Министерство образования Республики Беларусь
ГРОДНЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ЯНКИ КУПАЛЫ

В.А.ЛИОПО

СБОРНИК ЗАДАЧ
ПО КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Учебное пособие по курсу

«Физика диэлектриков и полупроводников»

для студентов специальности Н0201 — Физика

Гродно 2000

УДК 538.911(075.8)
ББК 22.37
Л 60

Рецензенты: доктор физико-математических наук,
профессор В.М. Анищик;
кандидат физико-математических наук,
доцент А.М. Колодинский.

Рекомендован советом физико-технического факультета ГрГУ.

Лиопо В.А.
СБОРНИК ЗАДАЧ ПО КРИСТАЛЛОГРАФИИ: Учеб. пособие. —
Л 60 Гродно: ГрГУ, 2000. — 69 с.

ISBN 985-417-

Учебное пособие содержит 60 задач с решениями и пояснениями. Предназначено для студентов специальности Н0201 — Физика.

УДК 538.911(075.8)
ББК 22.37

ISBN 985-417-

ВВЕДЕНИЕ

Среди разделов современной физики (механика, термодинамика, электромагнетизм, оптика, атомная и ядерная физика) в школьных и вузовских общефизических курсах не нашлось места физике твердого тела (ФТТ). В то же время хорошо известно, что более двух третей всех специалистов – физиков современности напрямую связаны с изучением проблем этой науки. Как объяснить это противоречие? Во-первых, ФТТ в неявной форме присутствует во всех разделах общей физики, во-вторых, многие аспекты ФТТ еще не получили своего завершения, чтобы стать «классикой», то есть их пока еще нельзя с уверенностью вводить в школьную и начальную вузовскую физику, так как физика твердого тела — стремительно развивающаяся наука и ее положения могут претерпевать изменения в связи с получением новых знаний. Методы и принципы ФТТ внедряются в другие отрасли науки (биофизика, химия, геофизика и многие другие). Открытые за последнее 15-20 лет новые формы вещества (например, квазикристаллы, фрактальные кластеры, фуллерены) заставили пересмотреть ряд положений современной науки. В-третьих, физика твердого тела требует достаточно глубоких знаний других разделов, таких, как кристаллография, теория групп, квантовая механика и др.

Наиболее простым объектом физики твердого тела являются кристаллы. Система теоретических взглядов на анализ геометрии взаиморасположения атомов называется кристаллографией. Кристаллография как наука родилась в связи с потребностями минералогии и частично химии, а затем редуцировала в физику, став основой физики твердого тела. Следовательно, кристаллографию можно рассматривать как своеобразное введение в физику твердого тела. Именно на таких позициях и построено данное пособие. В него включены задачи, отражающие теорию кристаллографии и ее практические аспекты. Пособие составлено таким образом, что не требует привлечения дополнительной литературы, по крайней мере, на первом этапе изучения геометрической кристаллографии. Необходимый для решения задач теоретический минимум имеется в пособии В.А. Лиопо «Матричная кристаллография» (Гродно: ГрГУ, 1998. – 78 с.). Рекомендации, приведенные в решениях задач, могут быть использованы при решении аналогичных задач, с которыми могут встретиться студенты (магистранты, аспиранты и т.д.) при изучении точечных симметрий в различных разделах кристаллографии и физики твердого тела в целом, в том числе и таких ее разделов, как физика диэлектриков и полупроводников.

Все кристаллические вещества могут быть разделены по различным типам в зависимости от выбора их свойств. Например, все кристаллы могут быть разделены на высокосимметричные (кубические), низкосимметричные (ромбические, моноклинные и триклинные) и среднесимметричные (три-, тетра- и гексогональные).

Наиболее общим и часто встречающимся делением кристаллов по типам является их разделение по электрическим свойствам. Металлы отличаются от остальных веществ высокой электро- и теплопроводностью, причем их электропроводность уменьшается при нагревании.

Если электропроводность вещества очень мала в широком интервале температур (от 0 К до температуры плавления кристалла), то такое вещество называется диэлектриком.

Полупроводники — это вещества, которые при низких температурах обладают плохой электропроводностью, которая увеличивается при повышении температуры.

Можно использовать и другие свойства для разделения кристаллов по различным типам, но во всех случаях методы анализа их атомной конфигурации остаются одинаковыми. Основой же этого анализа являются исследования точечной симметрии, чему и посвящено предлагаемое учебное пособие.

1. ТОЧЕЧНАЯ СИММЕТРИЯ И ЯЧЕЙКА КРИСТАЛЛА

Задача 1. Показать, что в кристаллической решётке не может существовать ось симметрии пятого порядка.

Задача 2. Найти порядок оси вдоль [111] в гранецентрированной кубической решётке.

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

Задача 4. Записать формулу симметрии следующих геометрических фигур: а) квадрата, б) параллелограмма, в) куба, г) тетраэдра, д) шестигранной призмы, е) шестигранной пирамиды, ж) додекаэдра, з) октаэдра, и) цилиндра, к) шара.

Задача 5. Записать в матричной форме результаты последовательного действия операций: а) $2_x \cdot \bar{1}$, б) $6_z \cdot m_x$, в) $2_x \cdot 3_{111} \cdot m_z$, г) $2_x \cdot m_z \cdot 3_{111}$, д) $3_z \cdot m_x$, е) $m_x 3_z$ и определите полученную операцию.

Задача 6. Каким операциям симметрии соответствуют следующие матрицы:

$$\text{а)} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \text{б)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}, \quad \text{в)} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\text{г)} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{д)} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{е)} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Задача 7. Изобразить графически взаиморасположение осей исходной координатной системы и осей после преобразования точечными операциями, имеющие в матричной записи вид:

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

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

Задача 8. Записать группу симметрии, соответствующую преобразованию отражения в плоскости, проходящей через ось z и лежащей под углом φ к оси x.

Задача 9. Доказать теоремы:
а) Если имеется ось n и проходящая через неё плоскость отражения, то общее число плоскостей равно n.
б) Если имеется ось n-го порядка (ось n) и перпендикулярная ей ось 2, то общее количество осей 2 равно n.

Задача 10. Показать, что:
а) точка пересечения чётной оси с плоскостью отражения (m) есть центр симметрии ($\bar{1}$);
б) если в плоскости отражения (m) лежит центр симметрии ($\bar{1}$), то линия, проходящая через $\bar{1}$ перпендикулярно m, есть ось 2;
в) если на оси 2 лежит $\bar{1}$, то появится m, проходящая через $\bar{1}$ перпендикулярно 2.

Задача 11. Показать, что две перпендикулярные плоскости отражения приводят к повороту вокруг оси 2, лежащей в обеих плоскостях.

Задача 12. Записать и определить операцию, соответствующую отражению в (перпендикулярной оси z) плоскости (m_z) с последующим отражением в плоскости (m_φ), лежащей под углом φ к оси x и проходящей через ось z.

Задача 13. Пусть в кристалле возможны следующие операции:
1) поворот вокруг оси 6, совпадающий с осью z (6_z);
2) поворот вокруг оси 2, совпадающий с осью x (2_x);
3) отражение в начале координат, как в центре симметрии ($\bar{1}$).
Определить результирующую операцию при последовательном выполнении:
а) 1, затем 2, затем 3; б) 1, затем 3, затем 2; в) 2, затем 1, затем 3; г) 2, затем 3, затем 1; д) 3, затем 1, затем 2; е) 3, затем 2, затем 1.

Задача 14. Найти матричное представление операции симметрии, дающей тот же результат, что и:
а) поворот вокруг 3_z и поворот вокруг 2_x;
б) поворот вокруг 2_x и поворот вокруг 3_z;
в) повороты вокруг 4_z, вокруг 2_y и вокруг 2_x.

Задача 15. Написать группы в матричном представлении для следующих операций: а) $\bar{1}$, б) 2_x, в) 2_y, г) 3_z, д) $3_{[111]}$, е) m_z, ж) 4_z.

Задача 16. Записать международной символикой точечные группы:
а) D_2, б) C_{2v}, в) C_{3v}, г) S_4, д) C_{4h}, е) D_{4h}, ж) C_{6h}, з) D_{6h}, и) T_h, к) O, л) T_d.

Задача 17. Записать подгруппы следующих точечных групп:
а) mmm, б) 6mm, в) 4/mmm, г) $\bar{3}$m .

Задача 18. Привести матричное представление точечной группы m3m и указать, каким преобразованиям соответствуют ее элементы.

Задача 19. Найти порядки следующих групп симметрии: mmm, 222, 23, m3m.

Задача 20. Записать матрицы-генераторы групп: а) 222, б) 4mm, в) 4/mmm, г) 23, д) 432.

Задача 21. Определить правильные системы точек для точечных групп: а) 4, б) mmm, в) 6mm, г) 4/mmm, д) 6/mmm, е) $\bar{3}$m , ж) m3m.

Задача 22. Записать матрицы-генераторы (порождающие матрицы) и привести матричное представление точечной группы 4/mmm. Найти подгруппы этой группы.

Задача 23. Рассчитать элементы группы, если матрицы-генераторы имеют вид:

$$\left(\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\right).$$

Задача 24. В кристалле имеются повороты вокруг координатных осей x и y, как вокруг осей 4. Записать матричное представление точечной группы этого кристалла.

Задача 25. Найти подгруппы группы 422.

