Задача 1.10. Параметры ячейки равны $a = 5{,}2$Å, $b = 8{,}3$ Å, $c = 12{,}1$ Å, $\alpha = 76°50'$., $\beta = 88°14'$, $\gamma = 117°26'$. Определить параметры ячейки обратной решетки.

2. Кристаллографические индексы.

Символы узлов. Если один из узлов решетки выбрать на начало координат, то любой другой узел решетка определяется радиусом вектора $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, где m, n, p -

три числа, которые называются индексом данного узла, Совокупности чисел m, n, p, записанная в двойных квадратных скобках $[\![m,n,p]\!]$ называется символом узла.
Индексы Миллера – три целых числа, определяющие расположение в пространстве граней и атомных плоскостей кристалла, а также направлений в кристалле относительно кристаллографических осей. Пусть кристаллографическая плоскость отсекает на осях координат, построенных на векторах $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, отрезки $p'_1\vec{a}$, $p'_2\vec{b}$, $p'_3\vec{c}$ (p'_1, p'_2, p'_3 - целые числа); целочисленные обратные отношения

$$1/p'_1 : 1/p'_2 : 1/p'_3 = h:k:l \qquad (2.1)$$

определяют индексы Миллера (hkl) данной плоскости. Если грань пересекает оси в отрицательном направлении, то над индексами ставятся черточки $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$. Совокупность симметричных граней одной простой формы кристалла обозначается $\{hkl\}$. Прямая и параллельное ей ребро, проходящие из начала координат O в точку A (определяемую вектором $p_1\vec{a}+p_2\vec{b}+p_3\vec{c}$) определяются индексами Вейса $[p_1p_2p_3]$. Совокупность параллельных направлений обозначается $< p_1, p_2, p_3 >$.
В кристаллах гексагональной сингонии используют четырехосную систему координат: в базисной плоскости , в дополнении к осям X и Y, направленным по $\vec{a}$ и $\vec{b}$ соответственно, вводится еще ось U, направленная по вектору $-\vec{a}-\vec{b}$. По главной оси симметрии по прежнему направлен вектор $\vec{c}$ и соответственно ось Z. Кристаллографические плоскости и направления характеризуются ориентировкой относительно всех четырех осей и соответственно четырьмя индексами (индексы Браве). Сумма первых трех индексов Браве всегда равна нулю.
Произвольная точка кристаллического пространства с координатами x, y, z принадлежащая этой плоскости удовлетворяет уравнению:

$$hx+ky+lz=0. \qquad (2.2)$$

Уравнения других плоскостей, параллельных данной, и не проходящих через начало координат, будут иметь вид

$$hx+ky+lz=p, \qquad (2.3)$$

где константа p определяет расстояние плоскости от начала координат.
Межплоскостное расстояние для решетки с произвольной сингонией

$$\frac{1}{d^2}=\frac{1}{\xi^2}\left\{\frac{h^2}{\left(a/\sin\alpha\right)^2}+\frac{k^2}{\left(b/\sin\beta\right)^2}+\frac{l^2}{\left(c/\sin\gamma\right)^2}\right\}+ \qquad (2.4)$$
$$+2\frac{hk}{ab}(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)+2\frac{kl}{ca}(\cos\gamma\cos\alpha-\cos\beta)+2\frac{kl}{bc}(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)$$

где параметр ξ определяется формулой

$$\xi^2=1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos^2\alpha\cos^2\beta\cos^2\gamma. \qquad (2.5)$$

В частном случае для кристаллов кубической сингонии

$$\frac{1}{d^2}=\frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}. \qquad (2.6)$$

Период идентичности узлового ряда – расстояние между двумя ближайшими узлами данного ряда

$$P_{ld} = \left(u^2a^2 + v^2b^2 + \omega^2c^2 + 2uvab\cos\gamma + 2u\omega ac\cos\beta + 2v\omega bc\cos\alpha\right)^{1/2}, \quad (2.7)$$

где $[uv\omega]$ - индексы узлового ряда.
Для ортогональной решетки период идентичности узлового ряда

$$P_{ld} = \sqrt{u^2a^2 + v^2b^2 + \omega^2c^2}\ . \quad (2.8)$$

Угол между двумя узловыми рядами $[u_1v_1\omega_1]$ и $[u_2v_2\omega_2]$

$$\cos\varphi = \frac{(R_1R_2)}{|R_1||R_2|} \quad (2.9)$$

здесь
$R_1 = u_1a + v_1b + \omega_1c$ и $R_2 = u_2a + v_2b + \omega_2c$
Для кубической решетки

$$\cos\varphi = \frac{u_1u_2 + v_1v_2 + \omega_1\omega_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + \omega_1^2}\sqrt{u_2^2 + v_2^2 + \omega_2^2}}\ . \quad (2.10)$$

Угол между двумя узловыми плоскостями $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$

$$\cos\varphi = \frac{(H_1H_2)}{|H_1||H_2|} \quad (2.11)$$

где H_1 и H_2 - векторы обратной решетки, перпендикулярные данным узловым плоскостям
$H_1 = h_1a + k_1b + l_1c$, $H_2 = h_2a + k_2b + l_2c$
Условие перпендикулярности двух плоскостей

$$(H_1H_2) = 0 \quad (2.12)$$

Для кубической решетки

$$\cos\varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \quad (2.13)$$

и условие перпендикулярности

$$h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2 = 0\ . \quad (2.14)$$

Угол между узловой плоскостью и узловым рядом

$$\cos\psi = \frac{(RH)}{|R||H|}. \quad (2.15)$$

Если в плоскости (hkl) лежат два направления $[u_1v_1w_1]$ и $[u_2v_2w_2]$ то индексы этой плоскости равны

$$h = v_1w_2 - v_2w_1, \qquad k = w_1u_2 - w_2u_1, \qquad l = u_1v_2 - u_2v_1 \quad (2.16)$$

Аналогично, индексы направления $[uvw]$ вдоль которой пересекаются две плоскости $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$ определяются системой уравнений

$$u = k_1l_2 - k_2l_1, \qquad v = l_1h_2 - l_2h_1, \qquad w = h_1k_2 - h_2k_1 \quad (2.17)$$

Множество узловых плоскостей, параллельных некоторому узловому ряду, называется зоной плоскостей, а соответствующий узловой ряд – осью зоны. Плоскость (hkl) принадлежит зоне с осью, которая имеет индексы $[uv\omega]$.

Индексы оси зоны, которой принадлежат две плоскости $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$ определяются из соотношений

$$u=(k_1l_2-k_2l_1),\qquad v=(h_2l_1-h_1l_{21}),\qquad \omega=(h_1k_2-h_2k_1) \tag{2.18}$$

Условие зональности определяющее связь между индексами оси зоны $[uvw]$ и индексами (hkl) плоскостей, входящих в данную зону имеет вид

$$hu+kv+lw=0. \tag{2.19}$$

Три узловые плоскости $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ и $(h_3k_3l_3)$ принадлежат одной зоне, если

$$\begin{pmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{pmatrix}=0. \tag{2.20}$$

Задача 2.1. Принадлежат ли плоскости (111), $(1\bar{7}1)$, $(2\bar{1}2)$ к одной зоне?

Задача 2.2. Записать индексы направления в гексагональной плотноупакованной решетке, вдоль которого расположены атомы с координатами $[[\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\,0]]$ и $[[\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,\frac{1}{2}]]$.

Задача 2.3. Вычислить углы между направлением [001] и $<111>$, $<110>$ и $<112>$ для Mg.

Задача 2.4. Найти среди перечисленных пять плоскостей, принадлежащих одной зоне: (111), $(\bar{1}71)$, (312), (021), $(3\bar{1}1)$, (515), (133), (113), $(1\bar{1}0)$, $(0\bar{1}1)$.

Задача 2.5. Построить плоские сетки прямой и обратной решеток, перпендикулярные направлениям $[001]$, $[110]$, $[111]$ проходящие через начало координат для Ge.

Задача 2.6. Определить период идентичности вдоль направления (111) в решетках алмаза и сфалерита.

Задача 2.7. Найти индексы плоскостей, отсекающих на координатных осях отрезки 2;3;4; -3;3;2.

Задача 2.8. Для кубической сингонии найти индексы плоскости (hkl), в которой находятся направления $[011]$ и $[102]$.

Задача 2.9. Найти три плоскости, входящие в данную зону или ось зоны [111].

Задача 2.10. Найти расстояние между плоскостями (111) для триклинного кристалла имеющего параметры: $a=6{,}64$ Å, $b=8{,}31$ Å, $c=11{,}18$ Å, $\alpha=64.0°$, $\beta=46.3°$, $.\gamma=77.4°$.

3. Кристаллографические проекции.

Для построения кристаллографической проекции кристаллического многогранника перенесем все грани и ребра параллельно самим себе так, чтобы они пересекались в одной точке пространства О. К каждой грани из той же точки о восстановим нормали, которые будут определять ориентацию соответствующих плоскостей. Построенная совокупность прямых и плоскостей называется кристаллическим комплексом, а выбранная таким образом точка О – центром кристаллического комплекса.

Сферическая проекция.

Из центра кристаллического комплекса O описывается сфера произвольного радиуса. Точка пересечения линии комплекса с поверхностью сферы – есть сферическая проекция направления.

Первая сферическая координата – долгота φ – отсчитывается по экватору от нулевого индекса по часовой стрелке (на сетке каждое деление соответствует 2°, каждый десятый градус выделен жирной линией).

Вторая сферическая координата – полярное расстояние ρ – отсчитывается по любому направлению от нуля (северный полюс N) до 180°. (южный полюс S).

Стереографическая проекция

Плоскостью проекции является экваториальная плоскость Q. Для построения стереографической проекции прямой, например OA, проводят линию AS на сфере от полюсной точки A на сфере проекций до южного полюса S сферы. Точка a пересечения линии AS с кругом проекции есть стереографическая проекция направления OA.

a

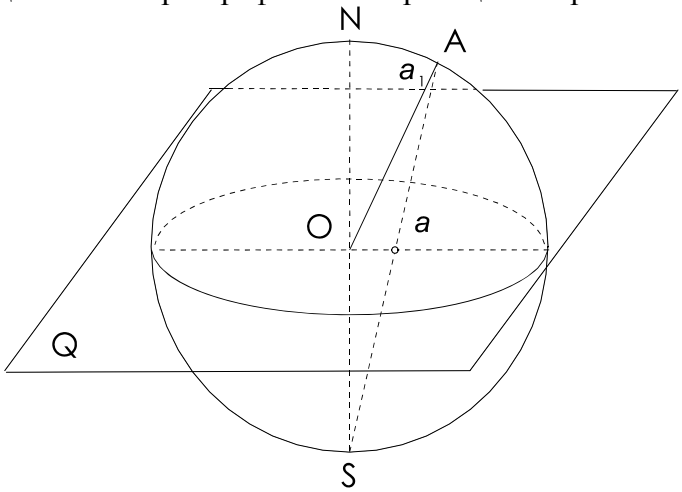


Рисунок 2 Построение стереографической проекции.

Гномостереографическая проекция.

Чтобы получить гномостереографическую проекцию кристаллографической плоскости, проводят нормаль к этой плоскости до пересечения со сферой проекций , а затем линию, соединяющую эту точку пересечения и южный полюс сферы. Гномостереографическая проекция плоскости является точка. Гномостереографические проекции направлений изображаются дугами больших кругов.

Гномоническая проекция.

Плоскость гномонической проекции - касательная к северному полюсу сферы проекций. Проекция направления OA дает на сферической проекции точку a, определенную координатами φ, ρ, на гномонической проекции – точку a_2, на стереографической проекции – точку a_1.

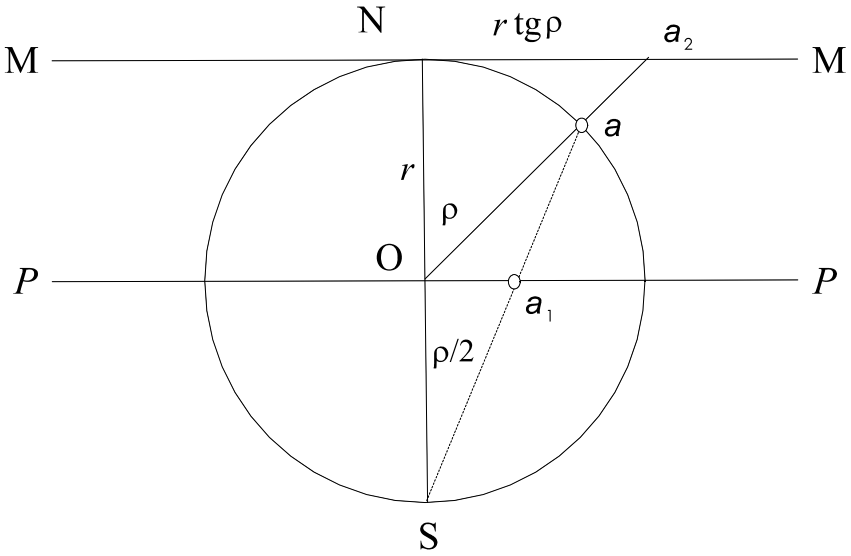
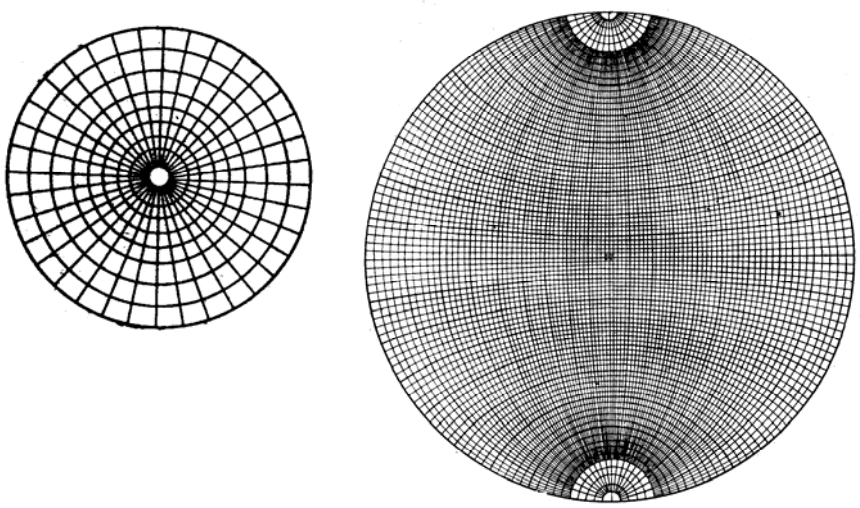


Рисунок 3 Связь между стереографической и гномостереографической проекциями.

Таблица 2 Соотношения между различными типами проекций.

Тип проекции	Изображение	
	плоскости	прямой
Стереографическая	Дуга большого круга	Точка
Гномоническая	Точка	Дуга большого круга
Гномоническая	Точка	Прямая

Для удобства построения проекций используются специальные стереографические сетки (например, «сетка Болдырева», рис. 4a), наибольшее распространение из которых получила в кристаллографии сетка Вульфа (рис. 4b), предложенная русским ученым Г.В.Вульфом в 1897 году. Она представляет собой стереографическую проекцию градусной сети сферы на меридиональную плоскость. Стандартный радиус сетки – 100 мм, цена деления – 2°.



a. b.

Рисунок 4 Сетка Болдырева (a) b и сетка Вульфа (b).

Задача 3.1. Построить стереографическую проекцию направления, заданного сферическими координатами φ и ρ.

Задача 3.2 (обратная). Определить сферические координаты направления, заданного стереографической проекцией

Задача 3.3. Провести дугу большого круга через заданные стереографические проекции двух направлений.

Задача 3.4. Измерить угол между двумя направлениями, заданными их стереографическими проекциями (например, угол между направлениями *A* и *B*).

Задача 3.5. Найти полюс дуги большого круга, заданной на стереографической проекции (под полюсом дуги разумеют точку, равноотстоящую от всех точек дуги на 90°).

Задача 3.6 (обратная). По заданному полюсу найти дугу большого круга, отвечающую его экватору.

Задача 3.7. Измерить угол между двумя дугами больших кругов. Например, требуется измерить угол между дугами *ab* и *ad* (см. рис. 4).

Задача 3.8. Построить геометрическое место точек, образующих с заданной на проекции точкой одно и то же угловое расстояние α (задача на построение малого круга).

Задача 3.9. Даны измеренные на гониометре сферические координаты следующих граней кристалла:

Грани	1	2	3	4	5	6	7	8	9
φ, °	-	11	101	191	281	56	146	236	326
ρ, °	0	42	42	42	42	90	90	90	90

Требуется: 1) изобразить гномостереографические и стереографические проекции всех граней (задачи 1 и 6); 2) измерить углы между гранями (задачи 4 и 7); 3) изобразить гномостереографические и стереографические проекции ребер (задачи 3 и 5); 4) найти сферические координаты ребер и измерить углы между ребрами (задачи 2, 4 и 7).

Задача 3.10. Построить гномостереографическую проекцию кристалла по углам между нормалями к граням (именно такие углы, как известно, измеряются на однокружном отражательном гониометре. Они же легко находятся и посредством прикладного гониометра).

