

Министерство образования Российской Федерации

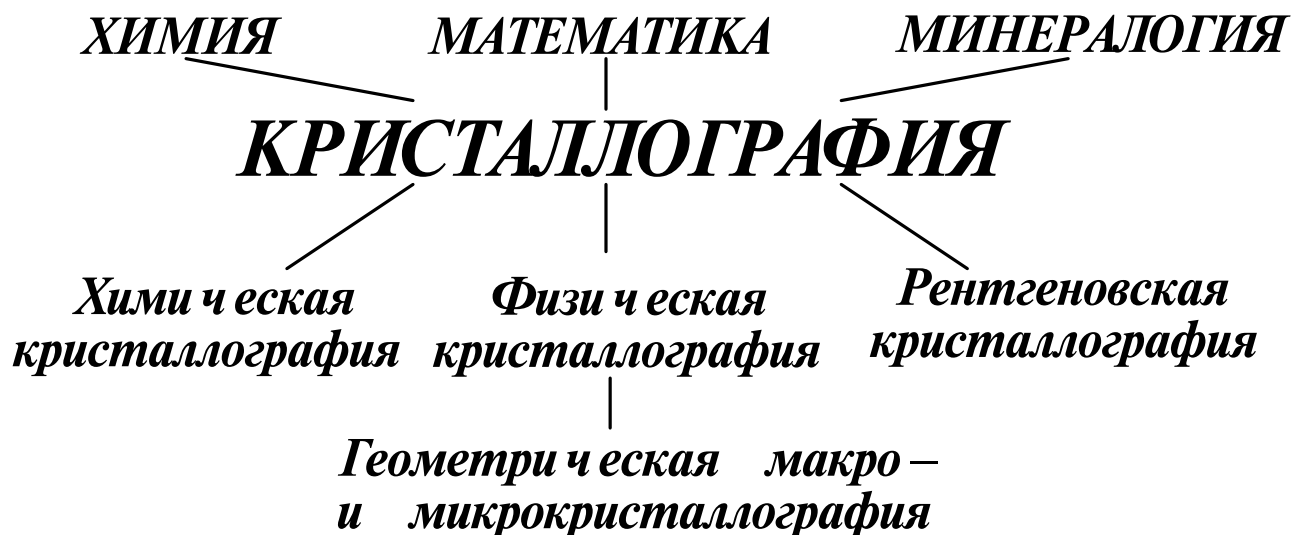
Московская государственная академия
тонкой химической технологии
им. М. В. Ломоносова

Кафедра физики и химии твердого тела

Г. М. Кузьмичева

ОСНОВНЫЕ РАЗДЕЛЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Учебное пособие



Москва, 2002 г

УДК 548.5

ББК

“Основные разделы кристаллографии”: учебное пособие /
Кузьмичева Г.М. – М.: МИТХТ, 2002. – 80 с.

В учебном пособии рассмотрены основы геометрической кристаллографии: формы и строение кристаллов, учение о симметрии.

Учебное пособие предназначено для занятий студентов по курсу “Кристаллография”, “Кристаллохимия современных материалов”, выполнения бакалаврских и магистерских работ.

Рецензент: доц., к.х.н. Сафонов В.В. (МИТХТ им. М.В.Ломоносова)

УДК 548.5

Утверждено Библиотечно-издательской комиссией
МИТХТ в качестве учебно-методического пособия.

© МИТХТ им. М.В. Ломоносова, 2002

ОГЛАВЛЕНИЕ

Глава 1

ПРЕДМЕТ “КРИСТАЛЛОГРАФИЯ”	5
---------------------------------	---

Глава 2

КРИСТАЛЛ И ЕГО СВОЙСТВА	5
-------------------------------	---

Глава 3

ПРОЕКТИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ	9
---------------------------------	---

3.1. Сферическая проекция	10
3.2. Стереографическая проекция	11
3.2.1. Свойства стереографической проекции.	12
3.3. Гномостереографическая проекция	13
Свойства гномостереографической проекции.	14
3.4. Гномоническая проекция.....	14
3.5. Сетка Ю.В. Вульфа и решение задач с помощью сетки Вульфа	16

Глава 4

СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ	20
----------------------------	----

4.1. Закрытые элементы симметрии	20
4.1.1. Элементы симметрии I рода.....	20
4.1.2. Элементы симметрии II рода	22
4.1.3. Сложные оси симметрии.....	23
4.2. Основные теоремы взаимодействия элементов симметрии ...	25
4.3. Операции симметрии	27
4.4. Точечные группы симметрии.....	28
4.4.1. Обозначение Бравэ.	28
4.4.2. Обозначение Шенфлиса.....	29
4.3.3. Обозначение Германа-Могена (международная символика)	29
4.4.4. Координатные системы в кристаллографии. Категории и сингонии кристаллов. Установка кристаллов.	30
4.5. Групповые аксиомы	34
4.5.1. Таблица Кейли	35
4.5.2. Групповые свойства	37

Глава 5

МЕТОД КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО ИНДИЦИРОВАНИЯ ... 38

5.1. Индексы и символы	38
5.1.1. Символ узла.	38
5.1.2. Символ рядов (ребер)	39
5.1.3. Символы плоскостей (граней) Параметры Вейса. Символы Миллера.	39
5.1.4. Четырехиндексные оси гексагональной сингонии (тригональная и гексагональная подсистемы). Символы Бравэ.....	41
5.1.5. Символы ребер гексагональных кристаллов.	43
5.2. Закон целых чисел, или закон рациональности отношений параметров (закон Гаюи - 1783 г)	44
5.3. Единичная грань	46
5.3.1. Единичная грань в кристаллах разных сингоний.	47
5.4. Метод косинусов Вульфа.	51
5.5. Закон зон (закон Вейса).....	53

Глава 6

ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ

И КОМБИНАЦИИ ПРОСТЫХ ФОРМ 56

6.1. Простые формы в классах с единичным направлением	57
6.2. Простые формы в классах без единичных направлений.....	64

Глава 7

СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ 67

7.1. Пространственная решетка. Ячейки Бравэ	68
7.1.1. Двумерные ячейки Бравэ	69
7.1.2. Трехмерные ячейки Бравэ	71
7.2. Открытые элементы симметрии.....	74
7.2.1. Винтовые оси	74
7.2.2. Плоскости скольжения, или плоскости скользящего отражения.....	78
7.3. Основные теоремы взаимодействия закрытых и открытых элементов симметрии с трансляциями.....	81
7.4. Пространственные (федоровские) группы симметрии.	83
7.5. Классный вывод пространственных групп симметрии (по Н. В. Белову)	85
7.6. Построение графиков пространственных групп.....	87
8. Основная литература	94

Глава 1

ПРЕДМЕТ “КРИСТАЛЛОГРАФИЯ”

В природе существует два предельных состояния дискретной материи - *хаос и идеальный кристалл*. Все остальные состояния - промежуточные между этими двумя. Поскольку абсолютный хаос описать невозможно, то отправным пунктом строгих теорий может быть только *идеальный кристалл*. *Идеальный кристалл* – твердое тело, в котором составляющие его основу структурные единицы (атомы, ионы, молекулы и пр.) расположены строго периодически, образуя геометрически закономерную кристаллическую структуру.

Кристаллография - фундаментальная наука об атомном строении, образовании и физических свойствах кристаллов. Эти три аспекта рассматриваются вместе как единая комплексная проблема. Кристаллографию делят на *геометрическую кристаллографию*, которая изучает внешнее и внутреннее строение кристаллов, *химическую кристаллографию* (*кристаллохимию*, или *структурную химию*) и *физическую кристаллографию* (*кристаллофизику*). Последние два раздела могут изучаться независимо друг от друга, но оба они базируются на первом, без знания которого невозможно их рациональное изложение.

Кроме того, в *задачи* кристаллографии входит всестороннее исследование свойств кристаллического вещества, три из которых наиболее важные:

1. описание и классификация кристаллов.
2. определение вещества по формам (внешней огранке) кристаллов.
3. изучение строения вещества.

Глава 2

КРИСТАЛЛ И ЕГО СВОЙСТВА

В огранке любого кристалла можно выделить грани, ребра и вершины: грани кристалла пересекаются по ребрам, последние же сходятся в вершинах. Между ними устанавливается следующая зависимость (*формула Эйлера-Декарта*)

$$\text{Грани} + \text{Вершины} - \text{Ребра} = 2$$

Среди основных *свойств кристаллов* можно выделить три:

1. *прямолинейность и плоскогранность*;
2. *анизотропия* (неодинаковые свойства в разных направлениях, но равные в симметрично-эквивалентных направлениях);
3. *однородность* (равные свойства в параллельных направлениях, так как все параллельные направления равноценны).

Кристаллы вырастают в форме многогранников из-за *анизотропии* скоростей роста. Способность кристалла образовывать *прямые ребра и плоские грани* определяется его внутренним строением: любой одномерный ряд в структуре

соответствует возможному ребру кристалла, любая плоскость — возможной грани кристалла.

Одномерный ряд представляет собой одномерную решетку, бесконечную в одном измерении и характеризующуюся одной трансляцией $\mathbf{a}$ (рис. 1). Кратчайшей, или элементарной трансляцией, или периодом идентичности, или параметром ряда называется кратчайшее из возможных расстояний между одинаковыми точками в ряду (точки — материальные частицы: атомы, молекулы, группы атомов и т. д.).



Рис. 1. Одномерный ряд

Двумерная решетка построена на двух трансляциях $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ с углом γ между ними. В общем случае $\mathbf{a} \neq \mathbf{b}$, $\gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$ (рис. 2).

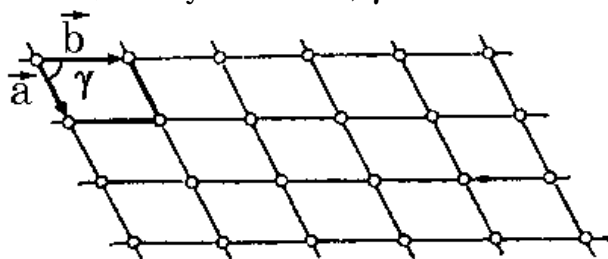


Рис. 2. Двумерная решетка.

Параллелепипед, построенный на трех элементарных трансляциях $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ с углами между ними α (угол между $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$), β (угол между $\mathbf{a}$ и $\mathbf{c}$), γ (угол между $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$) называется элементарной ячейкой (рис. 3).

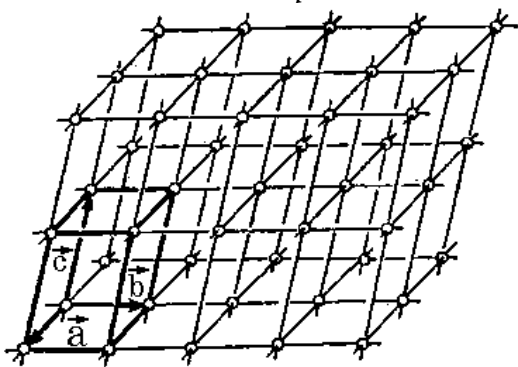


Рис. 3. Трехмерная решетка

Пространственную решетку можно представить как систему параллельных элементарных ячеек, которые касаются друг друга целыми гранями и заполняют пространство без промежутков.

Пространственную решетку можно определить тремя способами:

- как тройку элементарных некопланарных трансляций;
- как систему эквивалентных точек, преобразующихся друг в друга с помощью трех основных трансляций;
- как систему одинаковых параллелепипедов, которые плотно заполняют пространство и могут совмещаться друг с другом с помощью трех основных трансляций.

Любое из этих трех определений дает одну и ту же схему трехмерной периодичности распределения частиц в кристалле.

Итак, *пространственная решетка* это математический образ, геометрическое построение, с помощью которого в кристаллическом пространстве выявляются одинаковые точки.

Согласно **закону постоянства углов (Н. Стенон 1669 г)**, при постоянных физико-химических условиях (т.е. при постоянных температуре и давлении) углы между однотипными парами граней данного кристалла постоянны.

Другими словами, грани нарастают параллельно самим себе, меняются площади граней, их форма, какие-то грани могут вытесняться соседними и зарастать, но взаимный наклон грани остается неизменным и углы между гранями тоже остаются постоянными (**рис. 4**).

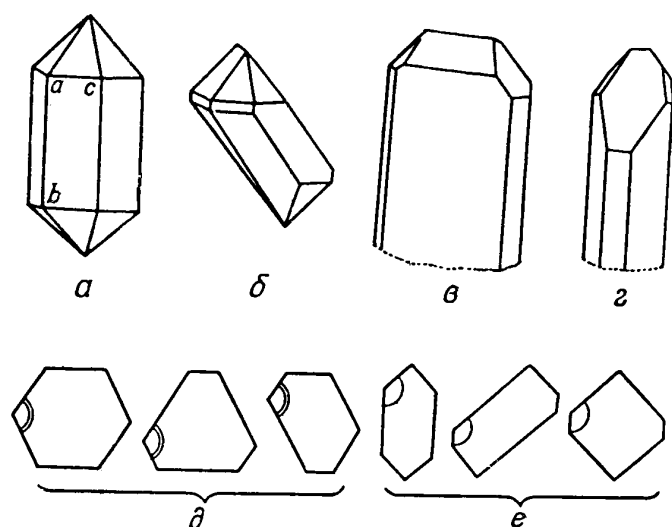


Рис. 4. Кристаллы кварца и их сечения

а - идеально развитый кристалл;

б-г – искаженные кристаллы;

д – сечения, перпендикулярные ребру ab;

е – сечения, перпендикулярные ребру ac.

Раздел кристаллографии, занимающийся измерением углов между гранями, называется *гониометрией*. Измерения углов кристалла осуществляются с помощью *гониометров* (прикладных и отражательных).

Прикладные гониометры

Прикладные гониометры (**рис. 5**) применяются обычно для измерения кристаллов с размерами более 0.5 см, особенно таких, грани которых неровные или матовые. Точность измерения достигает 0.5° .

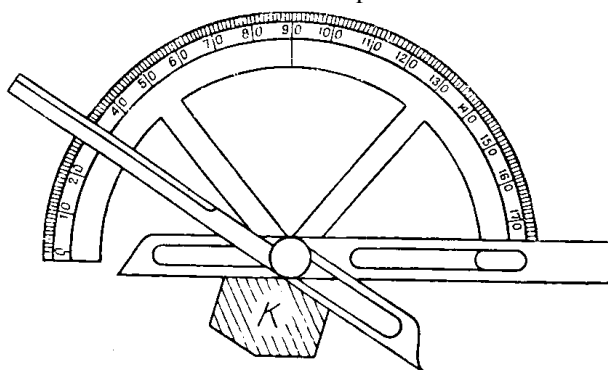


Рис. 5. Прикладной гониометр

Отражательные гониометры

Для изучения мелких кристаллов с блестящими гранями и вообще для более точных измерений применяются отражательные гониометры.

На **рис. 6** представлена схема устройства однокружного отражательного гониометра.

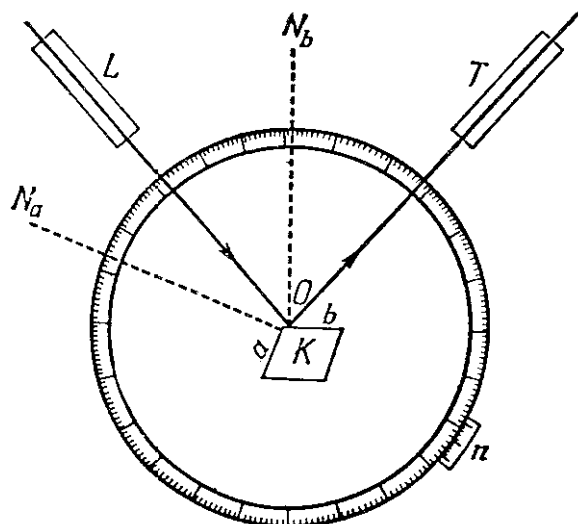


Рис. 6. Схема устройства однокружного отражательного гониометра.

Узкий пучок лучей из коллиматора **L** падает на грань **b** кристалла, отразившись от которой попадает в зрительную трубу **T**. Отражение светового пучка можно получить в зрительной трубе лишь в том случае, когда углы **LON_b** и **TON_b** будут равны. В результате измерений непосредственно

устанавливают значения углов между нормальми к соответствующим граням кристалла. Они позволяют производить отсчеты с точностью до 1 или 0.5', а в некоторых случаях даже до нескольких секунд.

Двукружный отражательный гониометр (**рис. 7**) представляет собой комбинацию однокружных гониометров с вертикальным и горизонтальным кругами.

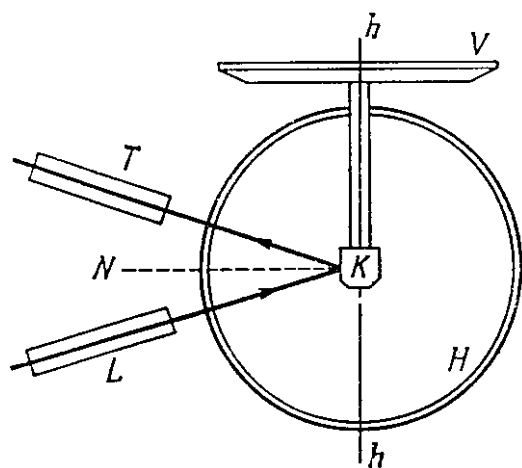


Рис. 7. Схема устройства двукружного отражательного гониометра

В двукружном гониометре каждая нормаль определяется в пространстве координатами ρ и ϕ , которые отсчитывают по горизонтальному и вертикальному кругам. По горизонтальному кругу гониометра **H** отсчитываются углы между нормальми к граням кристаллов и осью вращения **hh**, а по вертикальному кругу **V** - углы между плоскостями, проходящими через **hh**, и соответствующие нормали. Следовательно, для каждой нормали **N** к грани определяются два угла: угол ρ - угол между **N** и осью **hh** и угол ϕ - двугранный угол, образованный плоскостью, в которой лежат **n** и **hh**, и некоторой другой плоскостью, проходящей через **hh**.

Такие гониометры ускоряют и упрощают процесс измерения углов кристалла, хотя точность несколько уменьшается по сравнению с некоторыми однокружными гониометрами (до 1').

ГЛАВА 3

ПРОЕКТИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ

Кроме измерения углов кристалла, одной из существенных задач является его изображение. В кристаллографии для этого пользуются обычно двумя методами: *образным, или перспективным* (ортогональные и аксонометрические проекции) (**рис. 8**) и *графическим* (графические проекции). В последнем случае кристалл может проектироваться на поверхность сферы (*сферическая проекция*), экваториальную плоскость сферы (*стереографическая и гномостереографическая проекции*) и плоскость, касательную к северному (верхнему) полюсу сферы (*гномоническая проекция*).

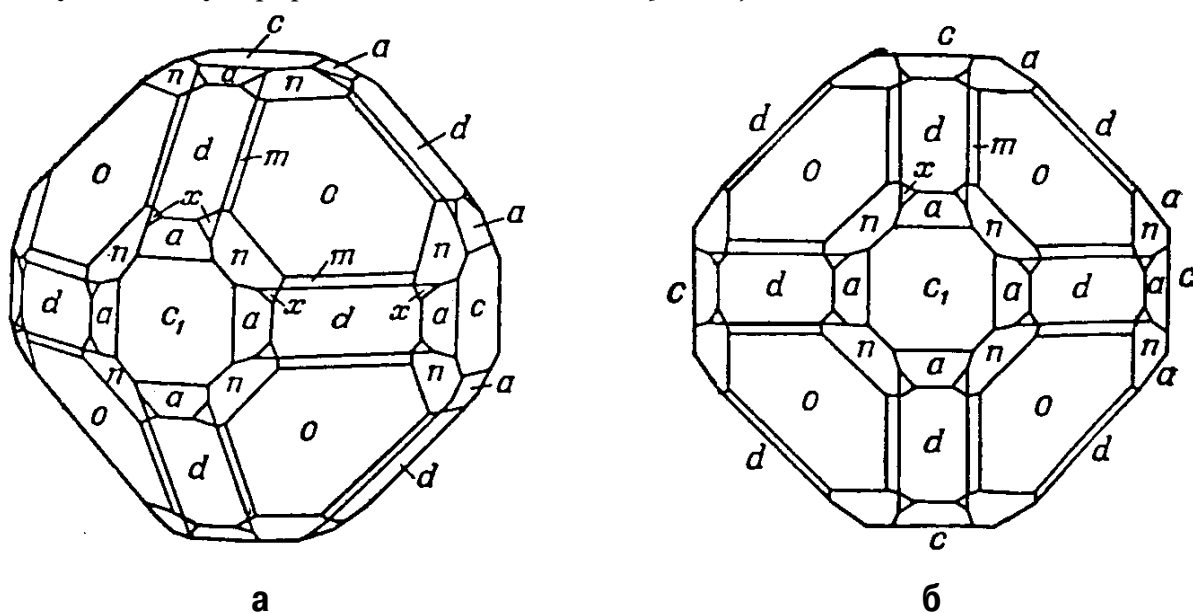


Рис. 8. Проекция кристалла флюорита - CaF_2 :

а – аксонометрическая проекция;

б – ортогональная проекция.

Образное проектирование не выявляет в достаточной степени действительные величины углов между гранями, что позволяют сделать графические проекции. При этом кристалл может быть представлен или в виде *прямого (кристаллического) комплекса* (**рис. 9а**), или в виде *обратного (полярного) комплекса* (**рис. 9б**). В последнем случае каждая грань кристалла заменяется на нормаль к ней, которая и проектируется (**рис. 9в**).

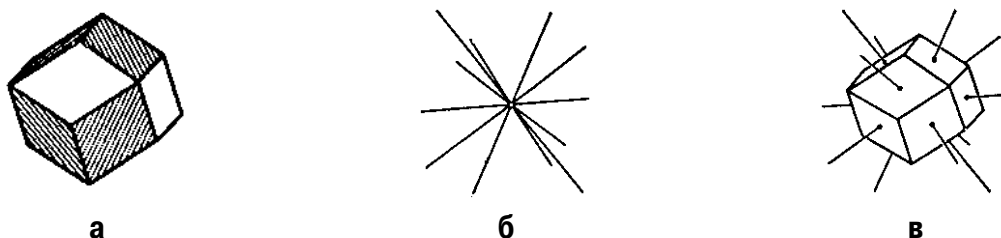


Рис. 9. Кристаллический многогранник:

а – прямой (кристаллический) комплекс;

б – обратный (полярный) комплекс; **в** – нормали к его граням

3.1. Сферическая проекция

Из точки пересечения прямых, перпендикулярных граням, опишем сферу. Пересечение нормалей к граням кристалла с поверхностью сферы представляет собой *сферическую проекцию* нормалей к граням кристалла. Каждая нормаль проектируется на поверхность сферы проекций в виде точки. Каждой из точек проекции отвечает одна из граней кристалла (**рис. 10**).

Сферическую проекцию кристалла можно строить без замены грани кристалла их нормалью. В этом случае все грани кристалла путем параллельного переноса перемещают в центр сферы проекций и строят следы пересечения этих граней со сферой проекций (**рис. 10**).

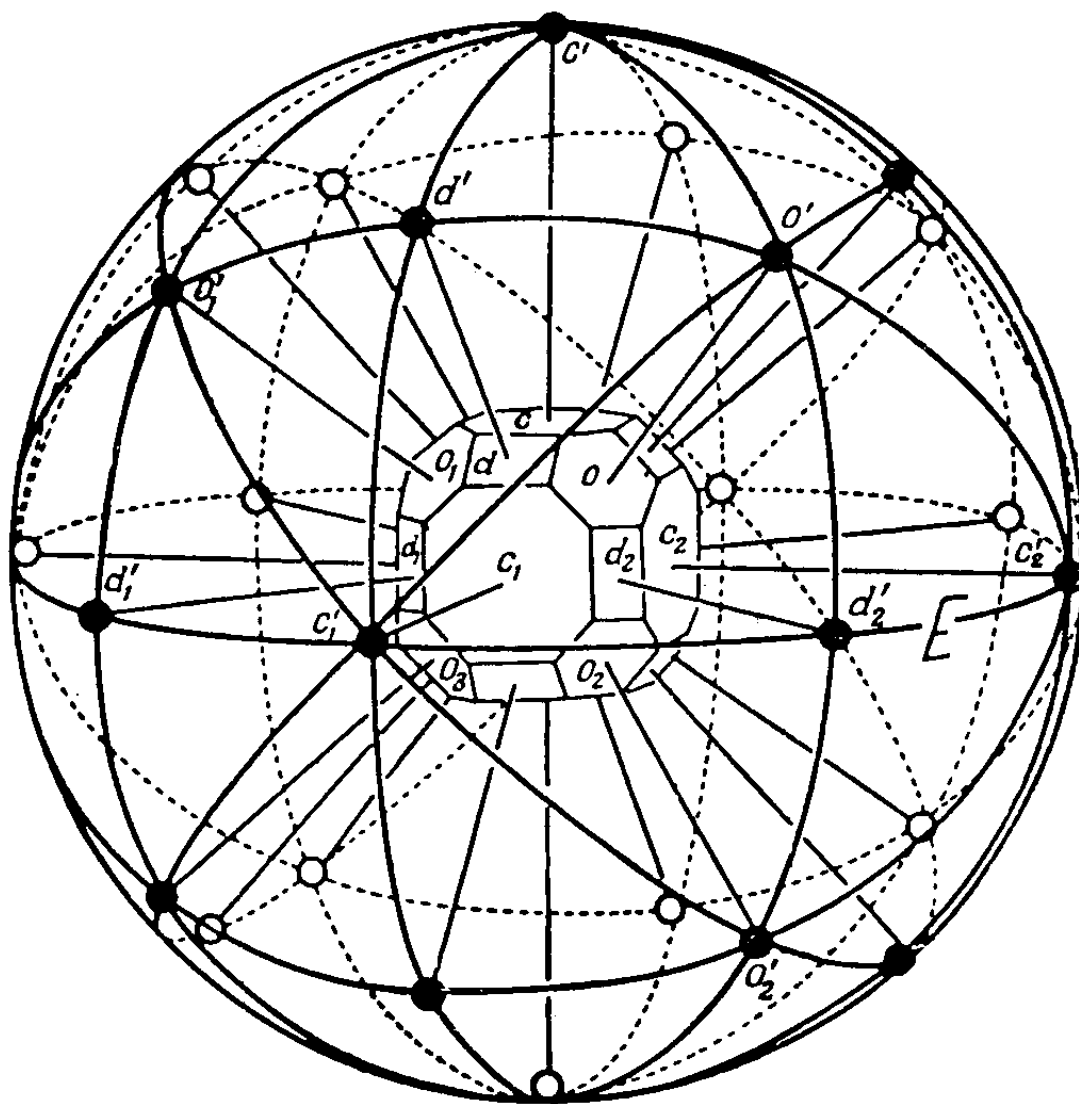


Рис. 10. Сферическая проекция кристалла

Положение любой точки на поверхности сферы можно охарактеризовать двумя сферическими координатами ρ (долгота) и φ (широта) (**рис. 11**)

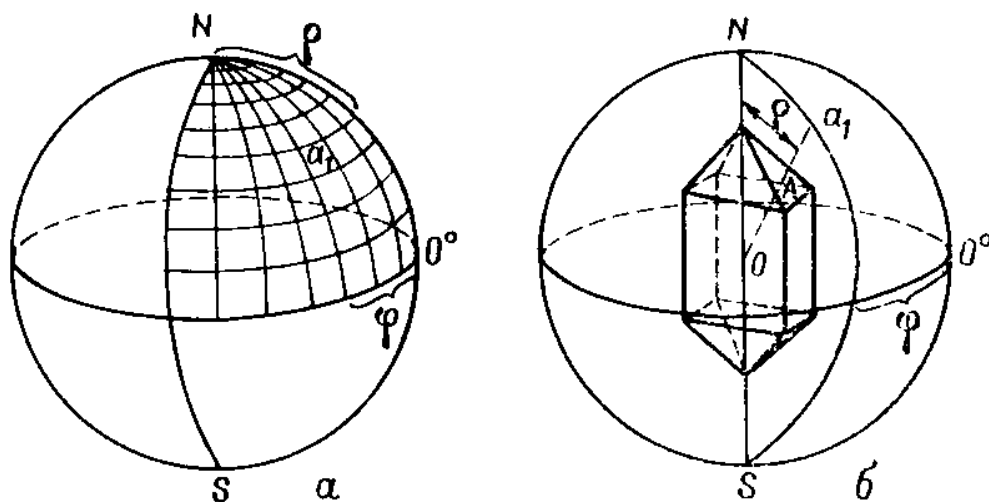


Рис. 11. Изображение грани a со сферическими координатами ρ и φ .

Сферическая проекция кристалла наглядна, но для практического применения ее удобнее спроектировать на плоскость. Для этого пользуются *стереографическими, гномографическими и гномоническими проекциями*.

3.2. Стереографическая проекция

За плоскость стереографической проекции выбирается экваториальная плоскость - P , на которую сфера проектируется в виде круга проекций (**рис. 12**).

Чтобы спроектировать точку a , находящуюся внутри сферы с определенным радиусом, на поверхность сферы, проводим из центра O через точку a прямую до пересечения со сферой; полученная при этом точка a' - сферическая проекция точки a . Соединяя точку a' с южным (нижним) полюсом S , получим на плоскости P точку a_1 - стереографическую проекцию точки a (**рис. 12**).

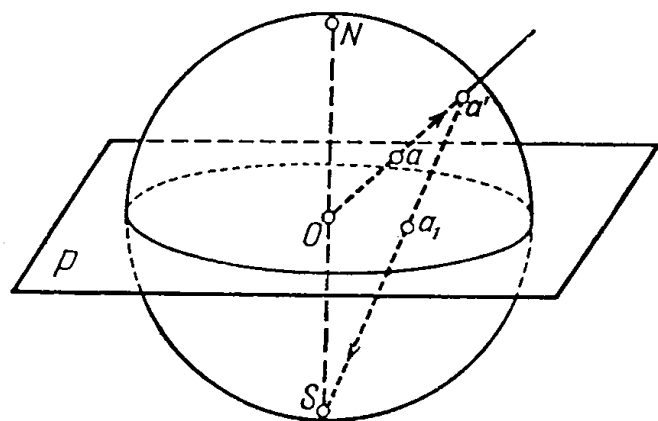


Рис. 12. Стереографическая проекция точки

При проектировании прямой линии (направления) AB (**рис. 13**), проходящую через центр сферы и пересекающую ее поверхность в точках m и n , сначала находят проекции m' и n' этих точек на экваториальную плоскость P , используя южный (нижний) и северный (верхний) полюсы сферы соответственно. Затем соединяют точки m' и n' и получают проекцию прямой mn . Так как прямая AB проходит через верхнюю (BO) и нижнюю (OA) половины сферы, отрезок ее проекции $m'O$ изображается сплошной линией, а On' - пунктирной. Точка O является общей точкой для стереографической проекции и для проектируемой прямой и расположена в экваториальной плоскости (**рис. 13**).

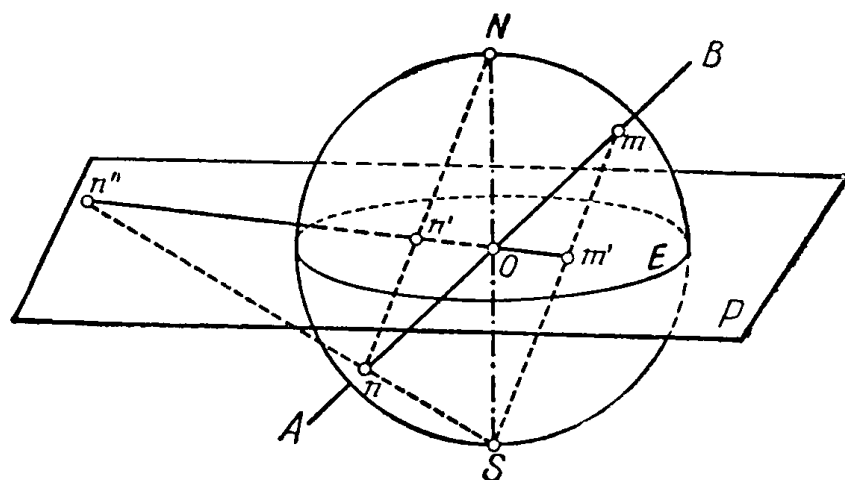


Рис. 13. Стереографическая проекция прямой.

Стереографические проекция плоскостей изображаются дугами внутри круга проекций (рис. 14).

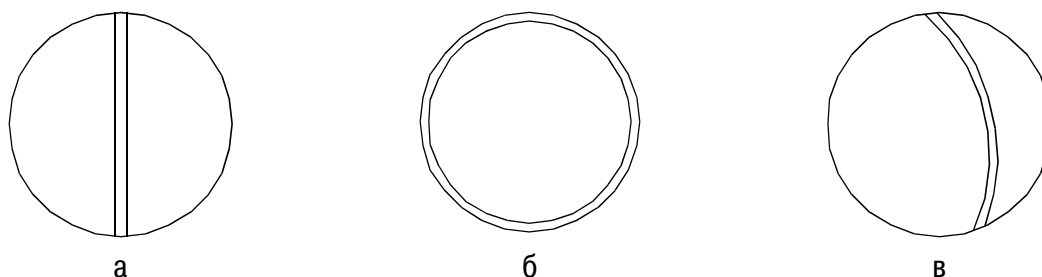


Рис. 14. Стереографические проекции плоскостей, расположенных перпендикулярно плоскости проекций (вертикальная плоскость) (а), в плоскости проекции (горизонтальная плоскость) (б), под косым углом к плоскости проекции (наклонная плоскость) (в).

3.2.1. Свойства стереографической проекции.

1. Любая окружность, проведенная на сфере, изображается на стереографической проекции также окружностью (в частном случае прямой линией).

2. На стереографической проекции не искажаются угловые соотношения: угол между нормальными к граням (полюсами граней) на сфере (измеренный по дугам больших кругов) равен углу между стереографическими проекциями тех же дуг.

3. При повороте сферы вокруг диаметра, проходящего через полюс, на плоскости происходит поворот вокруг точки ее касания со сферой на тот же угол.

Стереографические проекции применяются главным образом для изображения элементов симметрии кристаллов (рис. 15).

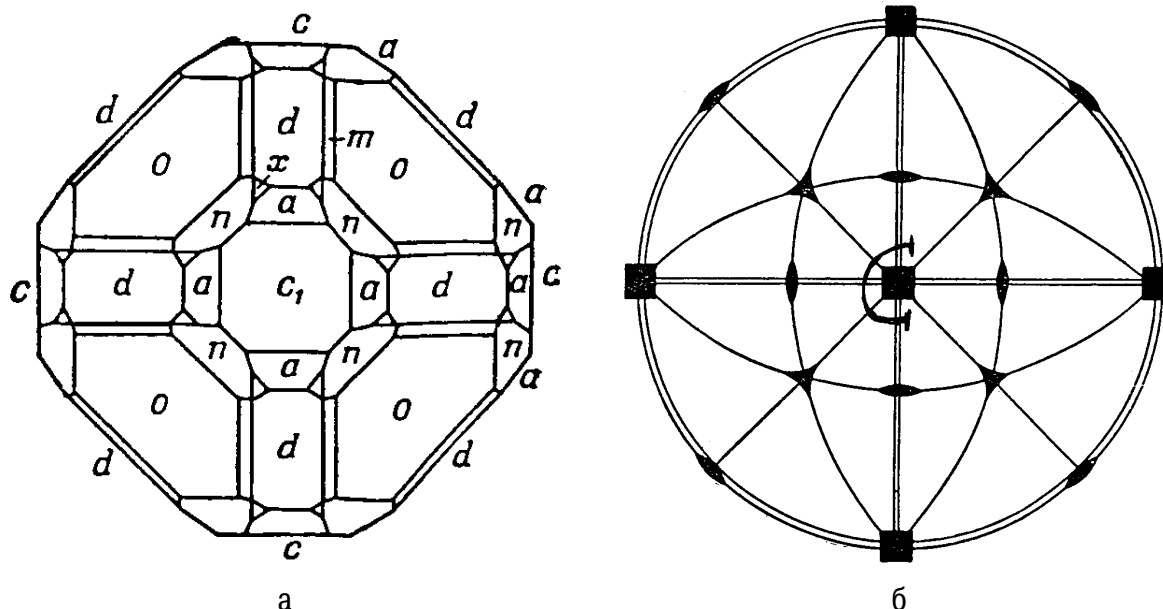


Рис. 15. Ортогональная проекция кристалла (а) и его стереографическая проекция (стереограмма) (б).

3.3. Гномостереографическая проекция

Этот вид проекции чаще всего применяется для изображения кристаллических многогранников. При этом проектируется не многогранник, а его полярный комплекс, т.е. не грань кристалла, а нормаль к грани. Плоскостью гномостереографической проекции служит та же экваториальная плоскость сферы проекций P , как и для стереографической проекции. Гномостереографическая проекция кристалла представляет собой совокупность стереографических проекций нормалей к граням кристалла (рис. 16).