Задача 26. Найти метрические тензоры решёток: а) кубической, б) тетрагональной, в) ромбической, г) гексагональной, д) тригональной (в H и R установках), е) моноклинной. Общий вид метрического тензора (M) следующий:

$$M = \begin{pmatrix} a & b\cdot\cos\gamma & c\cdot\cos\beta \\ 0 & b\cdot\sin\gamma & \frac{c}{\sin\gamma}\cdot(\cos\alpha - \cos\beta\cdot\cos\gamma) \\ 0 & 0 & \frac{c}{\sin\gamma}\cdot r \end{pmatrix},$$

где $r = \sqrt{1-\cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$.

Задача 27. Зная форму записи метрического тензора (см. задачу 26), найти объемы ячеек: а) моноклинной, б) ромбической, в) гексагональной, г) тетрагональной, д) кубической.

Задача 28. Привести правила расчета кристаллографических орбит в различных базисах в зависимости от базиса исходной точки, если задано матричное представление точечной группы в кристаллофизическом базисе. Метрический тензор решетки считать известным.

Задача 29. Записать метрические тензоры прямой (M) и обратной (M^{-1}) решеток а) гексагональных и б)моноклинных кристаллов.

Задача 30. Матрица-генератор точечной группы g в кристаллофизическом базисе гексагональной решетки имеет вид

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Записать матричное представление группы в кристаллографическом базисе.

Задача 31. Определить все возможные операции симметрии в кристалле с параметрами ячейки *а = в ≠ с,* α *= в = 90⁰, γ = 120⁰*.

Задача 32. Определить, какие ограничения на параметры элементарной ячейки кристалла накладывает операция симметрии

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Задача 33. Определить, какие элементы симметрии могут встречаться в кубических кристаллах.

Задача 34. Найти ограничения, накладываемые на параметры ячейки кристалла симметрией 4_z.

Задача 35. Записать группу 3m в матричном представлении, в H- и R-установках.

Задача 36. Найти общую и частные правильные системы точек группы 3m. Коэффициенты исходной точки: а)(xyz), б)(0yz), в)(x0z), г) (xy0), д) (00z), е) (xxx), ж) (000) в R- и H-установках.

Задача 37. Объяснить, почему не может существовать точечная группа, состоящая только из несобственных вращений.

Задача 38. Доказать, что точки общей правильной системы при наличии поворота вокруг оси 3 образуют правильный треугольник.

Задача 39. В кристалле имеется поворот вокруг оси 3, не совпадающий по направлению ни с одной из его кристаллографических координатных осей. Найти ограничения, накладываемые имеющейся операцией симметрии на параметры элементарной ячейки кристалла.

Задача 40. В тригональном кристалле при R-установке координатных осей (ромбоэдрическая ячейка) координаты точки равны $(x, y, z)_R$. Определить координаты этой же точки для гексагональной установки координатных осей (H-установка). Параметры ячейки в R-системе равны a, α.

Задача 41. Зная точечную группу кристалла (g), построить точечную группу этого же кристалла в векторном пространстве. Проверить выполнение групповых постулатов.

Задача 42. Точечная группа кристалла может быть задана либо в кристаллофизическом (кф), либо в кристаллографическом (кг) базисах. Привести правила расчета правильной системы точек в векторном пространстве в зависимости от базиса исходной точки и базиса векторного пространства.

Задача 43. Записать группу точечной симметрии векторного пространства кристалла с точечной группой симметрии 222.

Задача 44. Порядок точечной группы равен n. Найти порядок точечной группы векторного пространства этого кристалла.

Задача 45. Записать точечную группу векторного пространства кристалла с точечной группой 4. Определить ее порядок.

Задача 46. Записать группу точечной симметрии 3 в векторном пространстве: а) в ортогональном (кристаллофизическом) базисе, б) в кристаллографическом базисе при H-установке координатных осей.

Задача 47. Записать группу точечной симметрии векторного пространства точечной группы 3 при R-установке координатных осей.

Задача 48. $a = 10\,\mathring{A}$, $b = 17\,\mathring{A}$, $c = 20\,\mathring{A}$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 110°$. Найти параметры и объём ячейки обратной решётки и объём ячейки кристалла.

Задача 49. $a = 5\overset{\circ}{A}$, $b = 7\overset{\circ}{A}$, $c = 10\overset{\circ}{A}$, $\alpha = 100°$, $\beta = 90°$, $\gamma = 104°$. Найти объём ячейки кристалла и объём ячейки обратной решётки.

Задача 50. Определить элементарную ячейку обратной решётки для ромбоэдрического кристалла (параметры прямой решётки: a = b= c, α = = $\beta = \gamma \neq 90°$) и для ромбического кристалла (параметры прямой решётки: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$).

Задача 51. Элементарная ячейка триклинного кристалла имеет параметры: $a = 6.64\overset{\circ}{A}$, $b = 8.31\overset{\circ}{A}$, $c = 11.18\overset{\circ}{A}$, $\alpha = 64.0°$, $\beta = 46.3°$, $\gamma =$ 77.4°. Вычислить параметры обратной решётки.

Задача 52. Повторить вычисления по данным предыдущей задачи, но заменить угол γ на π - 77.4° = 102.6°.

Задача 53. В кристалле моноклинной сингонии с параметрами элементарной ячейки а = 5,2 $\overset{0}{A}$, в = 8,3 $\overset{0}{A}$, с = 10,17 $\overset{0}{A}$, $\gamma = 102^0$ точки имеют кристаллографические координаты:

1) $-\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}$; 2) 0,83, 0,92, 0,03; 3) -0,893, -0,252, -0,438. Записать координаты этих точек в кристаллофизической системе координат $(x\ y\ z)_{кф}$ при стандартной установке осей (*а* совпадает с х, *в* лежит в плоскости х у).

Задача 54. Параметры элементарной ячейки триклинного кристалла равны а = 5,2 $\overset{0}{A}$, в = 8,3 $\overset{0}{A}$, с = 12,1 $\overset{0}{A}$, $\alpha=76^0 50'$, $\beta=88^0 14'$, $\gamma = 117^0 26'$.

Определить:
1) метрический тензор прямой (M) и обратной (M^{-1}) решеток;
2) объемы ячеек прямой и обратной решеток.

Задача 55. Параметры ячейки равны a = 5,2, в = 8,3, c = 12,1 (все в $\overset{0}{A}$), $\alpha=76^0 50'$, $\beta=88^0 14'$, $\gamma = 117^0 26'$. Определить параметры ячейки обратной решетки.

Задача 56. Параметры ячейки равны a = 8,2, в = 4,2, c = 11,2 (все в $\overset{0}{A}$), $\alpha=\beta=90^0$, $\gamma = 92^0 30'$. Определить объемы V и $V^{-1} = V^*$ и параметры ячейки обратной решетки кристалла.

Задача 57. Точечная группа 23, параметр a=7,5 $\overset{0}{A}$. Найти b^*.

Задача 58. В объемноцентрированной ячейке ромбического кристалла с параметрами a = 6,2 $\overset{0}{A}$, b = 7,4 $\overset{0}{A}$, c = 8,6 $\overset{0}{A}$ задана точка с кристаллографическими координатами:

а) $(xyz)_{I(КГ)} = \left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$; б) $(xyz)_{IКГ} = (0{,}33;0{,}42;0{,}18)$; в) $\left(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\right)$.

Определить кристаллические координаты этой точки в примитивном базисе этой же решетки.

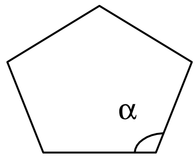
Задача 59. Определить общую и все возможные частные правильные системы точек в кристалле с точечной группой $\bar{4}3m$.

Задача 60. Привести задачи из общей физики, где можно использовать методы точечной кристаллографии.

Решения и пояснения к задачам

Задача 1.

а) Простейшей геометрической фигурой, обладающей осью пятого порядка (осью 5), является правильный пятиугольник (пентагон), изображенный на рис. 1.1. Пусть в кристалле есть ось 5. Но кристаллы тела решеточные, следовательно, характеризуются таким элементом симметрии, как трансляция. Это означает, что любая плоскость в

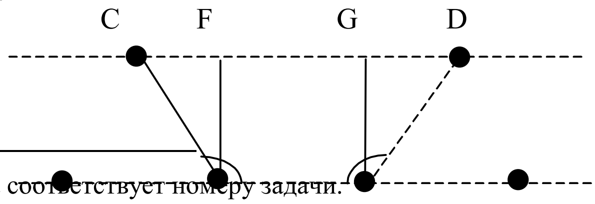


$\alpha=108^{o}$

Рис. 1.1*

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

б) Приведем более строгое доказательство. Рассмотрим произвольную узловую плоскость. Пусть через узлы этой плоскости перпендикулярно чертежу проходят оси n-порядка (рис. 1.2). По определению, поворот вокруг оси n на угол $\alpha=\frac{2\pi}{n}$ приводит кристалл к самосовпадению, причем поворот можно осуществить как по часовой, так и против часовой стрелки.



* Номер рисунка соответствует номеру задачи.

α α
А I В
Рис. 1.2

Развернем кристалл вокруг n - оси, проходящей через узел A, против часовой стрелки, а вокруг оси, походящей через узел B, по часовой стрелке. Точки A и B перейдут в позиции D и C соответственно. Узловая линия CD параллельна узловой линии AB, следовательно, CD обязательно кратна $AB = I$, то есть $CD = nI$, где $n \in Z$. Как следует из рис. 1.2, $CD = 2CF + FG = 2I\cos\alpha + I = I(2\cos\alpha + 1) = nI$, отсюда $2\cos\alpha + 1$ должно быть обязательно целым. Это выполняется при значениях $\cos\alpha = \pm 1/2, \pm 1, 0$. Значения $\cos\alpha$, α и n приведем в таблице, из которой видно, что в кристаллах могут быть оси симметрии с порядками 1, 2, 3, 4, 6 и невозможны оси других (в том числе и ось 5) порядков.

cos α	**+1/2**	**-1/2**	**+1**	**-1**	**0**
α^o	**60^o**	**120^o**	**$0 = 360^o$**	**180^o**	**90^o**
n	**6**	**3**	**1**	**2**	**4**

Задача 2.