4. Преобразования симметрии.

Преобразования симметрии представляют собой совокупность перемещений, при которых тело совмещается с самим собой.

Множество G называется группой, если для его элементов и заданной операции «умножения» выполняются следующие условия (групповые постулаты):

1. Умножение ассоциативно, т.е.

$$(g_i * g_k) * g_m = g_i * (g_k * g_m) \tag{4.1}$$

2. Среди элементов g_i множества G есть элемент $e \subset G$ такой, что

$$g_i * e = e * g_i = g_i \tag{4.2}$$

элемент e называется единичным (тождественным) элементом группы G.

3. Для каждого элемента g_i можно найти элемент, обозначаемый обычно через g_i^{-1}, принадлежащий тому же множеству G, такой что

$$g_i^{-1} * g_i = g_i * g_i^{-1} = e \tag{4.3}$$

Элемент g_i^{-1} называется элементом, обратным элементом g_i.

Если все элементы группы коммутируют друг с другом , то группа называется абелевой.

Группа называется конечной, если количество элементов группового множества равно некоторому числу. Количество элементов конечной группы называется ее порядком. При бесконечном числе элементов группового множества группа называется бесконечной.

Подгруппа представляет подмножество группы, которая является группой относительно операции умножения. Любая группа имеет две тривиальные подгруппы – подгруппу, множество которой состоит лишь из единичного элемента e, и подгруппу, тождественную самой группе. Порядок подгруппы R является целым делителем порядка n группы $G \supset R$, т.е.

$$\frac{n}{r} = p \qquad (4.5)$$

r - порядок подгруппы R, p - индекс подгруппы. g_i.

Левый смежный класс относительно подгруппы R получают умножением слева элемента g_k $(g_k \in G, \quad g_k \notin R)$ на все элементы подгруппы R - $g_k * R$. Правый смежный класс группы G относительно подгруппы R получают перемножением всевозможных элементов $g_i \in R$ и g_k таким образом, что g_k является правым сомножителем, т.е. $R * g_k$.

Любую группу G можно разложить по подгруппе R, представляя ее групповое множество в виде объединения элементов правых или левых смежных классов:

$$G = e * R \cup g_1 * R \cup g_2 * R \cup \ldots \cup g_{p-1} * R$$

$$G = R * e \cup R * g_1 \cup R * g_2 \cup \ldots \cup R * g_{p-1}$$

Подгруппа называется инвариантной, если разложения на правые и левые смежные классы совпадают.

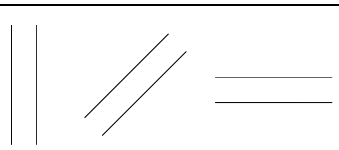
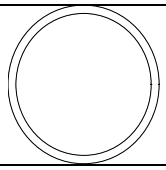
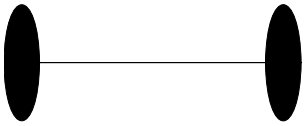
Две группы G и H изоморфные, если между элементами групповых множеств имеет место взаимно-однозначное соответствие, т.е. если элементам $g_i, g_p \in G$ соответствуют элементы $h_k, h_n \in H$, то из $g_f = g_p * g_i$ и $h_f = h_n * h_k$ следует, что элементу g_f соответствует элемент h_f.

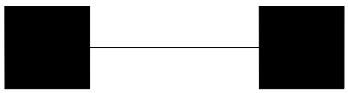
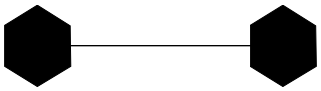
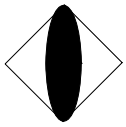
Две группы G и H гомоморфные, если одному и тому же элементу $h_i \in H$ могут быть сопоставлены сразу несколько элементов g_{i1}, g_{i2} … группы G (порядок группы G выше, чем порядок группы H).

Циклические группы – это группы, обладающие одним генератором. Все элементы циклической группы представляют степени одного генератора.

Точечные преобразования симметрии – такие преобразования, при которых есть хотя бы одна неподвижная точка.

Таблица 3 Элементы симметрии клнечных фигур и их обозначения.

Название			Обозначение международное	Изображение по отношению к плоскости чертежа	
				перпендикулярное	параллельное
Плоскость симметрии			m		
Центр симметрии			$\bar{1}$		
Оси симметрии	поворотные	двойная	2		
		тройная	3		

Название			Обозначение международное	Изображение по отношению к плоскости чертежа	
				перпендикулярное	параллельное
		четвертная	4		
		шестерная	6		
	инверсионные	тройная	$\bar{3}$		
		четвертная	$\bar{4}$		
		шестерная	$\bar{6}$		

Ось симметрии n-ого порядка – это поворот вокруг оси на угол $\frac{2\pi}{n}$.

Плоскость симметрии – плоскость, которая делит фигуру на две зеркально равные части.

Центр симметрии (центр инверсии) – точка внутри кристалла, в которой пересекаются и делятся пополам все прямые линии, соединяющие противоположные точки поверхности.

Инверсионная ось симметрии n-ого порядка - поворот вокруг оси на угол $\frac{2\pi}{n}$ и последующая инверсия.

Для обозначения кристаллографических классов (точечных групп) приняты: n - ось симметрии n-го порядка, $\bar{n}$ - инверсионная ось симметрии n-го порядка, m - плоскость симметрии, nm - ось симметрии n-ого порядка и n плоскостей симметрии, проходящих вдоль нее, $\frac{n}{m}$ - ось симметрии порядка n и плоскость симметрии, к ней перпендикулярная, $n2$ - ось симметрии порядка n и n осей второго порядка, к ней перпендикулярных, $\frac{n}{m}m$ или n/mmm - ось симметрии n-ого порядка и плоскости параллельные и перпендикулярные к ней.

Задача 4.1. Показать, что в кристаллической решётке не может существовать ось симметрии пятого порядка.

Задача 4.2. Найти порядок оси вдоль [111] в гранецентрированной кубической решётке.

Задача 4 3. Пренебрегая несущественными деталями, разбить буквы русского и латинского алфавитов по группам симметрии.

Задача 4.4. Записать формулу симметрии следующих фигур: а) квадрата, б) параллелограмма, в) куба, г) тетраэдра, д) шеститигранной призмы, е) шестигранной пирамиды, ж) додекаэдра, з) октаэдра, и) цилиндра, к) шара.

Задача 4.5. Записать международной символикой точечные группы:
а) D_2, б) C_{2v}, в) C_{3v}, г) S_4, д) C_{4h}, е) D_{4h}, ж) C_{6h}, з) D_{6h}, и) T_h, к) O, л) T_d.
Задача 4.6. Записать подгруппы следующих точечных групп:
а) mmm, б) $6mm$, в) $4/mmm$, г) $3m$.
Задача 4.7. Найти порядки следующих групп симметрии: mmm, 222, 23, $m3m$.
Задача 4.8. Дано множество, состоящее из четырех матриц:

$$a=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}\quad b=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\quad c=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}\quad e=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

В качестве операции умножения используется умножение матриц. Показать, что данное множество является группой. Найти его подгруппы.
Задача 4.9. Найти подгруппы группы 422.
Задача 4.10. Определить элементы симметрии модели объемноцентрированной кубической решетки, записать формулу симметрии и ее международный символ.

5. Матричное описание операций симметрии.

Каждой операции соответствуют матрицы. В соответствии со значением детерминанта матрицы преобразования все операции симметрии подразделяются на операции первого рода ($\det a_{ij}=+1$) и второго рода ($\det a_{ij}=-1$). Операции первого рода (повороты) не изменяют системы координат, операции второго рода (отражения, инверсия) преобразуют правую систему координат в левую и наоборот. Матрица преобразования системы координат, эквивалентная двум последовательно выполненным преобразованиям, равна произведению матриц этих преобразований.
Матрица тождественного преобразования

$$e=\begin{vmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{vmatrix} \tag{5.1}$$

Поворот на угол φ вокруг оси, задаваемой вектором $\begin{pmatrix}k_1 & k_2 & k_3\end{pmatrix}$

$$\begin{vmatrix}\cos\varphi+k_1^2(1-\cos\varphi) & k_3\sin\varphi+k_1k_2(1-\cos\varphi) & -k_2\sin\varphi+k_1k_3(1-\cos\varphi)\\ -k_3\sin\varphi+k_1k_2(1-\cos\varphi) & \cos\varphi+k_2^2(1-\cos\varphi) & k_1\sin\varphi+k_2k_3(1-\cos\varphi)\\ k_2\sin\varphi+k_1k_3(1-\cos\varphi) & -k_1\sin\varphi+k_2k_3(1-\cos\varphi) & \cos\varphi+k_3^2(1-\cos\varphi)\end{vmatrix}. \tag{5.2}$$

Поворот по часовой стрелке на угол $\varphi=\dfrac{2\pi}{n}$ (ось поворота ось Z)
Матрица абсолютных величин углов

$$\varphi_{ij}=\begin{vmatrix}\varphi & \frac{\pi}{2}-\varphi & \frac{\pi}{2}\\ \frac{\pi}{2}+\varphi & \varphi & \frac{\pi}{2}\\ \frac{\pi}{2} & \frac{\pi}{2} & 0\end{vmatrix} \tag{5.3}$$

Матрица направляющих косинусов

$$a_{ij} = \begin{vmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \tag{5.4}$$

Отражение в плоскости симметрии, проходящей через ось Z и составляющей угол θ с осью X.

Матрица абсолютных величин углов

$$\varphi_{ij} = \begin{vmatrix} 2\theta & \frac{\pi}{2} - 2\theta & \frac{\pi}{2} \\ \frac{\pi}{2} - 2\theta & \pi - 2\theta & \frac{\pi}{2} \\ \frac{\pi}{2} & \frac{\pi}{2} & 0 \end{vmatrix} \tag{5.5}$$

Матрица направляющих косинусов

$$a_{ij} = \begin{vmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) & 0 \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \tag{5.6}$$

Зеркальный поворот на угол φ вокруг оси координат Z

$$\begin{vmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \tag{5.7}$$

Инверсия

$$I = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \tag{5.8}$$

Инверсионный поворот на угол φ вокруг оси координат Z

$$\begin{vmatrix} -\cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & -\cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \tag{5.9}$$

При переходе от некоторой системы координат с базисными векторами $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ к новой системе с базисными векторами, точка, имевшая в базисе $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ координаты x, y, z, в базисе $\vec{A}$, $\vec{B}$, $\vec{C}$ будет иметь координаты X, Y, Z. Разложение вектора базиса $\vec{A}$, $\vec{B}$, $\vec{C}$ по базису $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$:

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \alpha_{11}\vec{a} + \alpha_{12}\vec{b} + \alpha_{13}\vec{c} \\ \vec{B} &= \alpha_{21}\vec{a} + \alpha_{22}\vec{b} + \alpha_{23}\vec{c}, \\ \vec{C} &= \alpha_{31}\vec{a} + \alpha_{32}\vec{b} + \alpha_{33}\vec{c} \end{aligned} \tag{5.10}$$

Аналогично, каждый вектор базиса $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ можно разложить по базису $\vec{A}$, $\vec{B}$, $\vec{C}$:

$$\begin{aligned}\vec{a} &= \beta_{11}\vec{A} + \beta_{12}\vec{B} + \beta_{13}\vec{C}\\ \vec{b} &= \beta_{21}\vec{A} + \beta_{22}\vec{B} + \beta_{23}\vec{C}\,.\\ \vec{c} &= \beta_{31}\vec{A} + \beta_{32}\vec{B} + \beta_{33}\vec{C}\end{aligned} \qquad (5.11)$$

Матрицы α_{ij} и β_{ij} являются взаимно обратными. Чтобы выразить новые координаты точки через старые нужно использовать матрицу β_{ij}, подвергнутую транспонированию. Аналогичным образом для получения выражения старых координат через новые используется матрица α_{ji} получаемая транспонированием матрицы α_{ij}.

Задача 5.1. Записать в матричной форме результаты последовательного действия операций: а) $2_x \cdot \overline{1}$, б) $6_z \cdot m_x$, в) $2_x \cdot 3_{111} \cdot m_z$, г) $2_x \cdot m_z \cdot 3_{111}$, д) $3_z \cdot m_x$, е) $m_x \cdot 3_z$ и определите полученную операцию.

Задача 5.2. Привести матричное представление точечной группы $m3m$ и указать, каким преобразованиям соответствуют ее элементы.

Задача 5.3. Записать матрицы-генераторы групп: а) 222, б) $4mm$, в) $4/mmm$, г) 23, д) 432.

Задача 5.4. Записать матрицы-генераторы (порождающие матрицы) привести матричное представление точечной группы $4/mmm$. Найти подгруппы этой группы.

Задача 5.5. В кристалле имеются повороты вокруг координатных осей x и y, как вокруг осей 4. Записать матричное представление точечной группы этого кристалла.

Задача 5.6. Каким операциям симметрии соответствуют следующие матрицы:

а) $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ б) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$, в) $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, г) $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, д) $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, е) $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.

Задача 5.7. Изобразить графически взаиморасположение осей исходной координатной системы и осей после преобразования точечными операциями, имеющие в матричной записи вид:

а) $\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, б) $\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ в) $\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, г) $\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, д) $\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, е) $\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Задача 5.8. Написать группы в матричном представлении для следующих операций: а) $\overline{1}$, б) 2_x, в) 2_y, г) 3_z, д) $3_{[111]}$, е) m_z, ж) 4_z.

Задача 5.9. Записать матрицу преобразования осей координат при переходе от гексагональной к ромбоэдрической системе осей.

Задача 5.10. Пусть в кристалле возможны следующие операции:
1) поворот вокруг оси 6, совпадающий с осью z (6_z);
2) поворот вокруг оси 2, совпадающий с осью x (2_x);
3) отражение в начале координат, как в центре симметрии $(\bar{1})$.
Определить результирующую операцию при последовательном выполнении:
а) 1, затем 2, затем 3; б) 1, затем 3, затем 2; в) 2, затем 1, затем 3;
г) 2, затем 3, затем 1; д) 3, затем 1, затем 2; е) 3, затем 2, затем 1.

6. Предельные группы.

Точечные группы, содержащие оси симметрии бесконечного порядка, называются предельными группами симметрии или группами Кюри. Таких групп 7 и каждая из 32 точечных групп симметрии кристаллов является подгруппой по меньшей мере одной из них. Конечные геометрические фигуры, которые характеризуют группы Кюри представлены на рисунке . Условные обозначения элементов симметрии предельных групп на стереографических проекциях показаны на рисунке .
Принцип Неймана. Группа симметрии любого физического свойства кристалла должна включать в себя точечную группу симметрии кристалла.
Принцип Кюри. Кристалл, находящийся под влиянием внешнего воздействия, будет обладать теми элементами симметрии, которые являются общими для кристалла в отсутствие воздействия и воздействия в отсутствии кристалла. Другими словами, точечная группа симметрии кристалла G в результате наложения возмущения с группой симметрии G^B переходит в группу G^Λ - общую подгруппу групп симметрии кристалла G и воздействия G^B:
$G^\Lambda = G \bigcap G^B$.

Задача 6.1. Определить группу симметрии однородного постоянного электрического поля
Задача 6.2. Известно, что кристаллы кварца являются пьезоэлектрическими, т.е. поляризуются под действием механических напряжений. Какие из ориентированных кварцевых пластинах: пластинки, перпендикулярные оси 3 или оси 2, следует выбрать в качестве чувствительных элементов пьезоэлектрических датчиков одноосного давления ?
Задача 6.3. К кубическому кристаллу с симметрией $m3m$ приложили одноосное напряжение растяжения. Какой симметрией будет обладать кристалл, если напряжение прикладывается вдоль направлений: а) $[001]$, б) $[111]$, в) $[110]$.
Задача 6.4. Кристалл с симметрией mm поместили в электрическое поле таким образом, что направление поля совпадало с направлением $[001]$ и затем $[010]$. Найти симметрию кристалла в обоих случаях.
Задача 6.5. Найти величину и направление вектора плотности тока (в координатной системе X_1, X_2, X_3), возникающего в кристаллической пластинке площадью S и толщиной $d\left(\sqrt{S} >> d\right)$ под действием внешнего поля E, равного 150 В/см и приложенного в направлении
$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, 0\right)$, если тензор удельной электропроводности кристалла в этой координатной системе имеет вид

$$\sigma_{ij} = \begin{vmatrix} 9 & -2 & 8 \\ -2 & 16 & 0 \\ 8 & 0 & 25 \end{vmatrix} \cdot 10^{-7} Ом^{-1} см^{-1}$$

Задача 6.6. Диэлектрическая проницаемость моноклинного кристалла в ортогональной системе координат задается тензором вида

$$\begin{vmatrix} 10 & 5 & 0 \\ 5 & 20 & 0 \\ 0 & 0 & 30 \end{vmatrix}.$$

как следует вырезать кристаллическую пластинку фиксированных размеров, обладающую наибольшей емкостью

Задача 6.7. Определить величину двойного лучепреломления кварцевой пластинки, ориентированной своей нормалью произвольным образом относительно оси X_3 кристаллофизической системы координат (рис 5). Каким образом следует вырезать пластинку, чтобы она а) обладала максимальным двойным лучепреломлением, б) не обладала двойным лучепреломлением.