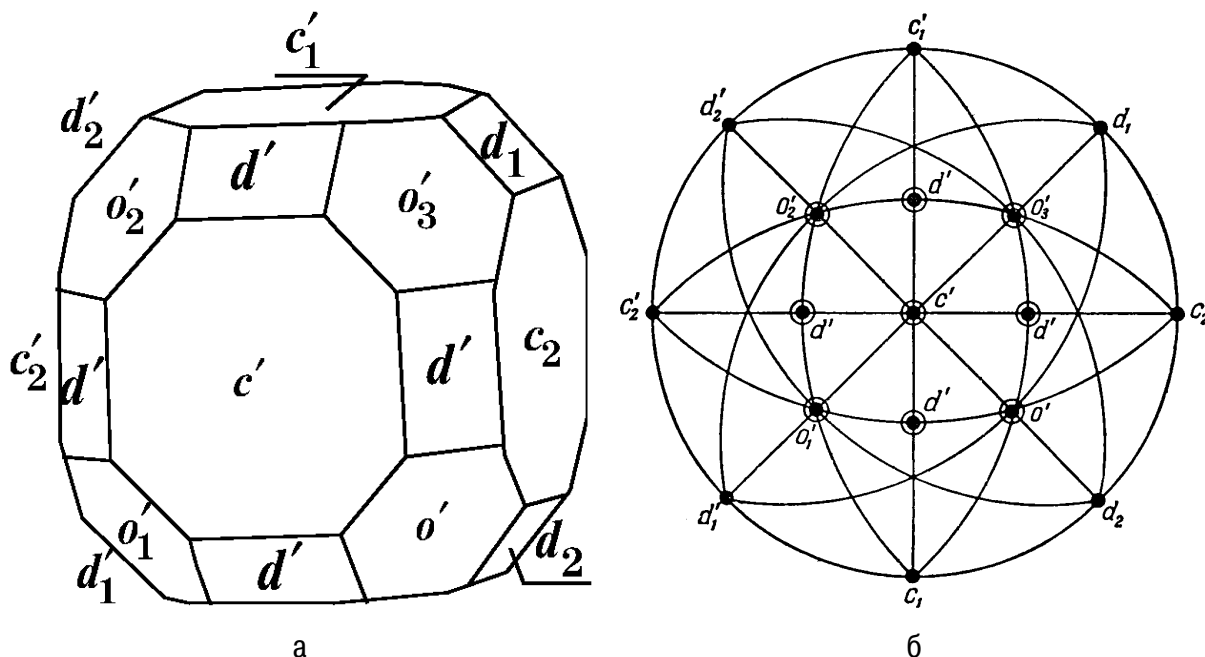


Рис. 16. Аксонометрическая проекция кристалла (а) и его гномостереографическая проекция (б).

Свойства гномостереографической проекции.

1. Горизонтальные грани проектируются в центре круга проекции.
2. Вертикальные грани проектируются на основном круге проекции;
3. Наклонные грани проектируются внутри основного круга, причем чем круче наклон, тем дальше от центра располагается проектирующая ее точка.

3.4. Гномоническая проекция

Плоскость гномонической проекции параллельна плоскости стереографической и гномостереографической проекций, но она не экваториальная, а касательная к северному полюсу сферы проекции. Нормаль к грани кристалла, проведенная из центра сферы проекций, продолжается до пересечения с плоскостью проекции. Плоскости граней, перпендикулярных плоскости проекции, отодвигаются в бесконечность. Их положение указывается стрелкой (рис. 17).

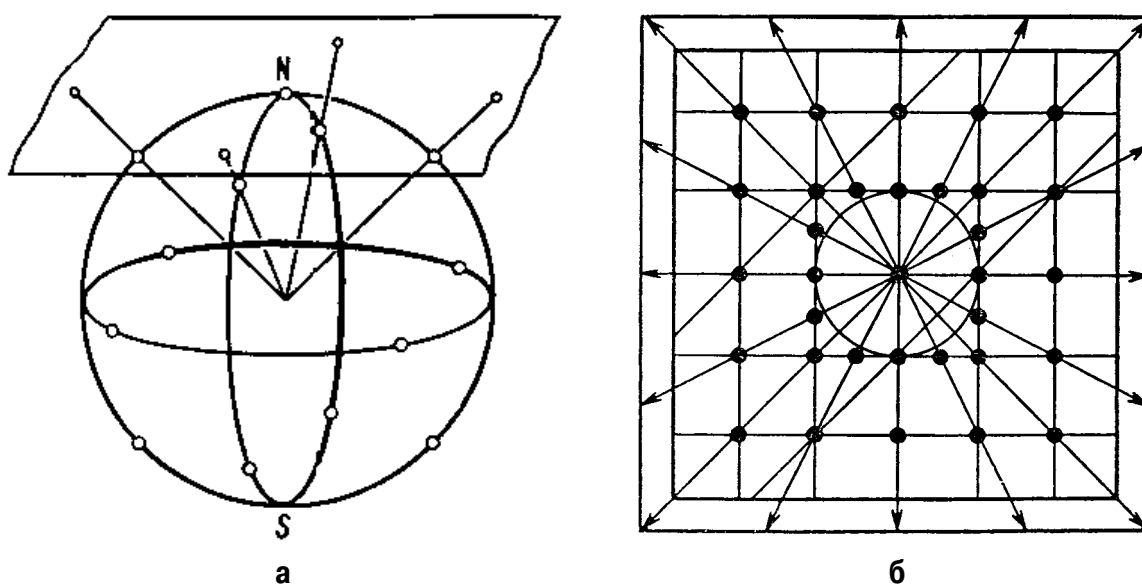


Рис. 17. Построение гномонической проекции кристалла (а) и типичный вид гномограммы (б).

Гномоническая проекция плоскости представляет собой точку, проекция направления - прямую. Проекции граней одной *зоны* лежат на одной прямой. *Зона* - совокупность граней, параллельных одному ребру, так называемой *оси зоны*, т.е. зону образует комплекс граней, нормали к которым лежат в одной плоскости.

Недостатком гномонической проекции является то, что в ней не сохранены угловые соотношения: углы между линиями зон на проекции не равны углам между соответствующими плоскостями одной зоны.

Этот вид проекции широко применяется в дифракционных методах исследования.

Соотношения между сферической, стереографической, гномостереографической и гномонической проекциями

Принцип построения стереографической и гномостереографической проекций одинаков, различие заключается в том, что стереографическая проекция строится по прямому (кристаллическому) комплексу граней кристалла, а гномостереографическая проекция – по обратному (полярному) комплексу. Иногда их совмещают на одном чертеже, изображая элементы симметрии кристалла с помощью стереографической проекции, а грани и ребра - с помощью гномостереографической.

На гномостереографической проекции (плоскость проектирования **P**) точка a_1 – это проекция плоскости (грани), перпендикулярной Oa , так как в этом виде проектирования грань заменяется нормалью к грани (Oa -нормаль к грани). С другой стороны, Oa' – это стереографическая проекция направления Oa . На гномонической проекции (плоскость проектирования **M**) точка a_2 – гномоническая проекция той же плоскости, нормаль к которой Oa . (рис. 18).

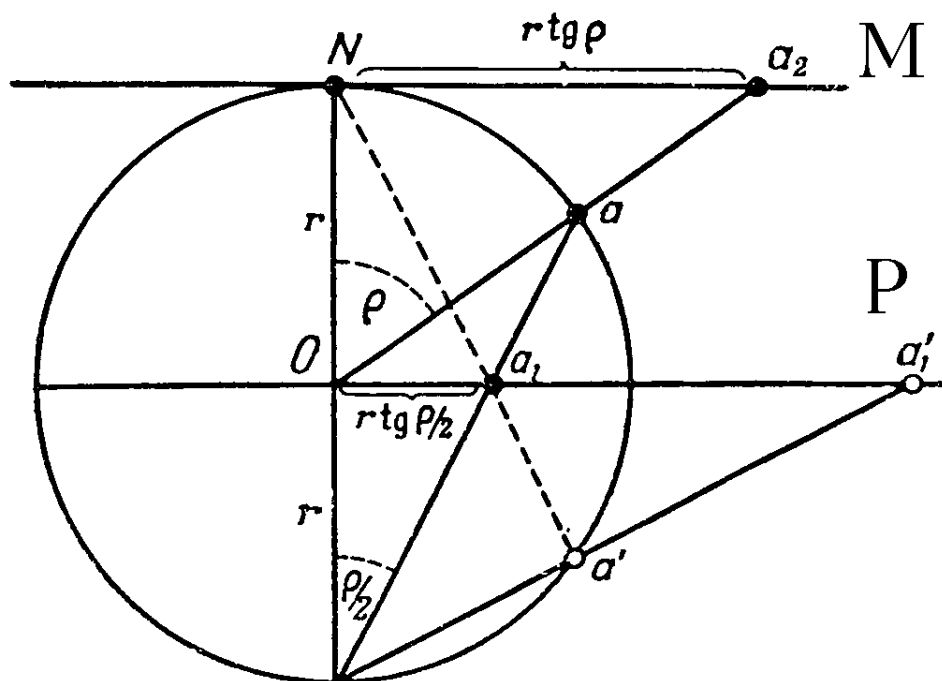


Рис. 18. Связь между разными видами графических проекций:

a - сферическая проекция направления Oa (поверхность проектирования – сфера),

a_2 – гномоническая проекция грани, нормаль к которой Oa (плоскость проектирования **M**),

Oa_1 – стереографическая проекция направления Oa или гномостереографическая проекция грани, нормаль к которой Oa (плоскость проектирования **P**).

3.5. Сетка Ю.В. Вульфа и решение задач с помощью сетки Вульфа

Для решения количественных задач с помощью стереографической и гномостереографических проекций пользуются градусными сетками. Наиболее часто применяют сетку, предложенную Ю.В. Вульфом, чью имя она и носит (рис. 19).

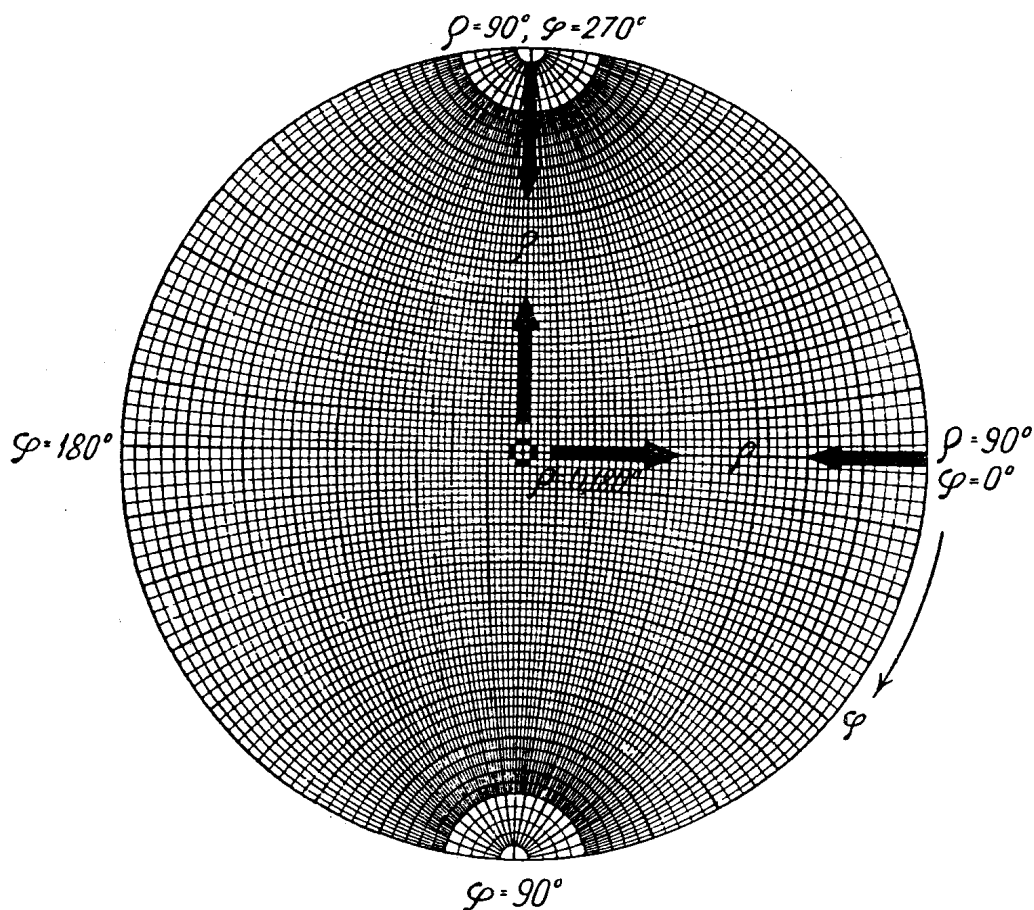


Рис. 19. Сетка Ю.В. Вульфа.

Сетка Вульфа представляет комбинацию проекций *больших кругов* (меридианы на сетке) и *малых кругов* (параллели на сетке), отстоящих друг от друга на 2° .

Большими кругами называются все круги, проходящие через центр сферы проекций, т.е. они получаются при пересечении сферы проекций плоскостями, проходящими через ее центр. *Малые круги* получаются, когда плоскости пересекают сферу проекций, минуя ее центр. Эти малые круги проектируются на стереограмме всегда в виде кругов.

Положение любой точки на сетке Вульфа определяется сферическими координатами ρ и φ , которые отсчитываются соответственно от центра и правого конца диаметра основного круга (рис. 19). Координата φ меняется от 0° до 360° , а координата ρ - от 0° до 180° , причем интервал $90...180^\circ$ соответствует проекциям граней, лежащих под плоскостью проектирования. Отсчет ρ ведется от центра сетки ($\rho=0^\circ$) по одному из ее диаметров к основному кругу ($\rho=90^\circ$) и далее по тому же диаметру к центру сетки ($\rho=180^\circ$).

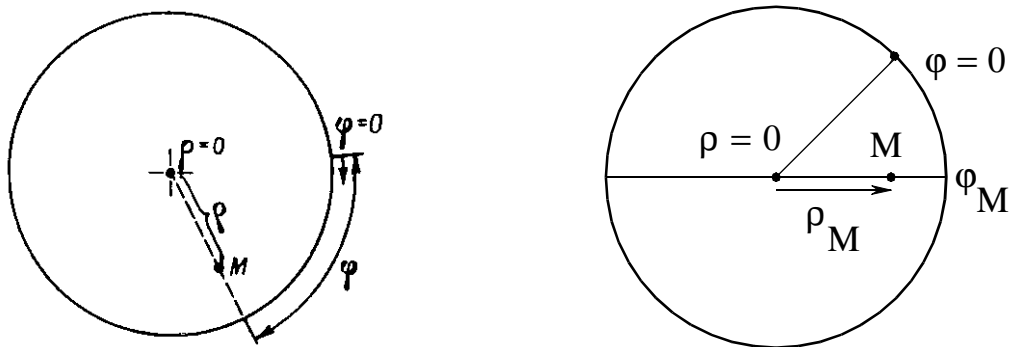


Рис. 20. Сферические координаты точки М на круге проекций.

1. Построить гномостереографическую проекцию грани кристалла, заданную своими сферическими координатами ρ и φ .

Для построения точки с координатами ρ и φ откладываем на кальке, наложенной на сетку Вульфа, по основному кругу угол φ . Концентрическим поворотом кальки, центр которой совмещен с центром сетки Вульфа и на которой отмечено первоначальное положение – верхний и нижний полюса и центр, приводим полученную точку на конец одного из диаметров и, отсчитав по нему угол ρ от центра сетки в сторону точки, находим искомую точку с координатами ρ и φ (рис. 20).

2. Измерить угол α между двумя гранями.

Поворачивая кальку концентрическим вращением вокруг сетки Вульфа приводим точки с координатами ρ_1, φ_1 и ρ_2, φ_2 , представляющие гномостереографические проекции граней кристалла (или стереографические проекции направлений), на один (если они лежат в одном полушарии) (рис. 21а) или на симметричные (если они находятся по разные стороны от плоскости чертежа) (рис. 21б) меридианы.

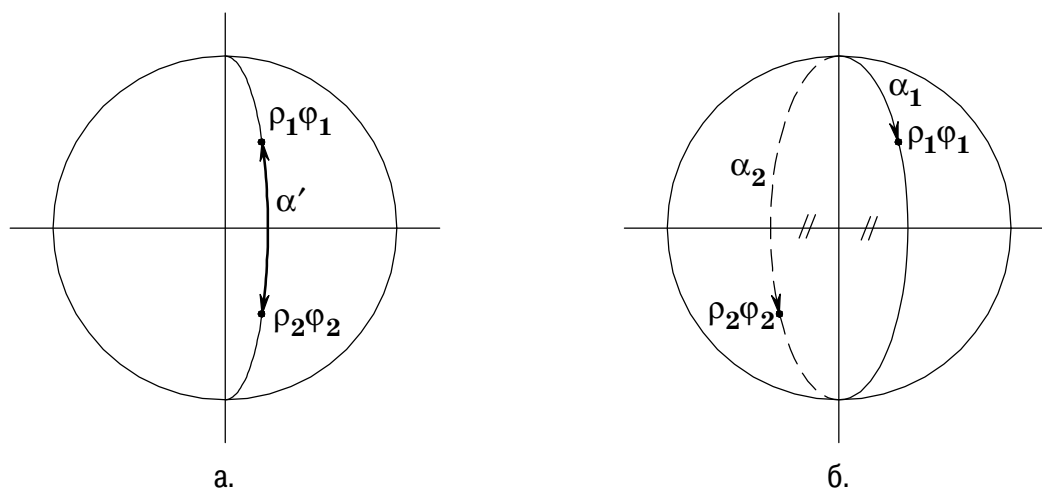


Рис. 21. Определение углового расстояния между точками одной полусферы - α' (а) и разных полусфер - $\alpha' = \alpha_1 + \alpha_2$ (б) (к задаче 2)

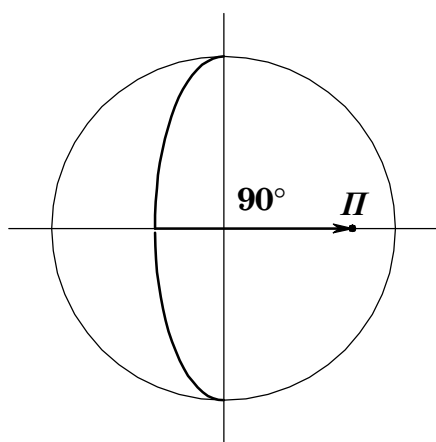
Угол между двумя гномостереографическими проекциями граней равен α' , заключенной между двумя точками. Угол же между гранями α является дополнительным до 180° , т.е. $\alpha = 180^\circ - \alpha'$.

3. Через две заданные точки провести дугу большого круга (построить стереографическую проекцию грани кристалла по координатам ρ_1, φ_1 и ρ_2, φ_2).

Обе точки с координатами ρ_1, φ_1 и ρ_2, φ_2 приводим на один или симметричные относительно вертикального диаметра меридианы. Этот меридиан (или совокупность двух симметричных меридианов) и есть искомая дуга большого круга.

4. Построить точку, диаметрально противоположную данной.

Точка приводится на один из вертикальных диаметров и по нему отсчитывается от нее 180° .



5. Найти полюс дуги большого круга (переход от гномостереографической проекции к стереографической).

Полюсом дуги большого круга называют точку, отстоящую от всех точек дуги на 90° (рис. 22).

Рис. 22. Нахождение полюса дуги большого круга (к задаче 5)

Дуга совмещается с одним из меридианов и от точки пересечения дуги с экватором отсчитывается угол 90° в сторону центра сетки. Найденная точка и

есть полюс - **П**.

6. Измерить угол между двумя дугами больших кругов (измерить угол между двумя стереографическими проекциями граней).

Угол между дугами равен углу между их полюсами. Сначала необходимо перейти от стереографической проекции к гномостереографической (т. е. перейти от дуги к точке) (задача 5), а затем измерить угол между двумя точками (задача 2).

7. Совместить путем поворота две заданные точки.

Концентрическим поворотом кальки приводим точки на одну параллель; ось поворота – вертикальный диаметр. Угол поворота β равен углу между точками, измеренному по параллели (рис. 23).

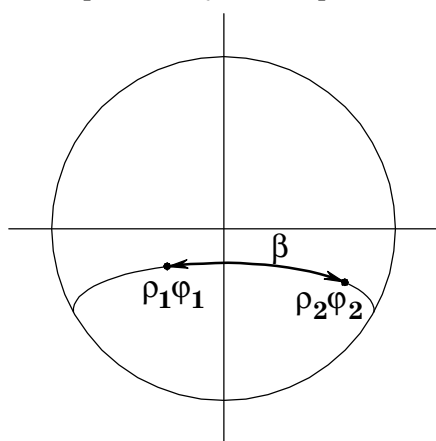


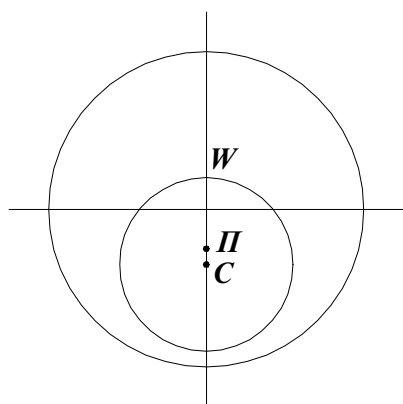
Рис. 23. Совмещение путем поворота двух заданных точек (к задаче 7).

8. Совместить поворотом две дуги большого круга.

Дуги совместятся, если совместятся их полюсы. Сначала необходимо перейти от стереографической проекции к гномостереографической (т. е. перейти от дуги к точке) (задача 5), а затем эти точки совместить путем поворота (задача 7).

9. Построить стереографическую проекцию дуги малого круга с радиусом Θ и с полюсом Π в заданной точке.

Приводим заданный полюс Π на любой из диаметров сетки Вульфа и по этому диаметру по обе стороны от полюса откладываем по углу Θ . Полученный отрезок NN' – диаметр искомого малого круга.



Окружность на сфере в стереографической проекции изображается окружностью. Поэтому, разделив найденный отрезок NN' пополам (т.е. находим центр окружности C), строим на нем, как на диаметре, с помощью циркуля окружность – искомый малый круг. Причем заданный полюс Π и центр найденного малого круга C в общем случае не совпадают.

Рис. 24. Построение дуги малого круга (1 случай) (к задаче 9).

Если угол Θ достаточно велик, так что дуга пересекает основной круг, то построение проводят несколько иначе. Поворачивая кальку концентрическим вращением, приводят заданный полюс Π на разные меридианы и каждый раз откладывают от него углы Θ в обе стороны. Таким образом получают достаточное число точек, через которые и проводят дугу (рис. 25).

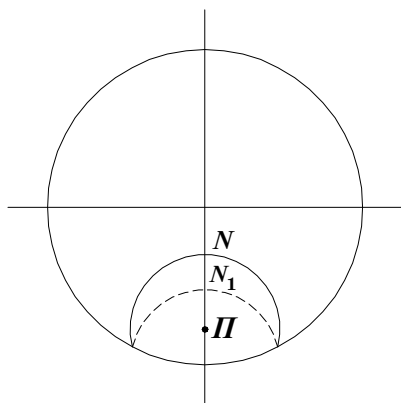


Рис. 25. Построение дуги малого круга (2 случай) (к задаче 9).

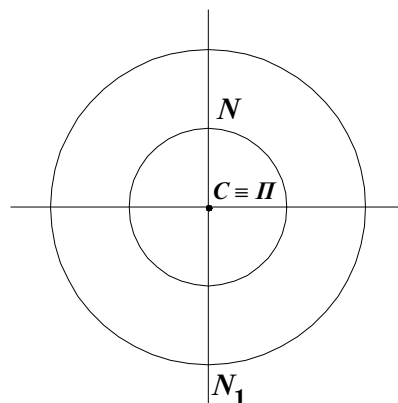
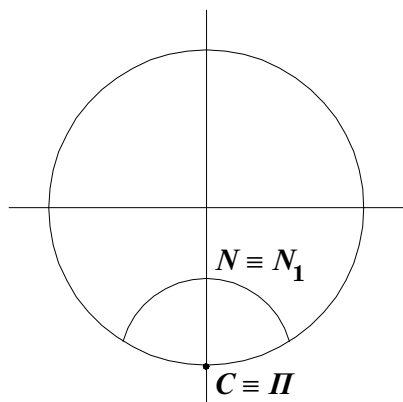


Рис. 26. Построение дуги малого круга (3 случай) (к задаче 9).

Если полюс дуги малого круга совпадает с центром сетки, то сферический (Π) и действительные центры (C) и радиусы совпадают (рис. 26).



Если полюс лежит на основном круге проекций, то его совмещают с одним из полюсов ее и, отложив угол Θ по вертикальному диаметру, проводят соответствующую параллель, которая и является искомой дугой малого круга (рис. 27).

Рис. 27. Построение дуги малого круга (4 случай) (к задаче 9).

10. Найти полюс дуги малого круга.

Находим сферический центр дуги малого круга **С** простым геометрическим построением - отысканием центра окружности. Совмещаем его с одним из диаметров сетки. Измерив диаметр 2Θ дуги малого круга и отложив Θ по диаметру от любой из точек пересечения круга с диаметром внутрь его, находим полюс **П**. Напомним, что в общем случае сферический центр **С** и полюс **П** не совпадают.

11. Построить по гониометрическим данным (координаты ρ и ϕ) гномостереограмму кристалла; дать набросок общего вида кристалла.

Построение граней кристалла по сферическим координатам ρ и ϕ рассмотрено в задаче 1. На **рис. 16** представлен в качестве примера внешний вид кристалла и его гномостереограмма.

Глава 4

СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

"Учение о симметрии занимается исследованием законов правильного расположения фигур или частей фигуры в пространстве... В самом широком смысле под симметричной фигурой мы разумеем фигуру, состоящую из равных и однообразно расположенных частей" (А.В.Шубников) .

По гречески *симметрия* означает соразмерность, пропорциональность, одинаковость в расположении.

4.1. Закрытые элементы симметрии

Идеально развитый кристалл представляет собой многогранник, равные элементы которого (грани, ребра, вершины) могут быть совмещены друг с другом путем *операций симметрии* - поворотов или отражений.

Геометрические образы (плоскости, прямые линии, точки), с помощью которых задаются и осуществляются симметрические операции, называются *элементами симметрии* .

В зависимости от характера операций различают элементы симметрии I и II родов.

4.1.1. Элементы симметрии I рода.

Поворотные оси симметрии - воображаемые прямые, при повороте вокруг которых на некоторый угол фигура совмещается сама с собой, т.е. совмещаются ее равные части, и фигура занимает в пространстве положение, эквивалентное исходному.

Наименьший угол поворота вокруг оси, приводящей фигуру к самосовмещению, называют *элементарным углом поворота оси симметрии* α . Его величина определяет *порядок оси* n , т.е. число самосовмещений фигуры при полном повороте на 360° : $n = 360^\circ / \alpha$.

Оси симметрии обозначаются L_n по символике Бравэ и n – по символике Германа-Могена, или международной символике.

Симметрия кристаллов описывается поворотными осями 1-го (L_1) (рис. 28а,б), 2-го (L_2) (рис. 29а,б), 3-го (L_3) (рис. 30а,б), 4-го (L_4) (рис. 31а,б) и 6-го (L_6) (рис. 32а,б) порядков.

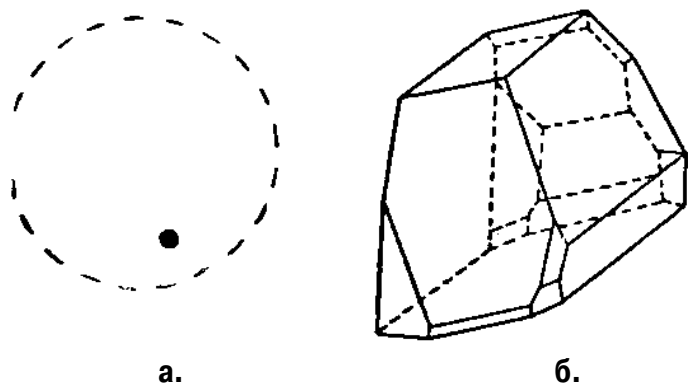


Рис. 28. Действие поворотной оси 1-го порядка на грань (а) и кристалл $\text{CaS}_2\text{O}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (б), все грани которого связаны осью 1 (L_1).

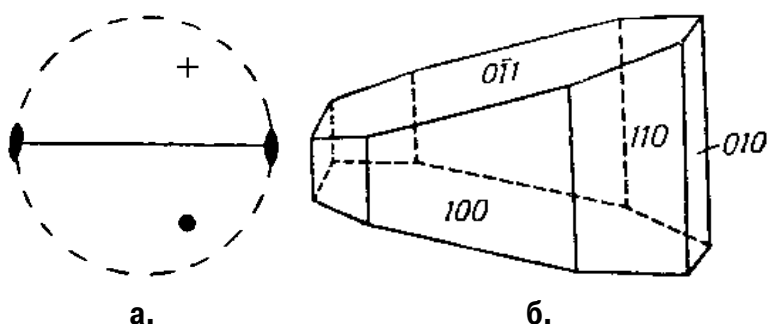


Рис. 29. Действие поворотной оси 2-го порядка на грань (а) и кристалл молочного сахара (б), все грани которого связаны осью 2 (L_2).

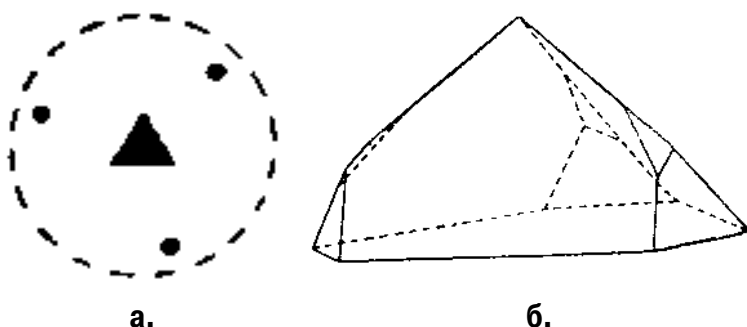


Рис. 30. Действие поворотной оси 3-го порядка на грань (а) и кристалл $\text{NaIO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (б), все грани которого связаны осью 3 (L_3).

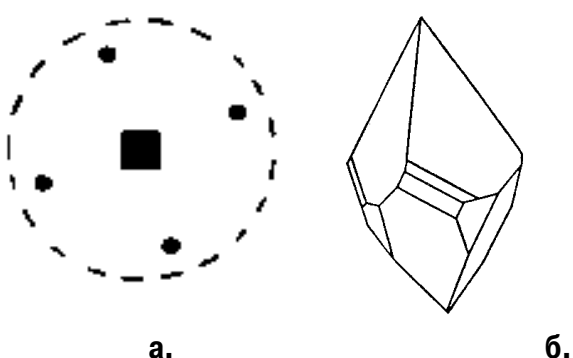


Рис. 31. Действие поворотной оси 4-го порядка на грань (а) и кристалл минерала вульфенита PbMoO_4 (б), все грани которого связаны осью 4 (L_4).

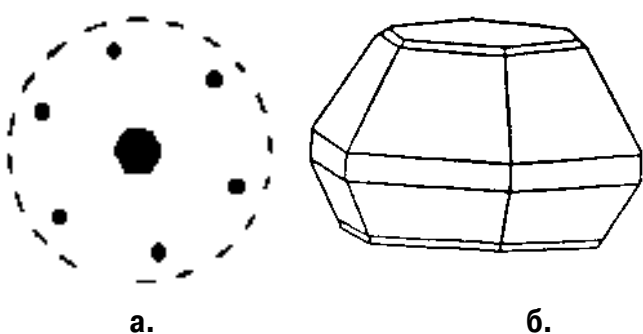


Рис. 32. Действие поворотной оси 6-го порядка на грань (а) и кристалл минерала нефелина NaAlSiO_4 (б), все грани которого связаны осью 6 (L_6).

В кристаллах невозможны оси симметрии 5-го порядка (рис. 33) и выше 6-го (рис. 34). Этот основной закон симметрии кристаллов установлен эмпирически и доказан на основании решетчатого строения кристаллов.

Допустим, что в бесконечной сетке материальных частиц есть ось симметрии 5-го порядка, перпендикулярная к горизонтальной плоскости (т. A – точка пересечения оси и плоскости), а т. a_1 – ближайший к ней узел сетки. По определению оси симметрии, узел a_1 должен повторяться вокруг оси 5-го порядка пять раз – $a_1 a_2 a_3 a_4 a_5$ (Рис. 33).

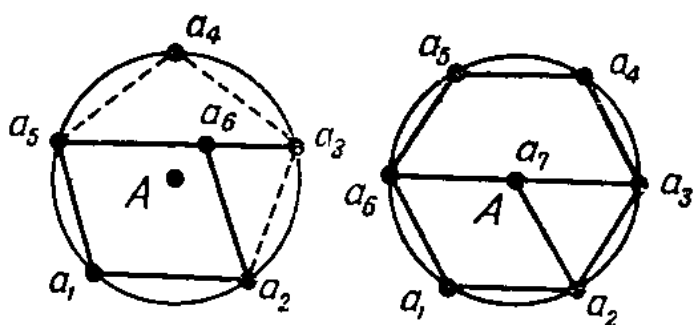
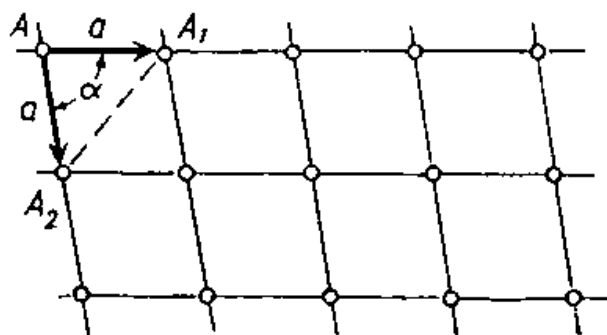


Рис. 33. Доказательство невозможности поворотной оси 5-го порядка ($n=5$) в кристаллах.

Значит, т. $a_1 - a_5$ должны быть узлами правильной сетки. Если это так, то должна существовать т. a_6 , для которой $a_1 a_2 = a_5 a_6$ и, тогда, $a_3 a_6 < a_5 a_6$. Однако, это

невозможно, так как мы выбрали т. a_1 как ближайшую точку, т.е. Aa_1 – наименьший параметр сетки. Отсюда, ось 5-го порядка в бесконечной непрерывной сетке существовать не может. Для сравнения на рис. 326 приведено действие оси 6-го порядка, которая имеет место в кристаллах.

Допустим, что в т. A пересекаются два узловых ряда, которые определяются одним и тем же межузловым расстоянием, минимальным для данной пространственной решетки ($a = a_{\min}$) (a – трансляция, кратчайшее расстояние между двумя одноименными точками).



Тогда в треугольнике AA_1A_2 сторона $A_1A_2 \geq AA_1$ и AA_2 и $a \geq 60^\circ$, поэтому n (n -порядок оси) ≤ 6 (рис. 34).

Рис. 34. Доказательство невозможности поворотных осей симметрии с $n > 6$.

4.1.2. Элементы симметрии II рода

Зеркальная плоскость симметрии – воображаемая плоскость, "отражаясь" в которой как в "двустороннем зеркале", правая фигура (часть фигуры) совмещается с "левой", т. е. фигуры, связанные плоскостью симметрии, относятся друг к другу как предмет и его зеркальное отражение (рис. 35 а,б).

Зеркальная плоскость обозначается буквами P (по Бравэ) и m (по Герману-Могену).

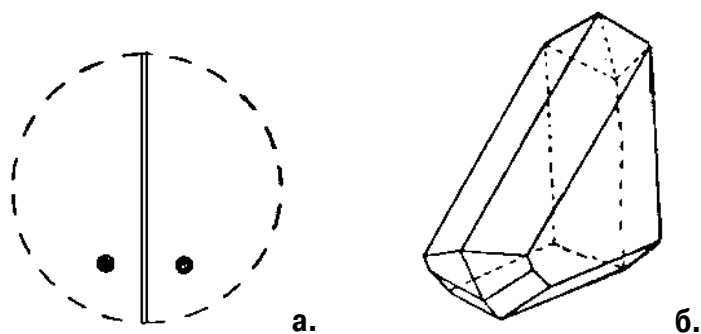


Рис. 35. Действие зеркальной плоскости симметрии на грань (а) и кристалл минерала хилгардита (б), все грани которого связаны плоскостью симметрии m .

Центр инверсии (центр симметрии) — воображаемая "зеркальная точка", отражаясь в которой правая фигура (часть фигуры) совмещается с левой, т.е. фигуры, связанные инверсией (центром симметрии), относятся друг к другу как предмет и его фотографическое изображение (рис. 36 а,б).

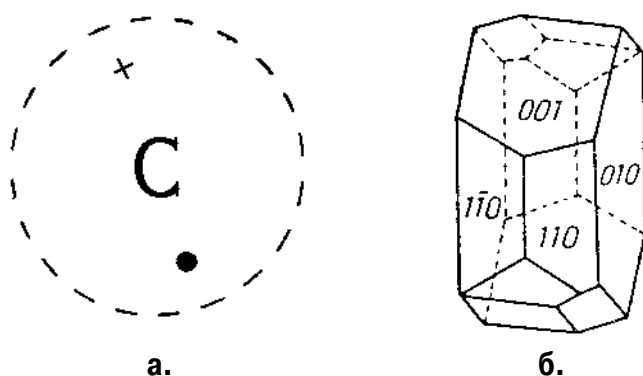


Рис. 36. Действие центра симметрии на грань (а) и кристалл анортита $Ca[Al_2Si_2O_8]$ (б), все грани которого связаны центром симметрии $\bar{1}$.

Центр симметрии связывает две диаметрально противоположные точки (рис. 36а) и его обозначают буквой **C** (по Бравэ) или $\bar{1}$ (по Герману-Могену).

Таким образом, операции элементов симметрии I рода связывают "правые" фигуры с "правыми", "левые" с "левыми", а операции симметрии II рода - "правые" фигуры с "левыми".