Гранецентрированную кубическую ячейку (рис. 2а) ориентируем так, чтобы её телесная диагональ (направление [111]) стала перпендикулярной плоскости чертежа (рис. 2б). Светлыми кружками пока-

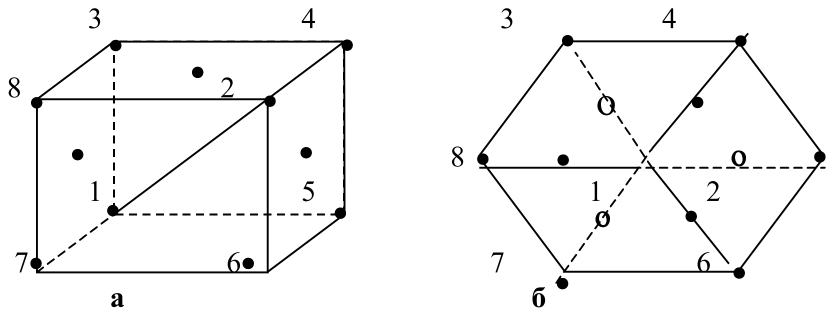


Рис. 2

заны видимые, черными – невидимые гомологичные точки. Из этого рисунка следует, что с направлением [111] совпадает направление инверсионной оси шестого порядка ($\bar{6}$).

Задача 3.

Буквы русского и латинского алфавитов распадаются на следующие группы симметрии: mm2 (две взаимно пересекающиеся плоскости отражения и на линии их пересечения, как следствие, ось второго порядка); m (вертикальная - (m_v) или горизонтальная - ($m_н$) плоскости отражения) 2 (ось второго порядка); 1 - отсутствие симметрии, кроме тривиальной, - поворота на 360^0. Разбиение букв по группам приведено в таблице.

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

Задача 4.

Формула симметрии - это перечень всех элементов симметрии объекта. У указанных в задаче фигур они имеют вид: а) квадрат - L_4, 4P, C; б) параллелограмм - L_2,C; в) куб - $3L_4$, $4L_3 6L_2$ 9PC; г) тетраэдр - $3L_{4i}$, $4L_3$, $4L_2$, д) шестигранная призма - L_6, $6L_2$,6P_v, $P_н$, C; е) шестигранная пирамида - L_6,6P; ж) додекадр - $6L_5$, $10L_3$,$15L_2$ (плоскости симметрии и центр симметрии найдите самостоятельно); з) октаэдр - $3L_4$, $4L_3$, $6L_2$ 9PC; и) цилиндр - оси вращения произвольного порядка ∞ P, C; к) шар - все возможные элементы точечной симметрии.

Обозначения: L_n- ось n-го порядка, L_{ni} – инверсионная ось n-го порядка, P_v, $P_н$ - плотности отражения, C- центр симметрии.

Задача 5.

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

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

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

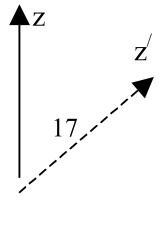
то есть R — отражение в плоскости, проходящей через ось z и имеющей с осью угол 60^0;

в)

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

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

Результирующее действие иллюстрируется рисунком 5: x y z — сплошные линии - исходные координаты оси, $x^/$ $y^/$ $z^/$ — пунктир-координатные оси после преобразования R.



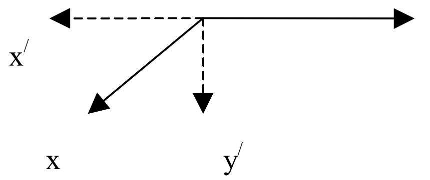


Рис. 5.1

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

то есть

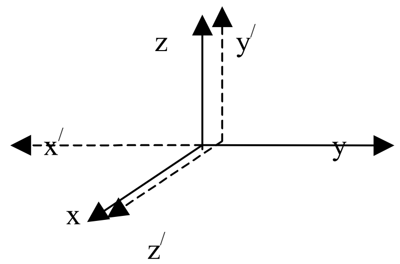


Рис. 5.2

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

Операции д) и е) являются инверсионными поворотами вокруг оси $\bar{6}_z$, но направления поворотов противоположны.

Задача 6.

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

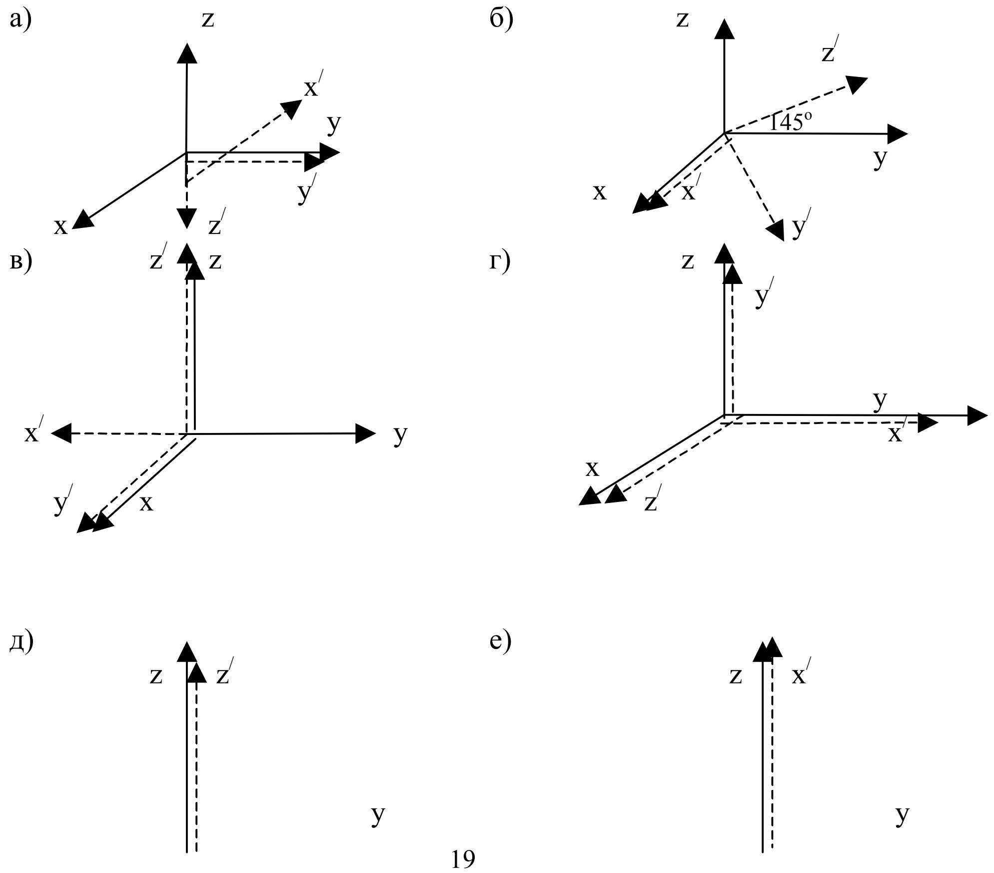


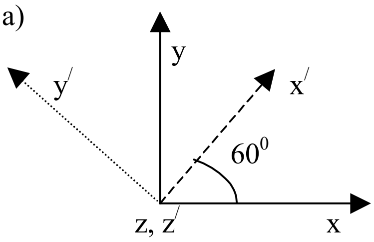
Рис. 6

а. Поворот на угол 180^0 вокруг оси y (ось 2).
б. Поворот на 45^0 (ось 8) вокруг оси z.
в. Поворот вокруг z на 90^0 (ось 4).
г. Поворот на 120^0 вокруг оси, совпадающей с направлением [111] (ось $3_{[111]}$).
д. Отражение в плоскости, идущей через ось z и биссектрису угла между x, y.
е. Отражение в плоскости, идущей через ось y и биссектрису угла между x, z.

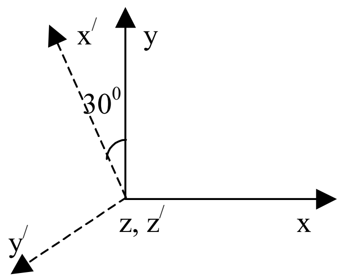
Задача 7.

Положения координатных осей до (x y z) и после преобразования (x' y' z') приведены на рис. 7. Ось z направлена на нас. Если ось z' направлена на нас, то она обозначается z', если от нас, то $\bar{z}'$.