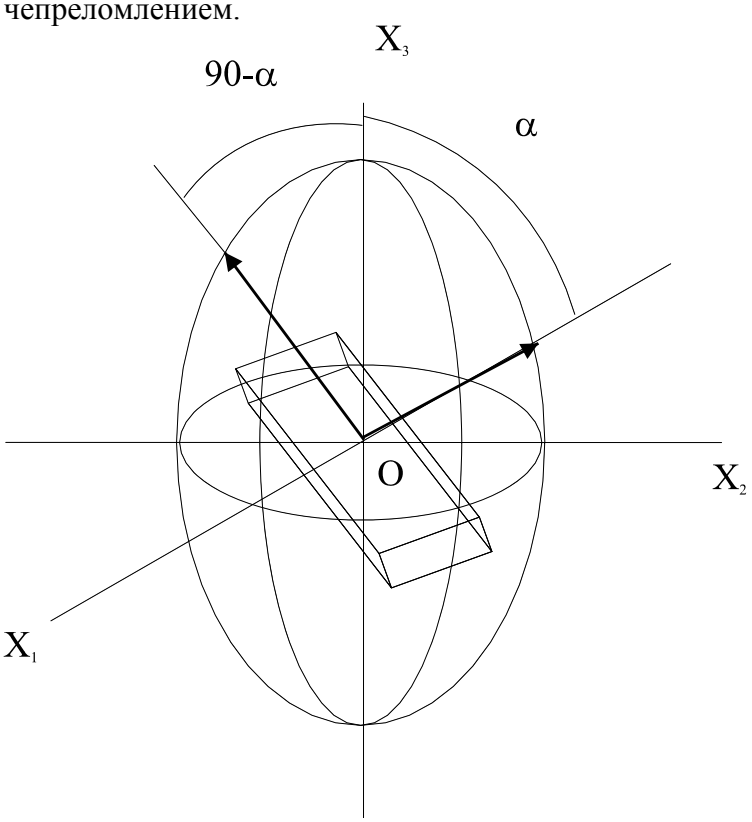


Рисунок 5 К задаче 6.7

Задача 6.8. Найти кристаллографические направления, по которым следует приложить электрическое поле к кристаллу с симметрией $\bar{6}m2$, чтобы его симметрия понизилась: а) до тригональной $3m$, б) до ромбической mm, в) до моноклинной m.

Задача 6.9. К кристаллу с симметрией 23 приложено электрическое поле вдоль направлений: а) $[100]$, б) $[110]$, в) $[111]$, г) $[hk0]$. Найти симметрию кристалла в поле для каждого из указанных способов наложения поля.

Задача 6.10. Какую симметрию приобретает однородная непрерывная изотропная среда в электрическом поле.

7. Пространственные группы симметрии.

Пространственной группой симметрии называется сочетание всех возможных преобразований симметрии кристаллической структуры. Каждая пространственная группа G представляет собой бесконечное множество элементов, которые описываются операторами

$\{e\,|\,0\}$, $\{\varphi_1\,|\,t(\varphi_1)\}$, $\{\varphi_2\,|\,t(\varphi_2)\}$, …, $\{\varphi_k\,|\,t(\varphi_k)\}$,

Здесь оператор $\{\varphi\ |t(\varphi\ )\}$ действует на множестве радиус-векторов точек кристаллического пространства по правилу

$\{\varphi\,|\,t(\varphi)\}r_i = \varphi r_i + t(\varphi)$ (7.1)

φ - оператор, который описывает изометрическую точечную операцию, совместимую с кристаллической решеткой, $t(\varphi)$ - оператор параллельного переноса, который комбинируется с точечной операцией φ.

Закон умножения операторов

$$\{\varphi|t(\varphi)\}\{\psi|t(\psi)\} = \{\varphi * \psi|\varphi t(\psi) + t(\varphi)\}. \qquad (7.2)$$

Основное бесконечное симметрическое преобразование – трансляция. Произведение трансляции на операцию отражения в плоскости симметрии порождает плоскость скользящего отражения. Если скольжение направлено вдоль осей $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ то плоскости скользящего отражения обозначают символами $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$. Величина переноса равна половине периода трансляции вдоль плоскости. Скольжение может быть направлено вдоль диагонали параллелограмма, построенного на элементарных трансляциях $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, лежащих в плоскости скольжения. Если при этом перенос производится на половину длины диагонали параллелограмма, плоскость обозначают символом n, если на четверть длины – символом d.

Произведение трансляции на поворот вокруг оси симметрии порождает винтовую ось симметрии. Винтовые оси могут быть порядков 2, 3, 4, 6. Обозначается винтовая ось цифрой с цифровым индексом: цифра указывает порядок оси, а частное от деления индекса на порядок оси дает величину переноса вдоль оси в долях элементарной трансляции. Различают левые и правые винтовые оси.

Таблица 4 Элементы симметрии структур кристаллов.

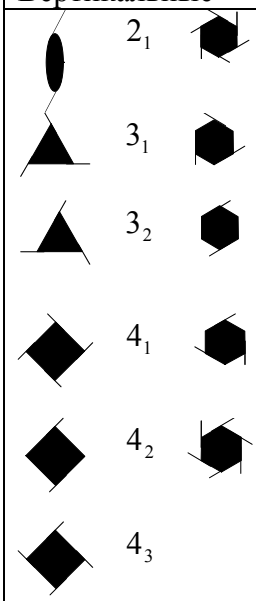
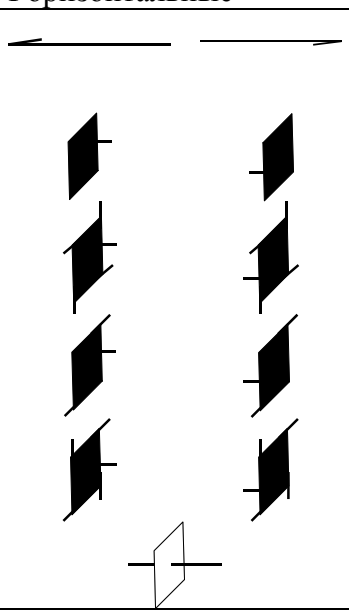
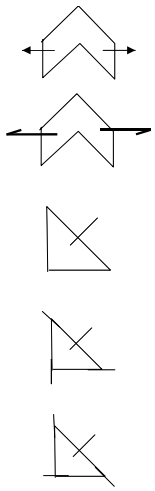
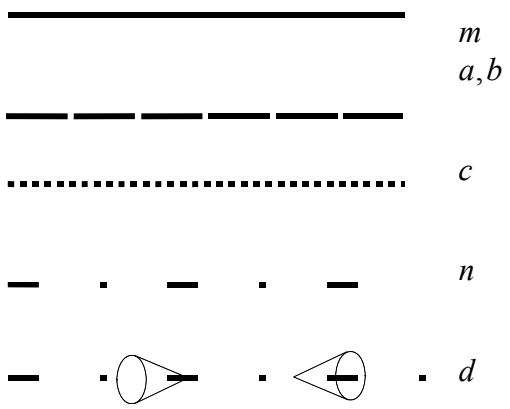
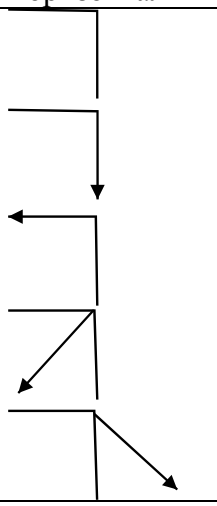
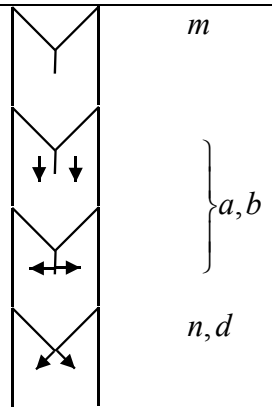
Оси		
Вертикальные	Горизонтальные	Наклонные
 2_1 6_1 3_1 6_2 3_2 6_3 4_1 6_4 4_2 6_5 4_3	 2_1 4 4_1 4_2 4_3 $\bar{4}$	 2 2_1 3 3_1 3_2

Таблица 5 Элементы симметрии структур кристаллов.

Плоскости		
Вертикальные	Горизонтальные	Наклонные
		

Каждой точечной группе соответствует несколько пространственных групп. Чтобы из пространственной группы симметрии кристалла получить его точечную группу, следует уничтожить все трансляции и свести оставшиеся элементы симметрии в одну точку, т.е. получить операцию симметрии вида $\{\varphi \mid 0\}$.

Чтобы вывести из точечной группы пространственную группу необходимо перебрать все возможные сочетания элементов симметрии и решеток Браве. Так получают 230 пространственных групп. Символ пространственной группы содержит символ решетки Браве и международный символ точечной группы. При этом символы осей и плоскостей симметрии в символе могут изменяться на символы винтовых осей о скользящих плоскостей в соответствии с их наличием в данном конкретном кристаллическом пространстве.

Все множество пространственных разбивается на два подмножества – симморфные и несимморфные. Симморфные пространственные группы содержат в качестве подгрупп точечные группы симметрии, отвечающие классу, к которому принадлежит данная пространственная группа.

Задача 7.1. Изобразить на чертеже винтовую ось симметрии 3 порядка.

Задача 7.2. Выписать подмножество пространственных групп отвечающей точеной группе $m3m$.

Задача 7.3. Изобразить график пространственной группы $P\frac{2_1}{b}$.

Задача 7.4. Вывести пространственные группы связанные с триклинной сингонией.

Задача 7.5. Определить точечную группу, соответствующую пространственной группе $P\frac{2_1}{b}$.

Задача 7.6. Записать координаты всех точек правильной системы в кристаллографическом базисе через координаты одной произвольно заданной для пространственной группы $P\frac{2_1}{b}$.

Задача 7.7. Выписать симморфные пространственные группы для тетрагональной сингонии.

Задача 7.8. Какие элементы симметрии присутствуют в пространственной группе $Ibam$.

Задача 7.9. Найти результат произведения поворотов вокруг винтовой оси и отражений в скользящей плоскости.

Задача 7.10. Найти результат операции $\{m_z | t_x(m_z)\}$.

8. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах.

Формула Вульфа-Брэгга для дифракции

$$2d\sin\theta = n\lambda \tag{8.1}$$

здесь d - расстояние между плоскостями, θ - угол дифракции, λ - длина волны, n - целое число.

Условия Лауэ для интерференции

$$\begin{aligned} a(\cos\varphi - \cos\varphi_0) &= h\lambda \\ b(\cos\psi - \cos\psi_0) &= k\lambda \\ c(\cos\eta - \cos\eta_0) &= l\lambda \end{aligned} \tag{8.2}$$

связывают косинусы первичных углов и косинусы углов рассеяния.

Структурный фактор рассеяния

$$J_c = \sum_j f_j e^{i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)} \tag{8.3}$$

f_j - атомный фактор рассеяния, x_j, y_j, z_j - координаты атомов в базисе.

Задача 8.1. При заданном направлении и длине волны λ падающего пучка изобразить возможные направления векторов рассеяния при условии, что их длина волны постоянна, и соответствующие направления волновых векторов рассеянных волн

Задача 8.2. Точечная симметрия кристалла – 222. Какие типы симметрии могут иметь лауграммы этого кристалла.

Задача 8.3. Первичный пучок рентгеновских лучей параллелен плоскости (100) кристалла с точечной группой $\bar{4}2m$. Какие типы симметрии лауэграмм возможны.

Задача 8.4. Дифрактограмма поликристаллического образца имеет отражения при следующих углах θ, град: 12,79; 14,81; 21,10; 25,00; 26,28; 30,74. Проверить принадлежит ли исследуемое вещество к кубической сингонии. Проиндицировать отражения дифрактограммы и определить параметр решетки.

Задача 8.5. Излучение с длиной волны $\lambda = 4\cdot 10^{-3}\,нм$ распространяется вдоль оси $[010]$ кристаллической пластинки вольфрама. Построить узлы обратной решетки плоскости [010], сферу Эвальда и определить возможные направления дифрагированных пучков.

Задача 8.6. Определить направляющие косинусы дифрагированного пучка при отражении от плоскости (hkl) при заданных направляющих косинусах для кубической решетки.

Задача 8.7. Пучок рентгеновских лучей направлен вдоль оси $[100]$ кристалла меди. Определить положение дифракционных максимумов отраженных от плоскостей индексы зоны которой равны $\{111\}$.

Задача 8.8. Рассчитать структурный фактор для ОЦК.

Задача 8.9. При упругом рассеянии излучения с длиной волны $\lambda = 0{,}07\,нм$ угол рассеяния $2\theta = 60^o$. Какой импульс приобрела квазичастица от рассеивателя.

Задача 8.10. Рассчитать положение дифракционных максимумов при съемке образца Zn. Длина волны излучения $\lambda = 0{,}07$.

Ответы, указания, решения.

1.1 ГЦК-ячейку Браве имеют кристаллы: Ge, PbTe, CaF_2, NaCl, Fe_3O_4, GaAs; ОЦК – αFe, V, W; кубическую примитивную – CsCl, Cu_3Au; гексагональную – Mg, ZnS; тетрагональную I-ячейку – $ZnSiP_2$.

1.2 Примитивная ячейка ОЦК – ромбоэдр, угол между соседними ребрами 60^0. Вектора примитивных трансляций:

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a\left(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}\right),\ \vec{b} = \frac{1}{2}a\left(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\right),\ \vec{c} = \frac{1}{2}a\left(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}\right)$$

1.3 Примитивная ячейка ГЦК – ромбоэдр, угол между соседними ребрами $109^0 28'$. Вектора примитивных трансляций:

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a\left(\vec{i} + \vec{j}\right),\ \vec{b} = \frac{1}{2}a\left(\vec{j} + \vec{k}\right),\ \vec{c} = \frac{1}{2}a\left(\vec{i} + \vec{k}\right)$$

1.4 Для доказательства используются соотношения (1.1). По этим соотношениям находят вектора обратной решетки.

1.5. Вектора прямой решетки записываются в виде:

$$\vec{a} = 1 \cdot \vec{i}\ ,\ \vec{b} = \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{i} + \frac{1}{2}\vec{j}\ .$$

Вектора обратной решетки ищут в виде:

$$\vec{a}^* = a_x \cdot \vec{i} + a_y \cdot \vec{j}\ ,\ \vec{b}^* = b_x \cdot \vec{i} + b_y \cdot \vec{j}\ .$$

Используя свойство (1.3) находят компоненты векторов обратной решетки. Затем строится двумерная сетка обратной решетки и ячейка Вигнера-Зейтца.

1.6. $a^* = \dfrac{bc\sin\alpha}{V}$, $b^* = \dfrac{ca\sin\beta}{V}$, $c^* = \dfrac{ab\sin\gamma}{V}$, $\alpha^* = \arcsin\dfrac{r}{\sin\beta\sin\gamma}$.

Здесь $r = \left(1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma\right)^{1/2}$

$\gamma^* = \arcsin\dfrac{r}{\sin\alpha\sin\beta}$, здесь $r = \sin\gamma$.

Отсюда $a^* = 0{,}106\,\overset{o}{A}^{-1}$, $b^* = 0{,}063\,\overset{0}{A}^{-1}$, $c^* = 0{,}05\,\overset{0}{A}^{-1}$, $\alpha^* = \beta^* = 90^o$, $\gamma^* = 70^o$.

$V = 10 \times 16 \times 20 = 3200\,\overset{0}{A}^3$, $V^* = 0{,}1 \times 0{,}06 \times 0{,}05 = 3 \cdot 10^{-4}\,\overset{o}{A}^{-3}$

1.7 Объемы ячейки решетки (V) и ячейки обратной решетки (V^*) (см. задачу 1.9) равны $V = abcr$, $V^* = a^* b^* c^* r^*$, причем VV* = 1.

$$r = \left(1 - \cos^2 100 - \cos^2 90 - \cos^2 104 + \cos 100\cos 90\cos 90\right)^{1/2} = 0{,}95$$

V =332.5Å , $V^* = 3 \cdot 10^{-3}$ Å^{-3}

1.8 Параметры обратной ячейки ромбоэдрического кристалла равны

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = \arccos\frac{\cos^2\alpha - \cos\alpha}{\sin^2\alpha} = \arcsin\frac{\left(1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha\right)^{1/2}}{\sin^2\alpha}$$

$$a^* = b^* = c^* = \frac{\sin\alpha}{a\left(1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha\right)^{1/2}}\ .$$

Для ромбического кристалла

$a^* = 1/a$, $b^* = 1/b$, $c^* = 1/c$. $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^0$.

1.9 Параметры обратной решетки равны:

$a^* = 0{,}154$ Å^{-1}, $b^* = 0{,}137$ Å^{-1}, $c^* = 0{,}100$ Å^{-1},

$\alpha^* = 64{,}2^0$, $\beta^* = 88{,}0^0$, $\gamma^* = 77{,}8^0$

$\left(r = 0{,}766 \quad V = 540{,}77\text{Å}^3\right)$.