4.1.3. Сложные оси симметрии

Сложные оси симметрии позволяют совмещать равные части фигуры путем двойной операции: поворота на определенный угол, задаваемый порядком оси, и отражения либо в плоскости, перпендикулярной к оси вращения, либо в точке на этой оси. В первом случае ось называется *зеркальной*, во втором - *инверсионной*. В общем случае каждое из совместных действий - поворот и отражение - мнимые. Операции коммутируют, то есть порядок действия безразличен.

Зеркальные оси обозначают символом L_{ns} (по Бравэ) или n (по Герману-Могену); инверсионные оси обозначают символом L_{ni} (по Бравэ) или $\bar{n}$ (по Герману-Могену).

Зеркальные и инверсионные оси связаны между собой следующими общими соотношениями:

$$L_{ns}(360^\circ/\alpha) = L_{ni}(360^\circ/180^\circ-\alpha)$$

(для осей кристаллографических порядков)

$$L_{ns}(360^\circ/\alpha) = L_{ni}(360^\circ q/180^\circ - \alpha)$$

(для осей некристаллографических порядков вводится коэффициент q – наименьшее число, приводящее к целочисленному значению n).

$$L_{s(2k+1)} = L_{2i(2k+1)}$$

$$L_{i(2k+1)} = L_{2s(2k+1)}$$

$$L_{s(4k+4)} = L_{i(4k+4)}$$

или частными соотношениями:

$$L_i = L_{2s} = C,$$

$$L_{2i} = L_s = P,$$

$$L_{3i} = L_{6s} = L_3 C$$

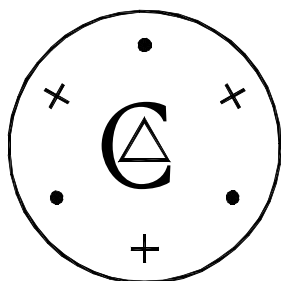
$$L_{4i} = L_{4s}$$

$$L_{6i} = L_{3s} = L_3 P$$

Чтобы решить, какими простыми элементами симметрии можно заменить преобразования сложных осей любых (некристаллографических) порядков, можно прибегнуть к аналогии:

1. для простых и сложных осей нечетных порядков $n = 2k + 1$ справедливы закономерности, выведенные для оси 3-го порядка;
2. для простых и сложных осей четных порядков $n = 2(2k + 1)$ – справедливы закономерности для оси 6-го порядка;
3. для простых и сложных осей четных порядков $n = 4k + 4$ – справедливы закономерности для оси 4-го порядка.

На практике зеркальные оси заменяют их эквивалентами – инверсионными осями: $\bar{1}$, а не 2 (рис. 35); $\bar{3}$, а не 6 (рис. 37); $\bar{4}$, а не 4 (рис. 38); $\bar{6}$, а не 3 (рис. 39), за исключением m , а не $\bar{2}$ (рис. 35).

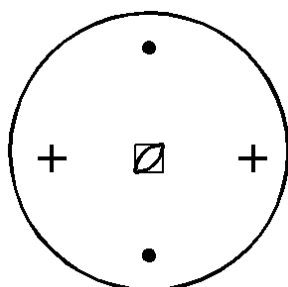


А.

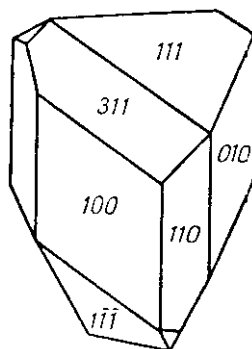


б.

Рис. 37. Действие инверсионной оси 3-го порядка на грань (а) и кристалл минерала доломита $MgCa(CO_3)_2$ (б), все грани которого связаны осью $\bar{3}$.



а.



б.

Рис. 38. Действие инверсионной оси 4-го порядка на грань (а) и кристалл минерала канита $Ca_4B_2As_2O_{12} \cdot 4H_2O$ (б), все грани которого связаны осью $\bar{4}$.

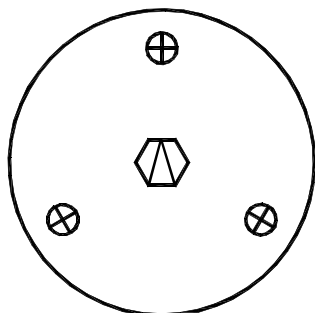


Рис. 39. Действие инверсионной осью 6-го порядка ($\bar{6}$) на грань кристалла.

Симметрия любого многогранника, т.е. закономерная повторяемость одинаковых его частей, может быть описана только осями симметрии – простыми (поворотными) и сложными (зеркальными или инверсионными).

На практике, внешняя огранка кристалла описывается следующими элементами симметрии:

$$L_1 \equiv 1, L_2 \equiv 2, L_3 \equiv 3, L_4 \equiv 4, L_6 \equiv 6, \\ P \equiv m, C \equiv \bar{1}, L_{3i} \equiv \bar{3}, L_{4i} \equiv \bar{4}, L_{6i} \equiv \bar{6}$$

4.2. Основные теоремы взаимодействия элементов симметрии

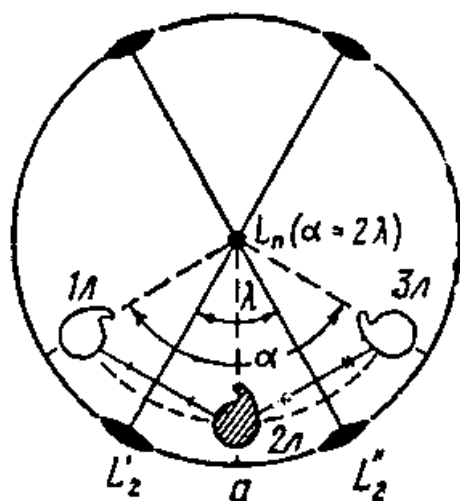


Рис. 40. К теореме 1

Теорема 1. Взаимодействие двух осей симметрии 2-го порядка, пересекающихся под углом α , порождает поворотную ось симметрии n -го порядка с элементарным углом поворота 2α (рис. 40).

$$\alpha \quad 2\alpha \\ L_2 \times L_2 \rightarrow L_n n L_2$$

Обратная: Взаимодействие поворотной оси симметрии n -го порядка с элементарным углом поворота 2α и перпендикулярной ей поворотной осью симметрии 2-го порядка порождает n осей 2-го порядка.

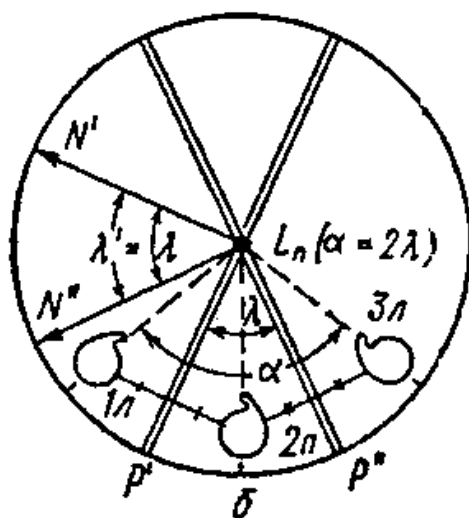


Рис. 41. К теореме 2.

Теорема 2. Взаимодействие двух плоскостей симметрии, пересекающихся под углом α , порождает поворотную ось симметрии n -го порядка с элементарным углом поворота 2α (рис. 41).

$$\alpha \quad 2\alpha \\ P_1 \times P_2 \rightarrow L_n n P$$

Обратная: Взаимодействие поворотной оси симметрии n -го порядка с элементарным углом поворота 2α и совпадающей с ней вертикальной плоскостью симметрии порождает n плоскостей симметрии.

Зависимость между элементарными углами поворота осей (α , β , γ) определяется из следующей формулы сферической тригонометрии:

$$\cos a = (\cos \alpha / 2 + \cos \beta / 2 \cos \gamma / 2) / \sin \beta / 2 \sin \gamma / 2$$

$$\cos b = (\cos \beta / 2 + \cos \alpha / 2 \cos \gamma / 2) / \sin \alpha / 2 \sin \gamma / 2$$

$$\cos c = (\cos \gamma / 2 + \cos \alpha / 2 \cos \beta / 2) / \sin \alpha / 2 \sin \beta / 2$$

4.3. Операции симметрии

Для описания *операций симметрии* используют те же значки, что и для элементов симметрии, причем показатель степени означает в этом случае число повторенных элементарных поворотов, а минус при показателе степени - поворот

в противоположном направлении. Так, если $\hat{L}_6(\hat{6}^1)$ - поворот на 60° по часовой

стрелке, то $\hat{L}_6^{-1}(\hat{6}^{-1})$ - такой же поворот на 60° против часовой стрелки. Таким же

образом $\hat{L}_6^2(\hat{6}^2) = \hat{L}_3^1(\hat{3}^1)$, $\hat{L}_6^3(\hat{6}^3) = \hat{L}_2(\hat{2})$, $\hat{L}_6^4(\hat{6}^4) = \hat{L}_3^{-1}(\hat{3}^{-1})$, $\hat{L}_6^6(\hat{6}^6) = 1$.

Единицей или буквой $\hat{E}$ обозначают операцию идентичности, или тождественности; операция отражения в плоскости обозначается буквами $\hat{P}$ и $\hat{m}$; для обозначения операций инверсии служит буква $\hat{i}$.

1. Любое симметрическое преобразование удобно представить с помощью координат исходной и преобразованной точек. Так, поворот вокруг вертикальной оси на 180° ($\hat{2}_z$) запишем как $x y z \rightarrow \bar{x} \bar{y} \bar{z}$, поворот вокруг вертикальной оси 4-го порядка по часовой стрелке ($\hat{4}_z^1$) как $x y z \rightarrow y \bar{x} z$, отражение в горизонтальной плоскости симметрии (m_z) в виде $x y z \rightarrow x y \bar{z}$, инверсия (i) как $x y z \rightarrow \bar{x} \bar{y} \bar{z}$.

Из **рис. 44а** видно, что переход грани от 1 до 4 осуществляется с помощью следующих симметрических преобразований:

$\hat{4}_z^1$:	т.1→т.2	Грани 1-4 имеют следующие координаты:	
$\hat{4}_z^2 = \hat{2}_z$:	т.1→т.3		т.1: $x y z$
$\hat{4}_z^3 = \hat{4}_z^{-1}$:	т.1→т.4		т.2: $\bar{y} x z$
$\hat{4}_z^4 = \hat{1} = \hat{E}$:	т.1→т.1		т.3: $\bar{x} \bar{y} z$
			т.4: $y \bar{x} z$

2. Симметрическое преобразование можно представить и как преобразование некоторой координатной системы относительно неподвижного объекта и записать его с помощью матриц - таблиц коэффициентов, определяющих соотношение между исходной (xyz , abc) и преобразованной (XYZ , ABC) координатными системами.

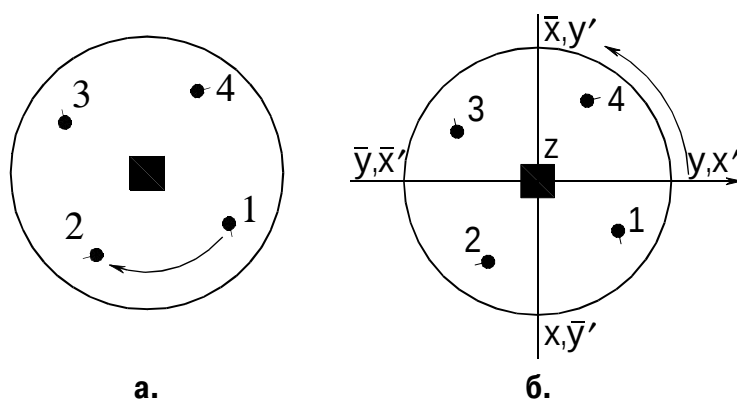


Рис. 44. Размножение граней кристалла.

Переход от старой к новой системе координат – прямое преобразование:

$$X = u_A x + v_A y + w_A z$$

$$Y = u_B x + v_B y + w_B z$$

$$Z = u_C x + v_C y + w_C z$$

$$M = \begin{vmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{vmatrix}$$

Переход от новой старой системе координат – обратное преобразование:

$$x = u_a X + v_a Y + w_a Z$$

$$y = u_b X + v_b Y + w_b Z$$

$$z = u_c X + v_c Y + w_c Z$$

$$M^{-1} = \begin{vmatrix} u_a & v_a & w_a \\ u_b & v_b & w_b \\ u_c & v_c & w_c \end{vmatrix}$$

Из рис. 44б следует:

$$\hat{4}_z^1 = \begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix};$$

$$\hat{4}_z^2 = \hat{2}_z = \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix};$$

$$\hat{4}_z^3 = \hat{4}_z^{-1} = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix};$$

$$\hat{4}_z^4 = \hat{1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \hat{E}$$

При операциях симметрии кристаллографический координатный репер преобразуется сам в себя, поэтому все матрицы симметрических преобразований, полученные таким способом, всегда будут иметь своими членами только **0** и ± 1 ("ноль, один"- матрицы). Причем матрицы с определителем $\Delta = 1$ представляют операции I рода, а с $\Delta = -1$ – II рода.

4.4. Точечные группы симметрии

Полное сочетание элементов симметрии кристаллического многогранника называется его *классом симметрии*, или *точечной группой симметрии*. Всего 32 точечных групп (классов), описывающих симметрию внешнего вида кристалла.

4.4.1. Обозначение Бравэ.

Очень простая и наглядная система обозначений Бравэ не является, однако, общей, так как, несмотря на громоздкость, формулы Бравэ все же не отражают всех операций данной группы, а, кроме того, их нельзя использовать для описания симметрии кристаллических структур.

4.4.2. Обозначение Шенфлиса

Символы Шенфлиса (*таблица 1*) используются гораздо шире, однако они, как и символы Бравэ, не привязаны к координатной системе и, хотя их и употребляют при описании внутренней симметрии кристалла, в этом качестве они недостаточно информативны.

Таблица 1. Обозначение 32 точечных групп (классов) симметрии по номенклатуре Шенфлиса

<i>Классы с единичным направлением</i>	
C_n	Классы с единственной осью симметрии n -го порядка
C_{nv}	Классы с одной главной осью n -го порядка и проходящей через нее n вертикальных плоскостей v
C_{nh}	Классы с одной главной осью n -го порядка и плоскостью h , перпендикулярной данной оси
C_{ni} (S_{2n})	Классы с одной главной инверсионной осью, которую обычно обозначают через зеркальную ось: $C_i=S_2$, $C_{2i}=C_s$, $C_{3i}=S_6$, $C_{4i}=S_4$
D_n	Классы с побочными осями 2-го порядка, перпендикулярных главной оси n
D_{nh}	Классы с главной осью n -го порядка, плоскостью h , ей перпендикулярной, и побочными осями 2-го порядка
D_{nd}	Классы с главной инверсионной осью, побочными осями 2-го порядка и n вертикальными плоскостями d , являющимися диагональными по отношению к координатным осям (плоскость d делит пополам угол между координатными осями x и y)
<i>Классы без единичных направлений</i>	
T	Классы с несколькими осями высшего порядка; осевой комплекс тетраэдра – $3L_24L_3$
O	Классы с несколькими осями высшего порядка; осевой комплекс октаэдра – $3L_44L_36L_2$
T_h	Классы с несколькими осями высшего порядка и координатными плоскостями – $3L_24L_33PC$
O_h	Классы с несколькими осями высшего порядка и координатными плоскостями – $3L_44L_36L_29PC$
T_d	Классы с несколькими осями высшего порядка и диагональными плоскостями – $3L_4i4L_36P$

4.3.3. Обозначение Германа-Могена (международная символика)

В международных символах, как и в символах Шенфлиса, записывают порождающие элементы симметрии, предпочитая считать таковыми плоскости симметрии.

Если плоскость перпендикулярна оси, то ось и плоскость записывается через черточку (например, $4/m$). Если ось и плоскость параллельны, то они записываются рядом (например, $4mm$).

Если инверсионная ось имеет б•ольшую величину симметрии (величина симметрии оси определяется ее “размножающей” способностью: “величина симметрии” равна шести у осей 6 , $\bar{6}$, $\bar{3}$, но лишь трем у оси 3), чем совпадающая с ней поворотная, то в символе показывают именно ее, т.е. записывают $\bar{6}$, а не $3/m$, но $4/m$, а не $\bar{4}/m$.

Основное преимущество обозначения групп симметрии по этой номенклатуре заключается в том, что символы Германа-Могена привязаны к координатной системе и к установке кристалла относительно нее.

4.4.4. Координатные системы в кристаллографии. Категории и сингонии кристаллов. Установка кристаллов.

Необходимость фиксировать то или иное направление, ту или иную плоскость или взаимное расположение граней заставляет вводить в кристаллах координатную систему. Однако пользоваться во всех случаях какой-то единой системой, например, принятой в аналитической геометрии декартовой, в кристаллографии неудобно, так как прямоугольная система с одинаковыми масштабами по осям не позволит достаточно полно и наглядно отразить основные особенности кристаллов - *симметрию и анизотропию*.

Чтобы увязать координатные системы с симметрией кристалла, координатные оси совмещают с его особыми направлениями (*особыми направлениями кристалла считают оси симметрии и нормали к плоскости симметрии*) и лишь при отсутствии или недостаточном их числе - с действительными или возможными ребрами кристалла (если есть одно особое направление, то ребра должны лежать в плоскости, перпендикулярной этому направлению).

Таким образом, координатные системы кристаллов будут различаться как своими осевыми углами (α, β, γ), так и различной степенью эквивалентности координатных направлений. Последнее может быть условно отражено соотношением масштабных единиц a, b, c вдоль осей X, Y, Z соответственно.

Три возможности - $a \neq b \neq c$, $a = b \neq c$, $a = b = c$ позволяют распределить кристаллографические координатные системы по трем категориям - *низшей, средней и высшей* соответственно. Классы с единым координатным репером объединяют в одно семейство — *сингонию*, т. е. в пределах каждой сингонии классы симметрии будут иметь одинаковую координатную систему.

Позиции международного символа (а их бывает 3, 2 и 1) (*таблица 2*) совмещают с особыми, неэквивалентными направлениями, которыми являются оси симметрии и нормали к плоскостям симметрии. Только при их отсутствии координатные оси совмещают с возможными или действительными ребрами кристалла.

Таблица 2. Обозначение 32-х точечных групп симметрии по международной символике (символы Германа–Могена)

Позиции в символе Германа-Могена		
Сингония	1	2 3
I. Низшая категория: $a \neq b \neq c$		
Триклинная сингония: $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$	1 Особые направления отсутствуют; координатные оси выбирают параллельно действующим или возможным ребрам кристалла.	
Моноклинная сингония: $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ \neq 120^\circ$	2 (параллельна оси Y) m (перпендикулярна оси Y) $2/m$ (ось симметрии параллельна оси Y и плоскость ей перпендикулярная) Две остальные оси X и Z выбирают в плоскости, перпендикулярной оси Y и параллельно действующим или возможным ребрам кристалла под углом моноклинности β , $\beta > 90^\circ$	
Орторомбическая (ортогональная) сингония: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2 (ось симметрии параллельна оси X)	2 (ось симметрии параллельна оси Z)
	m (плоскость симметрии перпендикулярна оси X)	2 (ось симметрии параллельна оси Z)
	m (плоскость симметрии перпендикулярна оси X)	m (плоскость симметрии перпендикулярна оси Z)

Таблица 2. Обозначение 32-х точечных групп симметрии по международной символике (символы Германа–Могена)

Позиции в символе Германа-Могена			
Сингония	1	2	3
II. Средняя категория $a = b \neq c$			
Тетрагональная сингония: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$4, \bar{4}$ (ось симметрии параллельна оси Z) $4/m$ (ось симметрии параллельна оси Z и плоскость ей перпендикулярна)	$2, m$ (ось симметрии параллельна осям X, Y или плоскость симметрии им перпендикулярна)	$2, m$ (ось симметрии параллельна диагональному направлению или плоскость симметрии ей перпендикулярна)
Гексагональная сингония: $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 60^\circ$	$6, \bar{6}$ (ось симметрии параллельна оси Z) $6/m$ (ось симметрии параллельна оси Z и плоскость ей перпендикулярна)	$2, m$ (ось симметрии параллельна осям X, Y или плоскость симметрии им перпендикулярна)	$2, m$ (ось симметрии параллельна диагональному направлению или плоскость симметрии ей перпендикулярна)
Тригональная сингония: $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$	$3, \bar{3}$ (ось симметрии параллельна оси Z)	$2, m$ (ось симметрии параллельна осям X, Y или плоскость симметрии им перпендикулярна)	
III. Высшая категория $a = b = c$			
Кубическая сингония: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$4, \bar{4}, m$ (ось симметрии параллельна осям X, Y, Z или плоскость симметрии им перпендикулярна)	$3, \bar{3}$ (ось симметрии, расположенная под 45° по отношению к осям X, Y, Z)	$2, m$ (имеющийся элемент симметрии - ось симметрии параллельна диагональному направлению или плоскость симметрии ей перпендикулярна)

Таблица 3. Группы симметрии (кристаллографические и некристаллографические) и их обозначения

Генераторы	Обозначение		
	Шенфлис	Герман-Моген	Бравэ
n	C_n : $C_1 C_3 C_5 C_7 \dots$ $C_2 C_4 C_6 C_8 \dots$	n : 1 3 5 7 ... 2 4 6 8 ...	L_n
$n, 2$ ($2 \perp n$)	D_n : ($D_1=C_2$) $D_3 D_5 D_7 \dots$ $D_2 D_4 D_6 D_8 \dots$	$n2$: 12=2 32 52 72 ... $n22$: 222 422 622 822 ...	$L_n n L_2$
n_i	$C_{ni} (S_n)$: $S_2 S_6 S_{10} S_{14} \dots$ (C_s) $S_4 (C_{3h}) S_8 \dots$	$\bar{n}$: $\bar{1} \quad \bar{3} \quad \bar{5} \quad \bar{7} \dots$ ($\bar{2} = m$) $\bar{4}$ ($\bar{6} = 3/m$) $\bar{8} \dots$	L_{ni} (P)
n, m_h ($n \perp m$)	C_{nh} $\bar{h} = C_s C_{3h} C_{5h} C_{7h} \dots$ $C_{2h} C_{4h} C_{6h} C_{8h} \dots$	($\bar{2}n$): ($1/m=m$) $3/m=\bar{6}$ $5/m=\bar{10}$ $7/m=\bar{14} \dots$ n/m : $2/m$ $4/m$ $6/m$ $8/m \dots$	L_{2ni} $L_n PC$
n, m_v ($n \parallel m$)	C_{nv} $C_v = C_s C_{3v} C_{5v} C_{7v} \dots$ $C_{2v} C_{4v} C_{6v} C_{8v} \dots$	nm : $1m = m$ $3m$ $5m$ $7m \dots$ nmm : $mm2$ $4mm$ $6mm$ $8mm \dots$	$L_n n P$
n_i, m_d ($n_i \parallel m$)	D_{nd} (C_{2h}) $D_{3d} D_{5d} D_{7d} \dots$ (C_{2v}) $D_{2d} (D_{3h}) D_{4d} \dots$	$\bar{n} m$: ($\bar{1} m=2/m$) $\bar{3} m$ $\bar{5} m$ $\bar{7} m \dots$ $\bar{n} 2m$: ($\bar{2} m=mm2$) $\bar{4} 2m$ ($\bar{6} m2$) $\bar{8} 2m \dots$	$L_{ni} n L_{2n} P$ $L_{ni} (n/2) L_2 (n/2) P$
$n, 2, m_h$ ($n \perp m, n \perp 2$)	D_{nh} (C_{2v}) $D_{3h} D_{5h} D_{7h} \dots$ $D_{2h} D_{4h} D_{6h} D_{8h} \dots$	($\bar{2}n$) $m2$: ($mm2$) ($3/m$) $m=\bar{6} m2$ ($5/m$) $m=\bar{10} m2$ ($7/m$) $m=\bar{14} m2 \dots$ n/mmm : mmm $4/mmm$ $6/mmm$ $8/mmm \dots$	$L_{2ni} n L_{2n} P$ $L_n n L_2 (n+1) PC$
3, 2; 4; 5	T O Y	23 432 532	$3L_2 4L_3$ $3L_4 4L_3 6L_2$ $6L_5 10L_3 15L_2$
3, m, 2; 4; 5	T_h O_h Y_h T_d	$m3$ $m3m$ $m\bar{3}m$ $43m$	$3L_2 4L_3 3PC$ $3L_4 4L_3 6L_2 9PC$ $6L_5 10L_3 15L_2 21PC$ $3L_4 i 4L_3 6P$

В *таблице 3* представлены обозначения точечных групп симметрии (кристаллографических и некристаллографических) тремя способами.

4.5. Групповые аксиомы

В математической теории множеств совокупности различного рода элементов рассматриваются исключительно с точки зрения их отношений. Если среди множества элементов $g_1, g_2, \dots$ выполняются 4 определенных правила (групповые аксиомы), то оно называется группой G .

Групповые аксиомы формулируются следующим образом:

1. В группе определено "групповое действие"- "умножение", так что произведение любой пары элементов $g_i \in G$ и $g_j \in G$ есть элемент g_k , также содержащийся в G :

$$g_i g_j = g_k \in G$$

2. Для любых элементов группы умножение ассоциативно

$$g_i(g_j g_k) = (g_i g_j) g_k$$

3. Существует единичный элемент $E \in G$, такой, что для любого $g_i \in G$, $E g_i = g_i$.

4. Для любого $g_i \in G$ существует обратный элемент g_i^{-1} , так что $g_i g_i^{-1} = E$.

Таким образом, совокупность элементов, обладающих свойствами 1-4, называется группой.

Рассмотрим точечную группу $L_{4i}2L_22P$ (рис. 45).

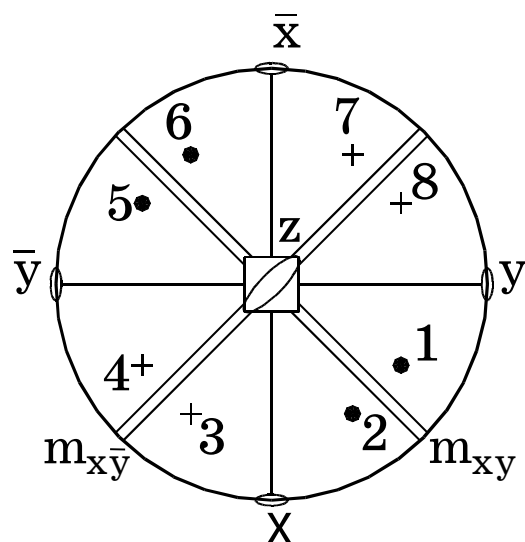


Рис. 45. Стереодиаграмма кристалла точечной группы $L_{4i}2L_22P$ ($D_{2d}, \bar{4}2m$)

1. т.8 → т.1 при помощи операции симметрии $\hat{2}_y$;
т.1 → т.2 при помощи операции симметрии $\hat{m}_{xy}$;
т.8 → т.2 при помощи операции симметрии $\hat{4}_z^1$.

$$\hat{2}_y \times \hat{m}_{xy} = \hat{4}_z^1$$

Первая аксиома выполняется, так как операции симметрии $\hat{2}_y$, $\hat{m}_{xy}$ и $\hat{4}_z^1$ содержатся в точечной группе $L_{4i}2L_22P$ ($D_{2d}, \bar{4}2m$)

2. т.8→т.2 при помощи действия двух операций симметрии ($\hat{2}_y \times \hat{m}_{xy}$);
 т.2→т.5 при помощи операции симметрии $\hat{m}_{x\bar{y}}$.

Таким образом,

т.8→т.5 при помощи действия ($\hat{2}_y \times \hat{m}_{xy}$) $\hat{m}_{x\bar{y}}$

т.8→т.4 при помощи действия двух операций симметрии ($\hat{m}_{xy} \times \hat{m}_{x\bar{y}}$);

т.4→т.5 при помощи операции симметрии $\hat{2}_y$

Таким образом,

т.8→т.5 при помощи действия $\hat{2}_y (\hat{m}_{xy} \times \hat{m}_{x\bar{y}})$

Следовательно, выполняется вторая групповая аксиома для группы $L_{4i}2L_22P$ ($D_{2d}, \bar{4}2m$):

$$(\hat{2}_y \times \hat{m}_{xy}) \hat{m}_{x\bar{y}} = \hat{2}_y (\hat{m}_{xy} \times \hat{m}_{x\bar{y}})$$

3. В каждом классе симметрии, в частности, $L_{4i}2L_22P$ ($D_{2d}, \bar{4}2m$) присутствует симметрическая операция $\hat{1} \equiv \hat{E}$, которая будучи умноженной на любую операцию симметрии данной группы не меняет действие последней. Итак, выполняется третья групповая аксиома.

4. т. 8→т. 2 под действием $\hat{4}_z^1$,

т. 2→т.8 при помощи $\hat{4}_z^{-1}$.

$$\hat{4}_z^1 \times \hat{4}_z^{-1} = \hat{1} \equiv \hat{E}.$$

Четвертая групповая аксиома также выполняется.

Следовательно, совокупность операций симметрии $L_{4i}2L_22P$ ($D_{2d}, \bar{4}2m$) образует группу.

В связи с тем, что для операций 32-х классов симметрии выполняются 4 групповые аксиомы, то при изучении законов симметрии мы можем полностью использовать результаты теории групп, которая в настоящее время подробно разработана.

4.5.1. Таблица Кейли

Все рассмотренные закономерности сводятся к закону "умножения" операций симметрии (правилу взаимодействия элементов симметрии), поэтому свойства абстрактной группы G полностью определяются ее таблицей умножения.

В качестве примера абстрактной группы приведем схему таблицы умножения групп 4-го порядка т.е. состоящей из четырех элементов.

	Е	А	В	С
Е	Е	А	В	С
А	А	В	С	Е
В	В	С	Е	А
С	С	Е	А	В

При умножении элемента столбца на элемент строки получим: $B=A^2$, $C=AB=A^3$, $E=AC=A^4$. Видно, что в рассматриваемой группе все элементы группы являются степенями единственного элемента A . Группа n -го порядка, состоящая из элементов A_n называется *циклической*. В этом случае произведение любой пары элементов группы не зависит от порядка сомножителей.

К циклическим группам относятся точечные группы симметрии C_n , в частности, группа C_4 аналогична рассмотренной выше абстрактной группе 4-го порядка.

Можно показать, что существует еще одна абстрактная группа 4-го порядка:

	E	A	B	C
E	E	A	B	C
A	A	E	C	B
B	B	C	E	A
C	C	B	A	E

При умножении элемента столбца на элемент строки получим: $A=BC$, $B=AC$, $C=AB$, $E=A^2$, $E=B^2$, $E=C^2$.

Группа симметрии D_2 ($3L_2$, 222) аналогична данной абстрактной группе: $\hat{2}_x \times \hat{2}_y = \hat{2}_z$, $\hat{2}_x \times \hat{2}_z = \hat{2}_y$, $\hat{2}_y \times \hat{2}_z = \hat{2}_x$; $\hat{2}_x \times \hat{2}_x = \hat{E}$, $\hat{2}_y \times \hat{2}_y = \hat{E}$, $\hat{2}_z \times \hat{2}_z = \hat{E}$.

Структура точечной группы симметрии задается при помощи произведения пар элементов и оформляется в виде таблицы Кейли (квадрат Кейли).

Каждая клетка таблицы содержит операцию, которая представляет собой произведение операций, стоящих в начале соответствующей строки и соответствующего столбца.

Квадрат Кейли группы $3m$ (рис. 46)

	$\hat{E}$	$\hat{3}_z^1$	$\hat{3}_z^2$	$\hat{m}^1$	$\hat{m}^2$	$\hat{m}^3$
$\hat{E}$	$\hat{E}$	$\hat{3}_z^1$	$\hat{3}_z^2$	$\hat{m}^1$	$\hat{m}^2$	$\hat{m}^3$
$\hat{3}_z^1$	$\hat{3}_z^1$	$\hat{3}_z^2$	$\hat{E}$	$\hat{m}^2$	$\hat{m}^3$	$\hat{m}^1$
$\hat{3}_z^2$	$\hat{3}_z^2$	$\hat{E}$	$\hat{3}_z^1$	$\hat{m}^3$	$\hat{m}^1$	$\hat{m}^2$
$\hat{m}^1$	$\hat{m}^1$	$\hat{m}^3$	$\hat{m}^2$	$\hat{E}$	$\hat{3}_z^2$	$\hat{3}_z^1$
$\hat{m}^2$	$\hat{m}^2$	$\hat{m}^1$	$\hat{m}^3$	$\hat{3}_z^1$	$\hat{E}$	$\hat{3}_z^2$
$\hat{m}^3$	$\hat{m}^3$	$\hat{m}^2$	$\hat{m}^1$	$\hat{3}_z^2$	$\hat{3}_z^1$	$\hat{E}$

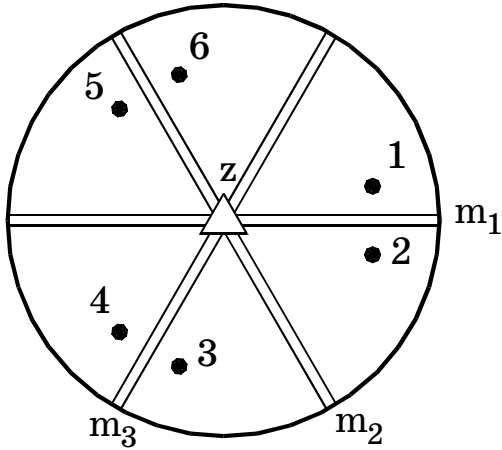


Рис. 46. Стереограмма группы 3m:

$$\begin{aligned}
 \text{т.1} &\rightarrow \text{т.2} - \hat{m}_1, \\
 \text{т.1} &\rightarrow \text{т.3} - \hat{3}_z^1, \\
 \text{т.1} &\rightarrow \text{т.4} - \hat{m}_2, \\
 \text{т.1} &\rightarrow \text{т.5} - \hat{3}_z^2, \\
 \text{т.1} &\rightarrow \text{т.6} - \hat{m}_3, \\
 \text{т.1} &\rightarrow \text{т.1} - \hat{3}_z^3 = \hat{E}.
 \end{aligned}$$

Нетрудно убедиться, что эта группа может быть получена всего лишь при помощи двух операций симметрии $\hat{3}_z^1$ и $\hat{m}_1$:

$$\hat{3}_z^2 = \hat{3}_z^1 \times \hat{3}_z^1 = \hat{3}_z^{-1}, \quad \hat{m}^2 = \hat{3}_z^1 \times \hat{m}^1, \quad \hat{E} = \hat{3}_z^1 \times \hat{3}_z^1 \times \hat{3}_z^1 = \hat{3}_z^3, \quad \hat{m}^3 = \hat{m}^1 \times \hat{3}_z^1.$$

Элементы группы, из которых можно при помощи закона умножения получить все остальные элементы, называются *генерирующими элементами*, или *генераторами*.

4.5.2. Групповые свойства

1. Порядок группы определяется числом ее элементов, т.е. порядок группы определяет число симметрических операций группы. Он соответствует числу граней общего положения, связанных операциями симметрии этой группы.

Порядок рассмотренной группы **3m** равен **6** (рис. 46).

2. В пределах группы можно выделить подмножества, которые сами по себе образуют группу и называются *подгруппой данной группы*.

Рассматривая таблицу умножения группы **3m**, можно увидеть, что подмножества $\{\hat{E}, \hat{3}_z^1, \hat{3}_z^2\}$, $\{\hat{E}, \hat{m}^1\}$, $\{\hat{E}, \hat{m}^2\}$, $\{\hat{E}, \hat{m}^3\}$ также удовлетворяют всем групповым аксиомам и, следовательно, также образуют группы.

3. Порядок любой подгруппы **H** группы **G** должен быть делителем порядка группы **G**, т.е. группа **3m** не может иметь подгруппы 4-го и 5-го порядков. Таким образом, в группе **3m**, являющейся группой 6-го порядка, имеется одна подгруппа 3-го и три подгруппы 2-го порядка.

Обозначим группу **3m** через **A** и рассмотрим группу $\mathbf{B} = \{\hat{E}, \hat{m}_h\}$, где $\hat{m}_h$ - плоскость симметрии, перпендикулярная оси 3-го порядка. Операция $\hat{m}_h$ отображает точки из верхнего полупространства в нижнее, причем элементы групп **A** и **B** коммутируют друг с другом, т.е. $A_i B_j = B_j A_i$, то $C_k = A_i B_j$ называется *прямым преобразованием*. В результате получаем новую группу:

$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \{\hat{E}, \hat{3}_z^1, \hat{3}_z^2, \hat{m}_1, \hat{m}_2, \hat{m}_3, \hat{m}_h, \hat{3}_z^1 \hat{m}_h = \hat{3}_z^1, \hat{3}_z^2 \hat{m}_h = \hat{3}_z^2, \hat{m}_1 \hat{m}_h = 2_{z(1)}, \hat{m}_2 \hat{m}_h = 2_{z(2)}, \hat{m}_3 \hat{m}_h = 2_{z(3)}\}$ - $L_{6i} 3L_2 3P (D_{3h}, \bar{6}m2)$. Порядок этой группы равен $6 \times 2 = 12$, и она является *надгруппой* группы 3m, которая в свою очередь представляет подгруппу группы $\bar{6}m2$.

ГЛАВА 5. МЕТОД КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО ИНДИЦИРОВАНИЯ

Для описания кристаллических структур и многогранников необходимо выявить взаимное расположение граней в пространстве. С этой целью применяются кристаллографические символы, определяющие положение любой грани данного кристалла относительно некоторых координатных осей и некоторой грани, принятой за параметрическую.