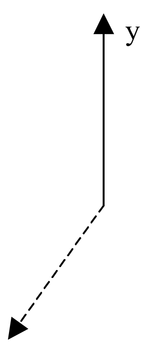
а)



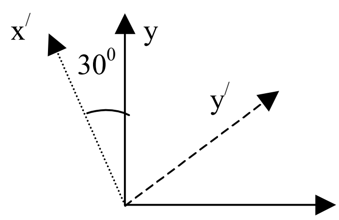
б)



в)



г)



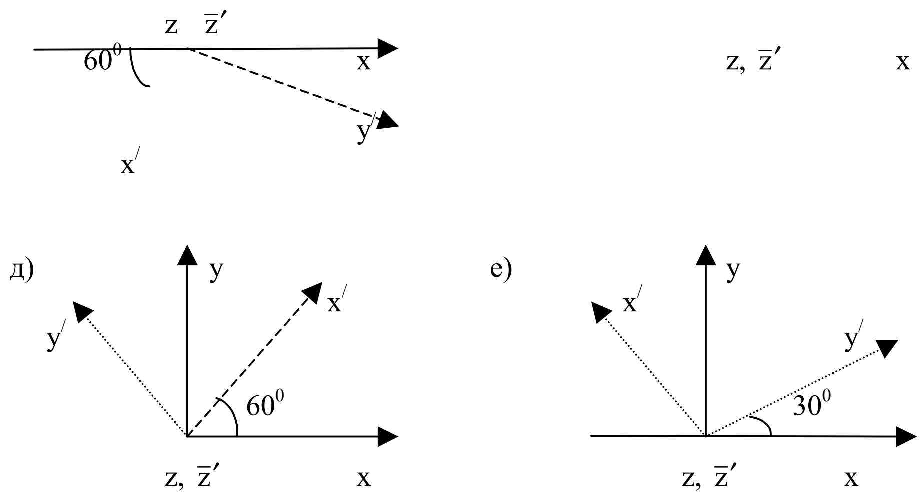


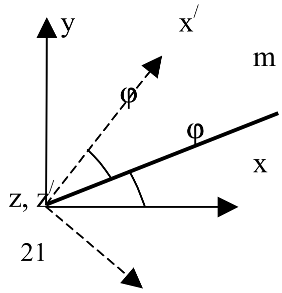
Рис. 7

Задача 8.

Как следует из рис. 8, матрица отражения указанной в условии задачи плоскости имеет вид:

$$m = \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 \\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Так как $m^2 = E$, где E - единичная матрица, то группа отражения в m имеет вид: m, E.



y'

Рис. 8

Задача 9.

а) Пусть ось n проходит через координатную ось z. Группа поворота вокруг этой оси включает n элементов, матричная запись которых имеет вид

$$\left(L_n\right)^{(k)} = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{n}k & -\sin\frac{2\pi}{n}k & 0 \\ \sin\frac{2\pi}{n}k & \cos\frac{2\pi}{n}k & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \ k = 1,2\ , ..n.$$

Плоскость отражения (m) совместима с координатной плоскостью xz, тогда отражение в этой плоскости опишется матрицей

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

Взаимодействие $\left(L_n\right)^{(k)}$ и m_{xz} приводит к появлению операций, описываемых матрицами

$$\left(L_n\right)^{(k)}\ m_{xz} = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{n}k & \sin\frac{2\pi}{n}k & 0 \\ \sin\frac{2\pi}{n}k & -\cos\frac{2\pi}{n}k & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$ которые соответствуют матрицам

отражения в плоскостях, проходящих через ось z под углом $\frac{\pi k}{n}$ (см. задачу 8). Число таких плоскостей равно n.

б) Взаимодействие оси $(L_n)^{(k)}$ и оси 2, ей перпендикулярной (пусть 2 идет вдоль оси x)

$$(2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

приводит к n осям второго порядка вида

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{n}k & \sin\frac{2\pi}{n}k & 0 \\ \sin\frac{2\pi}{n}k & -\cos\frac{2\pi}{n}k & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Эти оси 2 лежат в координатной плоскости xy, и их число равно n.

Задача 10.

Запишем матрицы поворота вокруг оси 2, идущей вдоль оси z (2_z), отражение в плоскости, совпадающей с координатной плоскостью x y (m_{xy}) и отражением в центре симметрии, совпадающем с началом координат $(\bar{1})$:

$$(2_z) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ (m_{xy}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$(\bar{1}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

а) Поворот вокруг четной оси обязательно включает и поворот на 180^0. То есть в группе четного поворота в качестве подгруппы фигурирует группа поворота вокруг оси 2.

$(2_z)\ (m_{xy}) = (m_{xy})\ (2_z) = (\bar{1})$.

б) $(m_{xy})\ (\bar{1}) = (\bar{1})\ (m_{xy}) = (2_z)$.

в) $(2_z)\ (\bar{1}) = (\bar{1})\ (2_z) = (m_{xy})$.

Задача 11.

Рассмотрим две плоскости, лежащие в координатных плоскостях: m_x —перпендикулярна оси x , m_y — перпендикулярна оси y.

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

$$(m_x\ \ m_y) = (m_y)\ (m_x) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_Z = (2_z),$$

2_z — поворот вокруг оси 2, совпадающей с осью z.

Задача 12.

Матрицу (m_φ) смотрите в задаче 8.

$$m_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},\ (m_\varphi) = \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 \\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$m_\varphi\ m_z = m_z\ m_\varphi = \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 \\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

что соответствует повороту вокруг оси 2, лежащей в плоскости xy под углом φ к оси x.

Задача 13.

Указанные операции точечной симметрии описываются матрицами:

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

$$3)\ \left(\bar{1}\right) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

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

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

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

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

Задача 14.

$$\text{а)}\ \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},$$

поворот вокруг оси 2, лежащей в плоскости xy, под углом 60^0 к оси x;

$$\text{б)}\ \begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},$$

поворот вокруг оси 2, лежащей во второй четверти плоскости xy, под углом 30^0 к оси y.

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

поворот вокруг оси, совпадающей с осью z, на угол 270^0 (против часовой стрелки).

Задача 15.

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

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

где x y z - исходные положения координатных осей, x' y' z' - положения координатных осей после выполнения операции симметрии. Элементы группы рассчитываются следующим образом:

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

То есть указанные в задаче группы записываются:

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

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

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

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

Задача 16.

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

Задача 17.

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

б) 6mm-3m, mm2, 3, 2, m.

в) 4/mmm-4mm, 4/m, mmm, mm2, 2/m, 2, m, $\bar{1}$.

г) $\bar{3}$m-$\bar{3}$, 3, m.

Задача 18.

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

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

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

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

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

$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$;

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

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

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

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

$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ (4 оси 3);

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

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ (3 оси 4);

---

* Для каждой оси возможен поворот против и по часовой стрелке.

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

$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ (3 оси $\bar{4}$);

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

$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ (4 оси $\bar{6}$).

Порядок группы m3m равен 48.

Задача 19.

mmm-8; 222-4; 23-12; m3m-48 (см. задачу 18).

Задача 20.

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

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

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

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

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

Задача 21.

а) 4 - (x, y, z), (-y, x, z), (-x, -y, z), (y, -x, z);
б) mmm - (x, y, z), (-x, -y, z), (-x, y, z), (x, -y, z), (-x, -y, -z), (x, y, -z), (x, -y, -z), (-x, y, -z);

в) 6mm - (x, y, z);
$\left(\frac{x}{2}-\frac{\sqrt{3}}{2}y, \frac{\sqrt{3}}{2}x+\frac{y}{2}, z\right)$, $\left(-\frac{x}{2}-\frac{\sqrt{3}}{2}y, \frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{y}{2}, z\right)$, (-x, -y, z),
$\left(-\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y, -\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{y}{2}, z\right)$, $\left(\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y, -\frac{\sqrt{3}}{2}x+\frac{y}{2}, z\right)$,

(-x,y,z), $\left(-\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y,\frac{\sqrt{3}}{2}x+\frac{y}{2},z\right),\left(\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y,\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{y}{2},z\right),$

(x,-y,z), $\left(\frac{x}{2}-\frac{\sqrt{3}}{2}y,-\frac{\sqrt{3}}{2}x+\frac{y}{2},z\right),\left(-\frac{x}{2}-\frac{\sqrt{3}}{2}y,-\frac{\sqrt{3}}{2}x+\frac{y}{2},z\right);$

г) 4/ mmm - (x, y, z), (y, -x , z), (-x, -y, z) (-y, x, z), (-x, y, z), (y, x, z), (x, -y, z), (-y, -x, z), (-x, -y, -z), (y, -x, -z), (-y, x, -z), (-y, x, -z), (-x, y,-z), (-y, -x, -z), (-x, y, -z), (y, x, -z);

д) 6/mmm- в правильной системе точки этой точечной группы имеется правильная система точек группы 6mm и дополнительно 12 точек, у которых координаты x, y те же, что и в группе 6mm, а координата z имеет противоположный знак, т.е. порядок общей правильной системы группы 6/mmm (значность) равен 24;

е) $\bar{3}\,m$

$$\pm\left\{(xyz),\left(-\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y,\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{y}{2},z\right),\left(-\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y,-\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{y}{2},z\right)\right.$$

$$\left(-\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y,-\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{y}{2},z\right),(-x,y,z),\left(\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y,\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{y}{2},z\right),$$

$$\left.\left(\frac{x}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}y,\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{y}{2},z\right)\right\};$$

ж) m3m - (x, y, z), (x, z, y), (y, x, z), (y, z, x), (z, x, y), (z, y, x), (-x, y, z), (-x, z, y), (-y, x, z), (-y, x, z), (-y, z, x), (-z, y, x), (x, -y, z), (x, -z, y), (y, -x, z), (y, -z, x), (z, -x, y), (z, -y, x), (x, y, -z), (x, z, -y), (y, x, -z), (y, z, -x), (z, x, -y), (z, y, -x), (-x, -y, z), (-x, -z, y), (-y, -x, z), (-y, -z, x), (-z, -x, y), (-z, -y, x), (-x, y, -z), (-x, z, -y), (-y, x, -z), (-y, z, -x), (-z, x, -y), (-z, y, -x,), (x, -y, -z), (x, -z, -y), (y, -x, -z), (y, -z, -x), (z, -x, -y), (z, -y, -x,), (-x, -y, -z), (-x, -z, -y), (-y, -x, -z), (-y, -z, -x), (-z, -x, -y), (-z, -y, -x,).