1.10 Расчет параметров обратной решетки по известным параметрам прямой решетки производится по формулам (1.1) и (1.2). То есть $a^* = 0{,}33$ Å^{-1}, $b^* = 0{,}21$ Å^{-1}, $c^* = 0{,}13$ Å^{-1}

$\alpha^* = 102{,}4^0, \quad \beta^* = 99{,}0^0, \quad \gamma^* = 61{,}3^0$.

Объем ячейки прямой решетки равен

$$V = abc\left(1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma\right)^{1/2},$$

то есть $V = 294{,}4$ Å^3

2.1 Векторы обратной решетки, нормальные к указанным плоскостям, должны удовлетворять условию (2.21). В данном случае это условие не выполняется.

2.2 [223]

2.3 $\cos\varphi = \dfrac{a_3}{\left[\left(v_1^2 + v_2^2 - v_1 v_2\right)a_1^2 + v_3^2 a_3^2\right]^{1/2}}$,

где v_i - индексы заданного направления, составляющего угол φ с направлением [001]. Для направления [111]

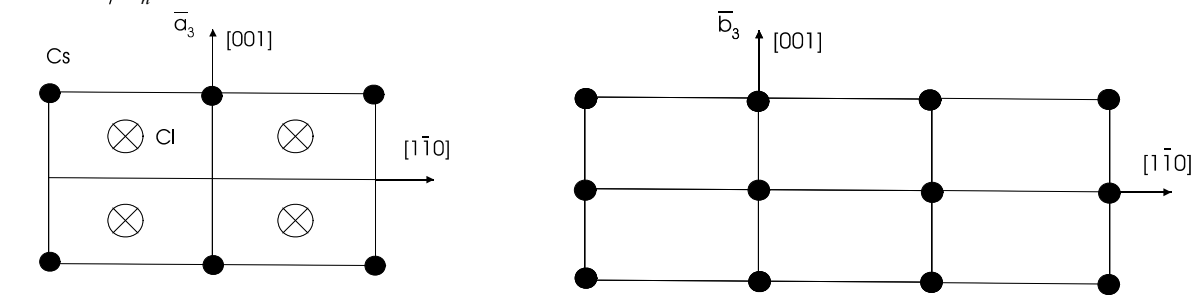
$$\cos\varphi = \frac{a_3}{\left(a_1^2 + a_3^2\right)^{1/2}},$$

а для $\left[1\,\bar{1}\,1\right]$

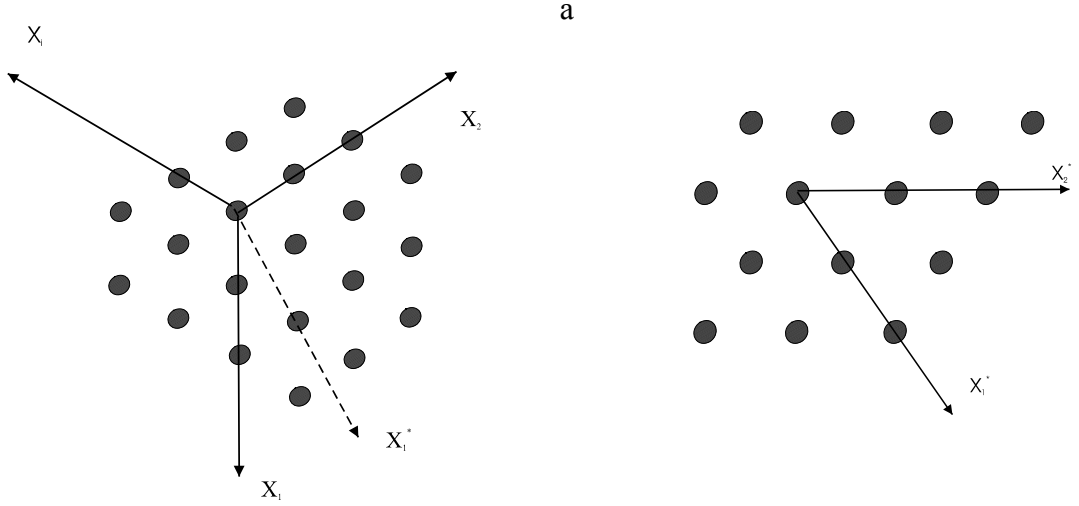
$$\cos\varphi = \frac{a_3}{\left(3a_1^2 + a_3^2\right)^{1/2}}$$

2.4 (111), (312), (021), $\left(3\,\bar{1}\,1\right)$, $\left(1\,\bar{1}\,0\right)$.

2.5 В кубической решетке индексы плоскости, перпендикулярного ей направления и индексы направления обратной решетки совпадают. Построить плоские сетки можно, найдя два узловых направления, принадлежащих им. Вычисляют соответствующие периоды идентичности, и сечение ячейки транслируется вдоль этих двух направлений. Узловые направления в обратной решетке перпендикулярны плоскостям решетки кристалла. При этом должно выполняться условие: $h_i u_i = 0$. Период идентичности вдоль соответствующих направлений $1/d_h$.



a



b

2.6 $a\sqrt{3}$

2.7 Для нахождения индексов используется соотношение (2.1).

2.8 С использованием отношений (2.17) находят искомые индексы.

2.9 Индексы плоскостей определяют из условия (2.20).

2.10 Межплоскостное расстояние определяется по формуле (2.4)

3.1 Например, пусть некоторое направление *A* задано сферическими координатами φ=165° и ρ=68°: *A* (165°, 68°). Требуется найти стереографическую проекцию этого направления.

1. Накладываем кальку на сетку и ставим на ней центральный крестик и черточку нулевого индекса для φ (рис. 3);

2. От нулевого индекса для φ по кругу проекций (по часовой стрелке) отсчитываем первую сферическую координату – долготу φ (165°) и отмечаем результат на внешнем круге вспомогательной чертой;

3. Вращением кальки (центр кальки при этом всегда должен совпадать с центром сетки) совмещаем найденную вспомогательную черту с концом ближайшего диаметра сетки;

4. По этому диаметру от центра сетки в сторону вспомогательной черты отсчитываем вторую сферическую координату – полярное расстояние ρ (68°) – и отмечаем найденную точку небольшим кружком;

5. Возвращаем кальку в исходное положение и надписываем точку *a*.

Точка *a* является искомой стереографической проекцией направления *A*

3.2

1. Вращением кальки приводим заданную точку (стереографическую проекцию направления) на ближайший диаметр сетки. По этому диаметру от центра сетки до заданной точки отсчитываем сферическую координату ρ и отмечаем вспомогательной чертой на круге проекций тот конец упомянутого диаметра, в направлении которого лежит наша точка (рис. 6).

2. По кругу проекций отсчитываем сферическую координату φ: от нулевого индекса по часовой стрелке до вспомогательной черточки.

3.3

Например, провести дугу большого круга через стереографические проекции *a* и *b* направлений *A* (165°, 68°) и *B* (309°, 55°).

1. Вращением кальки добиваемся того, чтобы обе заданные точки *a* и *b* оказались на одной из вспомогательных меридиональных дуг сетки Вульфа.

2. Найденную дугу тщательно обводим карандашом и возвращаем кальку в исходное положение (рис. 7).

3.4

1. Как и при решении предыдущей задачи, вращением кальки совмещаем данные точки *a* и *b* с одной из меридиональных дуг сетки Вульфа (задача 3).

2. Отсчитываем по этой меридиональной дуге количество градусов, заключенных между точками *a* и *b* (рис. 4). В результате получаем $\angle AB$=113°.

3.5 Например, требуется найти полюс дуги ab (см. рис. 7).

1. Вращением кальки совмещаем заданную дугу ab с соответствующей меридиональной дугой сетки Вульфа.

2. Отсчитываем по горизонтальному диаметру сетки от точки пересечения заданной дуги с этим диаметром по направлению к центру сетки 90° (перейдя за него) и отмечаем кружком найденную точку.

3. Возвращаем кальку в исходное положение и надписываем точку – P_{ab}.

Найденная точка P_{ab}, как легко проверить, действительно является полюсом дуги ab.

Ответ: P_{ab} (62°, 61°); P_{bd} (194°, 59°); P_{ad} (269°, 60°).

3.6

1. Вращением кальки приводим заданный полюс на горизонтальный диаметр сетки.

2. Отсчитываем по горизонтальному диаметру в направлении центра сетки 90° (перейдя за него) и обводим проходящую здесь меридиональную дугу. Эта последняя будет искомой экваториальной дугой относительно заданного полюса.

Если заданный полюс выражает гномостереографическую проекцию грани, то найденная экваториальная дуга соответствует стереографической проекции той же грани.

Если заданный полюс представляет стереографическую проекцию ребра, то найденная дуга отвечает его гномостереографической проекции.

3.7 Например, требуется измерить угол между дугами *ab* и *ad* (см. рис. 7).

1. Вращением кальки совмещаем точку пересечения дуг – *a* (вершину измеряемого угла) с горизонтальным диаметром сетки.

2. Приняв эту вершину за полюс, проводим отвечающую ему экваториальную дугу (задача 6).

3. Количество градусов, заключенное в этой дуге между точками пересечения с ней двух заданных дуг, и является величиной искомого угла.

3.8. Пусть заданная точка лежит внутри круга проекций (например, точка *b* (309°, 55°)). Требуется построить вокруг нее, как стереографического центра, малый круг заданного радиуса (α=30°).

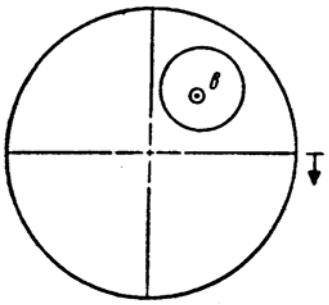


Рисунок 6.

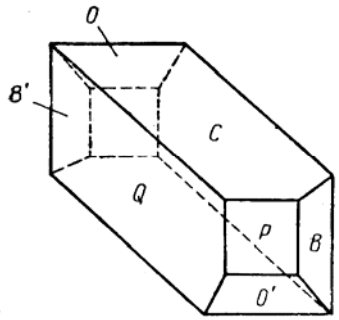


Рисунок 7.

Для этого совмещаем заданную точку с какой-либо параллелью, изображенной на сетке Вульфа, отсчитываем по меридиональной дуге сетки, проходящей через исходную точку, вверх и вниз угловое расстояние α и отмечаем полученные при этом две точки. Вращением кальки приводим заданную точку на какую-либо другую параллель сетки и аналогичным путем получаем пару новых точек. Повторяем такой прием до тех пор, пока полученные точки не начнут совершенно отчетливо обрисовывать окружность. Эта последняя может быть вычерчена с помощью одной из параллелей сетки Вульфа, кривизна которой соответствует искомому кругу. Для этого центр кальки сдвигается с центра сетки, и часть построенных точек совмещается путем наложения с упомянутой параллелью, по которой в несколько приемов вычерчивается, в конце концов, требуемый малый круг.

3.10 Для проектирования данного кристалла придаем ему такую пространственную ориентировку, при которой грани *B, P, Q* и *B′* становятся вертикальными и изобразятся на внешнем круге проекций. Проекцию одной из этих граней, например грани *B,* совместим с нулевым индексом для φ.

В соответствии с рисунком кристалла отсчитываем по часовой стрелке углы между нормалями к граням *B : P*=42°, *P : Q*=54° и *B : B′*=180°. Найденные на внешнем круге точки и будут проекциями этих вертикальных граней.

Далее по углам *B : C*=83° и *P : C*=72° находим точку *C.* Для этого приводим сперва точку *B* в один из полюсов сетки Вульфа, отсчитываем по кругу проекций в любую сторону 83° и прочерчиваем соответствующую параллель сетки. Затем совмещаем с полюсом сетки точку *P*, отсчитываем 72° и снова прочерчиваем параллель сетки. На пересечении двух полученных параллелей и находится проекция грани *C* (задача 8).

Для нахождения проекции грани *O* совмещаем точку *B′* с одним из изображенных полюсов сетки, отсчитываем 58° и рисуем параллель. Далее принимаем за стереографический центр точку *C* и строим малый круг радиусом в 54° (задача 8). Этот круг пересекает параллель, вычерченную вокруг *B′*, в двух точках. В соответствии с рисунком, принимаем за проекцию грани *O* ту из них, которая отвечает расположению грани на рисунке.

4.1 Простейшей геометрической фигурой, обладающей осью пятого порядка (осью 5), является правильный пятиугольник (пентагон), изображенный на рис. 8. Пусть в кристалле есть ось 5. Но кристаллы тела решеточные, следовательно, характеризуются таким элементом симметрии, как трансляция. Это означает, что любая плоскость в

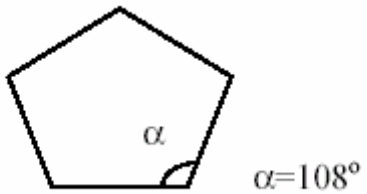


Рисунок 8

кристалле должна быть заполнена без пропусков одинаковыми многоугольниками. Это условие можно выполнить только для следующих многоугольников: гексагон (правильный шестиугольник), тетрагон (квадрат), тригон (правильный треугольник), параллелограмм и подогнанные друг к другу произвольные многоугольники. Пентагонами плоскость не может быть заполнена без пропусков. Следовательно, в кристаллах оси 5 встречаться не могут, а могут быть лишь оси 6, 4, 3, 2, 1.

4.2 Гранецентрированную кубическую ячейку (рис. 9а) ориентируем так, чтобы её телесная диагональ (направление [111]) стала перпендикулярной плоскости чертежа (рис. 9б). Светлыми кружками показаны видимые, черными – невидимые гомологичные точки. Из этого рисунка следует, что с направлением [111] совпадает направление инверсионной оси шестого порядка (6).

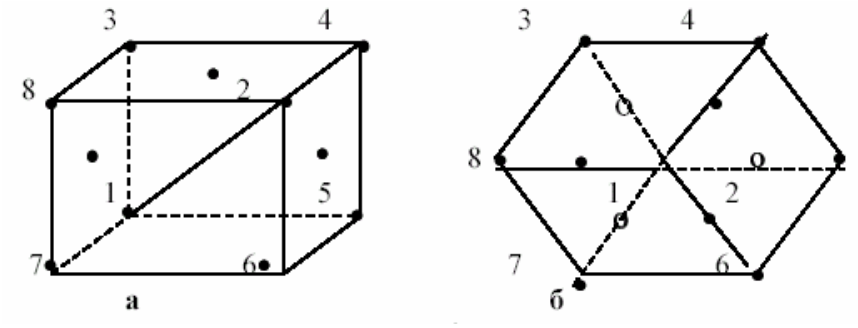


Рисунок 9

4.3 Буквы русского и латинского алфавитов распадаются на следующие группы симметрии: mm2 (две взаимно пересекающиеся плоскости отражения и на линии их пересечения, как следствие, ось второго порядка); m (вертикальная - (mv) или горизонтальная - (mн) плоскости отражения) 2 (ось второго порядка); 1 - отсутствие симметрии, кроме тривиальной, - поворота на 3600. Разбиение букв по группам приведено в таблице.

Группа		**А л ф а в и т**	
		русский	**латинский**
mm2		ЖНОХ	HIOX
m	$m_н$	АДМПТФШ	AMTUVWY
	m_v	ВЕЗКСЭЮ	BCDEK
2		И	NSZ
1		БГЁЙЛРУЦЧЩЬЪЯ	FGJLHQR

4.4 Формула симметрии - это перечень всех элементов симметрии объекта. У указанных в задаче фигур они имеют вид: а) квадрат - L4, 4P, C; б) параллелограмм - L2,C; в) куб - 3L4, 4L36L2 9PC; г) тетраэдр - 3L4i, 4L3, 4L2, д) шестигранная призма - L6, 6L2 ,6P v, Pн, C; е) шестигранная пирамида - L6,6P; ж) додекаэдр - 6L5, 10L3 ,15L2 (плоскости симметрии и центр симметрии найдите самостоятельно); з) октаэдр - 3L4, 4L3, 6L2 9PC; и) цилиндр - оси вращения произвольного порядка P, C; к) шар - все возможные элементы точечной симметрии.

Обозначения: Ln- ось n-го порядка, Lni – инверсионная ось n-го порядка, P v, Pн - плотности отражения, C-центр симметрии.

4.5 а) D_2-222; б) C_{2v} -mm2; в) C_{3v}-3m; г) S_4- 4 ; д) C_{4h}-4/m; е) D_{4h}-4/mmm; ж) C_{6h}-6/m; з) D_{6h}-6/mmm; и) T_h-m3; к) 0-432; л) T_d-43m.

4.6 а). mmm- $mm2_x$, $mm2_y$, $mm2_z$, $2_x/m$, $2_y/m$, $2_z/m$, 2_x, 2_y, 2_z, m_x, m_y, m_z, 1.

б) 6mm-3m, mm2, 3, 2, m.

в) 4/mmm-4mm, 4/m, mmm, mm2, 2/m, 2, m, 1.

г) 3 m-3 , 3, m.