5.1. Индексы и символы

5.1.1. Символ узла.

Если один из узлов решетки выбрать за начало координат, то любой другой узел решетки определяется радиусом вектором $\mathbf{t} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$, где m, n, p – три числа, которые называют *индексами данного узла* (рис. 47).

Совокупность чисел m, n, p , записанная в двойных квадратных скобках $[[mnp]]$, называются *символом узла*.

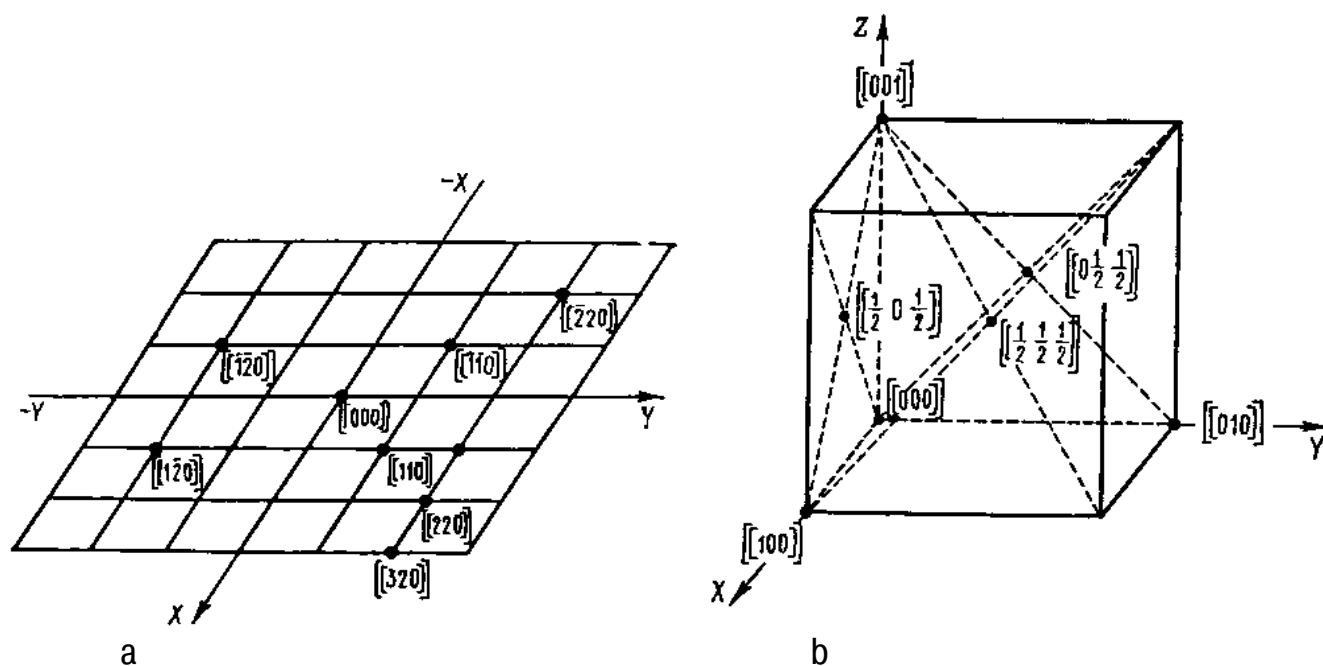


Рис. 47. Символы узлов в плоской сетке (а) и вершин, центра объема и центров граней куба (б)

Числа в символе пишутся подряд, без запятых, читаются порознь. Индексы в символе могут быть положительными, отрицательными, целыми и дробными.

5.1.2. Символ рядов (ребер)

Ряд или узловая прямая в решетке, а также ребро кристаллического многогранника характеризуются наклоном в выбранной системе координат. Если ряд не проходит через начало координат, то его мысленно сдвигают параллельно самому себе так, чтобы он прошел через начало координат (мы имеем право на такой перенос, так как все параллельные направления равноценны). Тогда направление ряда определяется двумя точками: началом координат и любым узлом ряда. Символ этого узла принимают за символ ряда и пишут в квадратных скобках **[rst]** (рис. 48). Этот символ характеризует семейство параллельных рядов, а также и параллельные ребра кристаллического многогранника.

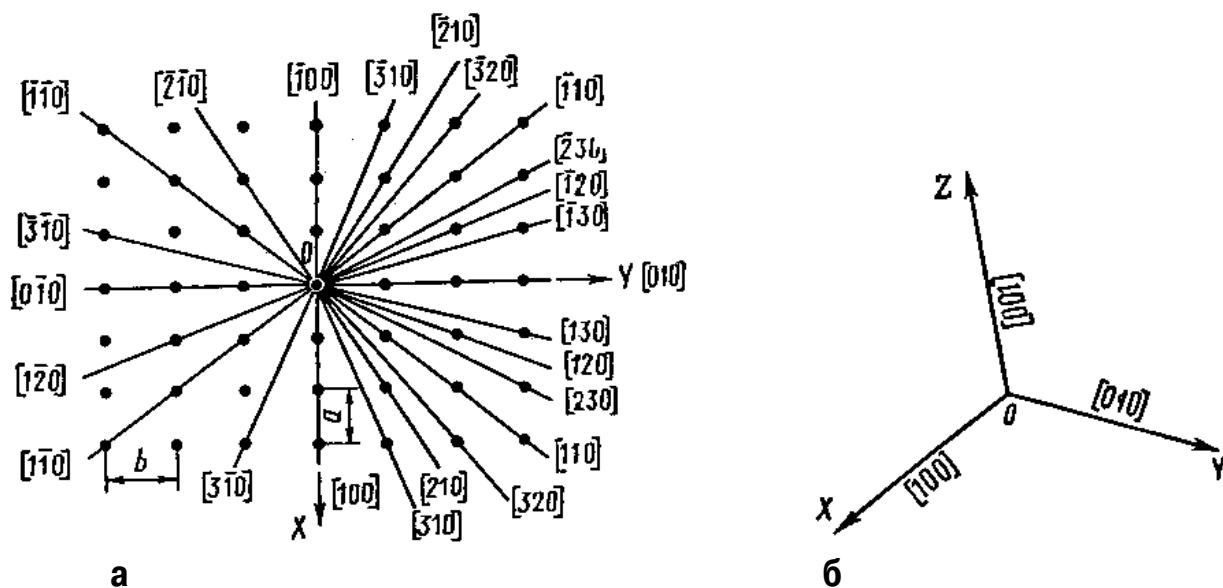


Рис. 48. Символы некоторых направлений в плоской сетке (а) и осей координат (б)

За определение символа ряда принято выбирать узел, ближайший к началу координат. Если индексы в символе ряда кратные, то их можно сократить на целое положительное число. Индексы в символе могут быть положительными или отрицательными, но только целыми. Совокупность симметрично-эквивалентных направлений записываются в угловых скобках **<rst>**.

Грани кристалла, пересекающиеся по параллельным ребрам, образуют *пояс*, или *зону*, а общее направление этих ребер называется *осью зоны*. Символ **[rst]** характеризует ось зоны.

Оси координат имеют символы **OX-[100]**, **OY-[010]**, **OZ-[001]**. Здесь видно одно из преимуществ кристаллографической символики: символы осей не зависят от углов между осями координат и от осевых отрезков: они одинаковы в любой координатной системе.

5.1.3. Символы плоскостей (граней)

Параметры Вейса. Символы Миллера.

Плоские сетки в пространственной решетке и соответствующие им грани кристаллического многогранника тоже характеризуются наклоном в заданной

системе координат. Любая грань кристалла параллельно какой-либо плоской сетке, а значит бесконечному числу параллельных ей плоских сеток.

Рассмотрим семейство плоскостей **1, 2, 3**, которые параллельны оси *Z* (рис. 49, таблица 4).

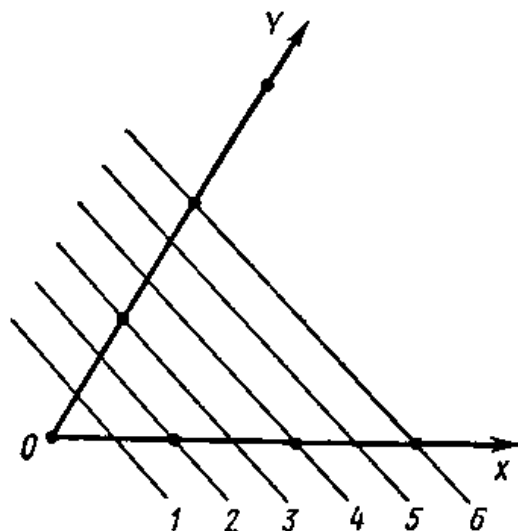


Рис. 49. К определению символов семейства параллельных плоскостей

Таблица 4. Определение индексов граней.

Грань	Отрезки по осям			Параметры Вейса			Индексы Миллера		
	<i>X</i>	<i>Y</i>	<i>Z</i>	<i>p</i>	<i>q</i>	<i>r</i>	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>
1	$a/2$	$b/3$	∞	3	2	∞	2	3	0
2	a	$2/3b$	∞	3	2	∞	2	3	0
3	$3/2a$	b	∞	3	2	∞	2	3	0

Серию отношений рациональных чисел **1/2:1/3: ∞** для всех параллельных плоскостей можно представить как отношение целых взаимно простых чисел ***p:q:r***, так называемых *параметров Вейса*. Параметры Вейса – отрезки, отсекаемые гранями на координатных осях. Однако ради удобства (ноль вместо бесконечности) лучше пользоваться отношением обратных (также целочисленных) величин – ***h,k,l*** – *индексов Миллера*:

$$h:k:l=1/p:1/q:1/r$$

Три индекса, записанные в круглых скобках (***hkl***) представляют *символ грани*. Индексы в символе грани могут быть положительными или отрицательными, но только целыми. Совокупность симметрично-эквивалентных граней записывается в фигурных скобках **{*hkl*}**.

5.1.4. Четырехиндексные оси гексагональной сингонии (тригональная и гексагональная подсистемы). Символы Бравэ.

Для описания тригональных и гексагональных кристаллов трехосная система координат неудобна. Это поясняет рис. 50.

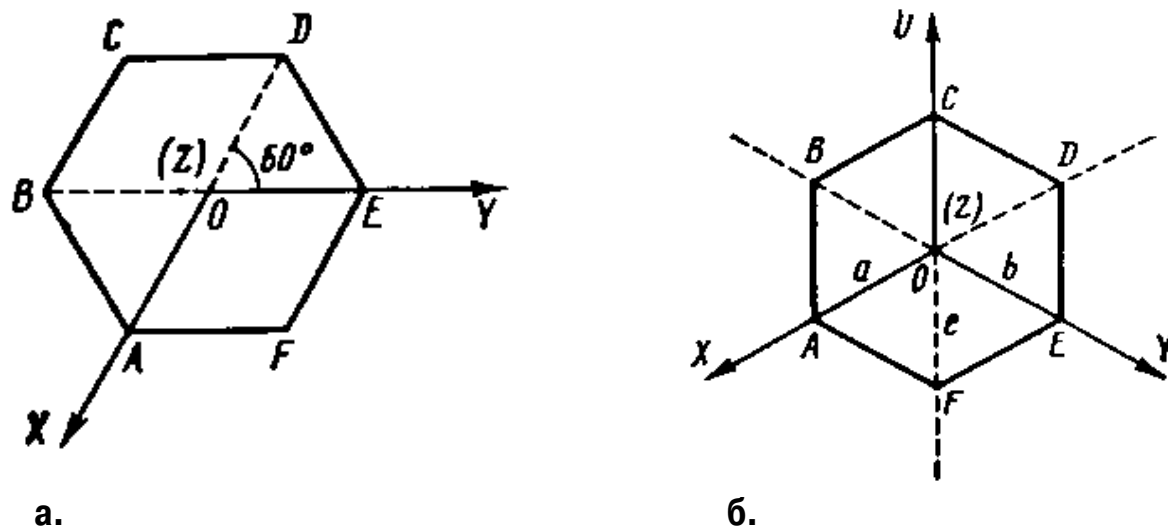


Рис. 50. Индексирование граней гексагонального кристалла в системе координат: трехосной (а), четырехосной (б)

Здесь показаны следы граней гексагональной призмы, параллельных оси **Z** (нормаль к плоскости чертежа). В трехосной системе координат (рис. 50а) символы граней будут:

$$EF: (010), AF: (100), AB: (1\bar{1}0),$$

$$BC: (0\bar{1}0), CD: (\bar{1}00), DE: (\bar{1}10).$$

Получается, что одинаковые грани, связанные друг с другом симметрическими преобразованиями, имеют разные символы, чего быть не должно.

От этого можно избавиться, вводя четвертую координатную ось **U**, т.е. три оси (**X, Y, U**) пересекаются под углами **120°** (рис. 50б). Перпендикулярно им проходит четвертая (вертикальная) ось **Z**. Она совмещается с осями 6-го или 3-го порядков. Для обозначения символов граней в кристаллах гексагональной и тригональной сингоний используются *индексы Бравэ* – (**hkil**).

Тогда в четырехкоординатной системе грани гексагональной призмы будут иметь следующие символы:

$$EF: (01\bar{1}0), AF: (10\bar{1}0), AB: (1\bar{1}00),$$

$$BC: (0\bar{1}10), CD: (\bar{1}010), DE: (\bar{1}100).$$

Таким образом, применение четырехосной координатной системы позволяет описать симметрично-эквивалентные грани однотипными символами.

Индекс **i** зависит от первых двух индексов (рис. 51).

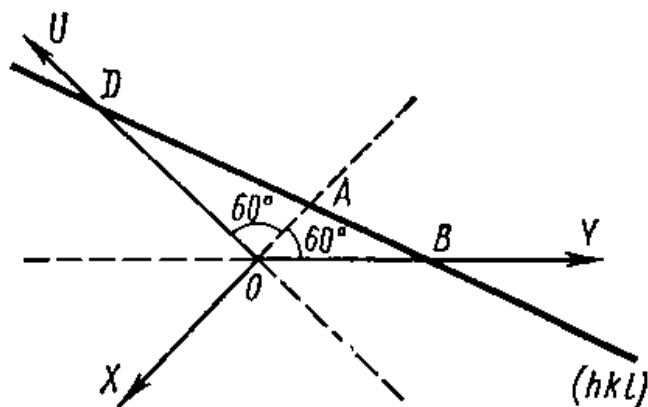


Рис. 51. К выводу соотношения между индексами в гексагональной системе координат

Плоскость BD с символом (hkl) отсекает на осях X, Y, U соответственно отрезки: $OA = -a/h$, $OB = a/k$, $OD = a/i$.

$$S_{\triangle OBD} = S_{\triangle OAB} +$$

$S_{\triangle OAD}$, (S - площадь треугольника)

$$1/2 OD \cdot OA \sin 60^\circ + 1/2 OA \cdot OB \sin 60^\circ = 1/2 OD \cdot OB \sin 120^\circ,$$

$$-a/i \cdot a/h \sin 60^\circ - a/h \cdot a/k \sin 60^\circ = a/i \cdot a/k \sin 120^\circ,$$

$$1/hi + 1/hk = -1/ki,$$

$$k+i = -h,$$

$$h+k+i = 0$$

В тригональной системе иногда прибегают и к иному способу индирования, предложенному Миллером. В этом случае в качестве кристаллографических осей выбирают не направления осей симметрии, а направления ребер так называемого основного ромбоэдра – кристаллографической формы, выводимой из куба путем деформации его вдоль одной из четырех осей 3-го порядка (рис. 52).

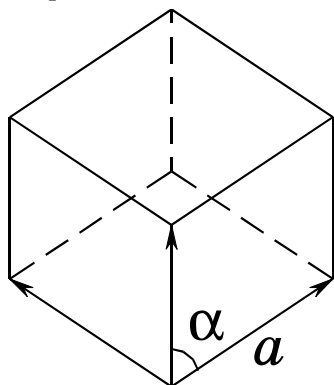


Рис. 52. Характеристики тригонального кристалла: параметр a и угол α

Осям X, Y, Z отвечают направления ребер ромбоэдра, равных друг другу, равнонаклонных к оси 3-го порядка кристалла и образующих между собой определенный угол α , который наряду с отрезком a , отсекаемым по оси X, служит характеристикой тригонального кристалла. Ось 3-го порядка в этом случае располагается вертикально, и проектирование ведется на плоскость, перпендикулярно этой оси (рис. 52а).

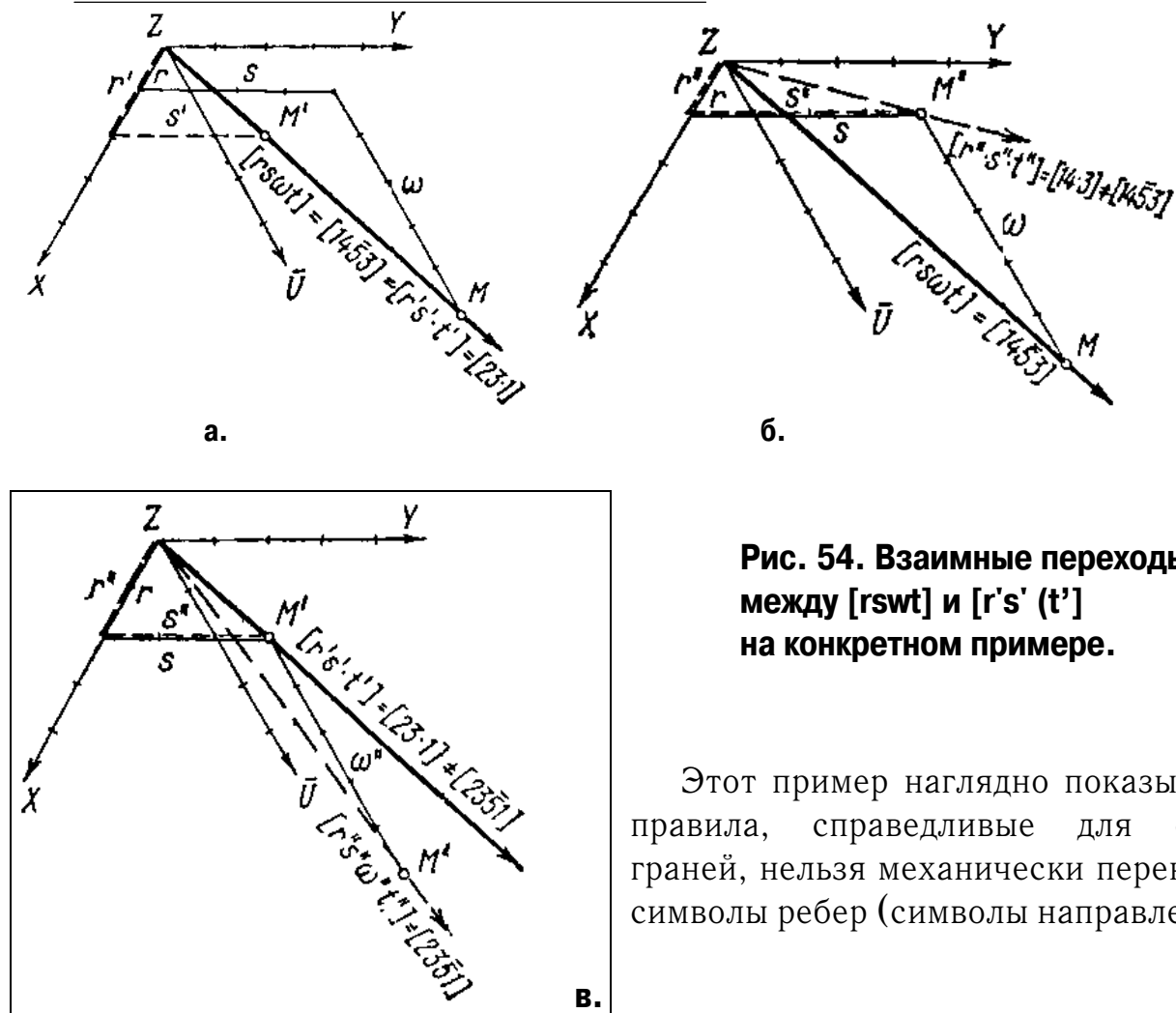


Рис. 54. Взаимные переходы между $[rswt]$ и $[r's' (t')]$ на конкретном примере.

Этот пример наглядно показывает, что правила, справедливые для символов граней, нельзя механически переносить на символы ребер (символы направлений).

5.2. Закон целых чисел, или закон рациональности отношений параметров (закон Гаюи - 1783 г)

Возьмем в кристалле 3 непараллельных ребра с общей точкой $O-O_1, O_2, O_3$ - за координатные оси. Непараллельные грани $A_1B_1C_1$ и $A_2B_2C_2$ пересекают все три ребра, т. е. отсекают отрезки OA_1, OB_1, OC_1 и OA_2, OB_2, OC_2 . Эти отрезки отвечают параметрам Вейса (рис. 55).

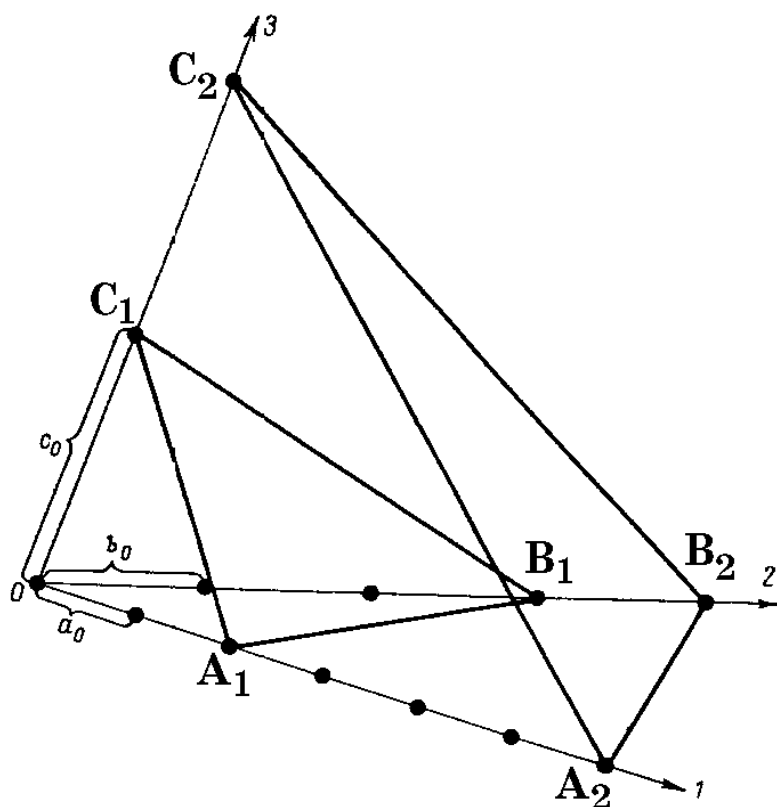


Рис.55. Рисунок, поясняющий закон целых чисел:
O1, O2, O3 – кристаллографические оси;
a, b, c – промежутки рядов (параметры); **A₁B₁C₁** и **A₂B₂C₂** – плоские сетки.

Разделив параметры какой-либо грани на соответственные параметры другой грани и взяв отношения между ними, получим отношение целых и сравнительно малых чисел:

$$OA_2/OA_1:OB_2/OB_1:OC_2/OC_1=p:q:r,$$

т. е. **p, q, r** – целые и обычно небольшие числа.

Такова сущность закона целых чисел – закона Гаюи (1783 г) :

Двойные отношения параметров, отсекаемых двумя любыми гранями кристалла на трех пересекающихся ребрах его, равны отношениям целых и сравнительно малых чисел.

Обозначим:

$$OA_1 = ua, OB_1 = vb, OC_1 = wc \text{ и } OA_2 = ra, OB_2 = sb, OC_2 = tc.$$

где **u, v, w** и **r, s, t** – числа целые или дробные, но обязательно рациональные;

a₀, b₀, c₀ – промежутки рядов **O1, O2, O3** (параметры ячейки).

$$ra / ua : sb / vb : tc/wc = r/u : s/v : t/w$$

Приведя к общему знаменателю полученные три дроби и взяв отношения между ними, всегда придем к целым числам.

Остается выяснить, почему эти числа являются сравнительно малыми, только в редких случаях превышают 10.

Известно, что на реальных кристаллах преобладают грани, характеризующиеся наибольшей ретикулярной плотностью – числом материальных частей, приходящихся на единицу поверхности. Возьмем плоскую сетку (рис. 56).

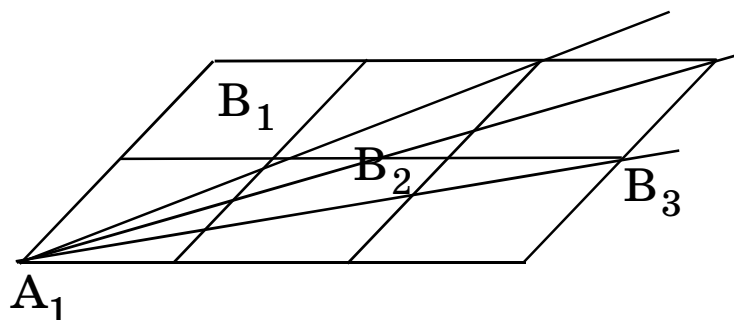


Рис. 56. К доказательству нереальности образования граней с большими индексами

Узлы вдоль A_1B_2 располагаются реже, чем вдоль A_1B_1 , соответственно вдоль A_1B_3 узлы лежат реже, чем вдоль A_1B_2 и т. д. Ясно, что сетка A_1B_n обладает чрезвычайно малой ретикулярной плотностью и тем самым не должна представлять реальную грань.

5. 3. Единичная грань

Рассмотрим грань $A_0B_0C_0$, которая на трех непараллельных ребрах кристалла X, Y, Z , принятых за координатные оси, отсекает параметры $OA_0=a, OB_0=b, OC_0=c$ (рис. 57). В этом случае грань $A_0B_0C_0$, является единичной, или масштабной гранью, и символ этой грани (111) .

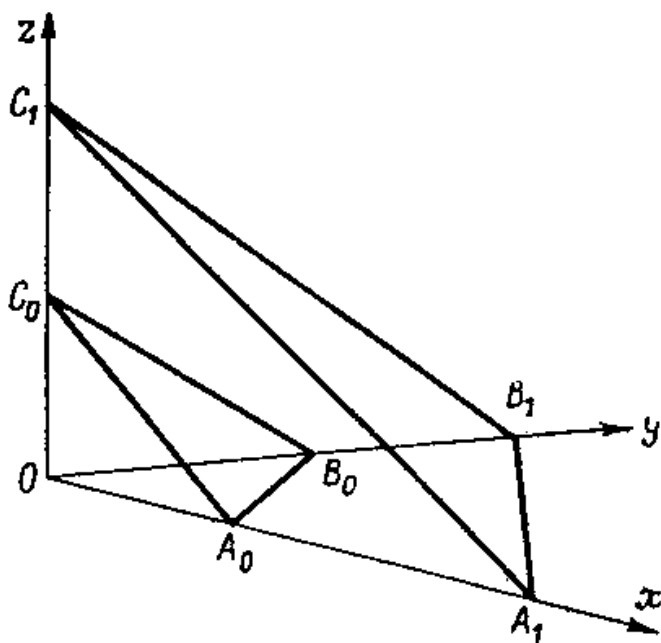


Рис. 57. $A_0B_0C_0$ - единичная грань, $A_1B_1C_1$ - произвольная грань кристалла.

Эта запись в общем случае отнюдь не означает равенства параметров единичной грани: единицы в символе указывают лишь то, что параметры именно этой грани выбраны за относительные единицы измерения параметров всех остальных граней (и ребер) данного кристалла.

Для нахождения символа некоторой грани $A_1B_1C_1$ отрезки, отсекаемые ею на координатных осях, измеряют отрезками единичной грани по соответствующим осям. Взяв отношения обратных величин и избавившись от дробей, получим символ данной грани:

$$OA_1/OA_0:OB_1/OB_0:OC_1/OC_0 = p:q:r,$$

$$1/p : 1/q : 1/r = h:k:l$$

5.3.1. Единичная грань в кристаллах разных сингоний.

Высшая категория.

Кубическая сингония.

В **кубической** сингонии координатные оси связаны равнонаклонной к ним осью 3-го порядка, поэтому они равномасштабны, и три единицы измерения одинаковы: $a = b = c$. Таким образом, в кристаллах кубической сингонии единичная грань отсекает равные отрезки по всем трем координатным осям. На стереограмме проекция такой грани занимает строго определенную позицию – на выходе оси 3-го порядка (рис. 58).

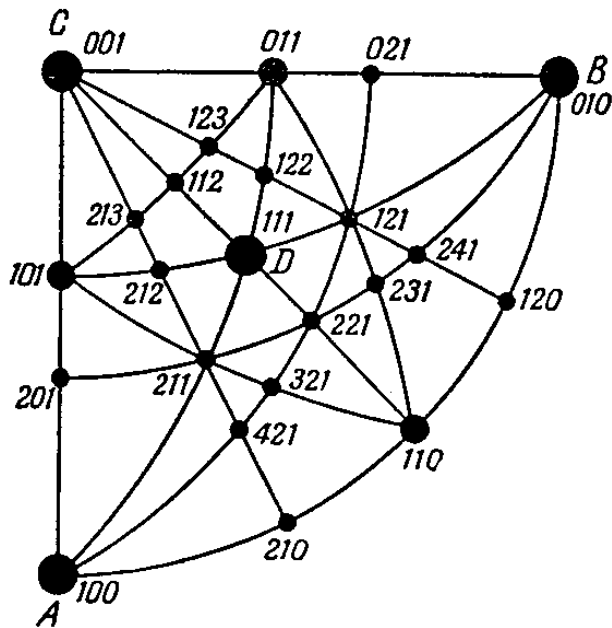


Рис. 58. Гномостереограмма кубического кристалла (на рисунке представлена 1/4 стереограммы).

Итак, для кубического кристалла

$$h:k:l = OA_0/OA : OB_0/OB : OC_0/OC \\ = \frac{1}{OA} : \frac{1}{OB} : \frac{1}{OC}$$

Средняя категория.

Тетрагональная сингония.

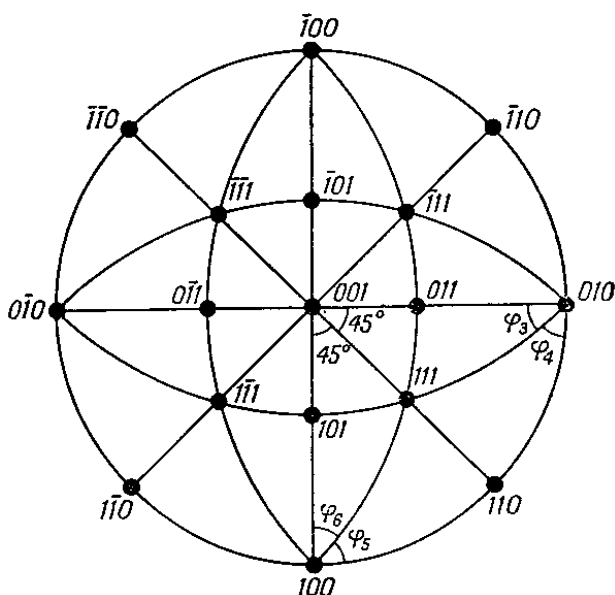


Рис. 59. Гномостереограмма тетрагонального кристалла

В кристаллах *тетрагональной* сингонии *единичная* грань располагается на биссектрисе угла между *горизонтальными* координатными осями (рис. 59).

Если такой грани нет, то

- за масштабную грань принимают грань, лежащую на горизонтальной оси, и ей присваивают символ **(101)** или **(011)** (рис. 60а). Отсекаемые ею отрезки по осям (параметры Вейса) соответствуют искомым параметрам **OA₀** и **OC₀** (или **OB₀** и **OC₀**). Тогда индексы остальных граней можно определить по соотношению

$$h:l=OA_0/OA : OC_0/OC \text{ или}$$

$$k:l=OB_0/OB : OC_0/OC$$

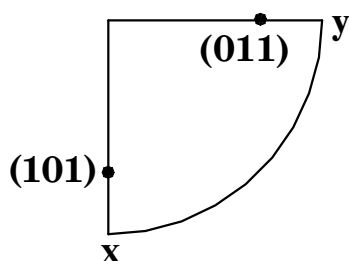
- за масштабную грань принимают грань, пересекающую обе горизонтальные оси, и ей придают символ **hk1** (рис. 61). Эта грань отсекает по координатным осям параметры **OA**, **OB**, **OC=OC₀**. Тогда индексы этой грани будут равны

$$h : k : 1 = OA_0/OA : OB_0/OB : OC_0/OC (=OC_0),$$

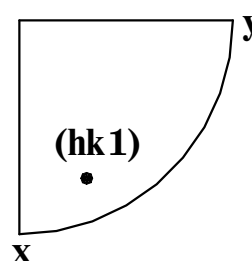
$$h : 1 = OA_0/OA : 1,$$

$$k : 1 = OA_0/OB : 1,$$

$$OA_0 (=OB_0) = OA \cdot h = OB \cdot k$$



а.



б.

Рис. 60. К выбору масштабных граней для тетрагональных кристаллов

Необходимо отметить, что в данном случае индекс $l=1$ следует вписывать в символ лишь после того, как отношение $h:k$ будет сведено к отношению целых чисел, иначе символ исходной (масштабной) грани окажется неоправданно усложненным.

Гексагональная и тригональная сингонии.

В гексагональной и тригональной сингониях за масштабную грань принимается грань с символом **(10 $\bar{1}$ 1)** или **(11 $\bar{2}$ 1)** (рис. 61).

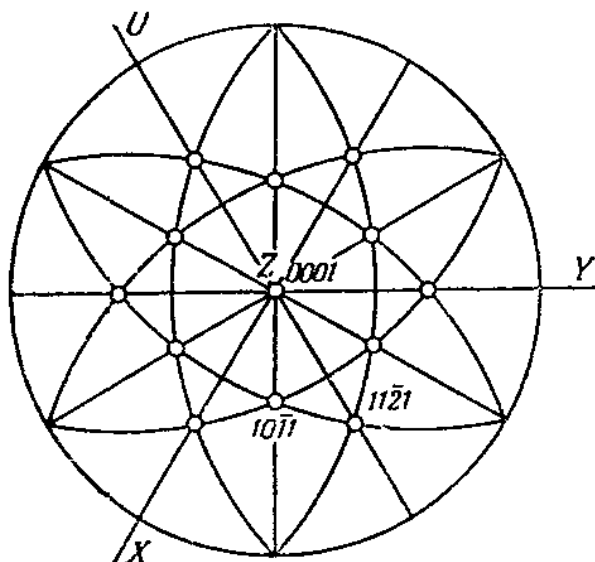


Рис. 61. Гномостереограмма гексагонального кристалла

Если таких граней нет, то индирование граней производится аналогично тетрагональным кристаллам.

Низшая категория.

Орторомбическая сингония.

За единичную грань в кристаллах орторомбической сингонии принимают любую наклонную грань, пересекающую три координатные оси (рис. 62).

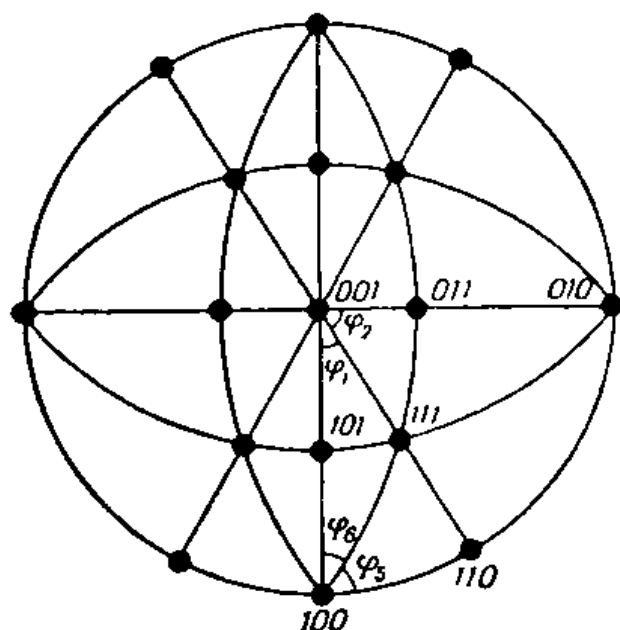


Рис. 62. Гномостереограмма орторомбического кристалла

Если такой грани нет, то масштабными гранями в таком случае могут быть лишь грани, пересекающие по две координатные оси, т. е. грани типа $(hk0)$, $(h0l)$, $(0kl)$. Каждая из них дает относительные единицы измерения лишь по двум соответствующим осям, поэтому две любые грани такого типа принимают за (110) и (011) , (110) и (101) или (101) и (011) (рис. 63) :

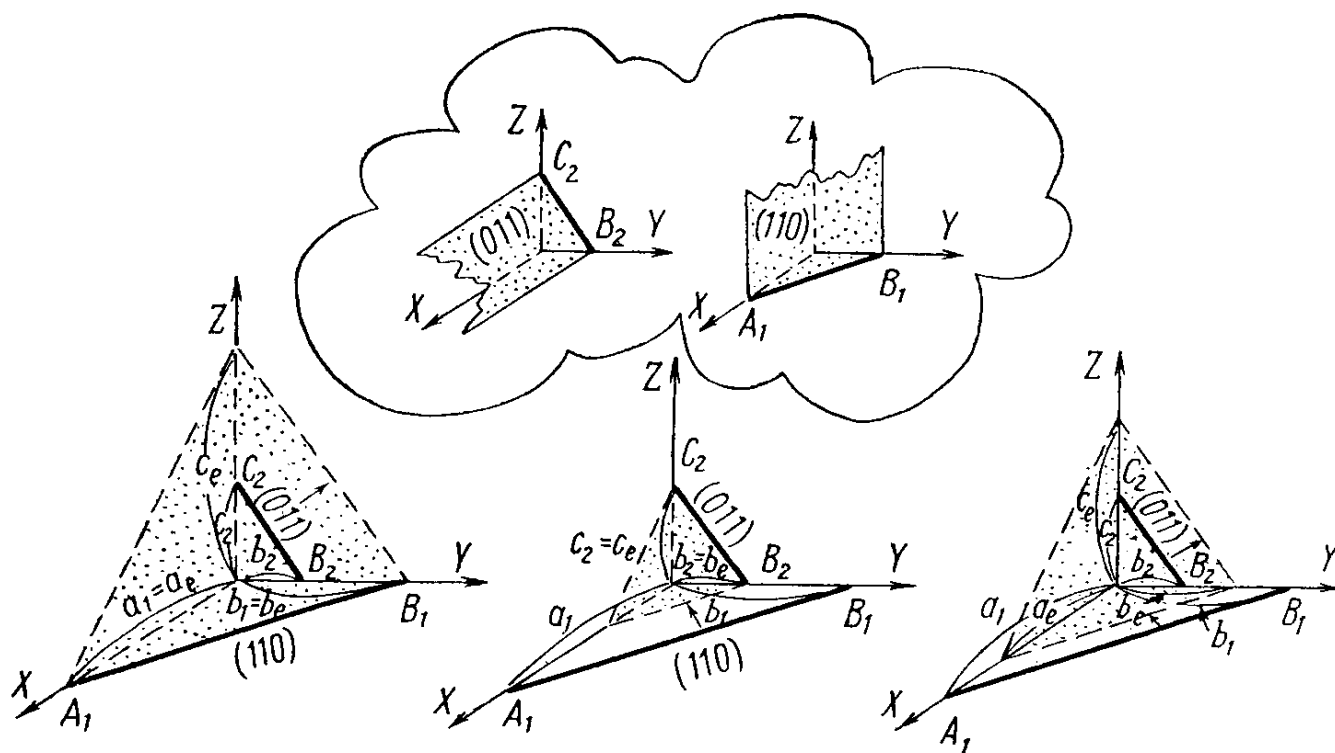


Рис. 63. Выбор возможной единичной грани по двум двуединичным в низшей категории.