Задача 22.

Группа 4/mmm включает поворот вокруг оси 4_z

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

отражение в плоскости, проходящей через оси z и x,

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

отражение в плоскости xy

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

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

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

то есть включается три элемента.
Подгруппы группы 4/mmm

$4=4_z,\ 4^2_z,\ 4^3_z,\ (4^4_z \equiv E) =$

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

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

Рассчитаем произведение элементов группы 4 на элементы группы m и проверим выполнение групповых постулатов.

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

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

$4mm \in 4/mmm$.

Рассчитаем произведение элементов группы 4mm и группы m_z , получим группу 4/mmm.

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

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

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

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

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

Задача 23.

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$, то есть это группа 32.

Задача 24.

Группы поворотов вокруг 4_x и 4_y в матричном представлении

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

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

Рассчитаем правые и левые произведения группы 4_x и 4_y, то есть найдем (4_x) (4_y) и (4_y) (4_x). Произведение (4_x) (4_y) имеет вид:
(4_x) (4_y) = A:

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

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

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

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

Повороты вокруг осей 4_x и 4_y можно осуществить в последовательностях $4_x\ 4_y = A$ или $4_y 4_x = B$. Объединив A и B, получим группу 432, матричное представление каждой имеет вид:

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

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

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

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

Задача 25.

Подгруппами группы 422 являются следующие группы:

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

$$2_x=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix};$$

$$2_{xy}=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix};$$

$$2'_{xy}=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix};$$

$$2_y=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix};$$

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

Задача 26.

а) $\begin{pmatrix}a & 0 & 0\\ 0 & a & 0\\ 0 & 0 & a\end{pmatrix}$, б) $\begin{pmatrix}a & 0 & 0\\ 0 & a & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}$, в) $\begin{pmatrix}a & 0 & 0\\ 0 & b & 0\\ 0 & 0 & a\end{pmatrix}$,

г) $\begin{pmatrix}a & -\frac{a}{2} & 0\\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}a & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}$, д) для H-установки $\begin{pmatrix}a & -\frac{a}{2} & 0\\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}a & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}$,

для R-установки $\begin{pmatrix}2A & -A & -A\\ 0 & B & -B\\ C & C & -C\end{pmatrix}$, где $A = \frac{\sqrt{3}}{3}a\sin\frac{\alpha}{2}$,

$B = a\sin\frac{\alpha}{2}$, $c = a\left(\frac{\sin\frac{3}{2}\alpha}{3\sin\frac{\alpha}{2}}\right)^{\frac{1}{2}}$, е) $\begin{pmatrix}a & b\cos\gamma & 0\\ 0 & b\sin\gamma & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}$.

Задача 27.

Объем ячейки равен определителю матрицы метрического тензора кристалла, то есть (см. задачу 26): а) abc sin γ; б) abc; в) $\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$; г) a^2c ; д) a^3.

Задача 28.

Расчет орбит в различных базисах $(x_s)=(x_{yz})_s$ в зависимости от базиса исходной точки (x)=(x,y,z) выполняется по правилам, приведенным в таблице; кф, кт — обозначения кристаллофизической и кристаллографической координатных систем соответственно, G — точечная группа в кристаллофизическом базисе, M — метрический и M^{-1} — обратный метрический тензоры решетки кристалла.

Орбита / x	$x_{кф}$	$x_{нг}$
$x_{кф}$	$G\|X\|_{кф}$	$GM\|X\|_{кф}$
$x_{нг}$	$GM\|X\|_{кт}$	$M^{-1}GM\|X\|_{кт} = H\|X\|_{кт}$

Примечание: $M^{-1}GM = H$ - точечная группа в кристаллографическом базисе.

Задача 29.

(см. задачи 26 и 27)

а) В гексагональных кристаллах a = b, $\alpha = \beta = 90^0$, $\gamma = 120^0$

$$M = \begin{pmatrix} a & -\frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix},$$

$$(M)^{1}=\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{\sqrt{3}}{2a} & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2}a^{*} & \frac{2}{3}a^{*} & 0 \\ 0 & a^{*} & 0 \\ 0 & 0 & c^{*} \end{pmatrix};$$

б) в моноклинных кристаллах $\alpha = \beta = 90^0$

$$M=\begin{pmatrix} a & b\cos\gamma & 0 \\ 0 & b\sin\gamma & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix},$$

$$(M)^{1}=\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{\mathrm{ctg}\gamma}{2a} & 0 \\ 0 & \frac{1}{b\sin\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a^{*}\sin\gamma^{*} & -a^{*}\cos\gamma^{*} & 0 \\ 0 & b^{*} & 0 \\ 0 & 0 & c^{*} \end{pmatrix}.$$

Задача 30.

Точечные группы в кристаллографическом базисе (H) при заданной группе в кристаллофизическом базисе (G) определяются по правилу (см. задачу 28)

$$H = M^{-1}GM,$$

где M, M^{-1} — прямой и обратный матричные тензоры решетки кристалла.

Группа 6 в кристаллофизическом базисе имеет вид :

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

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$M=\begin{pmatrix} a & -\frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix},\ M^{-1}=\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

следовательно, группа 6 в кристаллографическом базисе в матричном представлении запишется:

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

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

Задача 31.

Оператор симметрии (e), действуя на узел [[xyz]], может привести его только в узел [[q r s]], где q r s ∈ N. В качестве исходного узла возьмем [[111]], тогда

$$\begin{pmatrix} q \\ r \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & -\frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Отсюда

$$\begin{pmatrix} \frac{C_{11}\sqrt{3}C_{12}}{2} + C_{13}\frac{c}{a} + \frac{\sqrt{3}}{6}(C_{21} + \sqrt{3}C_{22}) + \frac{\sqrt{3}}{3}C_{23}\frac{c}{a} \\ \frac{\sqrt{3}}{3}(C_{21} + \sqrt{3}C_{22}) + \frac{2\sqrt{3}}{3}C_{33}\frac{c}{a} \\ C_{33} + \frac{a}{2c}(C_{31} + \sqrt{3}C_{32}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ r \\ s \end{pmatrix}.$$

Так как a и c независимы, то $C_{13} = C_{23} = C_{31} = C_{32} = 0$, а $C_{33} = \pm 1$.
Следовательно,

$$\begin{cases} (C_{11} + C_{22}) + \sqrt{3}(C_{12} + \frac{C_{21}}{3}) = 2g \\ C_{22} + \frac{\sqrt{3}}{3}C_{21} = r \end{cases}$$

кроме того, $C_{11}\,C_{22} - C_{21}\,C_{12} = \pm 1$. (Det = ±1)

$$\begin{cases} C_{11}^2 + C_{12}^2 = C_{11}^2 + C^2 + C_{21}^2 = 1, \\ C_{12}^2 + C_{22}^2 = C_{21}^2 + C_{22}^2 = 1. \end{cases}$$

Отсюда следуют значения C_{ij}

$$\begin{pmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \pm\frac{1}{2} & \pm\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \pm\frac{\sqrt{3}}{2} & \pm\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, в рассматриваемом кристалле могут встречаться следующие операции

1	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг 1
2	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг 2_z
3	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг 2_y
4	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг 2_x
5	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Отражение в m_x
6	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Отражение в m_y

7.	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Отражение в m_z
8	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Отражение в центре симметрии
9.	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг оси z на 60^0
10.	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг оси z на 120^0
11	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг оси z на 240^0

12	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг оси z на 300^0
13	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Инверсионный поворот на 240^0 вокруг оси z
14	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Инверсионный поворот на 120^0 вокруг оси z
15	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Инверсионный поворот на 60^0 вокруг оси z.
16	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Инверсионный поворот на 300^0 вокруг оси z

17	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг 2, лежащей в плоскости xy под углом 60^0 к оси x
18	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг 2, лежащей в плоскости xy под углом 120^0 к оси x
19	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг 2 , лежащей в плоскости xy под углом 240^0 к оси x
20	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Поворот вокруг 2 , лежащей в плоскости xy под углом 240^0 к оси x

21	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Отражение в плоскости , проходящей через z под углом 60^0 к оси x
22	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Отражение в плоскости , проходящей через z под углом 120^0 к оси x
23	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Отражение в плоскости , проходящей через z под углом 240^0 к оси x
24	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Отражение в плоскости , проходящей через z под углом 300^0 к оси x

Задача 32.

Исходная точка [[111]] после преобразования переходит в [[qst]], тогда (см. задачу 31)

$$\begin{pmatrix} q \\ s \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{-\mathrm{tg}\gamma}{a} & \frac{\cos\alpha\cos\alpha-\cos\beta}{a\sin\gamma r} \\ 0 & \frac{1}{b\sin\gamma} & \frac{\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha}{d\sin\gamma r} \\ 0 & 0 & \frac{\sin\gamma}{cr} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b\cos\gamma & c\cos\beta \\ 0 & b\sin\gamma & \frac{c}{\sin\gamma}(\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma) \\ 0 & 0 & \frac{cr}{\sin\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

следовательно,

$$\frac{1}{a}\left\{\frac{a+b\cos\gamma+\cos\beta}{2}-\frac{\sqrt{3}}{2}\left[b\sin\gamma+\frac{c}{\sin\gamma}(\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma)\right]\right\}-$$

$$-\frac{-\mathrm{tg}\gamma}{a}\left\{\frac{\sqrt{3}}{2}(a+b\cos\gamma+c\cos\beta)+\frac{1}{2}\left[b\sin\gamma+\frac{c}{\sin\gamma}(\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma)\right]\right\}+$$

$$+\frac{c(\cos\gamma\cos\alpha-\cos\beta)}{a\sin\gamma^2}=q\,.$$

$$\frac{1}{b\sin\gamma}\left\{\frac{\sqrt{3}}{2}(a+b\cos\gamma+c\cos\beta)+\frac{1}{2}\left[b\sin\gamma+\frac{c}{\sin\gamma}(\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma)\right]\right\}+$$

$$+\frac{(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)c}{b\sin^2\gamma}=s\,,$$

$q, s \in N$ (N - множество целых чисел).