4.7 mmm-8; 222-4; 23-12; m3m-48

4.8 Для доказательства построим «таблицу умножения» (квадрат Кэли) этого множества

	a	**b**	**c**	**e**
a	**b**	**c**	**e**	**a**
b	**c**	**e**	**a**	**b**
c	**e**	**a**	**b**	**c**
e	**a**	**b**	**c**	**e**

Видно, что множество из перечисленных четырех матриц замкнуто относительно умножения матриц. Умножение матриц ассоциативно, в качестве единицы служит единичная матрица, для матрицы a обратным элементом в данном множестве является матрица c, матрицы b и e совпадают с обратными. Таким образом, множество образует группу четвертого порядка. Эта группа имеет нетривиальную подгруппу второго порядка, состоящую из элементов b и e. Квадрат Кэли для этой подгруппы

	b	e
b	e	b
e	b	e

4.10 Формула симметрии куба $3\alpha_4 4\alpha_3 6\alpha_2 9PC$. Международный символ m3m.

5.1 Для определения результата (R) последовательного действия операций A, B (сначала - действует операцией B, затем - A) надо найти их матричное произведение, то есть R = ÃB:

а) $2_x \cdot \overline{1}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_x$,

б) $6_z m_x = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$,

то есть R — отражение в плоскости, проходящей через ось z и имеющей с осью угол 60^0;

в) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$.

г) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$,

д) $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \overline{6}$,

е) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \overline{6}$.

Операции д) и е) являются инверсионными поворотами вокруг оси 6_z, но направления поворотов противоположны.

5.2 В точечной группе m3m имеются различным образом ориентированные элементы симметрии. Матрицы соответствующих операций имеют вид.

ось 1 (Самосовпадение): $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$,

Центр симметрии: $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$,

Плоскости отражения: $\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},$

$\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&1\\0&-1&0\\1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}.$

оси 2: $\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix},$

$\begin{pmatrix}0&0&1\\0&-1&0\\1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{pmatrix}.$

оси 3*: $\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&-1\\-1&0&0\end{pmatrix},$

$\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&-1\\1&0&0\end{pmatrix}$

оси 4: $\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&-1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}$

оси $\bar{4}$: $\begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}$

оси $\bar{6}$: $\begin{pmatrix}0&0&-1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&0&-1\\0&0&-1\\-1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix},$

$\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&-1\\1&0&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix}$

Порядок группы m3m равен 48.

5.3

а) $222 - \left(\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\right),$

б) $4/mmm - \left(\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\right),$

в) $4mm - \left(\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right)$,

г) $23 - \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$,

д) $432 - \left(\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right)$.

5.4 Группа 4/mmm включает поворот вокруг оси 4z

$$4_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

отражение в плоскости, проходящей через оси z и x,

$$m_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

отражение в плоскости xy

$$m_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, матрица-генератор точечной группы 4/mmm имеет вид

$$\left(\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right).$$

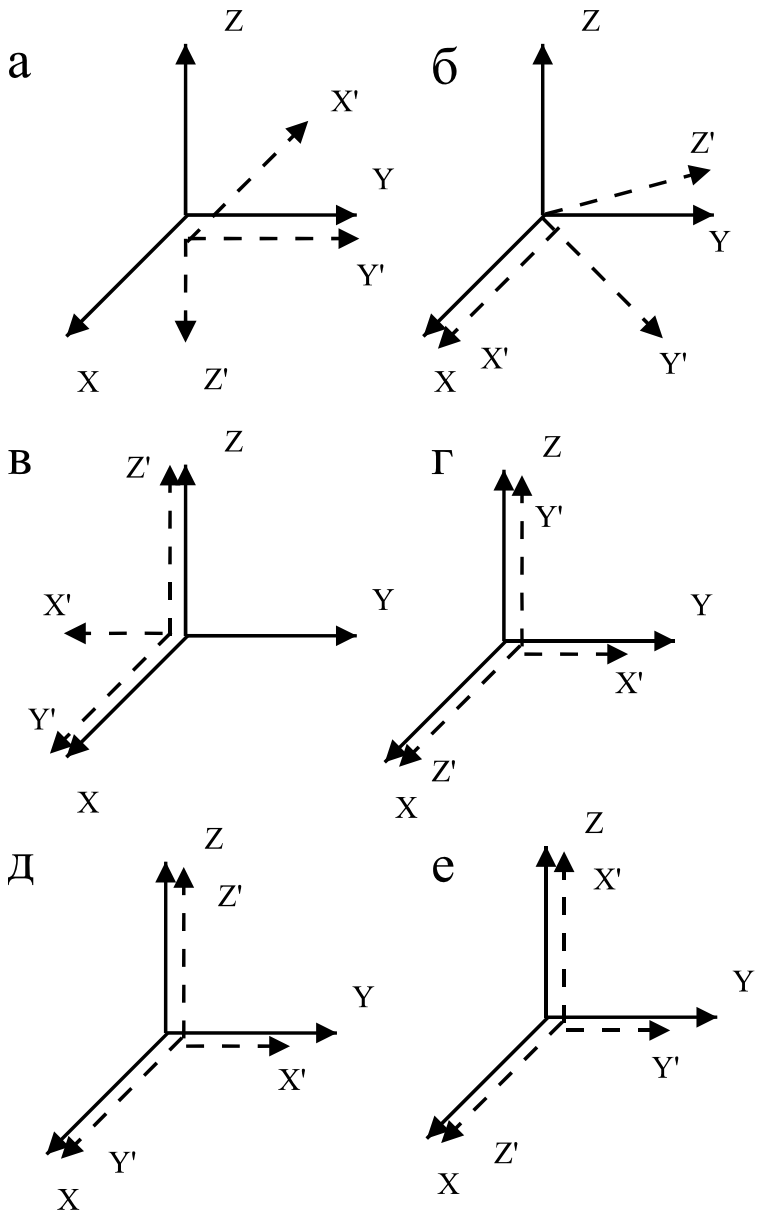
Подгруппами группы 4/mmm являются группы: 1, $\bar{1}$, 2 m, 4 причем их запись зависит от ориентации определяющих эти группы элементов

5.5 Группы поворотов вокруг 4x и 4y в матричном представлении

$$(4_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

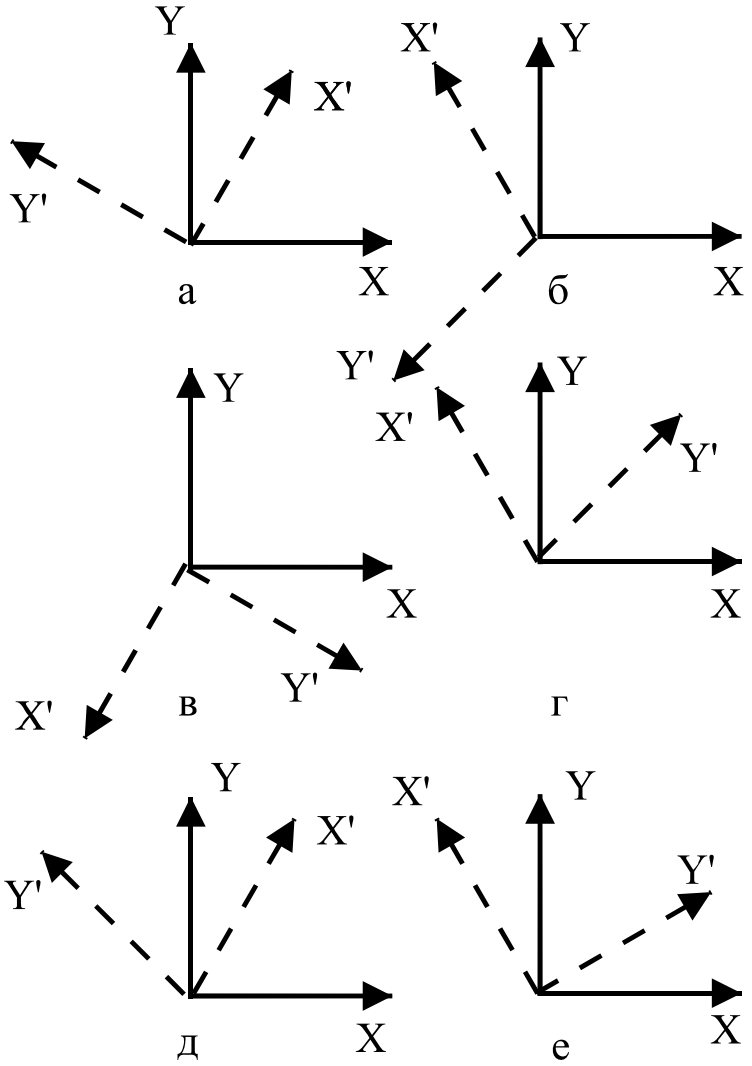
$$(4_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

5.6 Исходные (сплошная линия) и конечные - после поворота - (пунктир) положения координатных осей изображены на рис. 6.



а. Поворот на угол 180^0 вокруг оси y (ось 2).
б. Поворот на 450 (ось 8) вокруг оси z.
в. Поворот вокруг z на 90^0 (ось 4).
г. Поворот на 120^0 вокруг оси, совпадающей с направлением [111] (ось 3[111]).
д. Отражение в плоскости, идущей через ось z и биссектрису угла между x, y.
е. Отражение в плоскости, идущей через ось y и биссектрису угла между x, z.

5 7. Положения координатных осей до (x y z) и после преобразования (x/ y/ z/) приведены на рис. 7. Ось z направлена на нас. Если ось z/ направлена на нас, то она обозначается z/, если от нас, то z̰.



5.8 Матрица - генератор (матрица элементарного преобразования), записанная в виде (q)

$$(q)=\begin{pmatrix} \cos x'x & \cos y'x & \cos z'x \\ \cos x'y & \cos y'y & \cos z'y \\ \cos x'z & \cos y'z & \cos z'z \end{pmatrix},$$

где x y z - исходные положения координатных осей, $\tilde{x}\tilde{y}\tilde{z}$- положения координатных осей после выполнения операции симметрии. Элементы группы рассчитываются следующим образом:

$$(q)^1,\ (q)^2 \ldots (q)^n,\ \text{причем}\ (q)^n=(E)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

То есть указанные в задаче группы записываются:

а) $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}(E)$, б) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}(E)$ в) $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}(E)$,

г) $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}(E)$

д) $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}(E)$, е) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}(E)$,

ж) $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, (E)$.

5.9 Осевые векторы ромбоэдрической решетки выражаются через осевые векторы гексагональной решетки следующим образом:

$$\vec{a}^R = \frac{1}{3}\left(\vec{a}^\Gamma - \vec{b}^\Gamma + \vec{c}^\Gamma\right),\ \vec{b}^R = \frac{1}{3}\left(\vec{a}^\Gamma + 2\vec{b}^\Gamma + \vec{c}^\Gamma\right),\ \vec{c}^R = \frac{1}{3}\left(-2\vec{a}^\Gamma - \vec{b}^\Gamma + \vec{c}^\Gamma\right).$$

Отсюда:

$$\alpha_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

обратное преобразование

$$\beta_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

5.10 Указанные операции точечной симметрии описываются матрицами:

$$1)\ (6_z) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ 2)\ 2_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ 3)\ \bar{1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

1) а), б), д) — отражения в плоскости, проходящей через ось z под углом 120^0 к оси x.

$$(2_x)(6_z) = (2_x)(\bar{1})(6_z) = (2_x)(6_z)(\bar{1}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

2) в), г), е) - отражение в плоскости, проходящей через ось z под углом 60^0 к оси x.

$$(6_z)(2_x) = (6_z)(\bar{1})(2_x) = (6_z)(2_x)(\bar{1}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

6.1 Выберем декартову систему координат $x,\ y,\ z$ таким образом, чтобы вектор напряженности электрического поля E совпадал с осью z. Тогда группа симметрии поля будет изоморфна группе матриц, удовлетворяющих уравнению

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ E \end{pmatrix}.$$

Из решения системы уравнений следует $a_{13} = a_{23} = 0$ и $a_{33} = 1$. Сумма квадратов элементов одной строки такой матрицы (квадрат модуля единичного вектора) равна единице, т.е. $a_{31}^2 + a_{32}^2 + a_{33}^2 = 1$. Отсюда следует, что $a_{31} = a_{32} = 0$. Это означает, что однородное электрическое поле инвариантно относительно всех движений пространства, которые описываются матрицами вида

$$g = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

где элементы матриц должны быть такими, чтобы $\det g = \pm 1$. Если $\det g = +1$, то полученные матрицы описывают повороты вокруг оси z на всевозможные углы (ось симметрии бесконечного порядка). При $\det g = -1$ матрицы описывают отражения в бесконечном количестве плоскостей симметрии, проходящих через ось z. Таким образом, группа симметрии однородного электрического поля может быть обозначена как $C_{\infty v}$.

6.2 Кристаллы кварца принадлежат к классу 32. Поляризация кристаллов под действием одноосного сжатия возникает в том случае, если при этом в кристалле появляется единичное направление, являющееся в то же самое время и полярным. В классе 32 ось третьего порядка является единичным но не полярным направлением из-за присутствия перпендикулярных к этой оси осей второго порядка.

Действуя на кристалл кварца сжатием, обладающим группой симметрии ∞/mmm вдоль оси третьего порядка, получаем, что симметрия кристалла в этой случае не изменяется:

$$32 \cap \underset{\|3}{\infty/mmm} = 32.$$

Следовательно, сжимая кварцевую пластинку, вырезанную так, что ее рабочие грани перпендикулярны оси 3 эффект поляризации не обнаружится.

При сжатии кристалла кварца вдоль одной из осей 2

$$32 \cap \underset{\|2}{\infty/mmm} = 2,$$

из всех полярных направлений кристалла, расползающихся в плоскости, перпендикулярной оси 3 выделяется одно. Оно оказывается единичным и полярным. Следовательно, вдоль него и располагается вектор пьезоэлектрической поляризации. Таким образом, для получения пьезоэлектрического эффекта при действии одноосного сжатия кварцевую пластинку следует вырезать так, чтобы ее рабочие грани были перпендикулярны одной из осей 2.

6.3 а) $m3m \cap \underset{\|4}{\infty/mmm} = 4/mmm$

б) $m3m \cap \underset{\|3}{\infty/mmm} = \bar{3}m$

в) $m3m \cap \underset{\|2}{\infty/mmm} = mmm$.

6.4 mm, m.

6.5 Компоненты вектора E:

$$E_1 = 150 \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} B/см,\ E_2 = 150 \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} B/см,\ E_3 = 0;$$

$$j_1 = \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3 = 7{,}4 \cdot 10^{-5}\ A/см^2,$$

$$j_2 = \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3 = 14{,}7 \cdot 10^{-5}\ A/см^2,$$

$$j_3 = \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3 = 8{,}46 \cdot 10^{-5}\ A/см^2$$

Направление вектора j определяются углами α, β, γ, которые он составляет с осями координат. Эти углы определяются из соотношений:

$\cos\alpha = \frac{j_1}{|j|} = 0{,}398$, $\alpha = 66^o$,

$\cos\beta = \frac{j_2}{|j|} = 0{,}797$, $\alpha = 37^o$,

$\cos\gamma = \frac{j_1}{|j|} = 0{,}452$, $\alpha = 63^o$.

6.6 Перпендикулярно направлению $[001]$.