(110) и (011)

$$h:k = OA_0/OA_1:OB_0/OB_1=1:1$$

$$k:l = OB_0/OB_2:OC_0/OC_2=1:1$$

$$OA_0/OB_0 = OA_1/OB_1$$

$$OB_0/OC_0 = OB_2/OC_2$$

Умножим и разделим правую дробь на один и тот же параметр соответственно (OB_2/OB_2) и (OB_1/OB_1) :

$$OA_0/OB_0 = (OA_1/OB_1) (OB_2/OB_2)$$

$$OA_0/OC_0 = (OB_2/OC_2) (OB_1/OB_1).$$

Получим:

$$OA_0:OB_0:OC_0 = (OA_1 (OB_2) : (OB_1 (OB_2) : (OC_2 (OB_1)$$

Из **рис. 63** следует, что параллельный перенос граней, не меняя их символов, позволяет уравнивать отрезки (параметры Вейса) по той оси, которую пересекают обе грани, и получить таким образом единицы измерения по всем трем координатным осям – параметры единичной грани OA_0 , OB_0 , OC_0 .

Моноклиная сингония

В кристаллах **моноклиной** сингонии единичная грань **(111)** пересекает все три координатные оси (**рис. 64**).

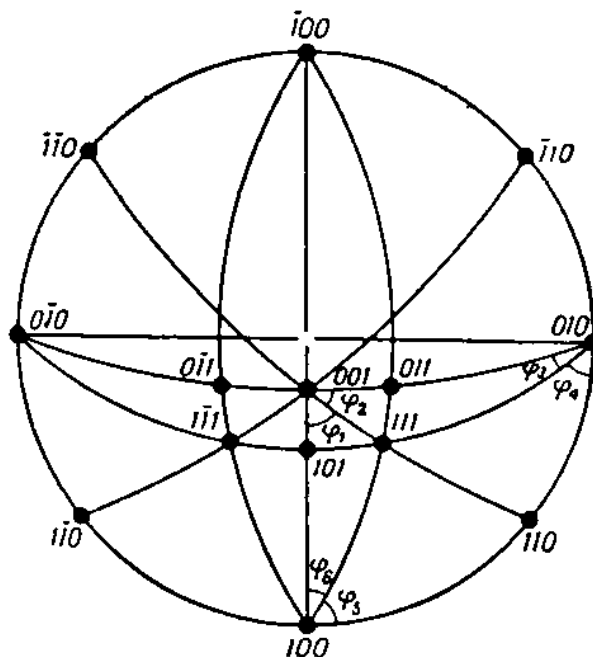


Рис. 64. Гномостереограмма моноклиного кристалла

Если такой грани нет, то масштабными могут быть лишь грани типа **(hk0)**, **(h0l)**, **(0kl)**, каждая из которых дает относительные единицы измерения лишь по двум соответствующим осям, поэтому две любые грани такого типа принимают за **(110)** и **(011)**, **(110)** и **(101)** или **(101)** и **(011)**. Таким образом, поступают как и в случае орторомбического кристалла.

Триклинная сингония

В кристаллах **триклинной** сингонии, аналогично кристаллам орторомбической и моноклинной сингоний, единичная грань **(111)** пересекает все три координатные оси (**рис. 65**).

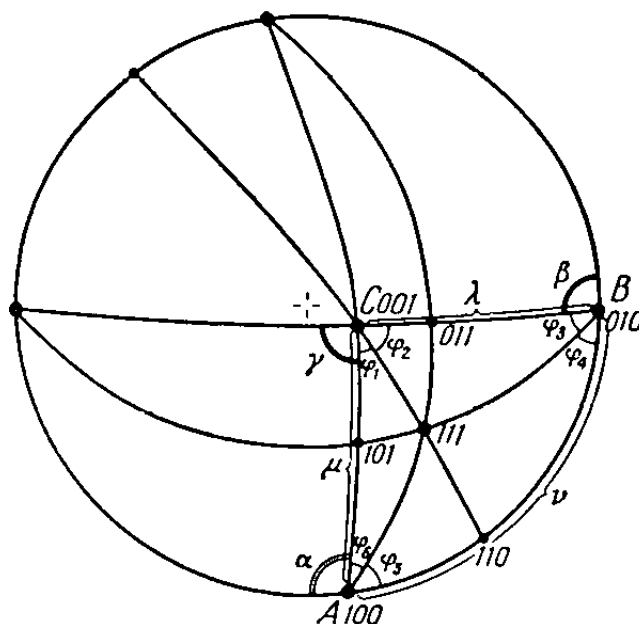


Рис. 65. Гномостереограмма триклинного кристалла

Если таких граней нет, то индигирование проводится также, как и для орторомбического кристалла.

5.4. Метод косинусов Вульфа.

Положение грани данного кристалла можно выразить не только с помощью отрезков на координатных осях, но и с помощью углов между нормальными к граням, проведенными из начала координат и соответствующими координатными осями. Этот метод называется *метод косинусов Вульфа*.

На **рис. 66** грань $A_0B_0C_0$ - единичная (**Е**), нормаль ON_0 к которой образует с координатными осями **X, Y, Z** полярные углы λ_0, μ_0, ν_0 .

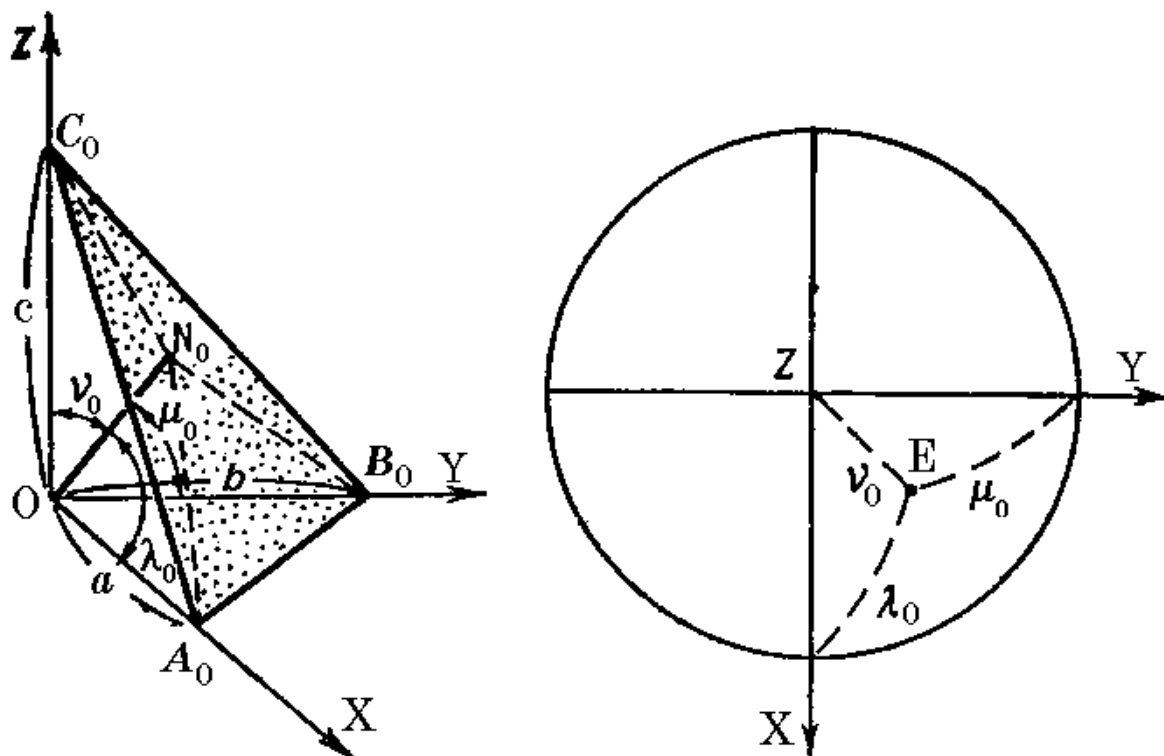


Рис. 66. К методу косинусов Вульфа.

Из треугольников ON_0A_0 , ON_0B_0 и ON_0C_0 следует:

$$\begin{aligned} OA_0:OB_0:OC_0 &= ON_0/\cos \lambda_0:ON_0/\cos \mu_0:ON_0/\cos \nu_0 = \\ &= 1/\cos \lambda_0:1/\cos \mu_0:1/\cos \nu_0 \end{aligned}$$

Очевидно, что для грани с символом (hkl)

$$\begin{aligned} h:k:l &= OA_0/OA:OB_0/OB:OC_0/OC = \\ &= \cos \lambda/\cos \lambda_0:\cos \mu/\cos \mu_0:\cos \nu/\cos \nu_0 \end{aligned}$$

Полярные углы определяют, пользуясь сеткой Вульфа, измеряя на стереограмме дуги между полюсами граней и выходами координатных осей.

Метод косинусов Вульфа определения символов граней кристалла является более точным. Используя его можно определить геометрические константы кристалла – a , b , c .

$$\begin{aligned} OA_0:OB_0:OC_0 &= \\ a:b:c &= 1/\cos \lambda_0:1/\cos \mu_0:1/\cos \nu_0 = \\ &= \cos \mu_0/\cos \lambda_0:\cos \mu_0/\cos \mu_0:\cos \mu_0/\cos \nu_0 \\ &= \cos \mu_0/\cos \lambda_0:1:\cos \mu_0/\cos \nu_0 \end{aligned}$$

Характерная константа тригональных и гексагональных кристаллов – осевое отношение c/a – легко определяется по уравнениям (рис. 61):

$$\operatorname{tg} (0001:10\bar{1}1) = c/(a \cos 30^\circ)$$

$$\operatorname{tg} (0001:11\bar{2}1) = c/(a/2)$$

или

$$c/a = 1/2 \operatorname{tg} (0001:11\bar{2}1)$$

5.5. Закон зон (закон Вейса)

Грань кристалла, как всякая плоскость, может быть представлена уравнением первой степени относительно координат (т. е. координат точки на плоскости)

Уравнение плоскости в отрезках:

$$x/a + y/b + z/c = 1$$

Для плоскости, параллельной данной, но проходящей через начало координат, получим

$$x/a + y/b + z/c = 0$$

Если некоторая прямая лежит на этой плоскости, то координаты любой точки этой прямой должны удовлетворять уравнению данной плоскости.

Перейдем от абстрактных плоскостей и прямой к грани кристалла **(hkl)** и ребру **[rst]**. Из определения символа грани и ребра следует, что

$$h:k:l = a_0/a : b_0/b : c_0/c \quad (a:b:c = a_0/h : b_0/k : c_0/l),$$

$$r:s:t = x/a_0 : y/b_0 : z/c_0 \quad (x:y:z = ra_0 : sb_0 : tc_0).$$

Уравнение в кристаллографической системе координат примет вид

$$hr + ks + lt = 0$$

Это фундаментальное уравнение, выведенное Вейсом, связывает символы грани **(hkl)** и ребра **[rst]**, параллельного этой грани, или, что то же, символы грани и оси зоны, включающей эту грань.

Допустим, что даны две грани **(h₁k₁l₁)** и **(h₂k₂l₂)** и надо определить символ ребра пересечения этих двух граней

$$h_1 r + k_1 s + l_1 t = 0$$

$$h_2 r + k_2 s + l_2 t = 0$$

Такие системы решаются способом перекрестного умножения:

$$\begin{array}{c} h_1 \left| \begin{array}{ccc} k_1 & l_1 & h_1 \\ \times & \times & \times \end{array} \right| l_1 \\ h_2 \left| \begin{array}{ccc} k_2 & l_2 & h_2 \\ \times & \times & \times \end{array} \right| l_2 \end{array}$$

$$r:s:t = (k_1 l_2 - k_2 l_1) : (h_2 l_1 - h_1 l_2) : (h_1 k_2 - h_2 k_1)$$

Таким образом можно вычислить символ грани **(hkl)**, параллельно двум ребрам **[r₁s₁t₁]** и **[r₂s₂t₂]**:

$$h r_1 + k s_1 + l t_1 = 0$$

$$h r_2 + k s_2 + l t_2 = 0$$

$$\begin{array}{c} r_1 \left| \begin{array}{ccc} s_1 & t_1 & r_1 \\ \times & \times & \times \end{array} \right| t_1 \\ r_2 \left| \begin{array}{ccc} s_2 & t_2 & r_2 \\ \times & \times & \times \end{array} \right| t_2 \end{array}$$

$$h:k:l = (r_1 t_2 - r_2 t_1) : (r_2 t_1 - r_1 t_2) : (r_1 s_2 - r_2 s_1)$$

Итак, две грани определяют ребро (зону), а два ребра – грань. Отсюда становится ясно, что возможные грани и ребра кристалла можно получить по четырем граням, не пересекающимся по параллельным ребрам, или по четырем

ребрам, три из которых не пересекаются в одной точке. Другими словами, любой тетраэдр предопределяет возможные грани и ребра кристалла, причем три грани этого тетраэдра диктуют координатные оси, четвертая – параметрическую единичную грань.

Следствия из закона зон

1. В символе любой грани, параллельной координатной оси, индекс, соответствующий этой оси, равен 0.

Например, в символах граней, параллельных оси **X**, **h=0**: символ оси **X** – **[100]**, отсюда **hx1+kx0+lx0=0**, т. е. **h=0**

2. Если грань (**hkl**) принадлежит той же зоне, что и грани (**h₁k₁l₁**) и (**h₂k₂l₂**), то определитель

$$\begin{vmatrix} h & k & l \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} = 0$$

Это условие *тавтозоональности*.

По аналогии с предыдущим: если ребро **[rst]** принадлежит той же плоскости, что и ребра **[r₁s₁t₁]** и **[r₂s₂t₂]**, то определитель

$$\begin{vmatrix} r & s & t \\ r_1 & s_1 & t_1 \\ r_2 & s_2 & t_2 \end{vmatrix} = 0$$

Это условие *компланарности*.

3. Грань (**hkl**), индексы которой могут быть представлены как **mh₁+nh₂**, **mk₁+nk₂**, **ml₁+nl₂**, лежит в одной зоне с гранями (**h₁k₁l₁**) и (**h₂k₂l₂**):

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ r_2 & s_2 & t_2 \\ mh_1+nh_2 & mk_1+nk_2 & ml_1+nl_2 \end{vmatrix} = 0$$

Это правило *сложения зон*.

При **m = n = 1**

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ r_2 & s_2 & t_2 \\ h_1+h_2 & k_1+k_2 & l_1+l_2 \end{vmatrix}$$

Это *компликационное правило*, или *правило Гольдшмидта*:

По символам двух граней (**h₁k₁l₁**) и (**h₂k₂l₂**) можно определить символ третьей грани (**hkl**), симметрично притупляющей ребро между ними.

$$h=h_1+h_2$$

$$k=k_1+k_2$$

$$l=l_1+l_2$$

То же самое и по отношению к **[rst]**.

$$\begin{vmatrix} r_1 & s_1 & t_1 \\ r_2 & s_2 & t_2 \\ mr_1 + nr_2 & ms_1 + ns_2 & mt_1 + nt_2 \end{vmatrix} = 0$$

При $m = n = 1$

$$\begin{vmatrix} r_1 & s_1 & t_1 \\ r_2 & s_2 & t_2 \\ r_1 + r_2 & s_1 + s_2 & t_1 + t_2 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$$

$$\mathbf{t} = \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2$$

Возможные грани и ребра по Вейсу удобно получать, пользуясь гномостереограммой (рис. 67).

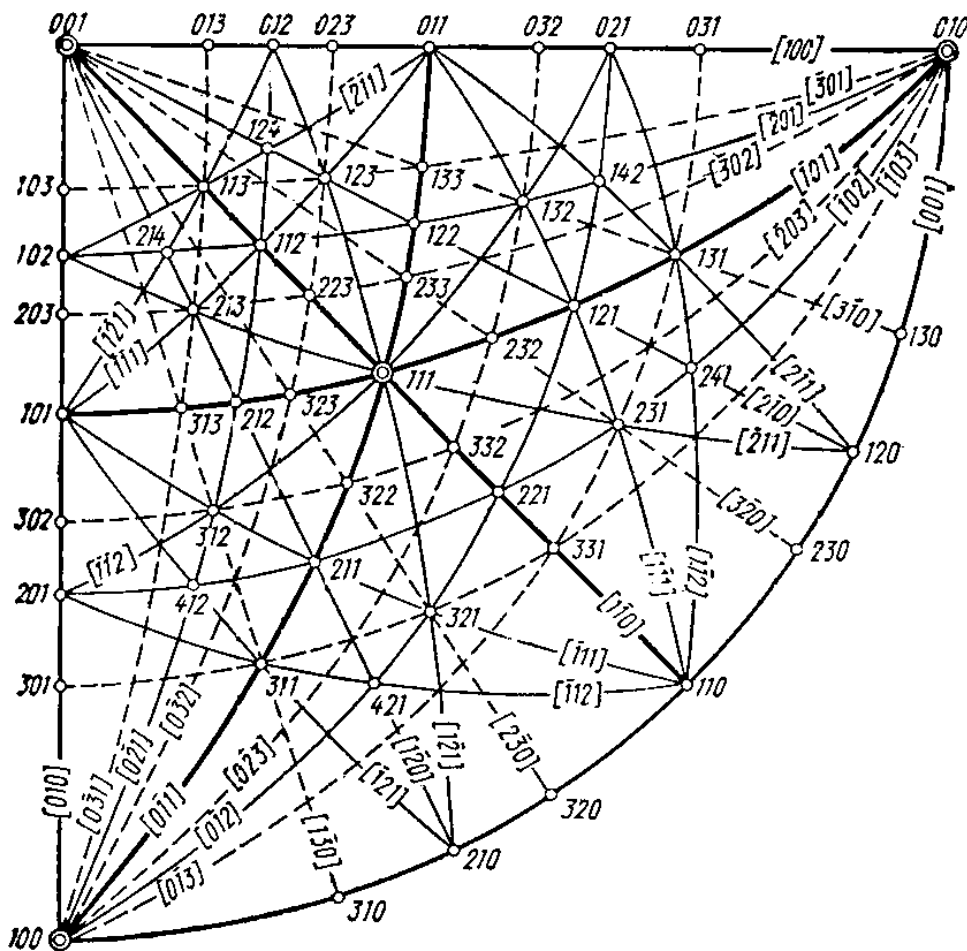


Рис. 67. Получение возможных граней кубического кристалла методом развития зон.

Если необходимо определить символ какой-либо грани данного кристалла, надо нанести четыре грани **(100)**, **(010)**, **(001)**, **(111)** и заданную грань на гномостереограмму, а затем провести зоны через грани с известными символами.

4. Для всех граней зон, проходящих через грань **(001)**, кроме самой грани **(001)**, постоянно отношение $\mathbf{h}/\mathbf{k}$. Таким же образом легко показать, что для

граней зон, проходящих через грань **(010)**, постоянно отношение **h/l**, а через грань **(100)** - **k/l**.

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h & k & l \end{vmatrix} = 0 \quad \mathbf{h_1:k_1=h:k}$$

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h & k & l \end{vmatrix} = 0 \quad \mathbf{h_1:l_1=h:l}$$

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h & k & l \end{vmatrix} = 0 \quad \mathbf{k_1:l_1=k:l}$$

Эти соотношения позволяют проверить правильность определения символов граней кристалла.

Глава 6

ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ И КОМБИНАЦИИ ПРОСТЫХ ФОРМ

Простой формой кристалла называют семейство граней, взаимосвязанных симметрическими операциями данной группы (класса) симметрии.

Число граней простой формы и ее облик определяются расположением исходной грани относительно элементов симметрии класса.

Различают *частное и общее* положения грани. *Грань частного положения* либо перпендикулярна какому-либо особому направлению, либо параллельно единичному особому направлению, либо образует равные углы с эквивалентными особыми направлениями. Все остальные положения граней общие. Простые формы, образованные гранями первого типа, называют *частными*, второго - *общими*. Частные простые формы имеют символы **{100}**, **{110}**, **{111}**, **{hh l}** и т. д; общие простые формы - символы **{hk l}**.

Грань общего положения подвергается действию всех операций симметрии данной группы, поэтому число граней общей формы равно числу операций, составляющих эту группу, т. е. равно ее порядку.

В огранке кристалла могут участвовать грани либо одной простой формы, либо нескольких, образуя *комбинационные многогранники*. В одном классе может быть несколько простых форм и одна общая, поэтому общая простая форма способна служить характеристикой данного класса, в частности, давать ему свое название. Надо иметь в виду, что в комбинационных кристаллах очертание грани простой формы может сильно исказиться.

Грани *закрытой простой формы* полностью замыкают заключенное между ними пространство, а *открытой* - не замыкают. Простые формы отражают особенности не только отдельных классов, но и целых семейств родственных

классов. Так, появление на кристалле только открытых форм предопределяет классы с *единичным полярным направлением*; возникновение лишь закрытых простых форм говорит о классах *без единичных направлений*, а сосуществование открытых и закрытых простых форм характеризуют классы с *биполярными особыми направлениями*.

Две простые формы, которые можно совместить с помощью поворотов и поступательных перемещений в пространстве, называются *тождественно равными*. Если такое совмещение осуществимо только после отражения одной из простых форм в плоскости или инверсии в точке, то такие простые формы называются *энантиоморфными* (рис. 68).

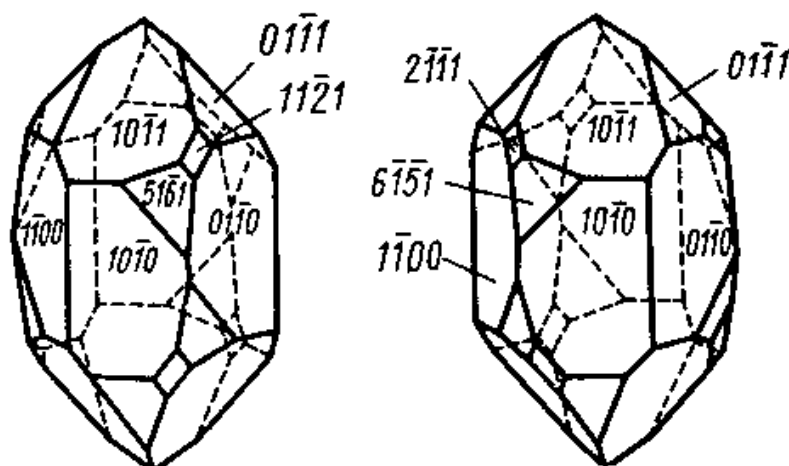


Рис. 68. Энантиоморфные (правая и левая) формы кварца SiO_2

В кристаллографии имеем 47 типов простых форм. Все они выводятся строго математически, исходя из 32 видов симметрии.

6.1. Простые формы в классах с единичным направлением

В кристаллах *низшей и средней категорий* возможны 32 простые формы. К таким формам относятся:

- моноэдр* — одна грань, отличная от всех остальных по форме и размерам;
- пинакоид* — две параллельные грани;
- диэдр (осевой и плоскостной)* — две пересекающиеся грани;
- пирамиды и бипирамиды* — три и более пересекающихся в одной вершине граней;
- призмы* — три и более граней, пересекающихся по параллельным ребрам;
- трапецоэдры (в том числе, симметризованный — ромбоэдр)* - антипирамиды — верхняя часть бипирамиды повернута на некоторый угол по отношению к нижней части той же бипирамиды;
- скаленоэдры* — пирамиды с преломленными гранями;
- тетраэдры (ромбический и тетрагональный)* .

В *таблице 5* и на **рис. 69-73** представлены простые формы для кристаллов *низшей и средней категорий*.

Таблица 5. Простые формы кристаллов низшей и средней категорий и их распределение по группам симметрии

Закрытые												
Открытые												
моноэдр	пинакоид	диэдр	призма		пирамида		бипирмида		тетраэдр	ромбоэдр	скаленоэдр	трапецеоэдр
			п-гональная	ди-п-гональная	п-гональная	ди-п-гональная	п-гональная	ди-п-гональная				
	S2								S4	S6		
	Cs	Cs										
Cn: C1, C2, C3, C4, C6	C2	C2	Cn: C3, C4, C6		Cn: C3, C4, C6		Cnh: C3h, C4h, C6h	Cnh: C3h, C4h, C6h				
Cnv: C2v, C3v, C4v, C6v	C2v		Cnv: C3v, C4v, C6v	Cnv: C2v, C3v, C4v, C6v	Cnv: C3v, C4v, C6v	Cnv: C2v, C3v, C4v, C6v						
	Cnh: C2h, C3h, C4h, C6h		Cnh: C3h, C4h, C6h									
	Dn: D2, D3, D4, D6								D2	D3		Dn: D3, D4, D6
	Dnh: D2h, D3h, D4h, D6h		Dnh: D3h, D4h, D6h	Dnh: D2h, D3h, D4h, D6h	Dnh: D3h, D4h, D6h	Dnh: D3h, D4h, D6h	Dnh: D3h, D4h, D6h	Dnh: D3h, D4h, D6h				
	Dnd: D2d, D3d								D2d	D3d	Dnd: D2d, D3d	D3d

Пирамиды. Данная простая форма образуется из одной грани в произвольной ориентации относительно оси n . Пирамиды могут быть n -гранные (таблица 6) и $2n$ -гранные (таблица 7).

Таблица 6. Названия n -гранных пирамид

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
1	Моноэдр	69а
2	Диэдр (осевой)	69г
3	Тригональная пирамида	70-IIIa
4	Тетрагональная пирамида	70-IIIв
6	Гексагональная пирамида	70-IIIд

Таблица 7. Названия $2n$ -гранных пирамид

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
m	Диэдр (плоскостной)	69 в
$mm2$	Орторомбическая пирамида	69 ж
$3m$	Дитригональная пирамида	70-IIIб
$4mm$	Дитетрагональная пирамида	70-IIIг
$6mm$	Дигексагональная пирамида	70-IIIе

$2n$ -гранные пирамиды имеют в два раза больше граней, чем n -гранные пирамиды. Так, для группы $4mm$ дитетрагональная пирамида (восьмигранная) имеет в сечении восьмиугольник, в котором углы равны через один (дитетрагон), в отличие от тетрагональной пирамиды группы 4, в сечении которой квадрат (правильный тетрагон) (рис. 70-г).

Призмы. Грани данной простой формы параллельны поворотным осям симметрии, и их названия аналогичны названиям соответствующих пирамид (таблица 8 и 9).

Таблица 8. Названия n -гранных призм

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
1	Моноэдр (моногональная призма)	69а
2	Пинакоид (дигональная призма)	69б
3	Тригональная призма	70-IIa
4	Тетрагональная призма	70-IIв
6	Гексагональная призма	70-IIг

Таблица 9. Названия $2n$ -гранных призм

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
m	Пинакоид (димонагональная призма)	69б
mm2	Ромбическая (дидигональная) призма	69д
3m	Дитригональная призма	70-IIб
4mm	Дитетрагональная призма	70-IIг
6mm	Дигексагональная призма	70-IIе

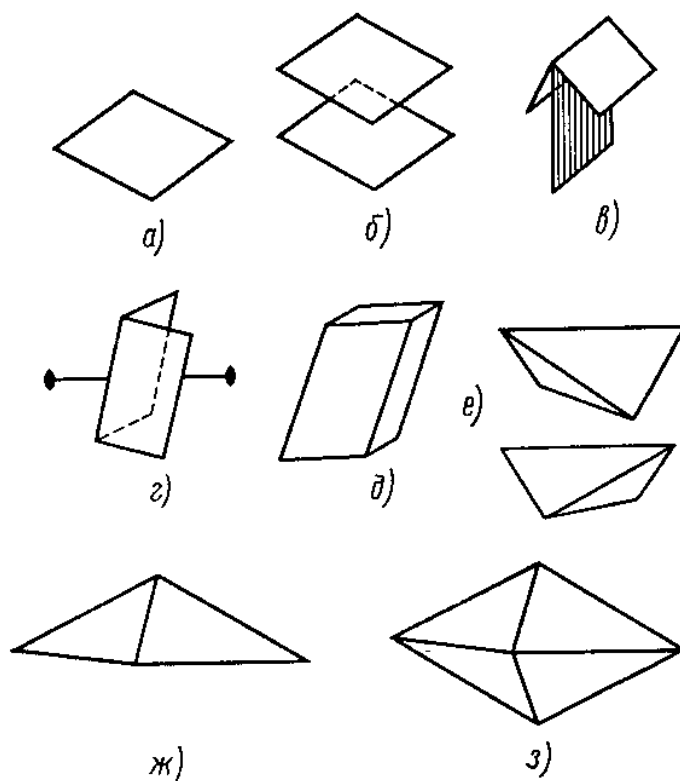


Рис. 69. Простые формы кристаллов низшей категории:

моноэдр (а),
 пинакоид (б),
 диэдр плоскостной (в),
 диэдр осевой (г),
 орторомбическая призма (д),
 орторомбические тетраэдры –
 правый и левый (е),
 орторомбическая пирамида (ж).

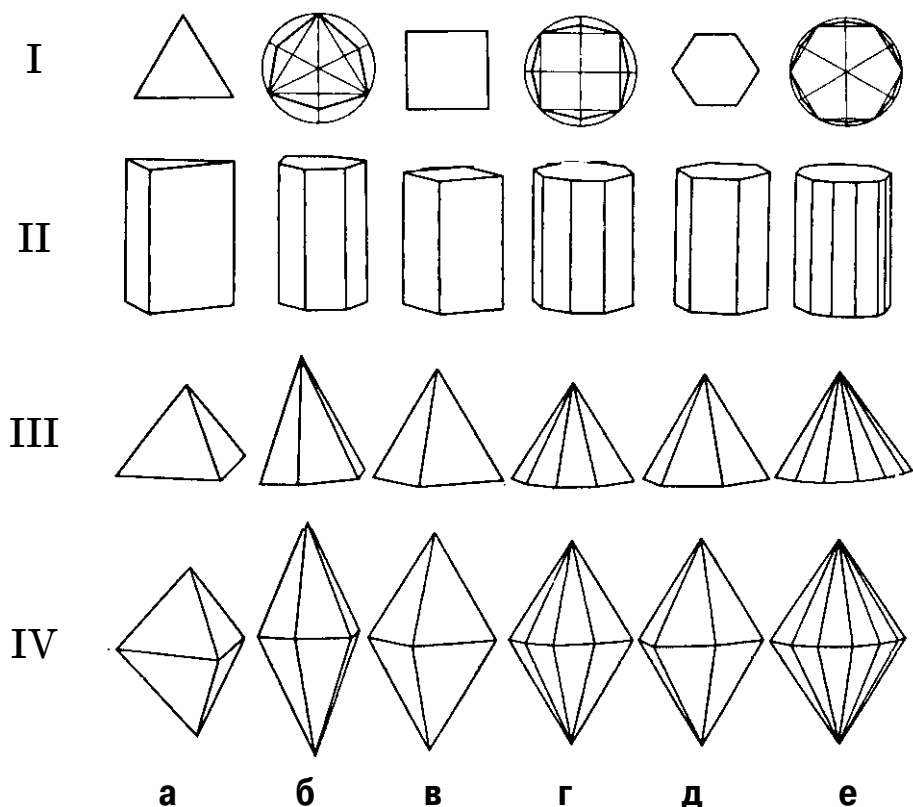


Рис. 70. Простые формы кристаллов средней категории (призмы, пирамиды и бипирамиды) и их сечения (верхний ряд) :

тригональная (а), дитригональная (б), тетрагональная (в), дитетрагональная (г), гексагональная (д), дигексагональная (е)

Трапецоэдры. Грани данной простой формы занимают произвольное положение по отношению к элементам симметрии класса D_n (таблица 10., рис. 70).

Таблица 10. Названия трапецоэдров.

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
2	Диэдр (осевой) (моногональный трапецоэдр)	69г
222	Ортормбический тетраэдр (дигональный трапецоэдр)	69е
32	Тригональный трапецоэдр	71а
422	Тетрагональный трапецоэдр	71в
622	Гексагональный трапецоэдр	71г

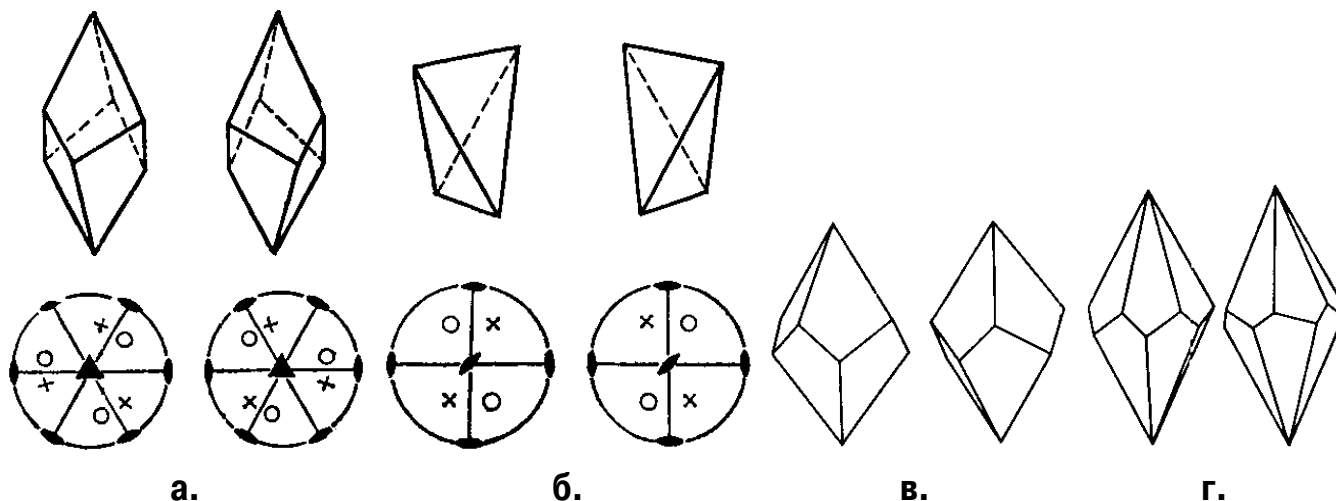


Рис. 71. Простые формы кристаллов низшей и средней категорий: правый и левый тригональный трапецоэдры – класс D_3 (а), правый и левый дигональные трапецоэдры (орторомбические тетраэдры - рис. 69е) - класс D_2 (б), правый и левый тетрагональные трапецоэдры – класс D_4 (в), правый и левый гексагональные трапецоэдры – класс D_6 (г)

Бипирамиды. Простые формы этого типа изображены на рис. 70-IV. Бипирамиды могут быть n -гранными (таблица 11) и $2n$ -гранными (таблица 12).

Таблица 11. Названия n -гранных бипирамид

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
m	Диэдр (моногональная дипирамида)	69в
$2/m$	Орторомбическая призма (дигональная дипирамида)	69д
$3/m (\bar{6})$	Тригональная бипирамида	70-IVа
$4/m$	Тетрагональная бипирамида	70-IVв
$6/m$	Гексагональная бипирамида	70-IVд

Таблица 12. Названия $2n$ -гранных бипирамид

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
$mm2$	Орторомбическая призма (димонагональная дипирамида)	69д
mmm	Орторомбическая (дидигональная) бипирамида	69з
$3/mmm (\bar{6}m2)$	Дитригональная бипирамида	70-IVб
$4/mmm$	Дитетрагональная бипирамида	70-IVг
$6/mmm$	Дигексагональная бипирамида	70-IVе

Антипризмы. Данная простая форма встречается в кристаллах класса C_{ni} (таблица 13).