На параметр с никаких ограничений не накладывается, а, так как параметры а и с, в и с независимы, то $\cos\beta = \cos\alpha = 0$.

Отсюда

$$\begin{cases} \dfrac{a+b\cos\gamma}{2a}(1-\sqrt{3}ctg\gamma) - \dfrac{b\sin\gamma}{2a}(\sqrt{3}+ctg\gamma) = q, \\ \dfrac{a+b\cos\gamma}{2b\sin\gamma}\sqrt{3} + \dfrac{1}{2} = S. \end{cases}$$

Итак, $a = b$, $\gamma = 120^0$ или $a_1 = b_1$, $\gamma_1 = 60^0$.
Следовательно, параметры ячейки кристалла должны удовлетворять условию $a = b$, $\alpha = \beta = 90^0$, $\gamma = 120^0$ (гексагональная сингония).

Задача 33.

Исходный узел [[111]] после преобразования имеет вид [[gst]] (см. задачи 31 и 32) gst — все целые.
Метрические тензоры (M) и (M^{-1}) кубических кристаллов имеют вид:

$$(M) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix},\ (M^{-1}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a} \end{pmatrix},$$

то есть

$$\begin{pmatrix} g \\ s \\ t \end{pmatrix} = (M^{-1})(c)(M)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

или

$$\begin{cases} c_{11} + c_{12} + c_{13} = g, \\ c_{21} + c_{22} + c_{23} = s, \\ c_{31} + c_{32} + c_{33} = t, \end{cases}$$

кроме того,

$$\sum_{i=1}^{3} C_{ij}^2 = \sum_{j=1}^{3} C_{ij}^2 = 1,$$

$$\det(c) = \pm 1,$$

отсюда $c_{ij} = 0, \pm 1, -1$.

Следовательно, (c_{ij}) может принять вид (знаки могут быть любые)

$$\begin{pmatrix} \pm1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \pm1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm1 \\ 0 & \pm1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \pm1 & 0 \\ \pm1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm1 \end{pmatrix},$$
$$\begin{pmatrix} 0 & \pm1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm1 \\ \pm1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & \pm1 \\ \pm1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & \pm1 \\ 0 & \pm1 & 0 \\ \pm1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Группа m3m, ее порядок 48.

Задача 34.

Исходная точка [[111]] после преобразования [[gst]].
Следовательно (см. задачи 32 и 33),

$$\begin{pmatrix} g \\ s \\ t \end{pmatrix} = (M^{-1})\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}(M)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

То есть

$$g = -\frac{1}{a}(b\sin\gamma + \frac{c}{\sin\gamma}(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma)) -$$
$$-\frac{\cos\gamma}{a\sin\gamma}(a + b\cos\gamma + c\cos\beta) + \frac{c}{\sin\gamma}\frac{\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta}{a\sin\gamma},$$
$$s = \frac{1}{b\sin\gamma}(a + b\cos\gamma + c\cos\beta) + \frac{(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha)c}{b\sin^2\gamma}.$$

Этим условиям удовлетворяют значения $a = b$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$, то есть это - тетрагональные кристаллы.

Задача 35.

Группа 3m в Н-установке ($\gamma = 120^0$) имеет вид (см. задачу 30):

$$3m \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

В R-установке:

$$3m\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

Задача 36.

Общая и частные правильные системы точек группы 3m имеют вид (см. задачу 21):

H-установка:

(xyz) ⇒ (-y, x-y, z), (-x+y, -x, z), (-x+y, y, z), (-y, -x, z), (x, x-y, z), (x, y, z).
(0yz) ⇒ (-y, -y, z), (y, 0, z), (y, y, z), (-y, 0, z), (0, -y, z), (0, y, z).
(x0z) ⇒ (0, x, z), (-x,- x, z), (-x, 0, z), (0, -x, z), (x, x, z), (x, 0, z).
(xy0) ⇒ (-y, x-y, 0), (-x+y, -x, 0), (-x+y, y, 0), (-y, -x, 0), (x, x-y, 0),(x, y, 0).
(00z) ⇒ (0, 0, z).
(xxx) ⇒ (-x, 0, x), (0, -x, -x), (0, x, x), (-x, -x, x), (x, 0, x), (x, x, x).
(000) ⇒ (0, 0, 0).

R-установка:

(xyz) ⇒ (z, x, y), (y, z, x), (x, z, y), (y, x, z), (z, y, x), (x, y, z).
(0yz) ⇒ (z, 0, y), (y, z, 0), (0, z, y), (y, 0, z), (z, y, 0), (0, y, z).
(x0z) ⇒ (z, x, 0), (0, z, x), (x, z, 0), (0, x, z), (z, 0, x), (x, 0, z).
(xy0) ⇒ (0, x, y), (y, 0, x), (x, 0, y), (y, x, 0), (0, y, x), (x, y, 0).
(00z) ⇒ (z, 0, 0), (0, z, 0), (0, 0, z).
(xxx) ⇒ (x, x, x).
(000) ⇒ (0, 0, 0).

Задача 37.

Если имеется несобственное вращение (М), то детерминант матрицы М равен –1. DetM = -1. При построении группы потребуется рассчитать M^2, но $DetM^2 = +1$. То есть M^2 – собственное вращение.

Задача 38.

Группа 3 имеет вид:

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

Для получения общей правильной системы точек в декартовой системе необходимо рассчитать

$$(\text{ОПСТ})_q = (3) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_q, \text{ то есть ОПСТ имеет вид:}$$

$(xyz)_q$, $(-\frac{1}{2}(x+\sqrt{3}\,y),\ \frac{1}{2}(\sqrt{3}\,x-y), z)_q$, $(\frac{1}{2}(-x+\sqrt{3}\,y),\ -\frac{1}{2}(\sqrt{3}\,x+y), z)_q$.

Расстояние от всех точек до начала координат одинаково и равно $(x^2+y^2+z^2)$. Углы между линиями, соединяющими полученные точки, равны

$$\varphi = \arccos\frac{x_i x_j + y_i y_i}{(x_i^2 + y_i^2)^{\frac{1}{2}}(x_j^2 + y_j^2)^{\frac{1}{2}}} = \arccos\left(-\frac{1}{2}\right) = 120^o,$$

то есть действительно полученные точки образуют правильный треугольник.

Задача 39.

Пусть кристаллографическая система координат характеризуется базисом a_1, a_2, a_3, который в декартовой системе координат (индекс д) с осью z, не совпадающей с осью 3, описывается векторами

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}_{\partial} \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}_{\partial} \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix}_{\partial}.$$

Как следует из задач 30 и 35,

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}_{\partial} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(x_1 + \sqrt{3}y_1) \\ \frac{1}{2}\sqrt{3}x_1 - y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}_{\partial}, \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z3 \end{pmatrix}_{\partial} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\sqrt{3}y_1 - x_1) \\ -\frac{1}{2}(\sqrt{3}x_1 + y_1) \\ z_1 \end{pmatrix}_{\partial}.$$

Следовательно,

$$x_1^2 + y_1^2 + z_1^2 = x_2^2 + y_2^2 + z_2^2 = x_3^2 + y_3^2 + z_3^2,$$

а также

$$\cos a_1a_2 = \cos a_2a_3 = \cos a_3a_1 = \frac{-\frac{1}{2}(x_1^2 + y_2^1) + z^2}{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}.$$

То есть $a_1 = a_2 = a_3$, $\alpha = \beta = \gamma$.

Задача 40.

Совместите ось $X_н$ с осью X декартовой системы, а ось $У_H$ - с плоскостью ХУ.

Метрический тензор гексагональной (M_H) и тригональной (в R-установке) (M_R) решеток определяются следующими выражениями:

$$(M_H) = \begin{pmatrix} a & -\frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{3}a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

$$M_R=\begin{pmatrix} \frac{2\sqrt{3}}{3}a\sin\frac{\alpha}{2} & -a\sin\frac{\alpha}{2}\frac{\sqrt{3}}{3} & -a\sin\frac{\alpha}{2}\frac{\sqrt{3}}{3} \\ 0 & a\sin\frac{\alpha}{2} & -a\sin\frac{\alpha}{2} \\ \frac{2a\sqrt{3}}{3}\left(\cos^2\frac{\alpha}{2}-\frac{1}{4}\right)^{\frac{1}{2}} & \frac{2a\sqrt{3}}{3}\left(\cos^2\frac{\alpha}{2}-\frac{1}{4}\right)^{\frac{1}{2}} & \frac{2a\sqrt{3}}{3}\left(\cos^2\frac{\alpha}{2}-\frac{1}{4}\right)^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Координаты $\begin{pmatrix} x_R \\ y_R \\ z_R \end{pmatrix}$ точек в R-системе координат преобразуются в $\begin{pmatrix} x_н \\ y_н \\ z_н \end{pmatrix}$ гексагональной системе следующим образом:

$$\begin{pmatrix} x_н \\ y_н \\ z_н \end{pmatrix} = M_H^{-1} \cdot M_R \begin{pmatrix} x_R \\ y_R \\ z_R \end{pmatrix}.$$

Задача 41.