6.7 Симметрия кварца 32, следовательно он является одноосным кристаллом и имеет два главных показателя преломления, n_0 и n_e. Показатель преломления обыкновенной волны n_0 не зависит от направления. Показатель преломления необыкновенной волны n'_e зависит от направления, изменяясь от n_0 до n_e. Его значение может быть найдено как радиус вектор оптической индикатрисы, лежащей в одной плоскости с нормалью к пластинке и перпендикулярной ей. Поскольку оптическая индикатриса одноосных кристаллов обладает осью симметрии бесконечного порядка, совпадающей с кристаллофизической осью X_3, вектор r и вектор нормали к пластинке n можно расположить в плоскости X_2X_3; вектор r будет иметь координаты $(0 \quad r_2 \quad r_3)$. Уравнение эллипса, представляющего сечение оптической индикатрисы плоскостью X_2X_3

$$\frac{x_2^2}{n_0^2} + \frac{x_3^2}{n_e^2} = 1.$$

Так как угол, составляемый вектором r с осью X_3 - $(90^o - \alpha)$, то

$$x_2 = r\sin(90^o - \alpha) = r\cos\alpha,$$

$$x_3 = r\cos(90^o - \alpha) = r\sin\alpha.$$

Подставляя x_2 и x_3 в уравнение (), получим

$$\frac{r^2\cos^2\alpha}{n_0^2} + \frac{r^2\sin^2\alpha}{n_e^2} = 1.$$

Откуда

$$r^2 = \frac{1}{\frac{\cos^2\alpha}{n_0^2} + \frac{\sin^2\alpha}{n_e^2}} = \frac{n_0^2 n_e^2}{n_e^2\cos^2\alpha + n_0^2\sin^2\alpha}.$$

Следовательно

$$n'_e = n_0 n_e \sqrt{\frac{1}{n_e^2\cos^2\alpha + n_0^2\sin^2\alpha}}.$$

Величина двойного лучепреломления по этому направлению

$$\Delta n' = n'_e - n_0 = n_0\left(n_e\sqrt{\frac{1}{n_e^2\cos^2\alpha + n_0^2\sin^2\alpha}} - 1\right).$$

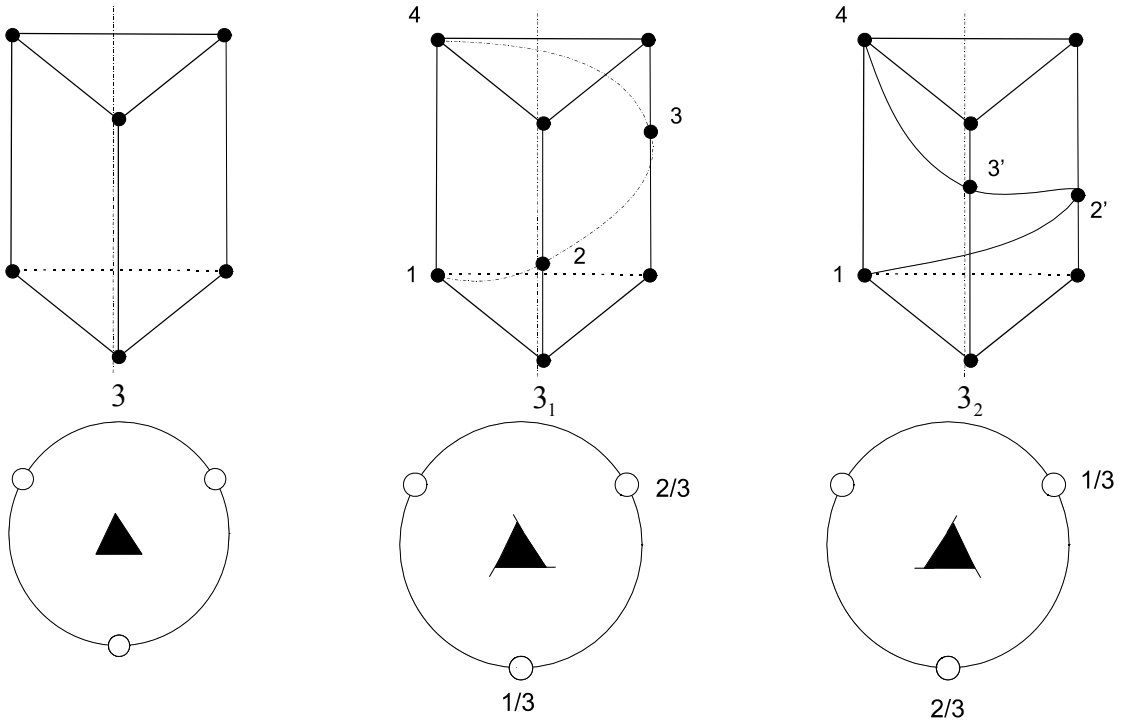
Величина $\Delta n'$ достигает максимального значения при $\alpha = 90^o$. Следовательно, максимальным двулучепреломлением будет обладать пластинка, нормаль к которой составляет угол 90° с осью X_3. При $\alpha = 0$ $\Delta n' = 0$, т.е. пластинка с нормалью, параллельной оси X_3 не обладает двойным лучепреломлением.

6.8 а) $[001]$, б) $[110]$, в) $[h0l]$.

6.9 а) 2, б) 1, в) 3, г) 1.

6.10 $C_{\infty v}$.

7.1



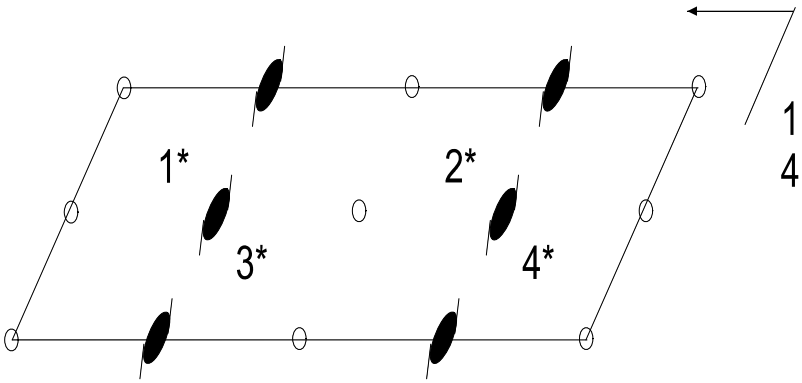
7.2 $Pm3m$, $Pm3n$, $Fm3m$, $Fd3m$, $\mathrm{I}m3m$, $Pn3n$, $Pn3m$, $Fm3c$, $Fd3c$, $Ia3d$.

7.3 Пусть трансляции a и b решетки располагаются в плоскости чертежа. Группа $P\frac{2_1}{b}$ принадлежит к классу $2/m$ моноклинной сингонии, поэтому трансляции имеют произвольные длины a и b и расположены под некоторым произвольным углом γ.

Трансляция c перпендикулярна трансляциям a и b и, следовательно, перпендикулярна плоскости чертежа. Буква P в символе пространственной группы указывает на моноклинную примитивную решетку Браве, что означает отсутствие внутри элементарной трансляций более коротких чем a, b, c.

Изобразим элементы симметрии, указанные в символе пространственной группы: винтовую ось второго порядка, параллельную оси Z, и перпендикулярную оси плоскость скользящего отражения b.

Винтовые оси будут размножаться трансляциями a, b, $(a+b)/2$, $(b+c)/2$. Умножая поворот вокруг винтовых осей на перпендикулярные трансляции a, b, $(a+b)/2$, получим новые винтовые оси на половинках этих трансляций. Произведение поворотов вокруг винтовых осей и отражений в плоскости скольжения дает инверсию в точке, смещенной на $(b-c)/4$ относительно точки пересечения оси и плоскости (см. задачу 7.9).



Выберем начало координат в центре инверсии и обозначим границы основания элементарной ячейки.

7.4 Триклинной сингонии принадлежат две точечные группы 1 и $\overline{1}$, и для нее характерна примитивная решетка Браве. Поэтому оба триклинных класса содержат лишь симморфные пространственные группы $P1$ и $P\overline{1}$.

7.5 В пространственной группе $P\frac{2_1}{b}$ имеются винтовые оси второго порядка, скользящие плоскости. Преобразуя плоскости скольжения в зеркальные и винтовые оси в поворотные и сводя все элементы симметрии в одну точку получим ось симметрии второго порядка и перпендикулярную ей плоскость отражения, что соответствует точечной группе $2/m$.

7.6 Зафиксируем произвольную точку 1 с координатами x, y, z внутри элементарной ячейки и будем действовать на нее операторами пространственной группы. Точка 2 получается из точки 1 операцией скользящего отражения в плоскости b, параллельной плоскости чертежа и поднятой на высоту $c/4$. Точка 3 получена из точки 1 поворотом вокруг винтовой оси второго порядка. Точка 4 получается из точки 1 инверсией в центре инверсии, расположенным на половине телесной диагонали элементарного параллелепипеда. Запишем координаты полученных точек.

Точка 2

$$\left\{m_z\middle|\frac{b}{2}+\frac{c}{2}\right\}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\y\\-z\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\1/2\\1/2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\1/2+y\\1/2-z\end{pmatrix}.$$

Точка 3

$$\left\{2_z\middle|a+\frac{b}{2}+\frac{c}{2}\right\}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\-y\\z\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1\\1/2\\1/2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1-x\\1/2-y\\1/2+z\end{pmatrix}.$$

Точка 4

$$\left\{\overline{1}\middle|a+b+c\right\}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\-y\\-z\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1-x\\1-y\\1-z\end{pmatrix}.$$

7.7. $P4$, $I4$, $P\overline{4}$, $I\overline{4}$ $P4mm$, $I4mm$, $P\frac{4}{m}$, $I\frac{4}{m}$, $P422$, $I422$, $P\overline{4}2m$, $I\overline{4}2m$, $P\frac{4}{m}mm$, $I\frac{4}{m}mm$.

7.8 Плоскости скольжения типа a, b, зеркальная плоскость.

7.9 Запишем в операторном виде произведение поворотов вокруг винтовой оси и отражений в плоскости отражения

$$\left\{m_z\middle|\frac{b}{2}\right\}\left\{2_z^1\middle|\frac{c}{2}\right\}=\left\{m_z*2_z^1\middle|m_z\frac{c}{2}+\frac{b}{2}\right\}=\left\{\overline{1}\middle|\frac{b}{2}-\frac{c}{2}\right\}$$

Произведение $m_z2_z^1=\begin{vmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{vmatrix}=\overline{1}$

Поскольку отражение происходит в плоскости скольжения, то результатом является инверсия в точке, смещенной на вектор $(b-c)/4$.

7.10 Эта операция описывает параллельный перенос вдоль оси x и отражение в плоскости, перпендикулярной оси z. Умножим оператор на себя

$$\{m_z|t_x(m_z)\}\{m_z|t_x(m_z)\}=\{m_z*m_z|m_z t_x(m_z)+t_x(m_z)\}.$$

Действие операции отражения m_z на вектор переноса $t_x(m_z)$ преобразует вектор $t_x(m_z)$ в себя

$$m_z t_x(m_z)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}t(m_z)\\0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}t(m_z)\\0\\0\end{pmatrix}.$$

Учитывая, что $m_z*m_z=e$, получаем

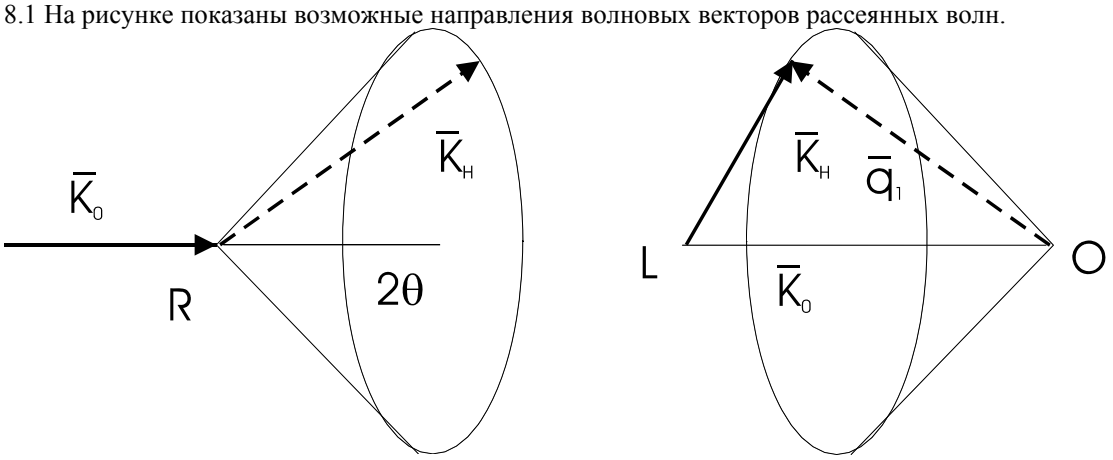
$$\{m_z|t_x(m_z)\}*\{m_z|t_x(m_z)\}=\{e|2\cdot t_x(m_z)\}.$$

Полученный оператор описывает перенос на удвоенный вектор $t_x(m_z)$, кратный вектору a. Таким образом

$$t_x(m_z)=0,\quad \frac{a}{2},\quad a,\quad \frac{3a}{2},\quad \ldots$$

Полученная операция представляет плоскость скольжения.

8.1 На рисунке показаны возможные направления волновых векторов рассеянных волн.



a b

8.2 Если направления $[100]$, $[010]$ или $[001]$ параллельны направлениям пучка, лауэграммы имеют симметрию $2m$. Если плоскости (001), (010) или (100) параллельны первичному пучку (но оси 2 не параллельны), то – симметрию m. Во всех остальных случаях симметрию 1.

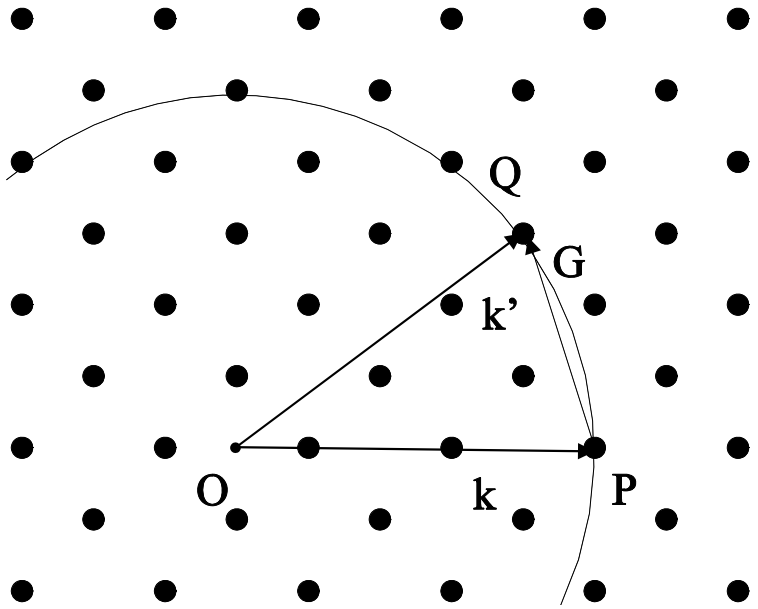
8.3 m, $2m$, $4m$.

8.4 Для кубических кристаллов межплоскостное расстояние рассчитывается по (). Учитывая формулу Вульфа-Брэгга, можно записать

$$\frac{\sin^2\theta_j}{\sin^2\theta_1}=\frac{h_j^2+k_j^2+l_j^2}{h_1^2+k_1^2+l_1^2}.$$

Этот ряд по данным задачи: 1,000; 1,333; 2,668; 3,666; 4,000; 5,333. Так как индексы интерференции и сумма их квадратов целые числа, то индексы первого отражения могут быть (111), тогда ряд индексов отражений: 111(3). 200(4). 220(8), 311(11), 222(12), 400(16) (в скобках записаны $h_j^2+k_j^2+l_j^2=3\sin^2\theta_j/\sin^2\theta_1$). Кристалл имеет кубическую решетку с параметром 0,6025 нм, ячейка Браве ГЦК.

8.5 Вольфрам имеет ОЦК решетку, обратной решеткой которой является ГЦК. Волновой вектор падающего луча, длина которого $|k|=\frac{2\pi}{\lambda}$ подводится к точке P. Начало вектора точка O является центром сферы Эвальда. Узлы обратной решетки, лежащие на поверхности сферы Эвальда, являются концами векторов рассеянного излучения. Соединяя точку O с точкой G, получим вектор, указывающий направление дифрагированного излучения.



8.6 Используя условия Лауэ для интерференции и что $\cos^2\varphi + \cos^2\psi + \cos^2\eta = 1$ для кубической решетки, решим систему уравнений.

$$\cos\varphi = -\frac{2kh\cos\psi_0 + \left(h^2 - k^2 - l^2\right)\cos\varphi_0 + 2lh\cos\eta_0}{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$\cos\psi = -\frac{2kh\cos\varphi_0 + \left(k^2 - h^2 - l^2\right)\cos\psi_0 + 2lk\cos\eta_0}{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$\cos\eta = -\frac{2lh\cos\varphi_0 + \left(l^2 - k^2 - h^2\right)\cos\eta_0 + 2lk\cos\psi_0}{h^2 + k^2 + l^2}$$

8.7 Индексы плоскостей зоны рассчитываются из условия зональности (). Направляющие косинусы, относительно кристаллографических осей – см. решение предыдущей задачи. Для расчета направляющих косинусов относительно пучка рентгеновских лучей необходимо перейти к новой системе координат посредством преобразования

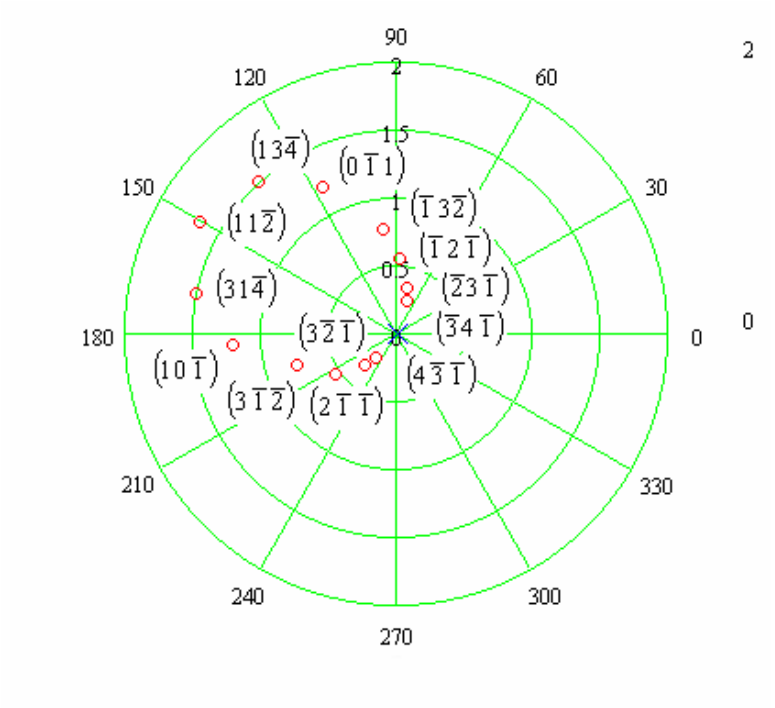
$$\begin{pmatrix} \cos\varphi' \\ \cos\psi' \\ \cos\eta' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -k_3\sin\varphi & k_2\sin\varphi \\ k_3\sin\varphi & \cos\varphi + k_2^2(1-\cos\varphi) & k_2k_3(1-\cos\varphi) \\ -k_2\sin\varphi & k_2k_3(1-\cos\varphi) & \cos\varphi + k_3^2(1-\cos\varphi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \cos\psi \\ \cos\eta \end{pmatrix}$$

Здесь $\vec{k} = \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{\cos\psi_0}{\sqrt{\cos^2\psi_0 + \cos^2\eta_0}} & \dfrac{\cos\eta_0}{\sqrt{\cos^2\psi_0 + \cos^2\eta_0}} \end{pmatrix}$ - вектор, определяющий ось вращения.