Таблица 13. Названия антипризм (группа симметрии C_{ni})

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
$\bar{1}$	Пинакоид (моногональная антипризма)	69б
$\bar{3}$	Ромбоэдр (тригональная антипризма)	72а
$\bar{4}$	Тетрагональный тетраэдр (дигональная антипризма)	72б

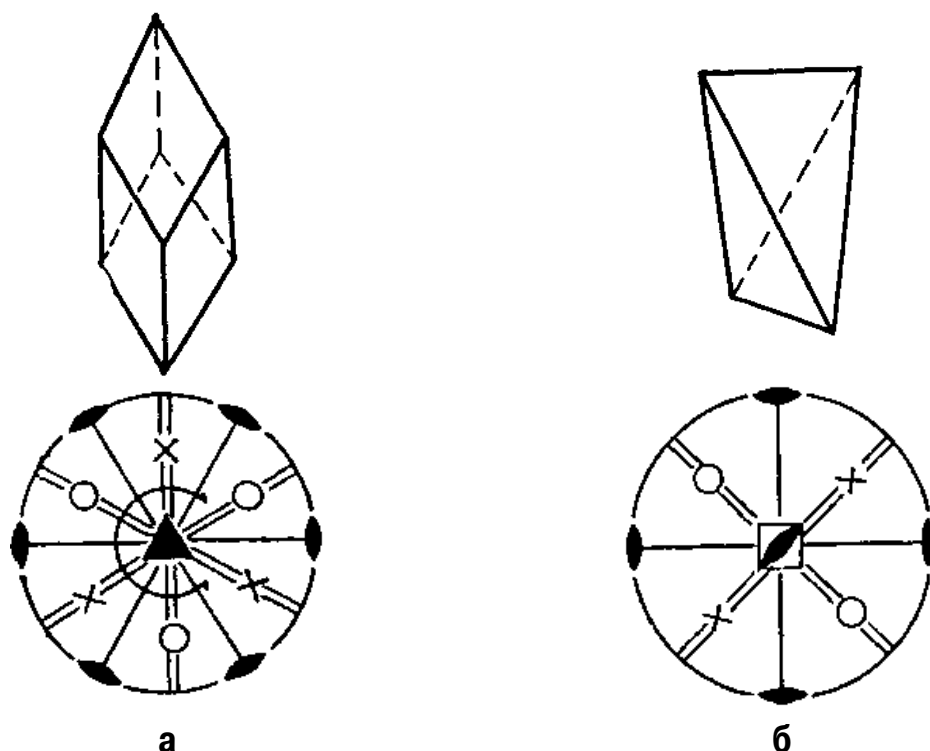


Рис. 72. Простые формы кристаллов средней категории: ромбоэдр – класс S_6 (а), тетрагональный тетраэдр – класс S_4 (б), собственная симметрия этих форм (в)

Задавая грань в произвольном положении относительно совокупности элементов симметрии групп D_{nd} получаем еще один вид антипризм (таблица 14).

Таблица 14. Названия антипризм (группа симметрии D_{nd})

Точечная группа	Простая форма	Рисунок
$\bar{1}m (2/m)$	Орторомбическая призма (димогональная антипризма)	69д
$\bar{3}m$	Тригональный скаленоэдр (дитригональная антипризма)	73а
$\bar{4}2m$	Тетрагональный скаленоэдр (дидигональная антипризма)	73б

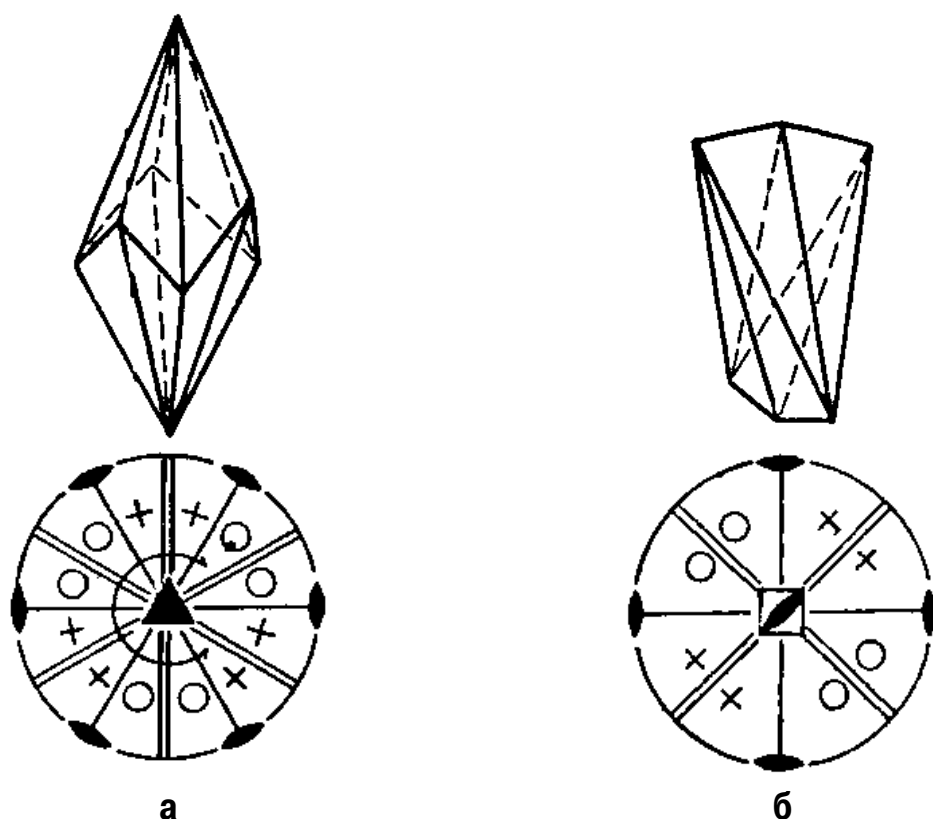


Рис. 73. Простые формы кристаллов средней категории: тригональный скаленоэдр – класс D_{3d} (а), тетрагональный скаленоэдр – класс D_{3d} (б)

6.2. Простые формы в классах без единичных направлений

В кристаллах высшей категории – кубической сингонии – встречаются 15 простых форм. Ни одна из ранее разобранных форм сюда не переходит. Никаких моноэдров, пинакоидов, призм, пирамид и бипирамид и т. д. здесь быть не может. Из старых названий мы находим здесь лишь тетраэдр.

В таблице 15 и на рис. 74-77 представлены простые формы для кристаллов высшей категории.

Таблица 15. Простые формы для кристаллов кубической сингонии.					
Основная простая форма	Символ простой формы {hkl}	Число граней	Производная простая форма	Символ простой формы {hkl}	Число граней
Тетраэдр (рис. 74)	111	4			
			Тригонритетраэдр (рис. 75)	hhl ($h < l$)	12
			Тетрагонтетратетраэдр (рис. 75)	hhl ($h > l$)	12
			Пентагонритетраэдр (рис. 75)	hkl	12

Таблица 15. Простые формы для кристаллов кубической сингонии.

Основная простая форма	Символ простой формы {hkl}	Число граней	Производная простая форма	Символ простой формы {hkl}	Число граней
			Тригонтетратетраэдр (гексатетраэдр) (рис. 75)	hkl	24
Октаэдр (рис. 74)	111	8			
			Тригонтриоктаэдр (рис. 76)	hhl (h>l)	24
			Тетрагонтетраоктаэдр (рис. 76)	hhl (h<l)	24
			Пентагонтриоктаэдр (рис. 76)	hkl	24
			Тригонтетраоктаэдр (гексаоктаэдр) (рис. 76)	hkl	48
Гексаэдр (куб) (рис. 74)	100	6			
			Тригонтетрагексаэдр (тетрагексаэдр, пирамидальный куб) (рис. 77)	hk0	24
			Ромбододекаэдр (рис. 77)	110	12
			Пентагондододекаэдр (рис. 77)	hk0	12
			Дидододекаэдр (рис. 77)	hkl	24

В высшей категории *все простые формы закрытые*.

Простые формы кубической сингонии выводятся как производные из основных форм путем “наращивания” на их гранях пирамид, двух-, трех- и четырехскатных “крыш”, допускаемых плоскостной симметрией граней (*индуктивный способ Н. В. Белова*).

Основные формы кубической сингонии: **куб (гексаэдр), октаэдр и кубический тетраэдр (рис. 74)**, причем у кубического тетраэдра все грани в виде равностороннего треугольника, в отличие от тетрагонального тетраэдра (все грани в виде равнобедренного треугольника) и орторомбического тетраэдра (все грани – разносторонние треугольники).

Грани основных форм занимают строго фиксированное положение в координатной системе, как бы подчеркивая основные направления кубической сингонии – три координатные оси симметрии и четыре оси 3-го порядка. *Перпендикулярно координатным осям располагаются грани куба {100}, перпендикулярно биполярным осям 3-го порядка – грани октаэдра {111}, перпендикулярно полярным осям 3-го порядка – грани тетраэдров {111}, {111̄}.*

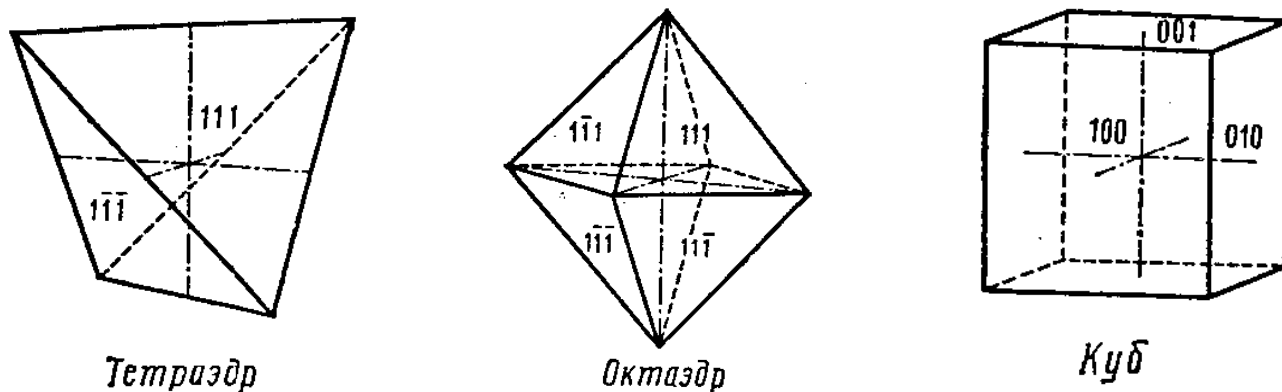


Рис. 74. Тетраэдр, октаэдр, гексаэдр (куб)

Тетраэдр. Утроив грани тетраэдра, получим 12-гранник (рис. 75):

1. грани в виде треугольника (тригона) - *тригонритетраэдр* (*пирамидальный тетраэдр*) $\{hhl\}$ ($h < l$),
2. грани в виде четырехугольника (тетрагона) - *тетрагонритетраэдр* $\{hhl\}$ ($h > l$),
3. грани в виде пятиугольника (пентагона) - *пентагонритетраэдр* $\{hkl\}$,

Грань тетраэдра, переведенная в общее положение, приведет к образованию 24-гранника - *тригонгексатетраэдра* (*гексатетраэдра*) $\{hkl\}$.

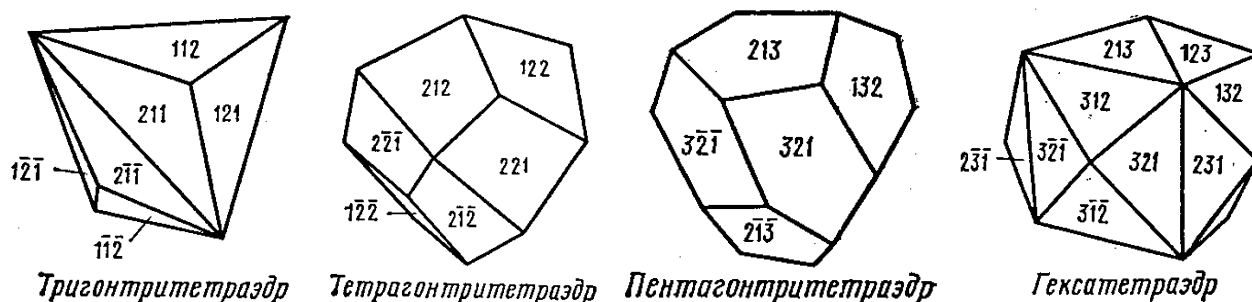
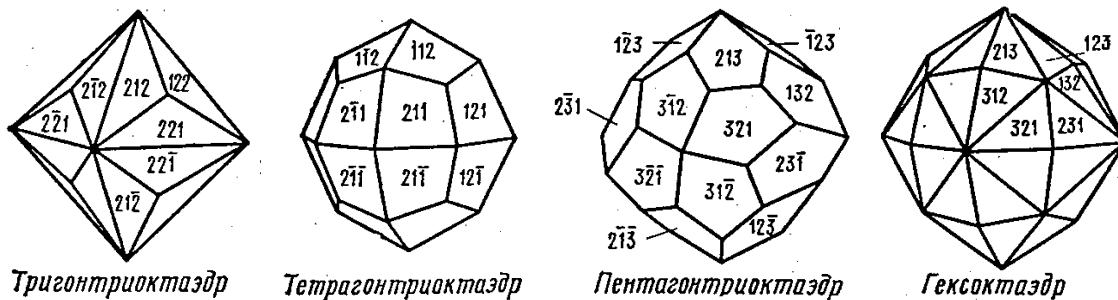


Рис. 75. Простые формы на основе тетраэдра

Октаэдр. Утроив грани октаэдра, получим 24-гранник (рис. 76) :

1. грани в виде треугольника (тригона) - *тригонтриоктаэдр* (*пирамидальный октаэдр*) $\{hhl\}$ ($h > l$),
2. грани в виде четырехугольника (тетрагона) - *тетрагонтриоктаэдр* $\{hhl\}$ ($h < l$),
3. грани в виде пятиугольника (пентагона) - *пентагонтриоктаэдр* $\{hkl\}$

Грань тетраэдра, переведенная в общее положение, приведет к образованию 48-гранника - *тригонгексаоктаэдра* (*гексаоктаэдра*) $\{hkl\}$.



Тригонтриоктаэдр

Тетрагонтриоктаэдр

Пентагонтриоктаэдр

Гексоктаэдр

Рис. 76. Простые формы на основе октаэдра

Куб (гексаэдр). Разделим грань куба на четыре части и построив пирамиду на грани куба получим 24-гранник - *тригонтетрагексаэдр* (пирамидальный куб) $\{hk0\}$.

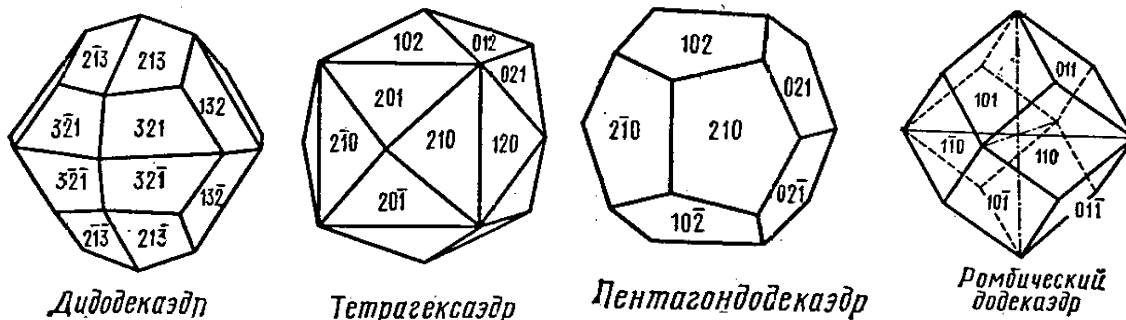
Разделив грань куба на две части можно получить (рис. 77):

-12-гранник - *пентагондодокаэдр* (грань в виде пятиугольника – пентагона) $\{hk0\}$,

-12-гранник – *ромбододокаэдр* (грань в виде ромба) $\{110\}$.

Если мы разделим грань пентагондодокаэдра пополам, то получим 24-гранник – *дидодокаэдр* (преломленный пентагондодокаэдр) $\{hkl\}$.

Отметим, что тетраэдры, пентагонтритетраэдры и пентагондодокаэдры могут быть правыми и левыми, т. е. они образуют энантиоморфные формы.



Дидодокаэдр

Тетрагексаэдр

Пентагондодокаэдр

Ромбический
додокаэдр

Рис. 77. Простые формы на основе гексаэдра

Глава 7

СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Мы рассмотрели операции, элементы симметрии и группы симметрии, которые позволяют описывать симметрию неперiodических фигур (в том числе – молекул). Переходим к рассмотрению симметрии фигур, обладающие периодичностью. К числу таких фигур относятся *идеальные кристаллические структуры*.

Кристаллической структурой называют конкретное расположение атомов в пространстве кристаллического вещества. При этом принимают три допущения:

1. Атомы считают материальными точками, положение которых совпадает со средним по времени положением атомных ядер;
2. Не учитывают границ кристалла, полагая, что он занимает все пространство;
3. Считают, что структура обладает трехмерной периодичностью, т. е. не принимают во внимание обязательное присутствие в кристалле различных дефектов.

Последние два допущения лежат в основе понятия *идеальной кристаллической структуры*.

7.1. Пространственная решетка. Ячейки Бравэ

Основное свойство кристаллической структуры и характеризующей ее пространственной решетки – бесконечная периодичность, т. е. любые два узла решетки можно совместить друг с другом при помощи *трансляции*. Трансляция является самым характерным элементом симметрии бесконечных фигур. Периодичность подобных бесконечных систем можно описать, введя новый элемент симметрии *решетку*. Решетку можно считать выразителем кристаллического состояния вещества, ибо любой кристалл, даже лишенный внешней симметрии, обладает решеткой.

Пространственная решетка – геометрическая схема, описывающая расположение материальных частиц в пространстве. Три элементарные трансляции ***a***, ***b***, ***c*** с углами между ними α , β , γ определяют *элементарную ячейку*, или *параллелепипед повторяемости*. Точки пересечения трансляций, слагающих пространственную решетку, называются *узлами*. Узел может находиться как в промежутке между материальными частицами, так и в центре масс одной частицы или группы частиц. Тип ячейки не зависит от того, какая из точек бесконечного узора была принята за исходный узел.

Выбор ячейки в двумерной, а тем более в трехмерной решетке не будет однозначным, так как каждый узел можно считать начальной точкой для множества трансляционных векторов (рис. 78).

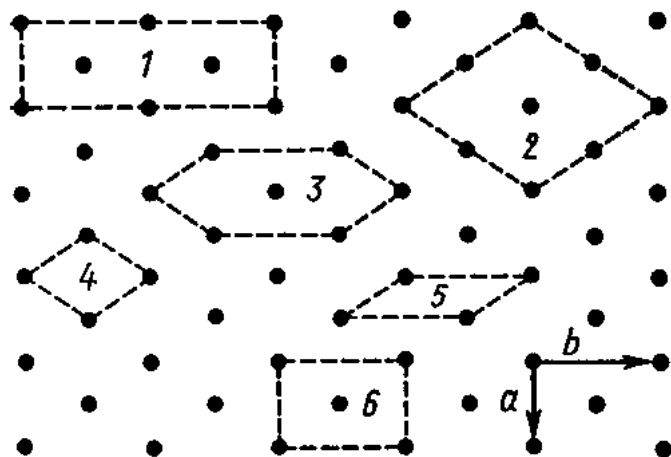


Рис. 78. К выбору элементарной ячейки Бравэ в плоской сетке.

О. Бравэ (1848 г.) сформулировал три условия выбора элементарной ячейки, которые названы *ячейками Бравэ*.

1. Симметрия элементарной ячейки должна соответствовать симметрии кристалла, точнее, наиболее высокой симметрии той сингонии, к которой относится кристалл. Ребра элементарной ячейки должны быть трансляциями решетки.

2. Элементарная ячейка должна иметь максимально возможное число прямых углов или равных углов и равных ребер.

3. Элементарная ячейка должна иметь минимальный объем.

Эти условия должны выполняться последовательно: при выборе ячейки первое условие важнее второго, а второе важнее третьего.

Ячейки, в которых узлы находятся только в вершинах, называются *примитивными*. Выбор примитивной ячейки по условию Бравэ дает систему координат самую удобную для описания структуры и свойств кристалла. Однако, в некоторых случаях *непримитивные* ячейки, которые содержат дополнительные (не охваченные контуром ячейки) узлы, являются более предпочтительными.

7.1.1. Двумерные ячейки Бравэ

Плоская сетка определяется двумя трансляциями a и b и углом γ между ними. Ячейки плоской сетки должны заполнять плоскость без промежутков.

В плоской сетке могут быть только повороты вокруг осей **1, 2, 3, 4, 6** порядков и отражения в плоскости симметрии, причем и оси, и плоскости должны быть перпендикулярны плоскости сетки. Отсюда следует, что симметрия плоских сеток описывается 10 двумерными кристаллографическими точечными группами: **1, 2, 3, 4, 6, m, mm2, 3m, 4mm, 6mm**.

Рассмотрим все возможные значения трансляций a и b и углом γ между ними (рис. 79).

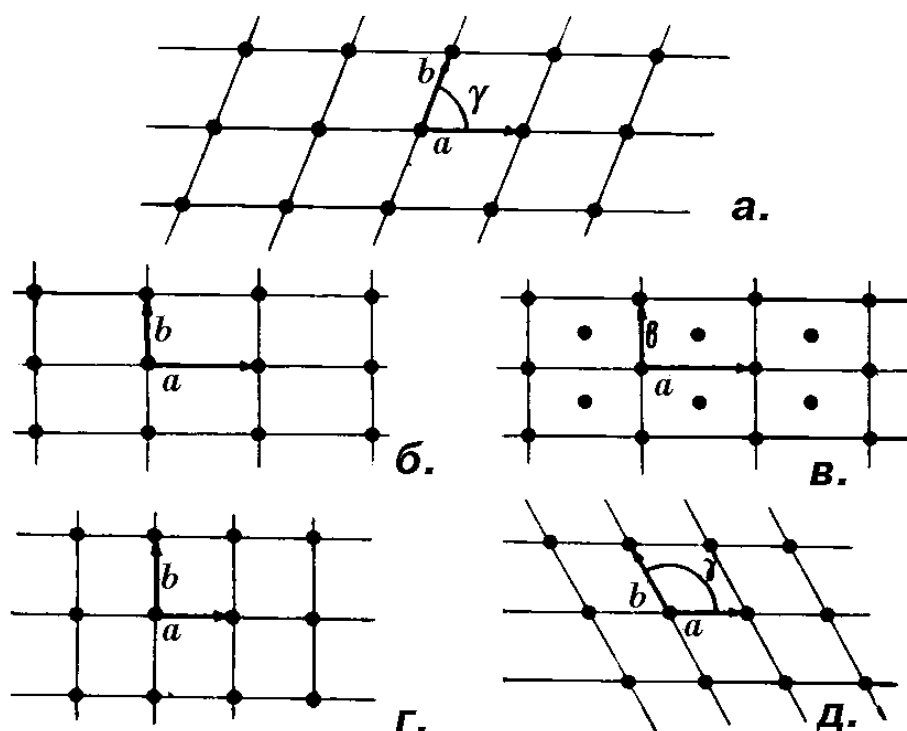


Рис. 79. 5 двумерных элементарных ячеек.

Полная характеристика ячейки требует указания не только точечной группы, но и трансляционной компоненты ее группы – подгруппы переносов. Подгруппы переносов *примитивной* решетки обозначается буквой **p**, *центрированной (непримитивной)* – буквой **c** (таблица 16). В третьем случае характеристическая ячейка повторяет по форме вторую ячейку, но имеет дополнительный узел в центре (рис. 79в). Таким образом, симметрия плоских сеток описывается 5 двумерными (плоскими) группами симметрии: **p2**, **pm2**, **cm2**, **p4mm**, **p6mm** (таблица 16).

Таблица 16. Двумерные ячейки Бравэ

№	Параметры ячейки	Симметрия ячейки	Тип ячейки (группа переносов)	рис. 79
1	$ a \neq b ,$ $\gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$	2	p	а.
2	$ a \neq b ,$ $\gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$	mm2	p	б.
3	$ a = b ,$ $\gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$	mm2	c	в.
4	$ a = b ,$ $\gamma = 90^\circ$	4mm	p	г.
5	$ a = b ,$ $\gamma = 120^\circ$	6mm	p	д.

Рассмотрим возможность появления дополнительных узлов в ячейке без образования новых ячеек, которые связаны с меньшими трансляциями.

1. На ребрах ячейки исключается появление узлов, так как трансляционные расстояния самые короткие.

2. Плоская сетка в виде параллелограмма не может быть центрированной, так как можно выбрать параллелограмм примитивный, меньший центрированного (рис. 80).

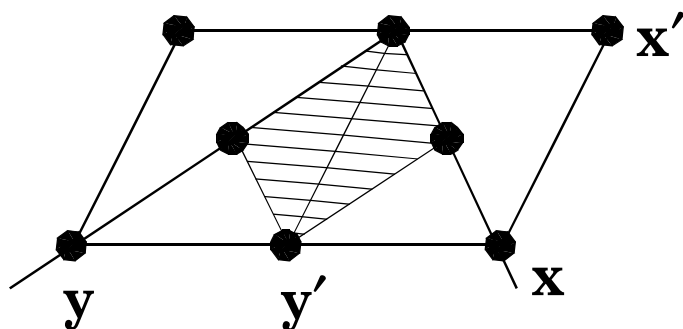


Рис. 80. Переход от одного параллелограмма к другому с меньшими трансляциями

3. Не приводит к ячейке нового типа и центровка квадратной ячейки, так как в этом случае характеристическая ячейка окажется примитивной (рис. 81).

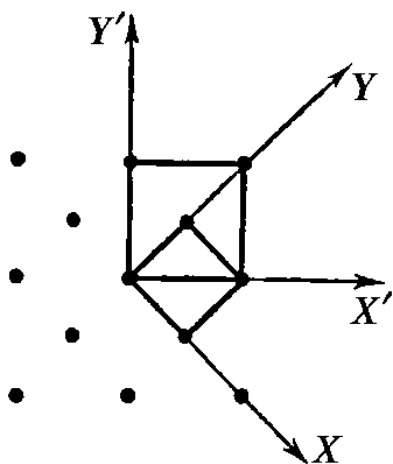


Рис. 81. Переход от тетрагональной центрированной ячейки к тетрагональной примитивной

2. Центрировка прямоугольной ячейки даст новую – центрированную – ячейку. Действительно, примитивная ячейка не будет характеристической, так как выбор ее в этом случае (симметрия **mm2**) строго однозначен (рис. 79в).

Таким образом, дополнительные узлы не могут быть на ребрах ячейки, в центре параллелограмов и в центре

квадратов.

7.1.2. Трехмерные ячейки Бравэ

Все многообразие кристаллических структур можно описать с помощью 14 типов решеток Бравэ, отличающихся по формам элементарных ячеек, величине и симметрии (рис. 81).

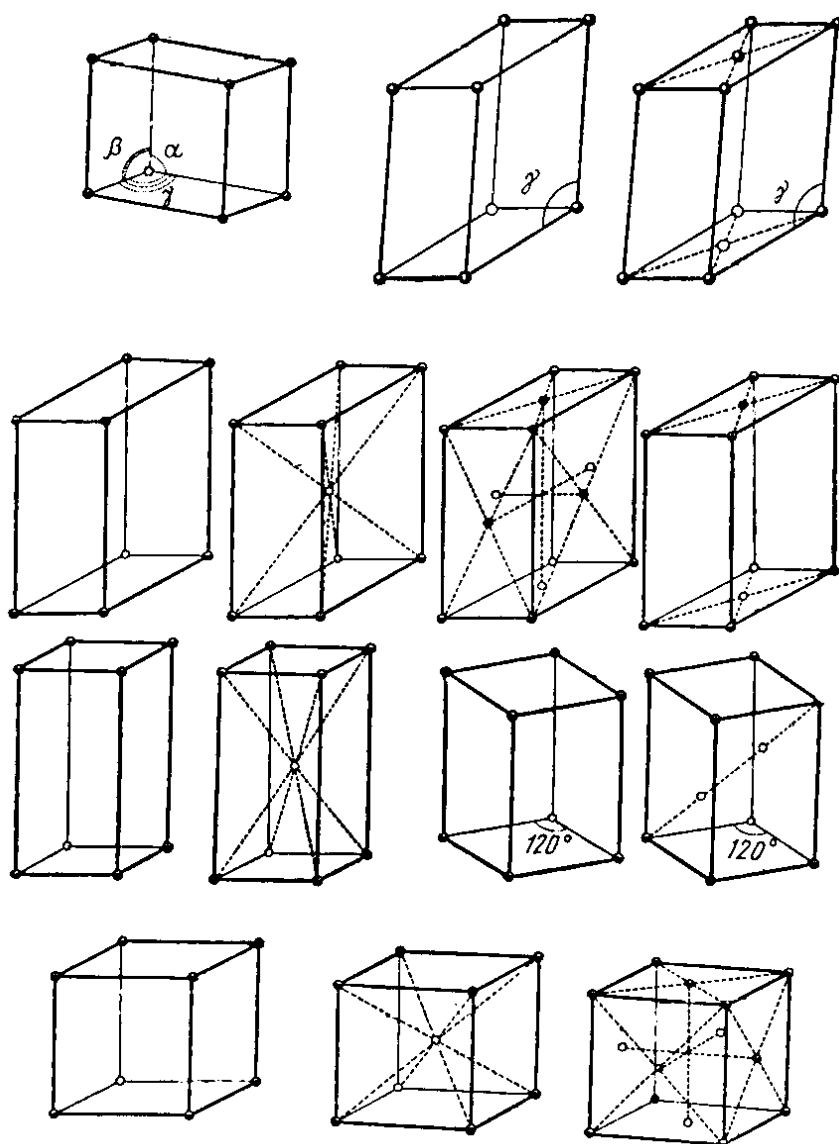


Рис. 82. 14 типов элементарных ячеек.

Симметрия пространственной ячейки описывается семью точечными группами симметрии: $\bar{1}$, $2/m$, mmm , $4/mmm$, $6/mmm$, $\bar{3}m$, $m\bar{3}m$.

Поместив узлы только в вершинах ячейки, т. е. задав кратчайшие трансляции вдоль координатных направлений, получим примитивные ячейки (решетки), которых может быть только шесть: $P\bar{1}$, $P2/m$, $Pmmm$, $P4/mmm$, $P6/mmm$, $Pm\bar{3}m$. Примитивная ячейка с симметрией $\bar{3}m$ невозможна. Это связано с тем, что узлы ячейки могут занимать лишь позиции, симметрия которых равна точечной симметрии самой ячейки. Отсюда следует, что если вершины узлов имеют симметрию $\bar{3}m$, то должны появиться дополнительные узлы с координатами $2/3 \ 1/3 \ 1/3$ и $1/3 \ 2/3 \ 2/3$ или $2/3 \ 1/3 \ 2/3$ и $1/3 \ 2/3 \ 1/3$. Эту ячейку, а следовательно, и решетку, называют ромбоэдрической – **R**, так как примитивная ячейка такой решетки (но не ячейка Браве!!!) – ромбоэдр (рис. 83).

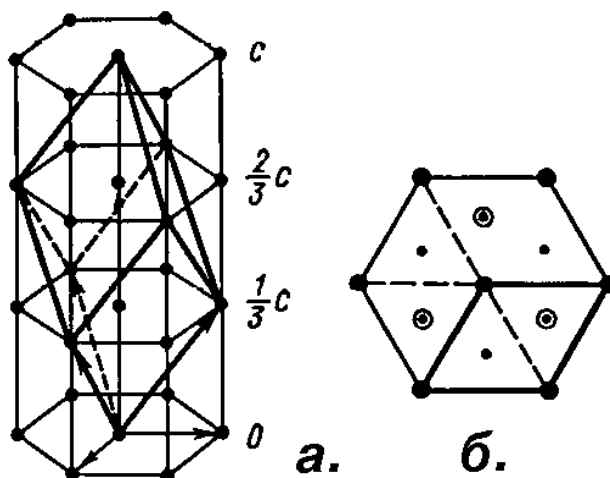


Рис. 83. Дважды центрированная гексагональная ячейка, эквивалентная ромбоэдрической (а), и проекция узлов этой ячейки на ее основание (б)

Заметим, что введение дополнительных узлов в R-ячейку исключается, так как так как добавочные узлы создают новые, уменьшенные трансляции.

Дополнительные узлы могут быть лишь в центре граней и в объеме ячеек, поскольку их симметрия может совпасть с точечной симметрией решетки. В зависимости от местоположения дополнительных узлов такие ячейки могут быть:

- базоцентрированными (в ячейке центрирована пара противоположных граней: **C** – дополнительные узлы на гранях $\{001\}$, **B** – дополнительные узлы на гранях $\{010\}$, **A** – дополнительные узлы на гранях $\{100\}$;

– гранецентрированными – **F** (ячейка с центрированными всеми гранями);

– объемноцентрированными – **I** (ячейка с узлом в центре ячейки).

Заметим, что одновременная центровка типа, например, **C+I**, **F+I** исключена, так как приведет к укорочению векторов.

В *таблице 17* представлены тип, симметрия, базис (совокупность координат узлов, входящих в элементарную ячейку) и число узлов (**z**) трехмерных элементарных ячеек.

Таблица 17. Типы ячеек Бравэ и их характеристики.

Сингония	Симметрия ячейки	Символ типа ячейки Бравэ	Основные трансляции	Базис	Число узлов в ячейке (z)
триклинная	$\bar{1}$	P	a,b,c	0 0 0	1
моноклинная	2/m	P	a,b,c	0 0 0	1
		C	a,b,c (a+b)/2	0 0 0 0	2
		(A)	a,b,c (b+c)/2	0 0 0 0	2
		(I)	a,b,c (a+b+c)/2	0 0 0	2
ромбическая	mmm	P	a,b,c	0 0 0	1
		C	a,b,c (a+b)/2	0 0 0, 0	2
		A	a,b,c (b+c)/2	0 0 0, 0	2
		(B)	a,b,c (a+c)/2	0 0 0, 0	2
		F	a,b,c (a+b)/2 (b+c)/2 (a+c)/2	0 0 0, 0, 0 , 0	4
		I	a,b,c (a+b+c)/2	0 0 0,	2
тетрагональная	4/mmm	P	a,b,c	0 0 0	1
		I	a,b,c (a+b+c)/2	0 0 0,	2
тригональная	$\bar{3}m$	R	a	0 0 0	1
гексагональная	6/mmm	P	a,b,c	0 0 0	1
кубическая	m3m	P	a,b,c	0 0 0	1
		I	a,b,c (a+b+c)/2	0 0 0,	2
		F	a,b,c (a+b)/2 (b+c)/2 (a+c)/2	0 0 0, 0, 0 , 0	4

7.2. Открытые элементы симметрии

В отличие от закрытых элементов симметрии (плоскости зеркального отражения, поворотных и инверсионных осей) *открытые элементы симметрии* являются бесконечными, так как содержат бесчисленное множество операций.

Многообразие открытых операций симметрии исчерпывается винтовыми поворотами и отражениями со скольжением. В общем случае симметрическая операция представляет собой комбинацию поворота или отражения и поступательного перемещения на величину вектора τ . Трансляции являются самым характерным элементом симметрии бесконечных фигур.

7.2.1. Винтовые оси

Комбинация поворота на угол $\alpha = 360^\circ/n$ и поступательного перемещения вдоль оси поворота на величину τ представляет собой операцию n_q , которая называется *винтовым поворотом*, причем $\tau = tq/n$ (t -кратчайшая трансляция, т. е. период повторяемости по данному направлению, q - целое число, n - порядок оси).

В уравнении $n\tau = tq$ правая часть может быть целым числом, поэтому только при $n=2$ и $\tau = 1/2$ мы получаем *винтовую ось* 2_1 (рис. 84)

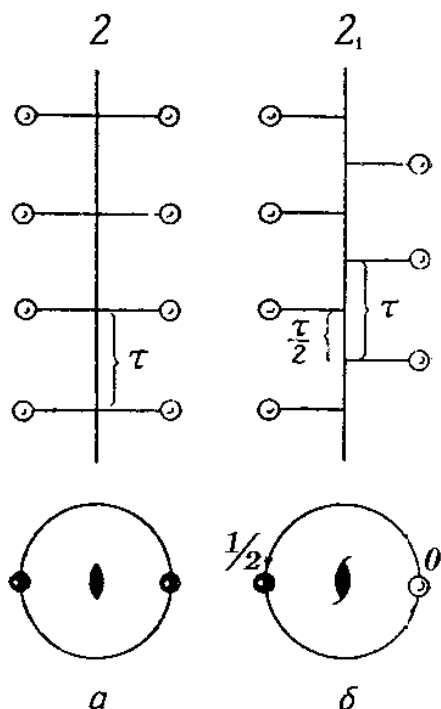


Рис. 84. Оси 2-го порядка: поворотная 2-ная ось - 2 (а), винтовая 2-ная ось – 2₁ (б)

Бесконечные цепи, присутствующие в полиэтилене (рис. 85), содержат винтовые оси 2_1 .