Группа симметрии векторного пространства имеет элементы

$$V_{ij} = g_i - g_i,\ V_{ij} \in V.$$

Бинарная операция в группе V определяется условием:

$$V_{ij} = V_{in} - V_{jn} = V_{in} + V_{jn}$$

Единичным элементом группы является матрица с нулевыми элементами.

Задача 42.

Расчет правильной системы точек в векторном пространстве в зависимости от базиса исходной точки (x)[1] и базиса векторного пространства (V) определяется формулами, приведенными в таблице; кф и кг индексы кристаллофизической и кристаллографической систем (базисов) соответственно.

V $(x)'$	$(V)_{кф}$	$(V)_{кг}$
$(x)'_{кф}$	$(g_i - g_j)(x)'_{кф} + M(T_i - T_j)$	$M^{-1}(g_i - g_j)(x)'_{кф} + (T_i - T_j)$
$(x)'_{кг}$	$(g_i - g_j)\, M(x)'_{кг} + M(T_i - T_j)$	$M^{-1}(g_i - g_j)(x)'_{кг} + (T_i - T_j)$

T_n — аддитивные (трансляционные) части пространственной группы кристалла.

Задача 43.

Группа 222 в матричном представлении имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & - \end{pmatrix} = Q_1, Q_2, Q_3 E\,.$$

Следовательно (см. задачу 41), группа точечной симметрии 222 в векторном пространстве имеет вид:

$$V = \begin{pmatrix} E & (g_1 - g_2) & (g_1 - g_3) & (g_1 - E) \\ (g_2 - g_1) & E & (g_2 - g_3) & (g_2 - g_4) \\ (g_3 - g_1) & (g_3 - g_2) & E & (g_3 - g_4) \\ (g_4 - g_1) & (g_4 - g_2) & (g_4 - g_3) & E \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} E & \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \\ & E & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \\ & & E & \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & & & E \end{pmatrix},$$

где $\mathrm{E} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.

В решении приведена половина антисимметричной матрицы V_{ij}.

Задача 44.

Так как элемент точечной группы векторного пространства V_{ij} определяется по правилу $V_{ij} = Q_i - Q_j$, где Q_n - элемент точечной группы кристалла, то число $\mathrm{V}_{\mathrm{ij}} = \mathrm{n}^2$, где n - порядок точечной группы. Так как $\mathrm{V}_{\mathrm{ii}} = \mathrm{V}_{\mathrm{jj}} = \ldots = \mathrm{V}_{\mathrm{nn}} = \mathrm{E} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, то число элементов в группе

$V_{ij} \in V$ равно $n^2 - n + 1$, причем среди этих элементов могут быть одинаковые.

Задача 45.

Порядок группы 4 в векторном пространстве равен (см. задачу 44) $n^2 = 4^2 - 4 + 1 = 13$. Точечная группа 4 в матричном представлении имеет вид

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

Следовательно (см. задачу 43), группа 4 в векторном пространстве запишется

$$V = \begin{pmatrix} E & \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & E & \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & & E & \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & & & E \end{pmatrix}.$$

С учетом одинаковых элементов порядок равен 9.

Задача 46.

Группа 3 в ортогональном базисе описывается матрицей-генератором $(3)_{кф}$ равной

$$3_{кф}=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Группа $V\left(3_{кф}\right)$ имеет вид:

$$V\left(3_{кф}\right)=\begin{pmatrix} E & \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\frac{3}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & E & \begin{pmatrix} -\frac{3}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & & E \end{pmatrix}$$

В кристаллографическом базисе матрица-генератор –

$$\left(3\mathrm{n}\right)=\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$
V(3n)=\begin{pmatrix}
E & \begin{pmatrix} 1 & -2 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & E & \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & & E
\end{pmatrix},
$$

$$
E=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
$$

Задача 47.

В R-установке координатных осей матрица-генератор группы 3 (3_R) имеет вид:

$$
(3_R)=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},
$$

то есть

$$V(3_R)=\begin{pmatrix} E & \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \\ & E & \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0-1 \end{pmatrix} \\ & & E \\ & & \end{pmatrix}.$$

Задача 48.

Метрические тензоры прямой (M) и обратной $(M)^{-1}$ решеток имеют вид:

$$M=\begin{vmatrix} a & b\cos\gamma & c\cos\beta \\ 0 & b\sin\gamma & c\frac{\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma} \\ 0 & 0 & \dfrac{c\cdot r}{\sin\gamma} \end{vmatrix},$$

$$M^{-1}=\begin{vmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{ctg\gamma}{a} & \frac{\cos\gamma\cos\alpha-\cos\beta}{ar\sin\gamma} \\ 0 & \frac{1}{b\sin\gamma} & \frac{\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma}{br\sin\gamma} \\ 0 & 0 & \frac{\sin\gamma}{cr} \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} \frac{a^*r^*}{\sin\alpha^*} & \frac{a^*(\cos\beta^*-\cos\alpha^*\cos\beta^*)}{\sin\alpha^*} & a^*\cos\beta^* \\ 0 & b^*\sin\alpha^* & b^*\cos\alpha^* \\ 0 & 0 & c^* \end{vmatrix},$$

где а в с α β γ параметры прямой и обратной (со знаком *) решеток, $r=(1-\cos^2\alpha - \cos^2\beta -\cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)^{1/2}$ (аналогично для обратной решетки). Отсюда

$$\cos\alpha_j^{0(*)} = \frac{\cos^*_{j+1}\cos\alpha^{*(0)}_{j+2} - \cos\alpha_j^{*(0)}}{\sin\alpha^{*(0)}_{j+1}\sin\alpha^{*(0)}_{j+2}} \quad \text{или}$$

$$\sin\alpha_j^{0(*)} = \frac{r^{*(0)}}{\sin\alpha^{*(0)}_{j+1}\sin\alpha^{*(0)}_{j+2}} \text{ , а также}$$

$$a_j^{0(*)} = \frac{a^{*(0)}_{j+1}a^{*(0)}_{j+2}\sin 2^{*(0)}_j}{V^{*(0)}},$$

0, * - индексы прямой и обратной решеток соответственно.

$V^{0(*)}$ = det $M^{0(*)}$ - объемы соответствующих ячеек. $a_1^{0(*)} = a_1^{0(*)}$, $a_1^{0(*)} = b_1^{0(*)}$, $a_3^{0(*)} = c^{0(*)}$, $\alpha_1^{0(*)} = \alpha^{0(*)}$, $\alpha_2^{0(*)} = \beta^{0(*)}$, $\alpha_3^{0(*)} = \gamma^{0(*)}$, $a_{j+3} = a_j$, $\alpha_{j+3} = \alpha_j$ и в прямой и в обратной решетках.

Следовательно:

$$M = \begin{vmatrix} 10{,}0 & -5{,}8 & 0 \\ 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 20 \end{vmatrix}, \qquad M^{-1} = \begin{vmatrix} 0{,}1 & 0{,}04 & 0 \\ 0 & 0{,}06 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}05 \end{vmatrix}, \text{ отсюда}$$

V = 10x16x20 = 3200 $\overset{0}{A}{}^3$, V^* = 0,1x0,06x0,05 = $3\cdot10^{-4}\,\overset{0}{A}{}^{-3}$.

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

$$\gamma^* = \arcsin\frac{(r)}{\sin\alpha\sin\beta}, \text{ но здесь } r = \sin\gamma.$$

Отсюда $a^* = \dfrac{17\cdot20}{3200}$ =0,106 $\overset{0}{A}$, в* = 0,063 $\overset{0}{A}{}^{-1}$, с* = 0,05 $\overset{0}{A}{}^{-1}$, $\alpha^*=\beta^*=90^o$, $\gamma^*=70^o$.

Задача 49.

Объемы ячейки решетки (V) и ячейки обратной решетки V* (см. задачу 48) равны V = a b c r, V* = a* b* c* r*, причем VV* = 1.

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

$$V = 332.5\ \overset{0}{A},\ V^* = 3\cdot 10^{-3}\ \overset{0}{A}{}^{-3}.$$

Задача 50.

Параметры обратной ячейки ромбоэдрического кристалла (тригональная синтония в R - устройстве) (см. задачу 48) равны

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

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

Для ромбического кристалла

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

Задача 51.

Параметры обратной решетки (см. задачу 48) равны:

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

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

$$(r = 0{,}766,\ V = 540{,}77\ \overset{0}{A}{}^{3}).$$

Задача 52.

(см. задачи 48 и 51)

$$r = 0{,}8633;\ V = 532{,}54\ \overset{0}{A}{}^{3};$$

$$a^* = 0{,}157\ \overset{0}{A}{}^{-1};\ b^* = 0{,}139\ \overset{0}{A}{}^{-1};\ c^* = 0{,}101\ \overset{0}{A}{}^{-1};$$

$$\alpha^* = 62{,}4^o,\ \beta^* = 79{,}8^o,\ c^* = 79{,}8^o.$$

Задача 53.