Координаты рефлекса по формулам:

$$\rho = tg\varphi'$$

$$\chi = arctg\left(\frac{\cos\eta'}{\cos\psi'}\right).$$



8.8

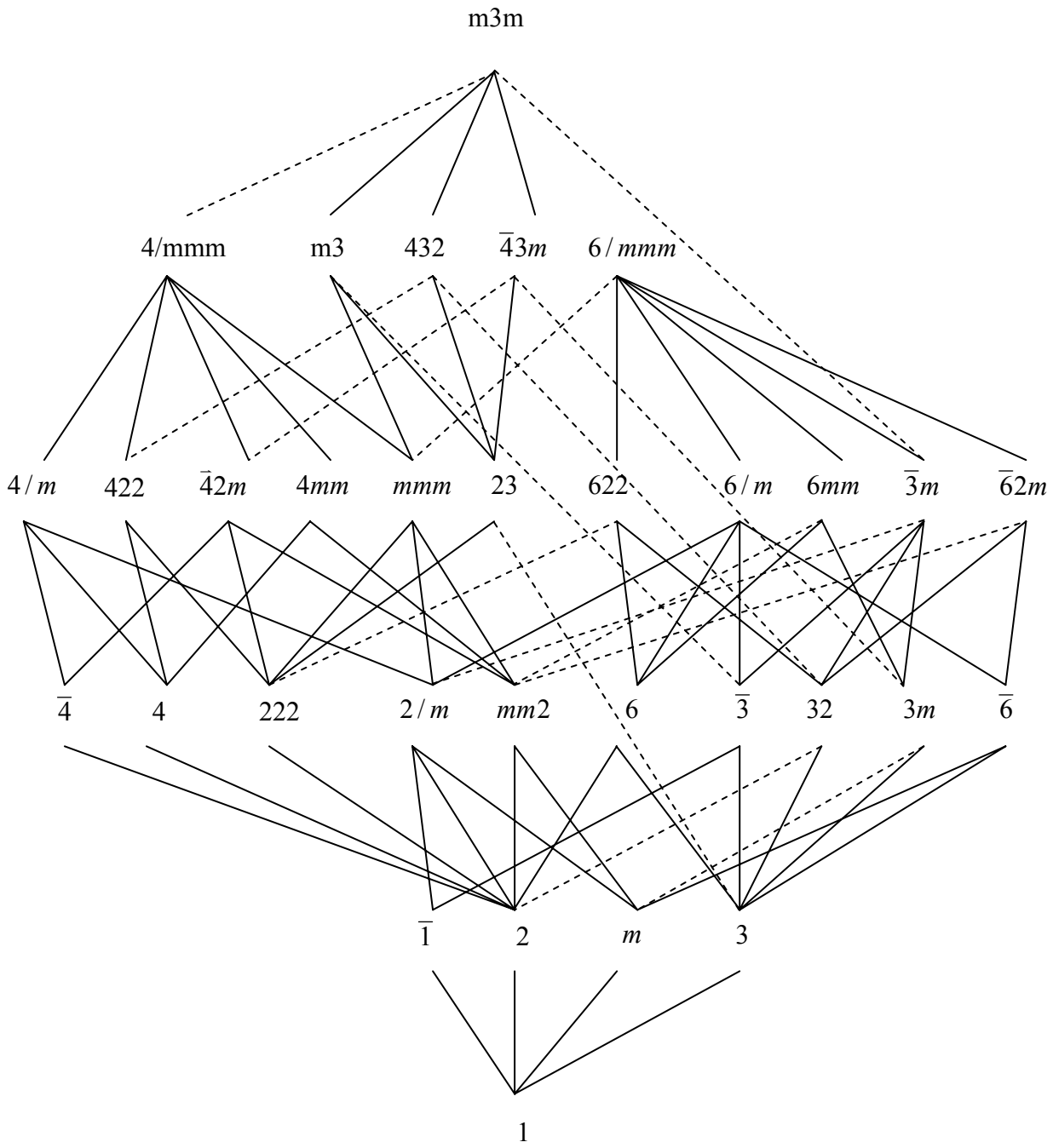
Индексы плоско-сти	100	110	111	200	210	220	221	310	311
$J(hkl)$	0	$2f$	0	$2f$	0	$2f$	0	0	$2f$

8.9 $\Delta p = 2h\dfrac{\sin\theta}{\lambda}$; $\Delta p_{\max} = 2h/\lambda$, $\Delta p = 9{,}466\cdot 10^{-24}\,кг\cdot м/с$; $\Delta p_{\max} = 18{,}931\cdot 10^{-24}\,кг\cdot м/с$.

8.10 Исходя из значений структурного фактора, определяются плоскости, от которых имеет место отражение лучей. Рассчитываются значения межплоскостных расстояний по формуле (). По формуле Вульфа-Брэгга рассчитываются углы дифракции.

Приложения

Приложение 1 Точечные группы и их подгруппы



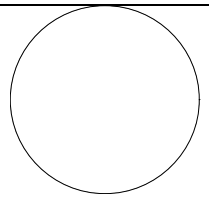
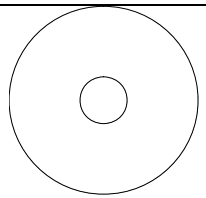
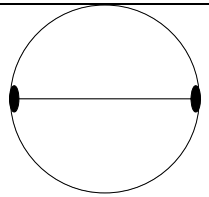
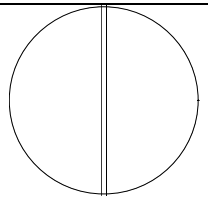
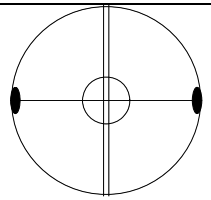
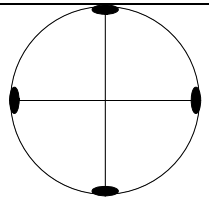
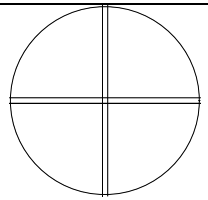
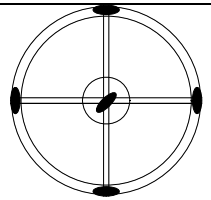
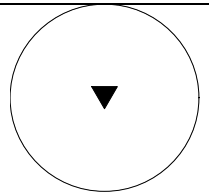
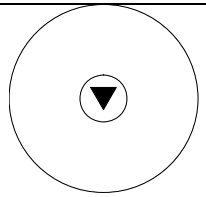
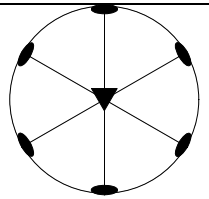
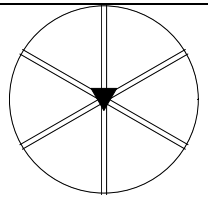
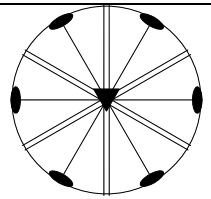
Точечные группы $m3m$, $6/mmm$ и их подгруппы. Сплошная линия обозначает, что соответствующая подгруппа является нормальным делителем.

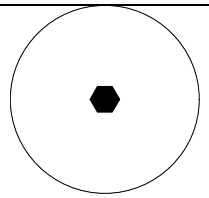
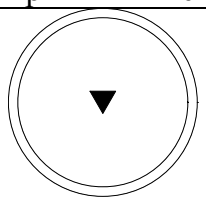
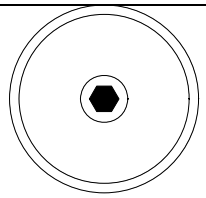
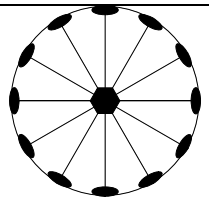
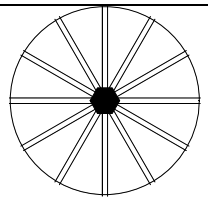
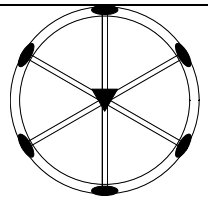
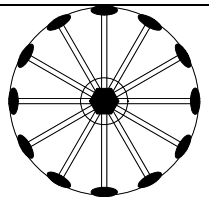
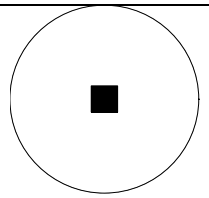
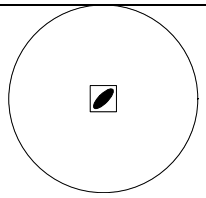
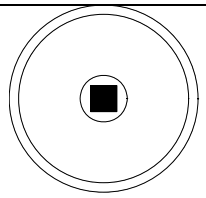
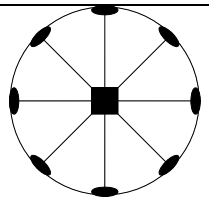
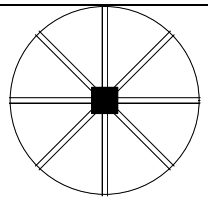
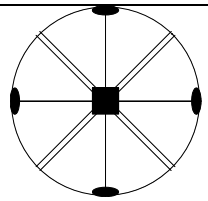
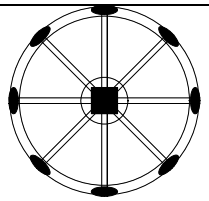
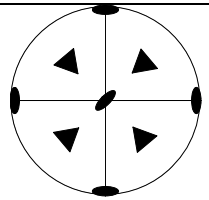
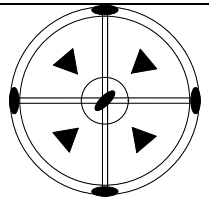
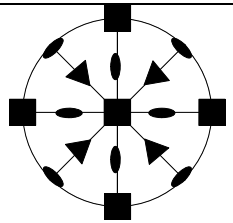
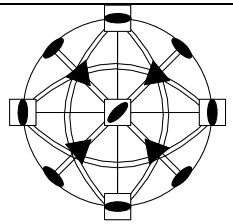
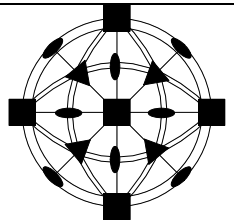
Приложение 2 Обозначения точечных групп симметрии

№ п/п	Международный Символ		Формула симметрии	Символ Шенфлиса	Порядок	Изоморфные группы
	сокращенный	полный				
1	1		L_1	C_1	1	Нет
2	$\bar{1}$		C	$C_i = S_2$	2	2, m
3	2		L_2	C_2	2	$\bar{1}$, m
4	m		P	$C_s = C_{1h}$	2	2, $\bar{1}$
5	$2/m$	$\frac{2}{m}$	L_2PC	C_{2h}	4	222, mm
6	222		$3L_2$	$D_2 = V$	4	mm, $2/m$
7	mm	$2mm$, $mm2$	$L_2 2P$	C_{2v}	4	222, $2/m$
8	mmm	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$3L_2 3PC$	$D_{2h} = V_h$	8	Нет
9	3		L_3	C_3	3	Нет
10	$\bar{3}$		$L_3C = L_{3i}$	$C_{3i} = S_6$	6	6, $\bar{6}$
11	32		$L_3 3L_2$	D_3	6	$3m$
12	$3m$		$L_3 3P$	C_{3v}	6	32
13	$\bar{3}m$	$\bar{3}\frac{2}{m}$	$L_3 3L_2 3PC$	D_{3d}	12	622, $6mm$, $\bar{6}m2$
14	6		L_6	C_6	6	$\bar{3}$, $\bar{6}$
15	$\bar{6}$		L_3P	C_{3h}	6	$\bar{3}$, 6
16	$6/m$	$\frac{6}{m}$	L_6PC	C_{6h}	12	Нет
17	622		$L_6 6L_2$	D_6	12	$\bar{3}m$, $6mm$, $\bar{6}m2$
18	$6mm$		$L_6 6P$	C_{6v}	6	$\bar{3}m$, 622, $\bar{6}m2$
19	$\bar{6}m2$		$L_3 3L_2 4P$	D_{3h}	12	$\bar{3}m$, 622, $6mm$
20	$6/mmm$	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$L_6 6L_2 7PC$	D_{6h}	24	Нет
21	4		L_4	C_4	4	$\bar{4}$
22	$\bar{4}$		$L_{\bar{4}}$, L_{4i}	$\bar{S}_4$	4	4
23	$4/m$	$\frac{4}{m}$	L_4PC	C_{4h}	8	Нет
24	422		$L_4 4L_2$	D_4	8	$4mm$, $\bar{4}2m$
25	$4mm$		$L_4 4P$	C_{4v}	8	422, $\bar{4}2m$
26	$\bar{4}2m$		$L_4 2L_2 2P$	D_{2d}	8	422, $4mm$
27	$4/mmm$	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$L_4 4L_2 5PC$	D_{4h}	16	Нет
28	23		$3L_2 4L_3$	T	12	Нет

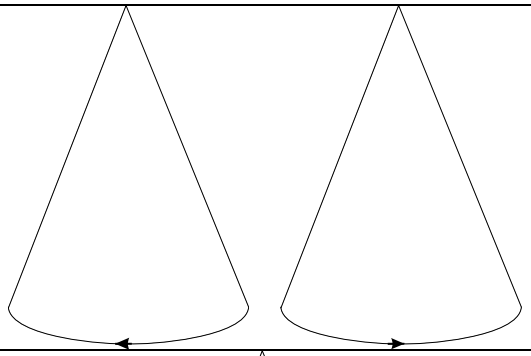
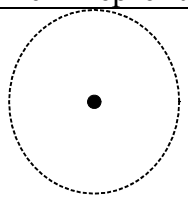
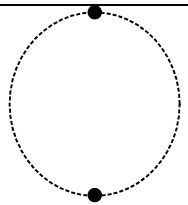
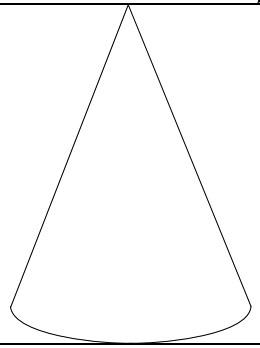
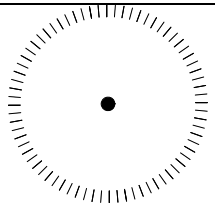
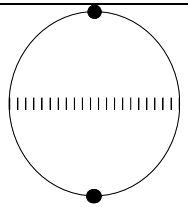
№ п/п	Международный Символ		Формула симметрии	Символ Шенфлиса	Порядок	Изоморфные группы
	сокращенный	полный				
29	$m3$	$\frac{2}{m}\bar{3}$	$3L_2 4L_3 3PC$	T_h	24	Нет
30	432		$3L_4 4L_3 6L_2$	O	24	$\bar{4}3m$
31	$\bar{4}3m$		$3L_4 4L_3 6P$	T_d	24	432
32	$m3m$	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$3L_4 4L_3 6L_2 9PC$	O_h	48	Нет

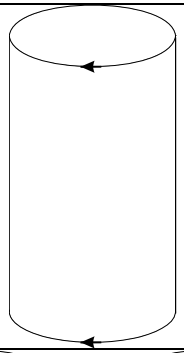
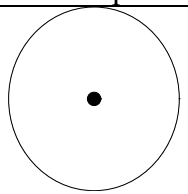
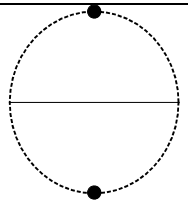
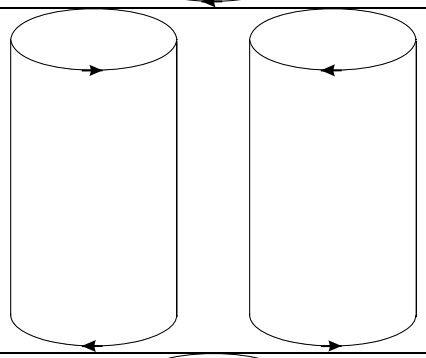
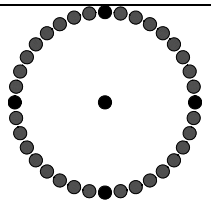
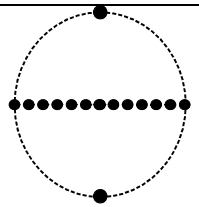
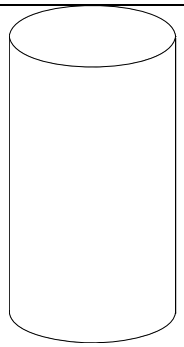
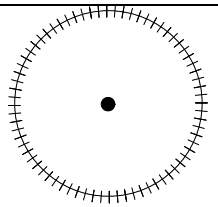
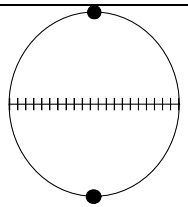
Приложение 3 Точечные группы симметрии.