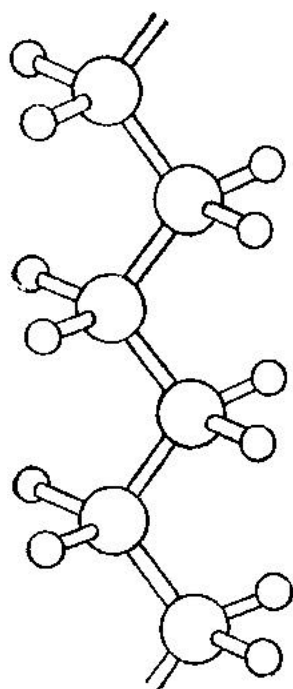


Рис. 85.
Винтовые оси 2_1 в
полиэтилене.

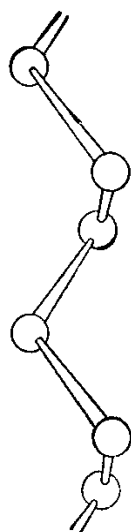


Рис. 86.
Винтовые
оси 3_1 в
структуре
селена

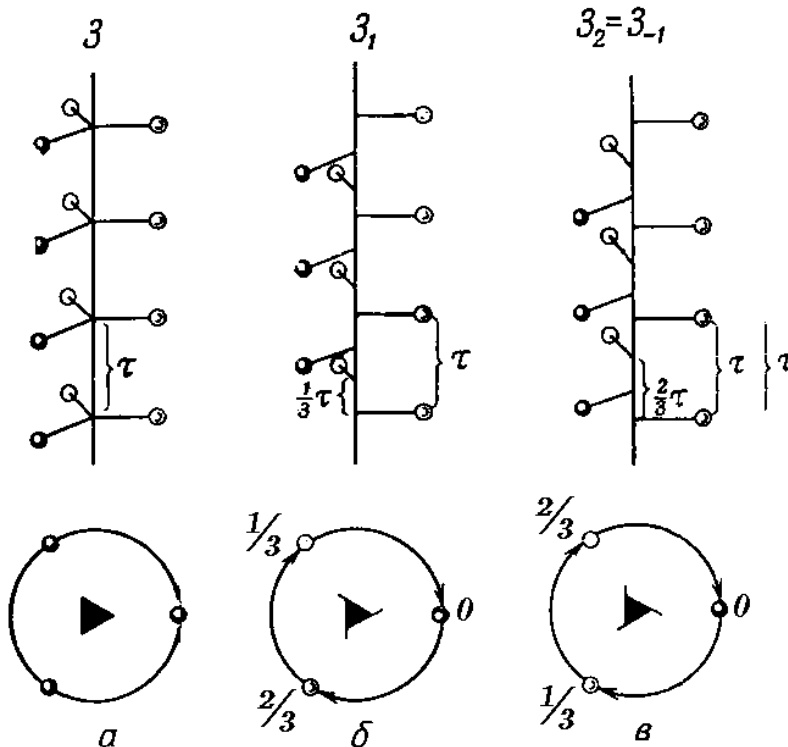


Рис. 87. Оси 3-го порядка: поворотная 3-ная ось –
3 (а), винтовые 3-ные оси 3_1 (б) и $3_2 \equiv 3_{-1}$ (в)

В уравнении $n\tau = tq$ правая часть может быть целым числом при $n = 3$ и $\tau = 1/3$, поэтому получаем **винтовую ось 3_1** и при $n = 3$ и $\tau = 2/3$ – винтовую ось 3_2 (рис. 85)

Бесконечные цепи, присутствующие в одной из модификаций селена (рис. 86), содержат винтовые оси 3_1 .

Для оси 4-го порядка - $n = 4$ в уравнении $n\tau = tq$ правая часть может быть целым числом при $\tau = 1/4$ (винтовая ось 4_1), $\tau = 2/4$ (винтовая ось 4_2) и $\tau = 3/4$ (винтовая ось 4_3) (рис. 88).

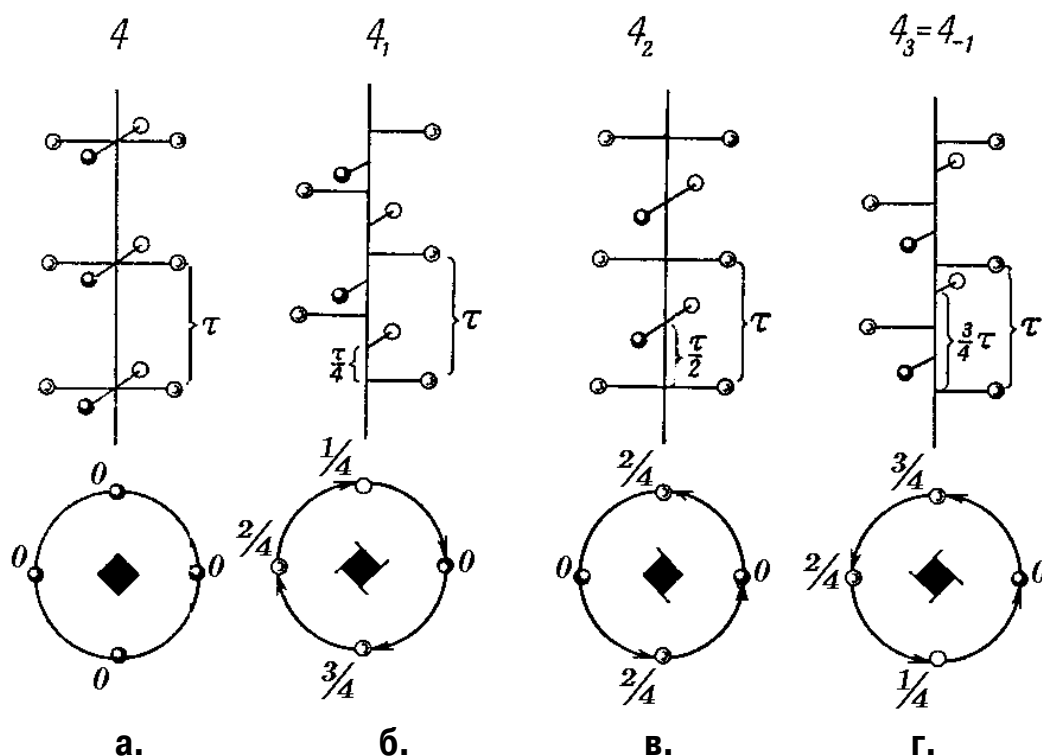


Рис. 88. Оси 4-го порядка: поворотная 4-ная ось – 4 (а), винтовые 4-ные оси 4_1 (б), 4_2 (в) и $4_3 \equiv 4_{-1}$ (г)

В структуре полиморфной модификации TiO_2 – рутиле присутствует винтовая ось 4_2 (рис. 89).

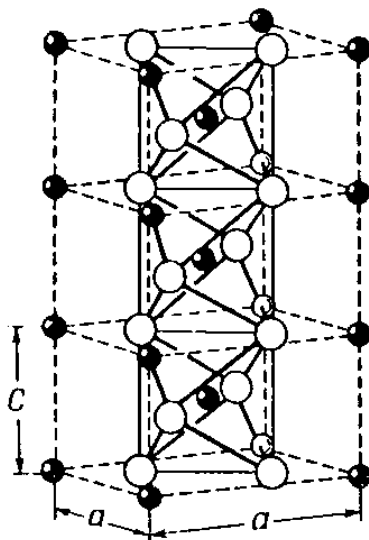


Рис. 89. Структура рутила с винтовой осью 4_2 вдоль оси Z (с-параметр ячейки).

В уравнении $n\tau = tq$ правая часть может быть целым числом: при $n = 6$ и $\tau = 1/6$ – винтовая ось 6_1 , при $n = 6$ и $\tau = 2/6$ – винтовая ось 6_2 , при $n = 6$ и $\tau = 3/6$ – винтовая ось 6_3 , при $n = 6$ и $\tau = 4/6$ – винтовая ось 6_4 , при $n = 6$ и $\tau = 5/6$ – винтовая ось 6_5 (рис. 89).

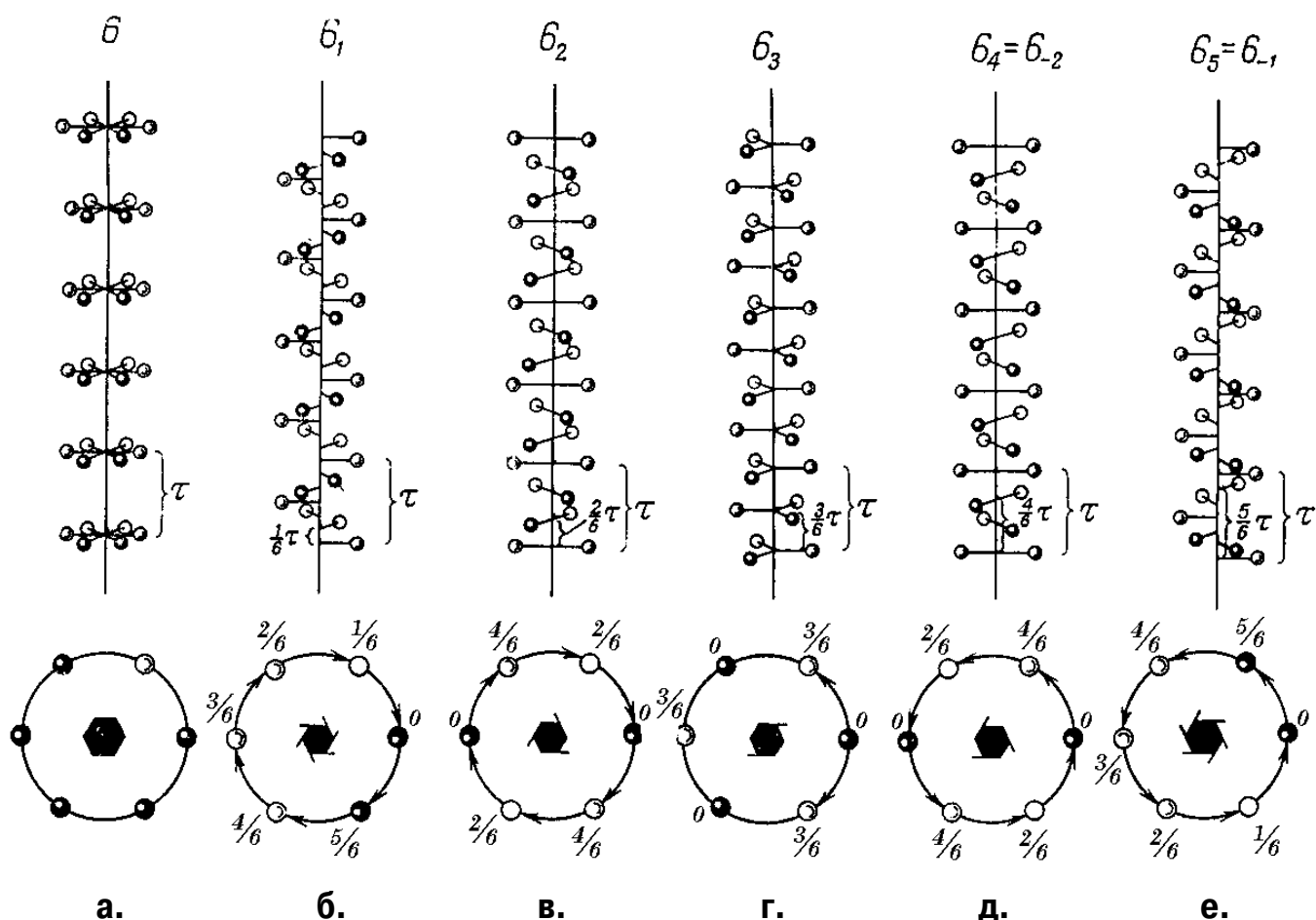


Рис. 90. Оси 6-го порядка: поворотная 6-ная ось – 6 (а), винтовые 6-ные оси 6_1 (б), 6_2 (в), 6_3 (г), $6_4 \equiv 6_2$ (д) и $6_5 \equiv 6_1$ (е)

Винтовая ось 6_3 присутствует в структуре магния (рис. 91).

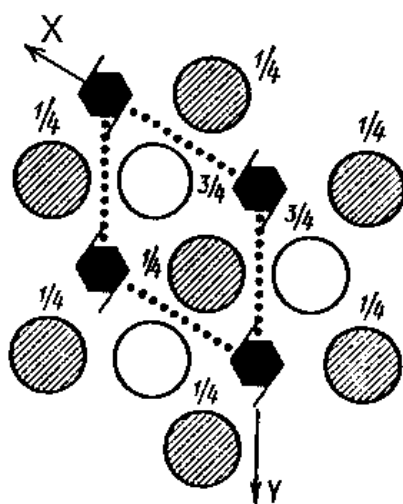


Рис. 91. Схема расположения винтовых осей 6_3 в структуре магния.

Винтовые оси 3_1 и 3_2 , 4_1 и 4_3 , 6_1 и 6_5 , 6_2 и 6_4 входят в энантиоморфные структуры. Например, $\alpha\text{-SiO}_2$ имеет две энантиоморфные формы с пространственными группами $P3_12$ и $P3_22$.

7.2.2. Плоскости скольжения, или плоскости скользящего отражения

Комбинация отражения и поступательного перемещения на величину вектора τ (представляет собой операцию *отражения со скольжением* вдоль плоскости отражения. Вспомним, что действие плоскости зеркального отражения m (рис. 92) идентично действию инверсионной оси 2-го порядка - $\bar{2}$, тогда $\tau = t\mathbf{q}/2$ (t - кратчайшая трансляция по данному направлению, $\mathbf{q}$ - целое число, в данном случае $\mathbf{q} = 1$).

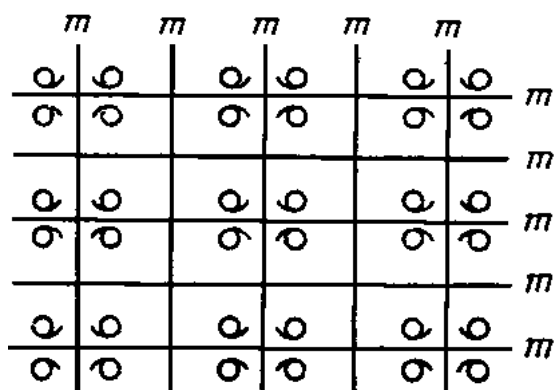


Рис. 92. Структурный мотив с зеркальными плоскостями m

В зависимости от направления скольжения плоскости скользящего отражения обозначаются символами a , b , c , n .

Если отражение происходит в плоскости, перпендикулярной оси X и скольжение имеет место вдоль этой плоскости на $\tau/2x$, то данная плоскость называется *плоскостью скользящего отражения a* (рис. 93).

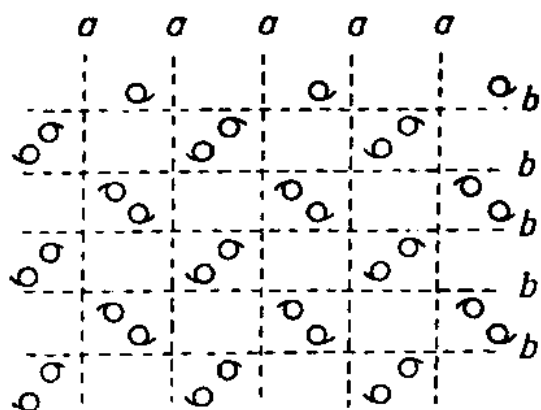


Рис. 93. Структурный мотив с плоскостями скольжения a и b

Если отражение происходит в плоскости, перпендикулярной оси Y и скольжение имеет место вдоль этой плоскости на $\tau/2y$, то данная плоскость называется *плоскостью скользящего отражения b* (рис. 93, 94).

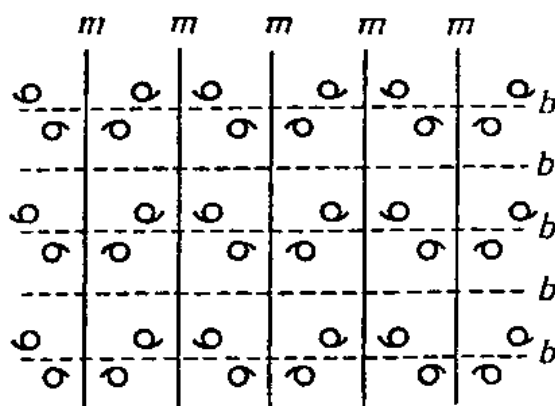


Рис. 94. Структурный мотив с зеркальными плоскостями m и плоскостями скольжения b .

Если отражение происходит в плоскости, перпендикулярной оси Z и скольжение имеет место вдоль этой плоскости на $\tau/2z$, то данная плоскость называется *плоскостью скользящего отражения c* (рис. 95).

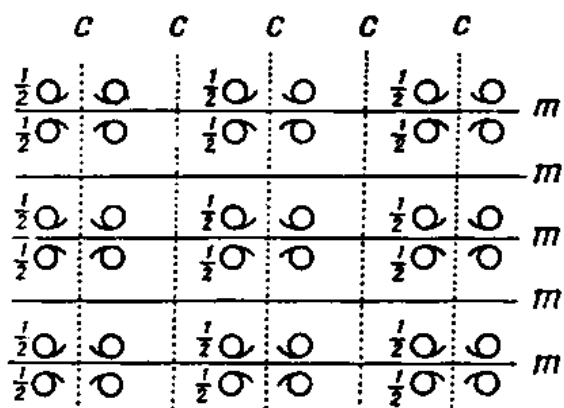


Рис. 95. Структурный мотив с зеркальными плоскостями m и плоскостями скольжения c .

В кубической структуре ацетилена C_2H_2 , кристаллизующегося при температуре $-117^\circ C$, присутствуют плоскости скользящего отражения a (b, c) (рис. 96).

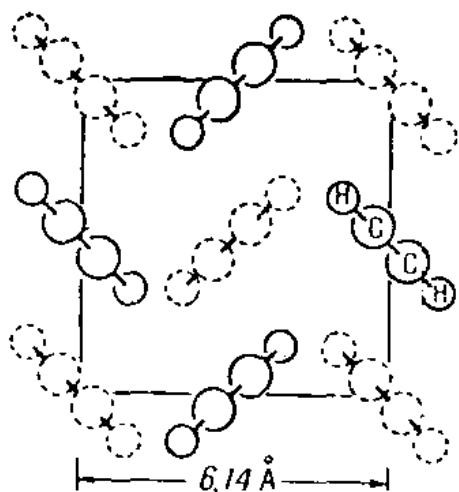


Рис. 96. Структура ацетилена с плоскостями скользящего отражения $a(b, c)$.

Если отражение происходит в плоскости, перпендикулярной оси X и скольжение имеет место вдоль этой плоскости на $\tau_y/2 + \tau_z/2$ (или если отражение происходит в плоскости, перпендикулярной оси Y и скольжение имеет место вдоль этой плоскости на $\tau_x/2 + \tau_z/2$, или если отражение происходит в плоскости, перпендикулярной оси Z и скольжение имеет место

вдоль этой плоскости на $\tau_x/2 + \tau_y/2$, то эти плоскости называются *клиноплоскостями* n (рис. 97).

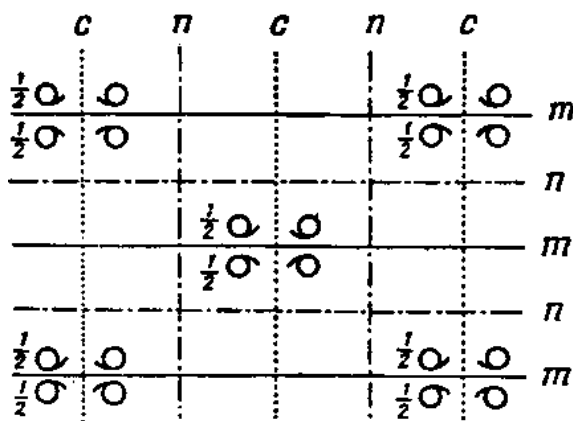


Рис. 97. Структурный мотив с зеркальными плоскостями m , плоскостями скольжения c и клиноплоскостями n .

В ромбической структуре FeS_2 (марказит) атомы связаны двумя вертикальными клиноплоскостями n (рис. 98).

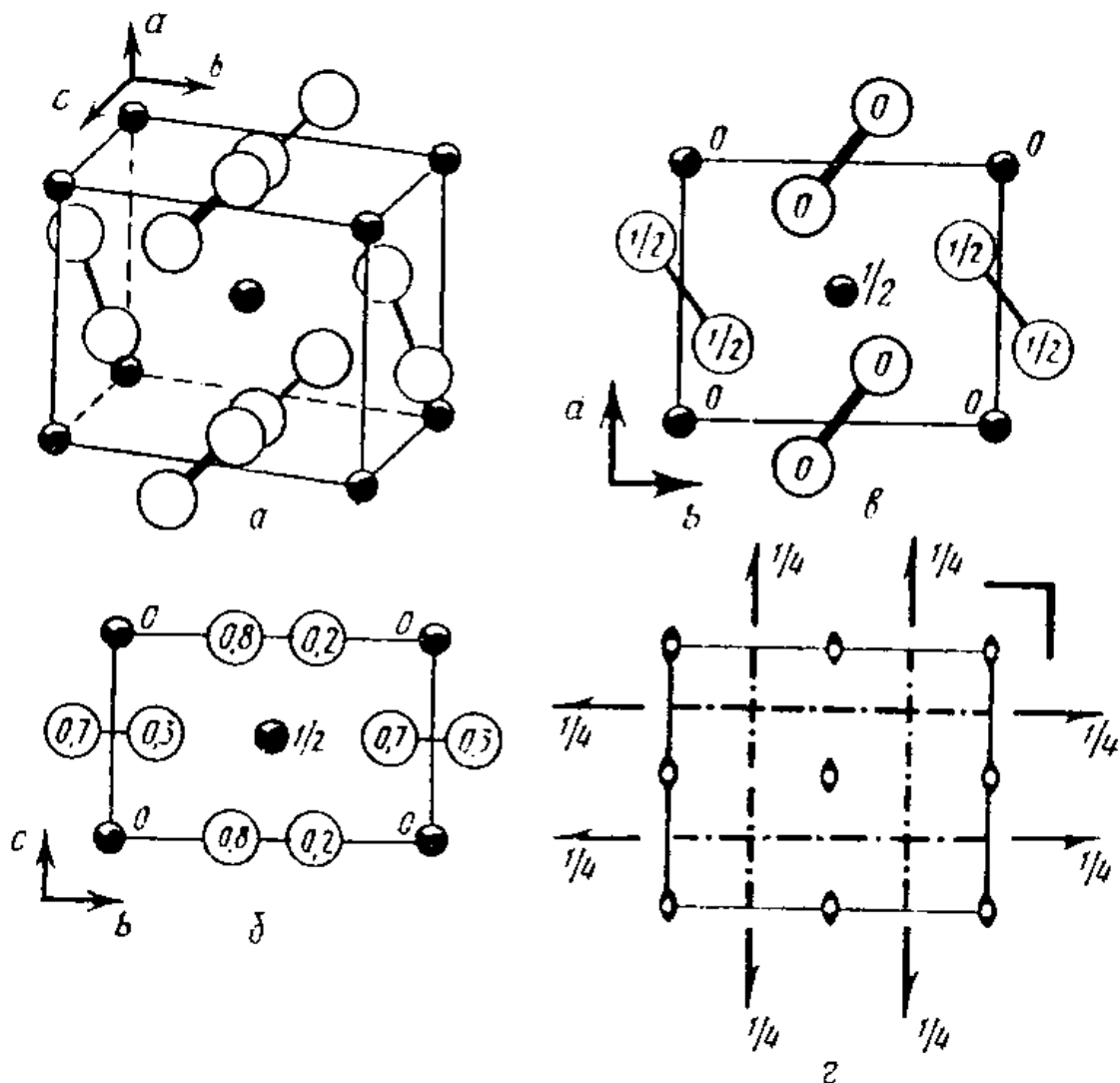


Рис. 98. Структура марказита FeS_2 : общий вид (а), проекция структуры на плоскость осей XZ (б), проекция структуры на плоскость XY (в), пространственная (федоровская группа) $Pnnm$ (D_{2h}^{12}).

В I и F -центрированных ячейках Бравэ возможно появление так называемых алмазных плоскостей симметрии, или диагональных плоскостей d . Действие этих плоскостей - сочетание отражения и диагональной трансляции или на $\tau_x/4 + \tau_y/4$, или на $\tau_x/4 + \tau_z/4$, или на $\tau_y/4 + \tau_z/4$ в зависимости от расположения плоскостей отражения по отношению к координатным осям (рис. 99).

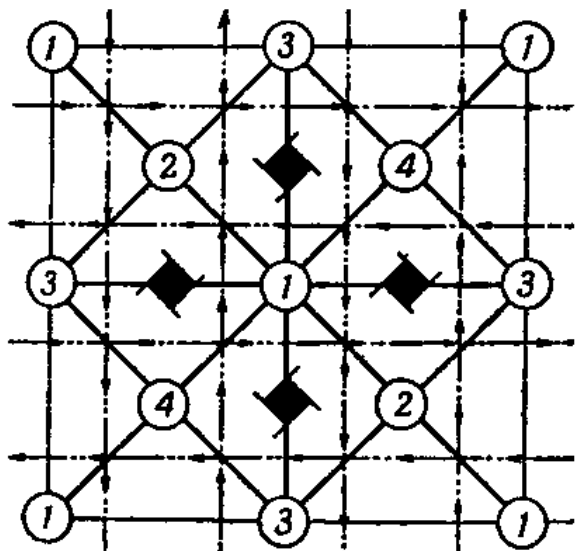


Рис. 99. Проекция структуры алмаза на плоскость (001) с диагональными (алмазными) плоскостями d .

7.3. Основные теоремы взаимодействия закрытых и открытых элементов симметрии с трансляциями

Теорема 1. Последовательное отражение в двух параллельных плоскостях симметрии, расстояние между которыми a , равносильно трансляции на расстояние $t = 2a$ (рис. 100).

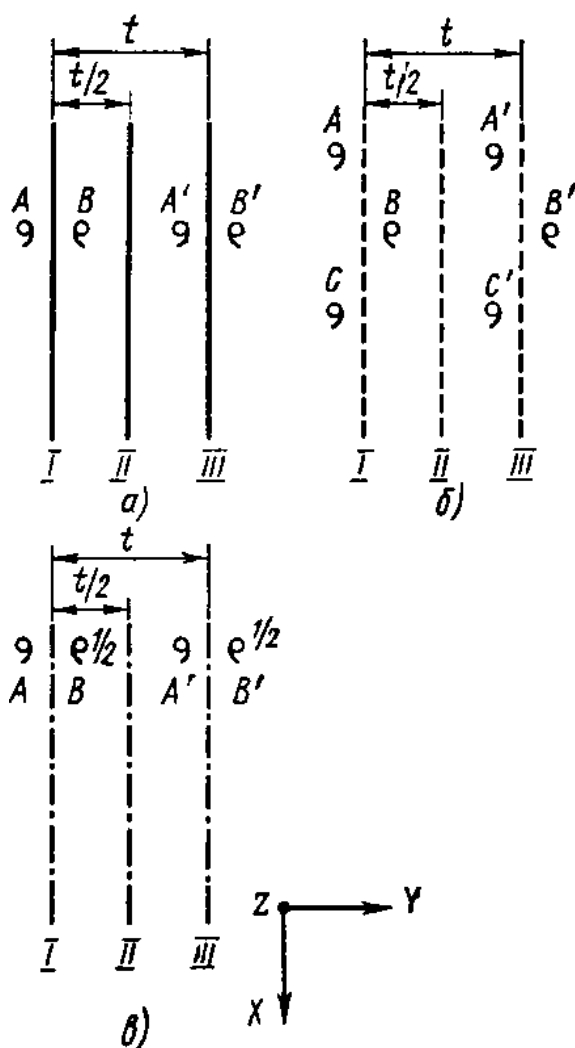


Рис. 100. К теореме 1

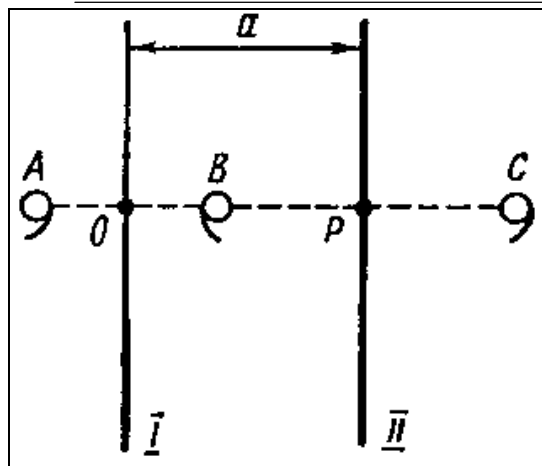


Рис. 101. К теореме 2

Теорема 2. Плоскость симметрии и перпендикулярная ей трансляция t порождает новые, вставленные плоскости симметрии, параллельные данной, аналогичные ей и отстоящие от нее на расстояние $t/2$ (рис. 101).

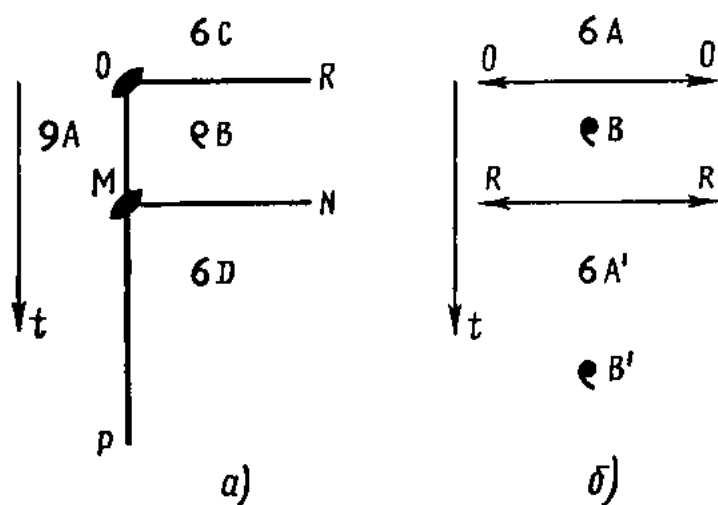


Рис. 102. К теореме 3.

Теорема 3. Ось симметрии и перпендикулярная ей трансляция t порождает новые оси симметрии, параллельные данной, аналогичные ей и отстоящие от нее на расстояние $t/2$ (рис. 102).

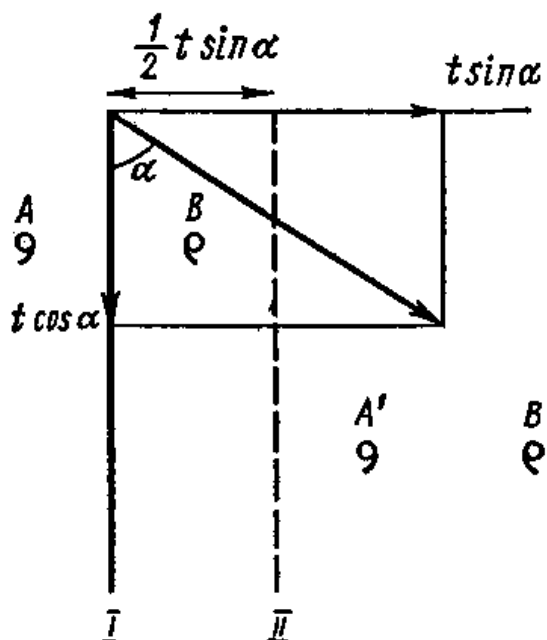


Рис. 103. К теореме 4.

Теорема 4. Плоскость симметрии m и трансляция t , составляющая с плоскостью угол α , порождает плоскость скользящего отражения, параллельную данной, отстоящую от нее на расстояние $t/2 \sin(\alpha)$ и имеющую скольжение $t \cos(\alpha)$ (рис. 103).

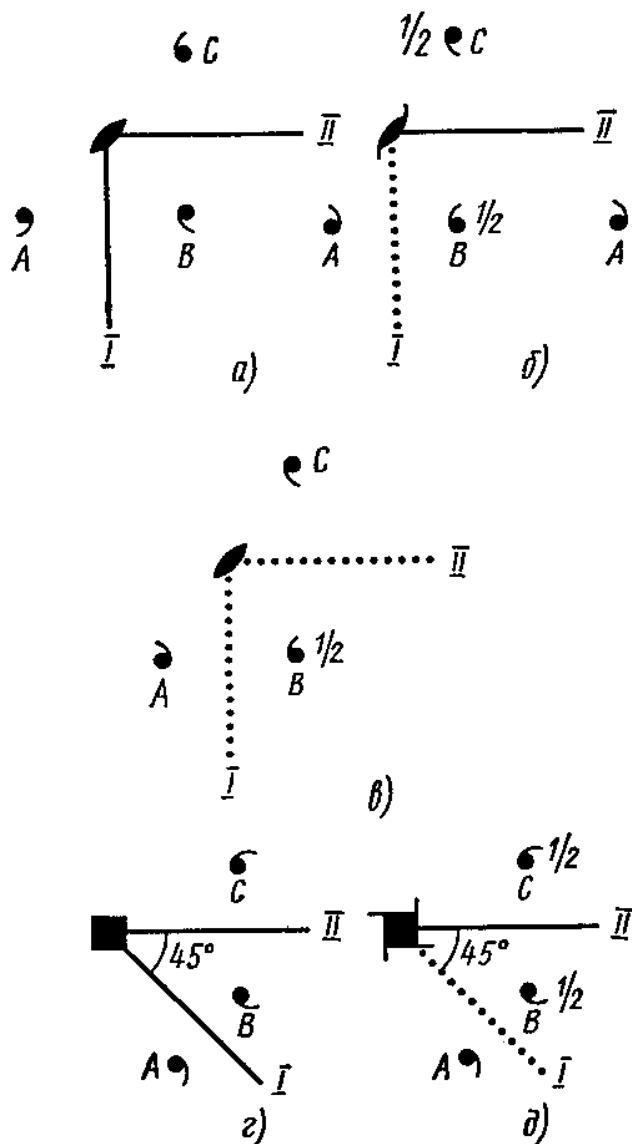


Рис. 104. К теореме 5.

Теорема 5. При пересечении двух пересекающихся под углом α плоскостей симметрии по линии пересечения появляется ось симметрии с углом поворота 2α (рис. 104).

7.4. Пространственные (федоровские) группы симметрии.

Взаимодействие элементов микросимметрии и 14 типов ячеек приводит к 230 различным пространственным группам симметрии (Е. С. Федоров-1890 г; А. Шенфлис-1891 г). Набор этих групп следует рассматривать как одну из констант Природы.

Точечные группы симметрии характеризуют симметрию внешней формы кристалла и их физических свойств. Каждой точечной группе соответствует несколько пространственных групп симметрии. *Пространственные группы симметрии* характеризуют симметрию структуры кристалла. Они являются главным критерием, выделяющим кристаллические структуры из всех других образований. *Кристалл* – твердые тела, структура которых описывается одной из 230 пространственных групп симметрии.

Для обозначения пространственных групп симметрии применяют международные символы (*Таблица 18*) или символы Шенфлиса.

Таблица 18. Обозначение пространственных групп симметрии по международной символике

Сингония	Позиция в символе			
	1	2	3	4
триклинная	Тип решетки Бравэ	имеющийся элемент симметрии		
моноклинная		ось 2 или 2_1 и плоскость ей перпендикулярная		
ромбическая		плоскость перпендикулярная или ось параллельная		
		оси X	оси Y	оси Z
тригональная гексагональная		ось высшего порядка и плоскость ей перпендикулярная	координатная плоскость или ось (большая диагональ ромба с $\gamma = 120^\circ$)	диагональная плоскость или ось (малая диагональ ромба с $\gamma = 120^\circ$)
тетрагональная		ось высшего порядка и плоскость ей перпендикулярная	координатная плоскость или ось	диагональная плоскость или ось
кубическая		координатная плоскость или ось	3	диагональная плоскость или ось

Международный (интернациональный) символ пространственной группы составлен так, что по виду символа при помощи теорем о сочетании элементов симметрии можно наглядно представить всю совокупность элементов симметрии этой группы. В символе пространственной группы пишутся только порождающие элементы симметрии.

В международном символе пространственной группы на первом месте всегда стоит буква, обозначающая тип ячейки Бравэ; далее – порождающие элементы симметрии, каждый на определенном месте (*таблица 9, 18*). Нарушение порядка записи меняет смысл символа.

При обозначении международными символами необходимо соблюдать ряд правил:

1. Если в одном направлении есть и плоскости зеркального отражения, и плоскости скользящего отражения, то в символ группы вводится обозначение плоскости зеркального отражения.

2. Если в одном направлении есть и плоскости, и оси, то в символе указывается плоскость.

3. Если в одном направлении есть оси различных порядков, то записывается страшная из них.

4. Если на каком-то месте нет элемента симметрии, то пишется цифра **1**.

Обозначения по Шенфлису пространственных групп симметрии аналогично обозначению точечных групп, за исключением верхнего индекса, который указывает порядок следования данной пространственной группы, соответствующей точечной, в Интернациональных таблицах (например, **Pnma** = **D_{2h}¹⁶**).

7.5. Классный вывод пространственных групп симметрии (по Н. В. Белову)

При выводе пространственных групп симметрии наиболее удобно исходить из 32 точечных групп симметрии, т. е. точечных групп симметрии, сочетающихся с трехмерными решетками. Добавив к каждой из 32 точечных групп симметрии все допустимые ею трансляционные подгруппы (решетки Бравэ), придем к пространственным группам, в которых целиком сохранился как осевой, так и плоскостной комплекс точечных групп, т. е. к *симморфным группам* (73 группы). Так, например, из точечной группы mmm получим пространственные группы **Pmmm, Cmmm, Immm, Fmmm**.