В соответствии с правилами перехода от кристаллографического (КГ) базиса к кристаллофизическому (КФ) (см. задачу 28) запишем условие

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{КФ} = (M)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{КГ},$$

где (M) - метрический тензор решетки, который по условию

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{КФ} = \begin{pmatrix} 5{,}2 & -1{,}7 & 0 \\ 0 & 8{,}1 & 0 \\ 0 & 0 & 10{,}2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{КГ}$$

1) $$\begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/3 \\ 1/4 \end{pmatrix}_{КГ} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2{,}0\,\mathring{A} \\ 2{,}7\,\mathring{A} \\ 2{,}6\,\mathring{A} \end{pmatrix}_{КФ};$$

2) $$\begin{pmatrix} 0{,}83 \\ 0{,}92 \\ 0{,}03 \end{pmatrix}_{КГ} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2{,}74\,\mathring{A} \\ 7{,}45\,\mathring{A} \\ 0{,}31\,\mathring{A} \end{pmatrix}_{КФ};$$

3) $$\begin{pmatrix} -0{,}893 \\ -0{,}252 \\ -0{,}438 \end{pmatrix}_{КГ} = \begin{pmatrix} 0{,}107 \\ 0{,}748 \\ 0{,}562 \end{pmatrix}_{КГ} = \begin{pmatrix} -0{,}72\,\mathring{A} \\ 6{,}06\,\mathring{A} \\ 5{,}73\,\mathring{A} \end{pmatrix}_{КФ}.$$

Задача 54.

Метрический тензор прямой (M) и обратной (M^{-1}) решеток имеет вид (см. задачу 48)

$$M = \begin{pmatrix} 5,2 & -3,8 & 0,4 \\ 0 & 7,4 & 4,5 \\ 0 & 0 & 7,6 \end{pmatrix},$$

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 0,19 & 0,10 & -0,05 \\ 0 & 0,14 & -0,06 \\ 0 & 0 & 0,13 \end{pmatrix},$$

объемы ячеек равны:

прямой решетки - $V = 5,2 \times 7,4 \times 7,6 = 294,4\,\overset{0}{A}{}^{3}$,

обратной решетки - $V^{-1} = 3,42 \times 10^{-3}\,\overset{0}{A}{}^{-3}$.

Задача 55.

Формулы расчета параметров обратной решетки по известным параметрам прямой решетки приведены в задаче 48.

Объем ячейки прямой решетки равен

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

то есть $V = 294,4\,\overset{0}{A}{}^{3}$ (см. задачу 54).

То есть

$$a^* = \frac{b \cdot c \sin\alpha}{V} = 0,33\,\overset{0}{A}{}^{-1},$$

$$b^* = 0,21\,\overset{0}{A}{}^{-1},\quad c^* = 0,13\,\overset{0}{A}{}^{-1},$$

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

Задача 56.

Объем ячейки прямой решетки V равен $V = 385,4\,\overset{0}{A}{}^{3}$, обратной решетки - $V^* = V^{-1} = 2,59 \cdot 10^{-3}\,\overset{0}{A}{}^{-3}$.

$$a^* = 0,12\,\overset{0}{A}{}^{-1},\ b^* = 0,24\,\overset{0}{A}{}^{-1},\quad c^* = 0,09\,\overset{0}{A}{}^{-1},$$

$$\alpha^* = 90^0,\ \beta^* = 90^0,\ \gamma^* = 87,5^0.$$

Задача 57.

Точечная группа 23 описывает кубическую решетку, в которой $a = b = c$, $a^* = b^* = c^*$, то есть $b^* = 0{,}13\,\overset{0}{A}{}^{-1}$.

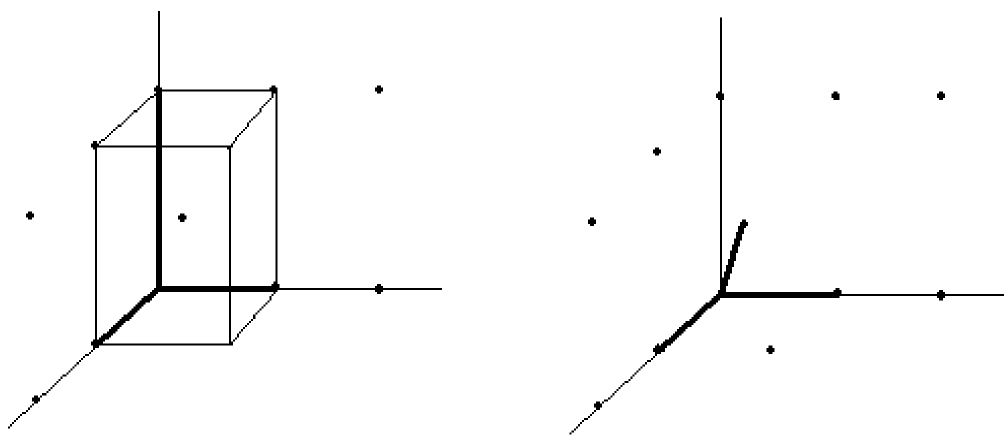
Задача 58.

Базисные векторы в ромбической решетке для ячеек I-типа и P-типа приведены соответственно на рис. 58(а) и 58(б), из которых видно, что метрический тензор для ячейки I-типа имеет вид:

$$M_I = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6{,}2 & 0 & 0 \\ 0 & 7{,}4 & 0 \\ 0 & 0 & 8{,}6 \end{pmatrix},$$

а для ячейки P-типа запишется в форме

$$M_P = \begin{pmatrix} 6{,}2 & 0 & 3{,}1 \\ 0 & 7{,}4 & 3{,}7 \\ 0 & 0 & 4{,}3 \end{pmatrix}.$$



а б

Рис. 58

Для перехода от $(xyz)_{I(КГ)}$ к $(xyz)_{P(КГ)}$ надо использовать уравнение

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{P(КГ)} = M_P^{-1} M_I \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{I(КГ)},$$

где M_P^{-1} - обратный метрический тензор для ячейки P-типа. Следовательно,

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{P(КГ)} = \begin{pmatrix} 0{,}161 & 0 & -0{,}116 \\ 0 & 0{,}135 & -0{,}116 \\ 0 & 0 & 0{,}232 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6{,}2 & 0 & 0 \\ 0 & 7{,}4 & 0 \\ 0 & 0 & 8{,}6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{I(КГ)},$$

или

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{P(КГ)} = \begin{pmatrix} 1{,}0 & 0 & -1{,}0 \\ 0 & 1 & -1{,}0 \\ 0 & 0 & 2{,}0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{I(КГ)}.$$

Следовательно,

а) $\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)_{I(КГ)} \Rightarrow (001) \equiv (000) \equiv (111)$;

б) $(0{,}33;0{,}42;0{,}18)_{I(КГ)} \Rightarrow (0{,}15;0{,}24;0{,}36)_{P(КГ)}$;
(КГ)

в) $\left(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\right)_{I(КГ)} \Rightarrow \left(0{,}0,\frac{1}{2}\right)_{P(КГ)}$.

Задача 59.

Матричное представление точечной группы $\bar{4}3m$ (д) имеет вид:

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

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

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

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

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

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

Для расчета правильной системы точек $(x)_S$ необходимо использовать условие

$$(x)_S = G(x),$$

где (x) - начальная точка.

$(xyz) \Rightarrow (zxy), (-z,-x,y), (z,-x,-y), (-z,x,-y), (y,z,x), (y,-z,-x), (-y,z,-x),$
$(-y,-z,x), (-x,-y,z), (-x,y,-z), (x,-y,-z), (x,y,z), (y,x,z), (-y,-x,z),$
$(y,-x,-z), (-y,x,-z), (z,y,x), (z,-y,-x), (-z,y,-x), (-z,-y,x), (-x,-z,y),$
$(-x,z,-y), (x,-z,-y), (x,y,z);$

$(xxx) \Rightarrow (xxx), (-x,-x,y), (x,-x,-x), (-x,x,-x);$

$(xy0) \Rightarrow (0xy), (0,-x,y), (0,-x,-y), (0,x,-y), (y,0,x), (y,0,-x), (-y,0,-x), (-y,0,x),$
$(-x,-y,0), (x,-y,0), (x,0,y), (yx0), (-y,-x,0), (-y,x,0), (0yx), (0,-y,-x), (0,y,-x),$
$(0,-y,x), (-x,0,y), (-x,0,-y), (x,0,-y), (xy0);$

$(x00) \Rightarrow (0x0), (0,-x,0), (0,0,x), (0,0,-x), (-x,0,0), (x,0,0).$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Задачи, приведенные в пособии, связаны с точечной симметрией, которая, конечно, не исчерпывает круг проблем, встречающихся при изучении физики твердого тела. Анализ пространственной симметрии, методов исследования структур, элементов кристаллохимии, а также описание связей между симметрией кристалла и его свойствами будут приведены в учебных пособиях, которые готовятся к изданию.

Учебное издание

Лиопо Валерий Александрович

СБОРНИК ЗАДАЧ
ПО КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Учебное пособие по курсу
«Физика диэлектриков и полупроводников»
для студентов специальности Н0201 — Физика

Редактор Н.П.Дудко
Компьютерная верстка: Е.З.Панусевич

Сдано в набор 14.04.2000. Подписано в печать 20.09.2000.
Формат 60x84/16. Бумага офсетная №1.
Гарнитура Таймс. Печать офсетная.
Усл.печ.л. 3,9. Уч.-изд.л. 3,7.

Налоговая льгота — Общегосударственный классификатор
Республики Беларусь ОКРБ 007-98, ч. 1, 22.11.20.600.

Тираж 150 экз. Заказ .
Гродненский государственный университет
имени Янки Купалы.
ЛВ №96 от 02.12.97 г.
Ул. Ожешко, 22, 230023, Гродно.

Отпечатано на технике издательского отдела
Гродненского государственного университета
имени Янки Купалы
ЛП №111 от 29.12.97 г.
Ул.Ожешко, 22, 230023, Гродно.