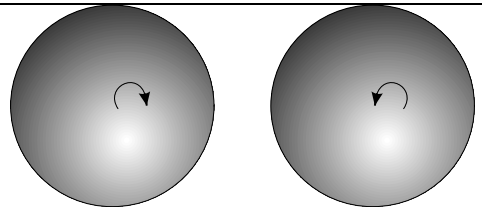
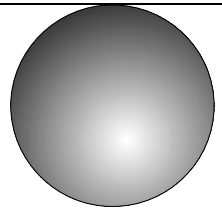
	Системы	Классы						
		Примитивные	Инверсионно-примитивные	Центральные	Аксиальные	Планальные	Инверсионно-планальные	Планаксиальные
Низшая категория	Триклинная	 1		 $\bar{1}$				
	Моноклинная				 2	 m		 $2/m$
	Ромбическая				 222	 mm		 mmm
Средняя категория	Тригональная	 3		 $\bar{3}$	 32	 $3m$		 $\bar{3}m$

	Системы	Классы						
		Примитивные	Инверсионно-примитивные	Центральные	Аксиальные	Планальные	Инверсионно-планальные	Планаксиальные
	Гексагональная	 6	 $\bar{6}$	 $6/m$	 622	 $6mm$	 $\bar{6}m2$	 $6/mmm$
	Тетрагональная	 4	 $\bar{4}$	 $4/m$	 422	 $4mm$	 $\bar{4}2m$	 $4/mmm$
Высшая катае-гория	Кубическая	 23		 $m3$	 432	 $\bar{4}3m$		 $m3m$

Приложение 4 Предельные группы.

Обозначение		Геометрическая фигура	Стереографическая проекция		Характеристика	Подчиненные группы
Международный символ	Символ Шенфлиса		Перпендикулярно плоскости чертежа	В плоскости чертежа		
∞	C_∞				Ось симметрии бесконечного порядка	6, 4, 3, 2, 1 и их подгруппы
∞m	$C_{\infty v}$				Ось симметрии бесконечного порядка и бесконечное число проходящих вдоль нее плоскостей	$6mm$, $4mm$, $3m$, $mm2$ и их подгруппы

Обозначение		Геометрическая фигура	Стереографическая проекция		Характеристика	Подчиненные группы
Международный символ	Символ Шенфлиса		Перпендикулярно плоскости чертежа	В плоскости чертежа		
∞ / m	$C_{\infty h}$				Ось симметрии бесконечного порядка и перпендикулярная к ней плоскость симметрии	$6/m$, $4/m$, $2/m$, m, $\bar{6}$, $\bar{4}$, $\bar{3}$, $\bar{1}$ и их подгруппы
$\infty 2$	D_{∞}				Ось симметрии бесконечного порядка и бесконечное число поперечных осей 2	622, 422, 32, 222, 6, 4, 3, 2, 1 и их подгруппы
∞ / mm	$D_{\infty h}$				Ось симметрии бесконечного порядка, бесконечное число продольных плоскостей и поперечная плоскость	$6/m$, $4/m$, $2/m$, m, 622, 422, 32, 222, 6, 4, 3, 2, 1 $6mm$, $4mm$, $3m$, $mm2$ и их подгруппы

Обозначение		Геометрическая фигура	Стереографическая проекция		Характеристика	Подчиненные группы
Международный символ	Символ Шенфлиса		Перпендикулярно плоскости чертежа	В плоскости чертежа		
$\infty\infty$	R				Вращающийся шар. Бесконечное число осей симметрии бесконечного порядка, нет плоскостей симметрии	432, 23 и их подгруппы
$\infty\infty / m$	R_i				Покоящийся шар. Бесконечное число осей и бесконечное число плоскостей симметрии	$\infty\infty$, ∞ / mm

Приложение 5 Пространственные группы симметрии.

Номер группы	Класс	Символ	Номер группы	Класс	Символ
Триклинная и моноклинная сингония					
1	C_1^1	$P1$	2	C_1^2	$P\overline{1}$
3	C_2^1	$P2$	4	C_2^2	$P2_1$
5	C_2^3	$B2$	6	C_s^1	Pm
7	C_s^2	Pb	8	C_s^1	Bm
9	C_s^2	Bb	10	C_{2h}^1	$P\frac{2}{m}$
11	C_{2h}^2	$P\frac{2_1}{m}$	12	C_{2h}^3	$B\frac{2}{m}$
13	C_{2h}^4	$P\frac{2}{b}$	14	C_{2h}^5	$P\frac{2_1}{b}$
15	C_{2h}^6	$B\frac{2}{b}$			
Ромбическая сингония					
16	D_2^1	$P222$	17	D_2^2	$P222_1$
17	D_2^3	$P2_12_12$	19	D_2^4	$P2_12_12_1$
20	D_2^5	$C222_1$	21	D_2^6	$C222$
22	D_2^7	$F222$	23	D_2^8	$I222$
24	D_2^9	$I2_12_12_1$	25	C_{2v}^1	$Pmm2$
26	C_{2v}^2	$Pmc2_1$	27	C_{2v}^3	$Pcc2$
28	C_{2v}^4	$Pma2$	29	C_{2v}^5	$Pca2_1$
30	C_{2v}^6	$Pnc2$	31	C_{2v}^7	$Pmn2_1$
32	C_{2v}^8	$Pba2$	33	C_{2v}^9	$Pna2_1$
34	C_{2v}^{10}	$Pnn2$	35	C_{2v}^{11}	$Cmm2$
36	C_{2v}^{12}	$Cmc2_1$	37	C_{2v}^{13}	$Ccc2$
38	C_{2v}^{14}	$Amm2$	39	C_{2v}^{15}	$Abm2$
40	C_{2v}^{16}	$Ama2$	41	C_{2v}^{17}	$Aba2$
42	C_{2v}^{18}	$Fmm2$	43	C_{2v}^{19}	$Fdd2$
44	C_{2v}^{20}	$\mathrm{Im}m2$	45	C_{2v}^{21}	$Iba2$
46	C_{2v}^{22}	$\mathrm{Im}a2$	47	D_{2h}^1	$Pmmm$
48	D_{2h}^2	$Pnnn$	49	D_{2h}^3	$Pccm$
50	D_{2h}^4	$Pban$	51	D_{2h}^5	$Pmma$
52	D_{2h}^6	$Pnna$	53	D_{2h}^7	$Pmna$
54	D_{2h}^8	$Pcca$	55	D_{2h}^9	$Pbam$
56	D_{2h}^{10}	$Pccn$	57	D_{2h}^{11}	$Pbcm$
58	D_{2h}^{12}	$Pnnm$	59	D_{2h}^{13}	$Pmmn$
60	D_{2h}^{14}	$Pbcm$	61	D_{2h}^{15}	$Pbca$

62	D_{2h}^{16}	$Pnma$	63	D_{2h}^{17}	$Cmcm$
64	D_{2h}^{18}	$Cmca$	65	D_{2h}^{19}	$Cmmm$
66	D_{2h}^{20}	$Cccm$	67	D_{2h}^{21}	$Cmma$
68	D_{2h}^{22}	$Ccca$	69	D_{2h}^{23}	$Fmmm$
70	D_{2h}^{24}	$Fddd$	71	D_{2h}^{25}	$\mathrm{Im}mm$
72	D_{2h}^{26}	$Ibam$	73	D_{2h}^{27}	$Ibca$
74	D_{2h}^{28}	$\mathrm{Im}ma$			
Тетрагональная сингония					
75	C_4^1	$P4$	76	C_4^2	$P4_1$
77	C_4^3	$P4_2$	78	C_4^1	$P4_3$
79	C_4^5	$I4$	80	C_4^6	$I4_1$
81	S_4^1	$P\bar{4}$	82	S_4^2	$I\bar{4}$
83	C_{4h}^1	$P\frac{4}{m}$	84	C_{4h}^2	$P\frac{4_2}{m}$
85	C_{4h}^3	$P\frac{4}{n}$	86	C_{4h}^4	$P\frac{4_2}{n}$
87	C_{4h}^5	$I\frac{4}{n}$	88	C_{4h}^6	$I\frac{4_1}{n}$
89	D_4^1	$P422$	90	D_4^2	$P42_12$
91	D_4^3	$P4_122$	92	D_4^4	$P4_12_12$
93	D_4^5	$P4_222$	94	D_4^6	$P4_22_12$
95	D_4^7	$P4_322$	96	D_4^8	$P4_32_12$
97	D_4^9	$I422$	98	D_4^{10}	$I4_122$
99	C_{4v}^1	$P4mm$	100	C_{4v}^2	$P4bm$
101	C_{4v}^3	$P4_2cm$	102	C_{4v}^4	$P4_2nm$
103	C_{4v}^5	$P4cc$	104	C_{4v}^6	$P4nc$
105	C_{4v}^7	$P4_2mc$	106	C_{4v}^8	$P4_2bc$
107	C_{4v}^9	$I4mm$	108	C_{4v}^{10}	$I4cm$
109	C_{4v}^{11}	$I4_1md$	110	C_{4v}^{12}	$I4_1cd$
111	D_{2d}^1	$P\bar{4}2m$	112	D_{2d}^2	$P\bar{4}2c$
113	D_{2d}^3	$P\bar{4}2_1m$	114	D_{2d}^4	$P\bar{4}2_1c$
115	D_{2d}^5	$P\bar{4}m2$	116	D_{2d}^6	$P\bar{4}c2$
117	D_{2d}^7	$P\bar{4}b2$	118	D_{2d}^8	$P\bar{4}n2$
119	D_{2d}^9	$I\bar{4}m2$	120	D_{2d}^{10}	$I\bar{4}c2$
121	D_{2d}^{11}	$I\bar{4}2m$	122	D_{2d}^{12}	$I\bar{4}2d$
123	D_{4h}^1	$P\frac{4}{m}mm$	124	D_{4h}^2	$P\frac{4}{m}cc$
125	D_{4h}^3	$P\frac{4}{n}bm$	126	D_{4h}^4	$P\frac{4}{n}nc$
127	D_{4h}^5	$P\frac{4}{m}bm$	128	D_{4h}^6	$P\frac{4}{m}nc$

129	D_{4h}^{7}	$P\frac{4}{n}mm$	130	D_{4h}^{8}	$P\frac{4}{n}cc$
131	D_{4h}^{9}	$P\frac{4_2}{m}mm$	132	D_{4h}^{10}	$P\frac{4_2}{m}cm$
133	D_{4h}^{11}	$P\frac{4_2}{n}bc$	134	D_{4h}^{12}	$P\frac{4_2}{n}nm$
135	D_{4h}^{13}	$P\frac{4_2}{m}bc$	136	D_{4h}^{14}	$P\frac{4_2}{m}nm$
137	D_{4h}^{15}	$P\frac{4_2}{n}mc$	138	D_{4h}^{16}	$P\frac{4_2}{n}cm$
139	D_{4h}^{17}	$I\frac{4_2}{m}mm$	140	D_{4h}^{18}	$I\frac{4}{m}cm$
141	D_{4h}^{19}	$I\frac{4_1}{a}md$	142	D_{4h}^{20}	$P\frac{4_1}{a}cd$
Гексагональная сингония					
143	C_{3}^{1}	$P3$	144	C_{3}^{2}	$P3_1$
145	C_{3}^{3}	$P3_2$	146	C_{3}^{4}	$R3$
147	C_{3i}^{1}	$P\bar{3}$	148	C_{3i}^{2}	$R\bar{3}$
149	D_{3}^{1}	$P312$	150	D_{3}^{2}	$P321$
151	D_{3}^{3}	$P3_112$	152	D_{3}^{4}	$P3_121$
153	D_{3}^{5}	$P3_212$	154	D_{3}^{6}	$P3_221$
155	D_{3}^{7}	$R32$	156	C_{3v}^{1}	$P3m1$
157	C_{3v}^{2}	$P31m$	158	C_{3v}^{3}	$P3c1$
159	C_{3v}^{4}	$P31c$	160	C_{3v}^{5}	$R3m$
161	C_{3v}^{6}	$R3c$	162	D_{3d}^{1}	$P\bar{3}1m$
163	D_{3d}^{2}	$P\bar{3}1c$	164	D_{3d}^{3}	$P\bar{3}m1$
165	D_{3d}^{4}	$P\bar{3}c1$	166	D_{3d}^{5}	$R\bar{3}m$
167	D_{3d}^{6}	$R\bar{3}c$	168	C_{6}^{1}	$P6$
169	C_{6}^{2}	$P6_1$	170	C_{6}^{3}	$P6_5$
171	C_{6}^{4}	$P6_2$	172	C_{6}^{5}	$P6_4$
173	C_{6}^{6}	$P6_3$	174	C_{3h}^{1}	$P\bar{6}$
175	C_{6h}^{1}	$P\frac{6}{m}$	176	C_{6h}^{2}	$P\frac{6_3}{m}$
177	D_{6}^{1}	$P622$	178	D_{6}^{2}	$P6_122$
179	D_{6}^{3}	$P6_522$	180	D_{6}^{4}	$P6_222$
181	D_{6}^{5}	$P6_422$	182	D_{6}^{6}	$P6_322$
183	C_{6v}^{1}	$P6mm$	184	C_{6v}^{2}	$P6cc$
185	C_{6v}^{3}	$P6_3cm$	186	C_{6v}^{4}	$P6_3mc$
187	D_{3h}^{1}	$P\bar{6}m2$	188	D_{3h}^{2}	$P\bar{6}c2$
189	D_{3h}^{3}	$P\bar{6}2m$	190	D_{3h}^{4}	$P\bar{6}2c$
191	D_{6h}^{1}	$P\frac{6}{m}mm$	192	D_{6h}^{2}	$P\frac{6}{m}cc$

193	D_{6h}^{3}	$P\frac{6}{m}cm$	194	D_{6h}^{4}	$P\frac{6}{m}mc$
Кубическая сингония					
195	T^{1}	$P23$	196	T^{2}	$F23$
197	T^{3}	$I23$	198	T^{4}	$P2_{1}3$
199	T^{5}	$I2_{1}3$	200	T_{h}^{1}	$Pm\overline{3}$
201	T_{h}^{2}	$Pn\overline{3}$	202	T_{h}^{3}	$Fm\overline{3}$
203	T_{h}^{4}	$Fd\overline{3}$	204	T_{h}^{5}	$\mathrm{Im}\overline{3}$
205	T_{h}^{6}	$Pa\overline{3}$	206	T_{h}^{7}	$Ia\overline{3}$
207	O^{1}	$P432$	208	O^{1}	$P4_{2}32$
209	O^{3}	$F432$	210	O^{4}	$F4_{1}32$
211	O^{5}	$I432$	212	O^{6}	$P4_{3}32$
213	O^{7}	$P4_{1}32$	214	O^{8}	$I4_{1}32$
215	T_{d}^{1}	$P\overline{4}3m$	216	T_{d}^{2}	$F\overline{4}3m$
217	T_{d}^{3}	$I\overline{4}3m$	218	T_{d}^{4}	$P\overline{4}3n$
219	T_{d}^{5}	$F\overline{4}3c$	220	T_{d}^{6}	$I\overline{4}3d$
221	O_{h}^{1}	$Pm3m$	222	O_{h}^{2}	$Pn3n$
223	O_{h}^{3}	$Pm3n$	224	O_{h}^{4}	$Pn3m$
225	O_{h}^{5}	$Fm3m$	226	O_{h}^{6}	$Fm3c$
227	O_{h}^{7}	$Fd3m$	228	O_{h}^{8}	$Fd3c$
229	O_{h}^{9}	$\mathrm{Im}3m$	230	O_{h}^{10}	$Ia3d$

Литература

1. Чупрунов Е.В., Хохлов А.В., Фадеев М.А. Кристаллография. М., Издательство физико математической литературы, 2000. 496 с.
2. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М., Наука, 1975, 680 с.
3. Бублик В.Т., Дубровина А.Н. Сборник задач и упражнений по курсу «Методы исследования структуры». М., Высшая школа, 1988, 192 с.
4. Переломова Н.В., Тагиева М.М. Задачник по кристаллофизике. М., Наука, 1972, 192 с.
5. Лиопо В.А. Сборник задач по кристаллографии. Гродно, ГрГУ, 2000, 69 с.
6. Геометрическая кристаллография: Методические указания к лабораторным работам по дисциплине «Кристаллография» для студентов специальностей 080600 и 080100 / Санкт-Петербургский горный институт; Составители: А.И.Глазов, М.В.Морозов. СПб, 2000. 41 с