Для получения *несимморфных* пространственных групп симметрии надо у каждой симморфной группы последовательно заменить все макроэлементы симметрии на их микроэлементы симметрии, тогда, например, из **Pmmm** получим **Pmma, Pbam, Pbca ...**, из **Cmmm** – **Cmma, Cmca, Ccca ...**.

Несимморфные группы разделяются на 54 *гемисимморфных* и 103 *асимморфных*. В первых полностью сохранился осевой комплекс их точечных групп (например, **Pbam** = **P2/b 2/a 2/m**, **Pccm** = **P2/c 2/c 2/m**), во вторых – ни осевой, ни плоскостной комплекс точечных групп полностью не сохраняется (например, **Pbca**=**P2₁/b 2₁/c 2₁/a**, **Pmna** = **P2/m 2/n 2₁/a**).

Рассмотрим вывод орторомбических групп симметрии, основываясь на котором легко можно перейти к другим группам как более низкой, так и более высокой симметрии.

Последовательность действий: к зеркальным плоскостям и поворотным осям последовательно добавить τ (переход к плоскостям скольжения и к винтовым осям) и затем добавить t (т. е. указать тип ячейки Бравэ).

Трем ортоомбическим классам кристаллографической макросимметрии (**222, mm2, mmm**) соответствуют 59 пространственных микрокристаллографических групп симметрии. Все они выводятся из 4-х возможных плоскостей симметрии (зеркальных и скользящих) путем простых перестановок с возможных повторением одной и той же буквы.

Класс $mm2$.

Чтобы вывести для этого класса все пространственные группы симметрии с Р-ячейкой Бравэ, надо учитывать возможность появления в обоих положениях, кроме зеркальных плоскостей m , также и скользящих с вертикальным (параллельно оси **Z**) или горизонтальным (параллельно осям **X** или **Y**) скольжениями, или с диагональным скольжением. Плоскости с вертикальным скольжением обозначим буквой **c**, а с горизонтальным скольжением – **a** или **b**, клиноплоскость – **n**:

Pmm, Pmn (=Pnm), Pmc (=Pcm), Pma (=Pbm), Pnn, Pnc (=Pcn),

Pna (=Pbn), Pcc, Pca (=Pbc), Pba.

На третьем месте будет ось 2-го порядка:

-поворотная ось (гемисимморфные группы), если порождающие плоскости либо не содержат вертикальной компоненты скольжения ($\mathbf{Pma}...=\mathbf{Pma2}$, $\mathbf{Pba}...=\mathbf{Pba2}$), либо ее имеют каждая из плоскостей ($\mathbf{Pcc}...=\mathbf{Pcc2}$, $\mathbf{Pnn}...=\mathbf{Pnn2}$, $\mathbf{Pnc}...=\mathbf{Pnc2}$),

-винтовая (асимморфные группы), если в порожденную ось входит скольжение лишь одной из плоскостей ($\mathbf{Pmc}...=\mathbf{Pmc2}_1$, $\mathbf{Pca}...=\mathbf{Pca2}_1$).

Таким образом, точечной группе $\mathbf{mm2}$ соответствует 10 пространственных групп с Р-ячейкой Бравэ:

$\mathbf{Pmm2}$, $\mathbf{Pmn2}_1$, $\mathbf{Pmc2}_1$, $\mathbf{Pma2}$, $\mathbf{Pnn2}$, $\mathbf{Pnc2}$, $\mathbf{Pna2}_1$, $\mathbf{Pcc2}$, $\mathbf{Pca2}_1$, $\mathbf{Pba2}$.

Класс $\mathbf{mmm}$.

Здесь исчезает различие между вертикальными и горизонтальными направлениями, и при выводе групп надо обращать особое внимание на одинаковость или различие направлений скольжения в 3-х плоскостях. Заметим, что в клиноплощади $\mathbf{n}$ скольжение происходит как вдоль одной диагонали, так и обязательно и вдоль другой, поэтому в этом она сходна с плоскостью $\mathbf{m}$.

Поочередно меняя плоскости в трех позициях точечной группы $\mathbf{mmm}$ получим следующие пространственные группы с Р-ячейкой Бравэ с двумя плоскостями $\mathbf{m}$ или $\mathbf{n}$:

1) $\mathbf{Pmmm}$ 2) $\mathbf{Pnnn}$ 3) $\mathbf{Pmmn}$ 4) $\mathbf{Pnnm}$ 5) $\mathbf{Pmng}$ 6) $\mathbf{Pnng}$

Топологически безразлично, как расшифровывать третью букву $\mathbf{g}$ ($\mathbf{g}$ -плоскость с горизонтальным скольжением): $\mathbf{a}$ или $\mathbf{b}$. Соответственно этому следующие равенства надо читать как топологические:

5) $\mathbf{Pmng}=\mathbf{Pmnb}=\mathbf{Pma}=\mathbf{D}$ 6) $\mathbf{Pnng}=\mathbf{Pnnb}=\mathbf{Pna}=\mathbf{D}$ 7) $\mathbf{Pmna}$ 8) $\mathbf{Pnma}$

В группе 7 плоскость $\mathbf{a}$ имеет скольжение, перпендикулярно к зеркальной плоскости $\mathbf{m}$, а в группе 8 плоскость $\mathbf{a}$ имеет скольжение, перпендикулярное к клиноплощади $\mathbf{n}$. Поэтому топологически идентичными будут группы:

7) $\mathbf{Pmna} = \mathbf{Pnmb} = \mathbf{Pman} = \mathbf{D}_{2h}^{17}$, 8) $\mathbf{Pnma} = \mathbf{Pmnb} = \mathbf{Pnam} = \mathbf{D}_{2h}^{16}$.

Переходим к пространственным группам с одной плоскостью $\mathbf{m}$ или $\mathbf{n}$ и с плоскостями с горизонтальным скольжением ($\mathbf{g}$) или вертикальным ($\mathbf{c}$).

9) $\mathbf{Pccm}$ 10) $\mathbf{Pccn}$ 11) $\mathbf{Pggn}$ 12) $\mathbf{Pggn}$ 13) $\mathbf{Pgcm}$ 14) $\mathbf{Pgcn}$

Расшифровывая символ $\mathbf{g}$, получим последние 4 группы в виде:

11) $\mathbf{Pbam}$ 12) $\mathbf{Pban}$ 13) $\mathbf{Pbcm}$ 14) $\mathbf{Pbcn}$

Если в числе 3-х плоскостей нет ни одной плоскости $\mathbf{m}$ или $\mathbf{n}$, то получим следующие пространственные группы симметрии:

15) $\mathbf{Pcca}=\mathbf{Pccb}=\mathbf{Pbaa}=\mathbf{Pcaa}=\mathbf{Pccb}=\mathbf{Pbab}=\mathbf{D}$

16) $\mathbf{Pbca}=\mathbf{Pcab}=\mathbf{D}$

Таким образом, точечной группе $\mathbf{mmm}$ соответствует 16 пространственных групп с Р-ячейкой Бравэ:

$\mathbf{Pmmm}$, $\mathbf{Pnnn}$, $\mathbf{Pmmn}$, $\mathbf{Pnnm}$, $\mathbf{Pmmb}$, $\mathbf{Pnnb}$, $\mathbf{Pmna}$, $\mathbf{Pnma}$,
 $\mathbf{Pccm}$, $\mathbf{Pccn}$, $\mathbf{Pbam}$, $\mathbf{Pban}$, $\mathbf{Pbcm}$, $\mathbf{Pbcn}$, $\mathbf{Pcca}$, $\mathbf{Pbca}$

Следующий этап – переход к другим типам ячейки Бравэ. Например, **Pmm2, Imm2, Fmm2, Cmm2, Amm2=Bmm2**.

Обратная задача – переход от пространственной группы симметрии к ее точечной – значительно проще. Надо заменить все плоскости скользящего отражения зеркальными плоскостями и все винтовые оси – поворотными соответствующего порядка (т. е. необходимо отбросить все τ) и затем перенести все элементы симметрии параллельно самим себе до их пересечения в одной точке (т. е. необходимо отбросить все t). Например, пространственные группы **Pban, Cmca, Imma, Fddd** → точечная группа **mmm**.

7.6. Построение графиков пространственных групп.

Построение графика пространственной группы симметрии состоит из нескольких последовательных действий, которые рассмотрим на примере орторомбических кристаллов с точечными группами **mm2, 222, mmm**.

Первоначально необходимо изобразить координатную систему и плоскости симметрии, записанные в символе и повторить эти плоскости через трансляции, согласно правилам установки (*таблица 2, 9*) $P = t_x + t_y$. Далее при построении графиков пространственных групп надо придерживаться выполнения следующих правил:

1. Взаимодействие плоскостей с перпендикулярными трансляциями ячейки Бравэ (t) приводит к появлению плоскостей, аналогичных данным, параллельных им и отстоящих от них на $1/2t$.
2. Взаимодействие полученных плоскостей с оставшимися трансляциями t приводит в преобразованию этих плоскостей в новые.
3. Оси образуются по линии пересечения всех плоскостей и перемещаются под действием трансляций (t), относящихся к пересекающимся плоскостям.

Точечная группа **mm2**

1. P – ячейка. P-ячейка имеет трансляции $T = t_x + t_y$. При взаимодействии исходных плоскостей с трансляциями t_x и t_y (**теорема 2**) образуются вставленные плоскости, аналогичные исходным, отстоящие от них на $t/2$ и чередующиеся с ними. Например, для группы **Pca2₁** плоскость $a_{\perp y} \times t_x = a_{\perp y}$, т. е. появляется аналогичная исходной вставленная плоскость, расположенная на $[t_x/2]$; затем плоскость $c_{\perp x} \times t_y = c_{\perp x}$, т. е. образуется аналогичная исходной вставленная плоскость, расположенная на $[t_y/2]$ (в квадратных скобках показано смещение вставленной плоскости с точки пересечения исходных плоскостей) (**рис. 105**).

2. Далее необходимо расставить оси 2-го порядка (**теорема 5**):

- оси будут находиться на пересечении плоскостей, если они не имеют трансляций вдоль осей **X** и **Y** (плоскости **m** и **c**) ;
- оси будут смещены на $t_x/4$, если перпендикулярно оси **Y** расположена плоскость, имеющая трансляцию $t_x/2$ (плоскости **a** или **n**), а перпендикулярно

оси **X** нет плоскостей с трансляцией вдоль оси **Y** (плоскости **b** или **n**) (**теорема 3**);

– оси будут смещены на $t_y/4$, если перпендикулярно оси **X** расположена плоскость, имеющая трансляцию $t_y/2$ (например, плоскости **b** или **n**), а перпендикулярно оси **Y** нет плоскостей с трансляцией вдоль оси **X** (плоскости **a** или **n**) (**теорема 3**);

– оси будут смещены на $(t_x + t_y)/4$, если перпендикулярно осям **X** и **Y** расположены плоскости, имеющие трансляции $t_y/2$ и $t_x/2$ (плоскости или **b** и **a**, или **n** и **n**, или **b** и **n**, или **n** и **a**) (**теорема 3**);

– оси будут поворотными, если взаимодействующие плоскости или не имеют вертикальных трансляций (плоскости **m** и **m**), или и одна, и другая плоскости имеют вертикальные трансляции (плоскости **c** и **c**, **n** и **n**, **c** и **n**);

– оси будут винтовыми, если только одна из взаимодействующих плоскостей имеет вертикальную трансляцию (плоскости **m** и **c**, **m** и **n**, **a** и **c**, **c** и **b**, **a** и **n**, **n** и **b**).

3. В-ячейка. В-ячейки Бравэ имеет трансляции $T = t_x/2 + t_z/2$.

После действий, указанных в пункте 1, мы получаем плоскости, аналогичные указанным в пространственной группе, которые перпендикулярны координатным осям **X** и **Y**. Затем необходимо рассмотреть взаимодействие одной плоскости, перпендикулярной оси X, с перпендикулярной ей трансляцией $t_x/2$, в результате чего получим плоскость, аналогичную данной и отстоящую от нее на $[t_x/4]$ (**теорема 2**). Например, для группы **Bca2₁** при взаимодействии плоскости $c_{\perp x} \times t_x/2 = c_{\perp x}$, т. е. появляется такая же плоскость, но расположенная на $[t_x/4]$.

Далее происходит взаимодействию этой появившейся вставленной плоскости с оставшейся трансляцией $t_z/2$, что приводит к образованию новой плоскости на месте вставленной. Например, продолжая рассматривать пространственную группу **Bca2₁**, при взаимодействии образовавшейся вставленной на трансляции $[t_x/4]$ плоскости с $c_{\perp x} \times t_z/2 = m$, так как трансляция $t_z/2$ плоскости **c** “уничтожается” при взаимодействии с трансляцией $t_z/2$, принадлежащей В-ячейке Бравэ, и плоскость скользящего отражения **c** превращается в зеркальную плоскость **m**.

Только после этих двух действий необходимо расставить оси симметрии, согласно пункту 2 (рис. 104).

4. А-ячейка. А-ячейка Бравэ имеет трансляции $T = t_y/2 + t_z/2$. После действий, указанных в пункте 1, мы получаем плоскости, аналогичные указанным в пространственной группе, которые перпендикулярны координатным осям **X** и **Y**.

Затем необходимо рассмотреть взаимодействие имеющейся одной плоскости, перпендикулярной оси Y, с перпендикулярной ей трансляцией $t_y/2$, в результате чего получим плоскость, аналогичную данной и отстоящую от нее на $[t_y/4]$ (**теорема 2**). Например, для группы **Aca2₁** при взаимодействии плоскости $a_{\perp y} \times t_y/2 = a_{\perp y}$, т. е. появляется такая же плоскость, но расположенная на $[t_y/4]$.

Далее происходит взаимодействие этой появившейся вставленной плоскости с оставшейся трансляцией $\mathbf{t}_z/2$, что приводит к образованию новой плоскости на месте вставленной. Например, продолжая рассматривать пространственную группу **Aca2₁**, при взаимодействии образовавшейся вставленной на расстоянии $[\mathbf{t}_y/4]$ плоскости $\mathbf{a}_{\perp y} \times \mathbf{t}_z/2 = \mathbf{n}$, так как трансляция $\tau_x/2$ плоскости $\mathbf{a}$ при взаимодействии с трансляцией $\mathbf{t}_z/2$, принадлежащей В-ячейке Бравэ, превращается в клиноплоскость $\mathbf{n}$.

Только после этого расставляются оси симметрии, согласно пункту 2 (рис. 104).

5. С-ячейка. С-ячейка Бравэ имеет трансляции $\mathbf{T} = \mathbf{t}_x/2 + \mathbf{t}_y/2$. После действий, указанных в пункте 1, мы получаем плоскости, аналогичные указанным в пространственной группе, которые перпендикулярны координатным осям **X** и **Y**.

Затем необходимо рассмотреть взаимодействие имеющих двух плоскостей, перпендикулярных осям X и Y, с перпендикулярным им трансляциям $\mathbf{t}_x/2$ и $\mathbf{t}_y/2$, в результате чего получим плоскости, аналогичным данным и отстающим от них соответственно на $[\mathbf{t}_x/4]$ и $[\mathbf{t}_y/4]$ (**теорема 2**). Например, для группы **Csa2₁** при взаимодействии плоскости $\mathbf{c}_{\perp x} \times \mathbf{t}_x/2 = \mathbf{c}_{\perp x}$, т. е. появляется такая же плоскость, но расположенная на $[\mathbf{t}_x/4]$; при взаимодействии плоскости $\mathbf{a}_{\perp y} \times \mathbf{t}_y/2 = \mathbf{a}_{\perp y}$, т. е. появляется аналогичная ей плоскость, но расположенная на $[\mathbf{t}_y/4]$.

Далее происходит взаимодействие этих появившихся вставленных плоскостей с оставшейся для каждой из них другой трансляцией, что приводит к образованию новой плоскости на месте вставленной. Например, продолжая рассматривать пространственную группу **Csa2₁**, при взаимодействии образовавшейся вставленной на трансляции $[\mathbf{t}_x/4]$ плоскости $\mathbf{c}_{\perp x} \times \mathbf{t}_y/2 = \mathbf{n}$, так как трансляция $\tau_z/2$ плоскости $\mathbf{c}$ при взаимодействии с трансляцией $\mathbf{t}_y/2$, принадлежащей С-ячейке Бравэ, превращается в клиноплоскость $\mathbf{n}$. Далее при взаимодействии образовавшейся вставленной на расстоянии $[\mathbf{t}_y/4]$ плоскости $\mathbf{a}_{\perp y} \times \mathbf{t}_x/2 = \mathbf{m}$, так как трансляция $\tau_x/2$ плоскости $\mathbf{a}$ “уничтожается” при взаимодействии с трансляцией $\mathbf{t}_x/2$, принадлежащей С-ячейке Бравэ, и плоскость скользящего отражения $\mathbf{a}$ превращается в зеркальную плоскость $\mathbf{m}$.

Затем только после всего этого расставляются оси симметрии, согласно пункту 2 (рис. 104).

6. I-ячейка. I-ячейка Бравэ имеет трансляции $\mathbf{T} = \mathbf{t}_x/2 + \mathbf{t}_y/2 + \mathbf{t}_z/2$. После действий, указанных в пункте 1, мы получаем плоскости, аналогичные указанным в пространственной группе, которые перпендикулярны координатным осям **X** и **Y**.

Затем необходимо рассмотреть взаимодействие имеющих двух плоскостей, перпендикулярных осям X и Y, с перпендикулярными им трансляциями $\mathbf{t}_x/2$ и $\mathbf{t}_y/2$, в результате чего получим плоскости, аналогичные данным и отстающие от них соответственно на $\mathbf{t}_x/4$ и $\mathbf{t}_y/4$ (**теорема 2**). Например, для группы **Ica2₁** при взаимодействии $\mathbf{c}_{\perp x} \times \mathbf{t}_x/2 = \mathbf{c}_{\perp x}$, т. е. появляется такая же плоскость, но

расположенная на $[t_x/4]$; при взаимодействии плоскости $a_{\perp y} \times t_y/2 = a_{\perp y}$, т. е. появляется такая же плоскость, но расположенная на $[t_y/4]$.

Далее происходит взаимодействие этих появившихся вставленных плоскостей с оставшимися для каждой из них двух трансляций I-ячейки Бравэ, что приводит к образованию новых плоскостей на месте вставленных. Например, продолжая рассматривать пространственную группу **Ica2₁**, при взаимодействии образовавшейся вставленной на расстоянии $[t_x/4]$ плоскости $c_{\perp x} \times t_y/2 \times t_z/2 = b$, так как трансляция $t_z/2$ плоскости **c** при взаимодействии с трансляциями $t_y/2$ и $t_z/2$, принадлежащих I-ячейке Бравэ, превращается в плоскость скользящего отражения **b** из-за того, что трансляции $t_z/2$ и $t_z/2$ “уничтожаются”. Далее, при взаимодействии образовавшейся вставленной на трансляции $[t_y/4]$ плоскости $a_{\perp y} \times t_x/2 \times t_z/2 = c$, так как трансляция $t_x/2$ плоскости **a** при взаимодействии с трансляциями $t_x/2$ и $t_z/2$, принадлежащих I-ячейке Бравэ, превращается в плоскость скользящего отражения **c** из-за того, что трансляции $t_x/2$ и $t_x/2$ “уничтожаются”.

Затем расставляются оси симметрии, согласно пункту 2 (рис. 104).

7. F-ячейка. F-ячейка Бравэ имеет трансляции $T_F = t_x/2 + t_y/2$, $t_y/2 + t_z/2$, $t_x/2 + t_z/2$. После действий, указанных в пункте 1, мы получаем плоскости, аналогичные указанным в пространственной группе, которые перпендикулярны координатным осям **X** и **Y**.

В гранецентрированной решетке, как и в любой непримитивной, плоскости симметрии разных наименований оказываются взаимосвязанными. В данном случае необходимо учитывать влияние сразу нескольких трансляций как лежащих в самой плоскости, так и косо расположенных к ней. Итак, для плоскостей симметрии обеих позиций характерны как *двойственность*, так и *чередование*.

Рассмотрим пространственную группу **Fmm2**. Трансляции $t_y/2 + t_z/2$, лежащие в самой плоскости $m_{\perp x}$, заставит зеркальную плоскость быть одновременно и плоскостью $n \perp m$ (**n**) - *двойственность*; плоскость $m_{\perp x}$ и трансляции $t_x/2 + t_z/2$ превратят $m_{\perp x}$ в плоскость $c \perp m$ (**c**), а трансляции $t_x/2 + t_y/2$ – в плоскость $b \perp m$ (**b**), обе расположенные на $[t_x/4]$. Причем, для плоскостей **m** и **c**, и **m** и **b** – это *чередование*, а для плоскостей **c** и **b** – *двойственность*.

Таким образом, в одном символе **Fmm2** исчерпаны все возможности для пространственных групп класса **mm2** с F-решеткой Бравэ: **Fmm2 = Fm** $\perp$ (**n**) [**c** $\perp$ (**b**)] **m** $\perp$ (**n**) [**c** $\perp$ (**a**)] 2 [2₁], где круглая скобка указывает двойственность, а квадратная – чередование.

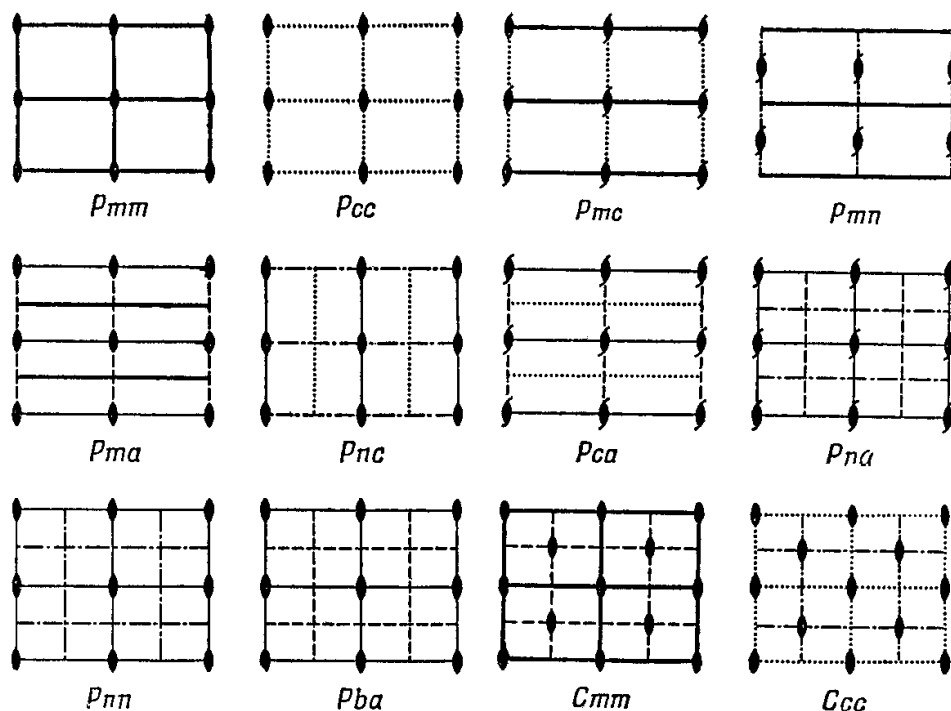


Рис. 105.
Пространственные
группы, имеющие
точечную группу
 $mm2$.

Кроме группы **Fmm2**, для **F**-ячейки Браве возможна группа **Fdd2** (рис. 106), так как плоскость d может пересекаться под прямым углом только с себе подобной, так как в противном случае (например, при пересечении d и m) возникла бы ось 2-го порядка с недопустимой для нее трансляцией $t/4$ (теорема 3). В случае же пересечения двух плоскостей d с трансляциями $\tau/4$ под углом 90° появляется ось с трансляцией $\tau/4 + \tau/4 = \tau/2$, т. е. ось 2-го порядка.

При взаимодействии плоскости d с трансляциями **F**-ячейки может появиться только плоскость d в качестве вставленной, так как в этом случае при взаимодействии трансляций, например, $\tau_y/4 + \tau_z/4$ плоскости $d_{\perp x}$ с трансляциями $t_x/2 + t_z/2$ **F**-ячейки появляется вставленная плоскость с трансляцией $\tau_y/4 + \tau_z/2$, т. е. также плоскость d , отстоящая от первоначальной плоскости на $[t_x/4]$.

Позицию осей 2 и 2_1 можно выявить модельным способом (рис. 105).

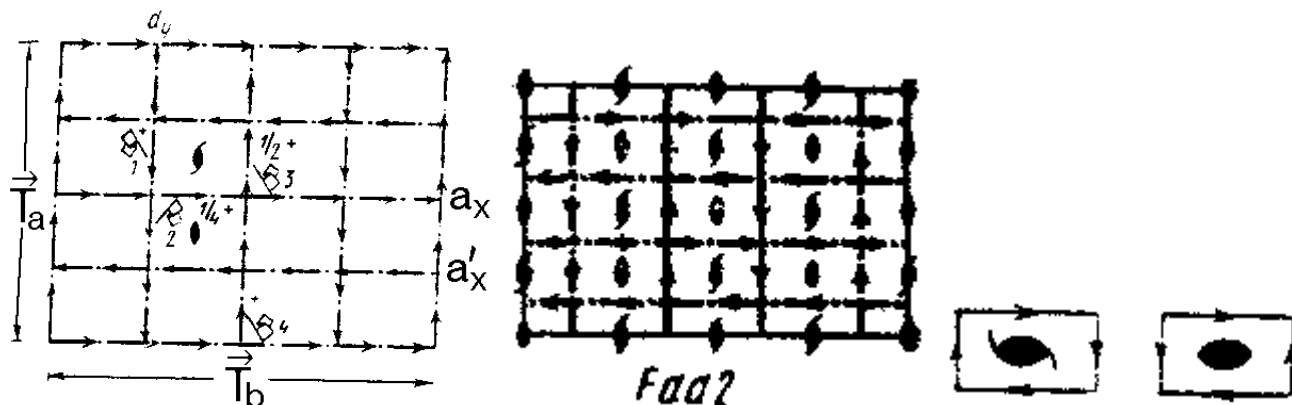


Рис. 106. Размещение осей 2 и 2_1 в пространственной группе **Fdd2**.
Отражение d_y : 1 (2, отражение d_x : 2 (3, d_x' : 2 (4; операция 1 (3 – поворот вокруг $(2_1)_z$, операция 1 (4 – поворот вокруг $(2)_z$. Оси 2 и 2_1 оказываются в центрах разных прямоугольников.

Точечная группа 222

При построении графиков пространственных групп $P222$, $P2_12_12_1$, $P222_1$ и $P2_12_12_1$ необходимо воспользоваться двумя правилами:

Взаимоперпендикулярные оси могут или пересекаться ($2_x \times 2_y = 2_z$) или скрещиваться ($2_x \times 2_y [t_z/2] = 2_{1(z)}$) (рис. 107). В последнем случае они находятся друг от друга на расстоянии $t/4$, так как только при этом исходные оси не будут размножать друг друга.

1. Каждая поворотная ось в символе пространственной группы указывает на пересечения, а каждая винтовая – на скрещивание.

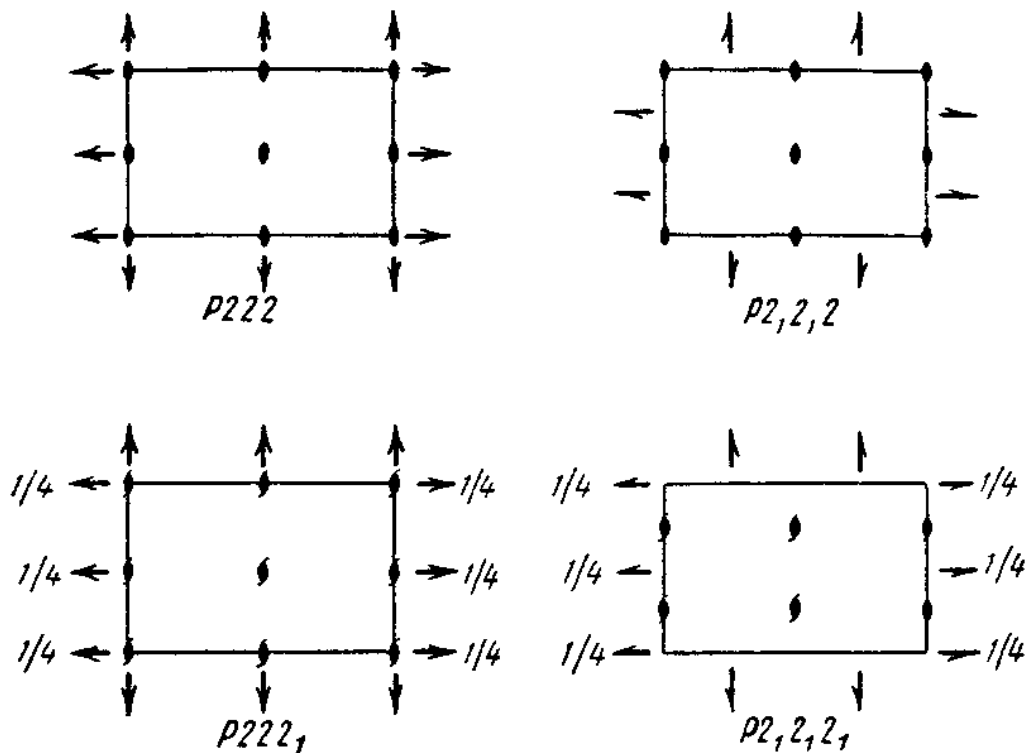


Рис. 107. Графики пространственных групп $P222$, $P222_1$, $P2_12_12_1$ и $P2_12_12_1$

Точечная группа mmm

1. $Pmmm$. (рис. 108). Используя теорему 2, нарисовать вставленные плоскости m , аналогичные исходным, отстающие от них на $t/2$ и чередующиеся с ними.

2. При взаимодействии двух перпендикулярных осей X и Y плоскостей m по линии пересечения образуются поворотные оси 2-го порядка, параллельные оси Z (теорема 5).

3. При взаимодействии двух перпендикулярных осей X и Z плоскостей m по линии пересечения образуются поворотные оси 2-го порядка, параллельные оси Y (теорема 5).

4. При взаимодействии двух перпендикулярных осей Y и Z плоскостей m по линии пересечения образуются поворотные оси 2-го порядка, параллельные оси X (теорема 5).

5. Данная пространственная группа является центросимметричной. Центр симметрии находится на пересечении трех плоскостей **m**.

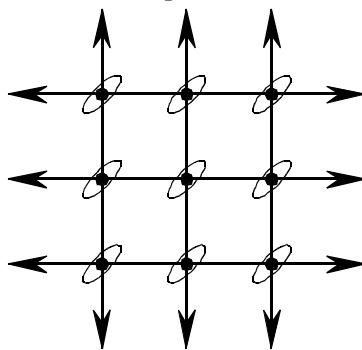


Рис. 108. График пространственной группы Pmmm

1. **Pnma** (рис. 109). Используя **теорему 2**, нарисовать вставленные плоскости **n** и **m**, аналогичные исходным, отстающие от них на $\mathbf{t}/2$ и чередующиеся с ними.

2. При взаимодействии двух перпендикулярных осей **X** и **Y** соответственно плоскостей **n** с трансляциями $\mathbf{t}_y/2 + \mathbf{t}_z/2$ и **m** образуются винтовые оси 2-го порядка $[\mathbf{t}_z/2]$, параллельные оси **Z** и отстоящие вдоль оси **Y** на $[\mathbf{t}_y/2]$.

3. При взаимодействии двух перпендикулярных осей **X** и **Z** соответственно плоскостей **n** с трансляциями $\mathbf{t}_y/2 + \mathbf{t}_z/2$ и **a** с трансляцией $\mathbf{t}_{1/x}$ образуются винтовые оси 2-го порядка $[\mathbf{t}_y/2]$, параллельные оси **Y** и отстоящие вдоль оси **X** на $[\mathbf{t}_x/2]$.

4. При взаимодействии двух перпендикулярных осей **Y** и **Z** соответственно плоскостей **m** и **a** с трансляцией $\mathbf{t}_{1/x}$ образуются винтовые оси 2-го порядка $[\mathbf{t}_x/2]$, параллельные оси **X** (рис. 109a).

5. Данная пространственная группа является центросимметричной. Центр симметрии, возникший при пересечении трех плоскостей **n** с трансляциями $\mathbf{t}_y/2 + \mathbf{t}_z/2$, **m** и **a** с трансляцией $\mathbf{t}_{1/x}$ отстоит от точки пересечения плоскостей на $[\mathbf{t}_x/4 + \mathbf{t}_y/4 + \mathbf{t}_z/4]$.

6. Начало координат находится в самой симметричной точке и отыскивается она непосредственно из формулы групп: подсчитываем вдоль каждой координатной оси общее число ей параллельный полтрансляций, заключающихся в символе 3-х плоскостей. Если это число будет четным, то вдоль этой оси центр симметрии не смещен вовсе, если же число полтрансляций нечетное, то вдоль соответственной координатной оси центр симметрии смещен на $1/4$ длины оси.

Число полтрансляций для пространственной группы **Pnma** = **D_{2h}**¹⁶:

а. параллельно оси **X** равно **1** (одна от плоскости **a**: плоскость **a** имеет трансляцию $\tau_x/2$),

б. параллельно оси **Y** равно **1** (одна полтрансляция $\tau_y/2$ от плоскости **n**: плоскость **n** имеет трансляцию $\tau_y/2 + \tau_z/2$),

в. параллельно оси **Z** равно **1** (одна полтрансляция $\tau_z/2$ от плоскости **n**: плоскость **n** имеет трансляцию $\tau_y/2 + \tau_z/2$),

Следовательно, центр симметрии смещен от тройной точки по осям **X** и **Y** на $1/4$ и поднят вдоль оси **Z** на $1/4$ (рис. 109б).

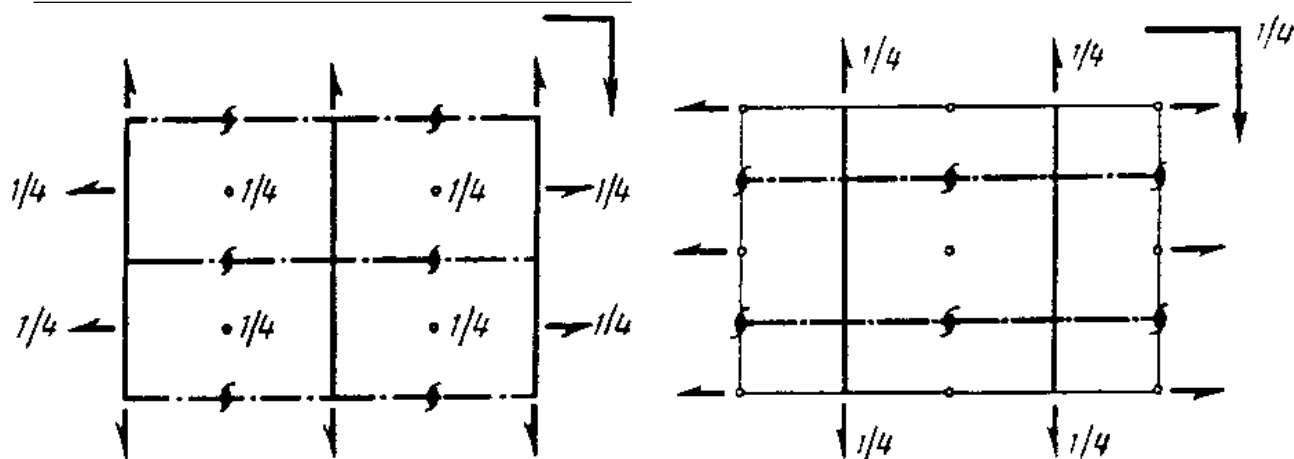


Рис. 109. К построению графика пространственной группы Pnma

Графики 230 пространственных (федоровских) групп симметрии приведены в справочнике "Интернациональные таблицы по структурной кристаллографии".

8. Основная литература.

1. Костов И. "Кристаллография". Изд-во "Мир". Москва. 1965. 527С
2. Зоркий П. М., Афонина Н. Н. "Симметрия молекул и кристаллов". Изд-во Московского университета. 1979. 176С
3. Вайнштейн Б. К., Фридкин В. М., Инденбом В. Л. "Современная кристаллография". Т.1. Изд-во "Наука". Москва. 1979. 359С
4. Шаскольская М. П. "Кристаллография". Москва. "Высшая школа". 1984. 375С
5. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П., Ю. К. Егоров-Тисменко "Геометрическая кристаллография". Изд-во Московского университета. 1986. 166С
6. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П., "Геометрическая микрокристаллография". Изд-во Московского университета. 1976. 238С
7. Зоркий П. М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М., Изд-во Моск. ун-та. 1986. 231С
8. Ю. Г. Загальская, Г. П. Литвинская. "Геометрическая кристаллография." М., Изд-во Моск. Ун-та. 1973. 160С

Учебное пособие

Кузьмичева Галина Михайловна

ОСНОВНЫЕ РАЗДЕЛЫ
КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Главный редактор Капкин В.Д.

Сдано в печать . . . 2002. Печать офсетн. Бум.офсетн.

Усл. печ. л. 6.3. Формат 60×90/16. Тираж 150 экз. Заказ № .
117571 Москва, пр. Вернадского, 86. ИПЦ МИТХТ им. М.В. Ломоносова.