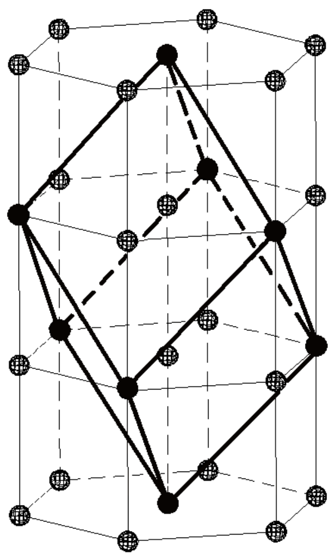
Н. П. Белов, О. К. Покопцева, А. Д. Яськов

ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОФИЗИКИ

ЧАСТЬ I

ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

Учебное пособие



Санкт-Петербург

2009

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

ПРИОРИТЕТНЫЕ НАЦИОНАЛЬНЫЕ ПРОЕКТЫ «Образование»

ПОБЕДИТЕЛЬ КОНКУРСА ИННОВАЦИОННЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ ВУЗОВ

Н. П. Белов, О. К. Покопцева, А. Д. Яськов

ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОФИЗИКИ

ЧАСТЬ I

ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

Учебное пособие

ИТМО
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Санкт-Петербург

2009

Белов Н. П., Покопцева О. К., Яськов А. Д. Основы кристаллографии и кристаллофизики. Часть I. Введение в теорию симметрии кристаллов.– СПб: СПбГУ ИТМО, 2009. – 43с.

Настоящее учебное пособие содержит минимум сведений по точечной симметрии кристаллов, необходимых для дальнейшего изучения кристаллооптики, нелинейной оптики, оптики полупроводников и оптоэлектроники. Предназначено для студентов 3 и 4 курсов, обучающихся по специальности 200201 «Лазерная техника и лазерные технологии», а также по направлению 140400 «Техническая физика».

Одобрено решением ученого совета ИФФ СПб ГУ ИТМО (протокол № 3 от 11.11.2008).

СПбГУ ИТМО стал победителем конкурса инновационных образовательных программ вузов России на 2007-2008 годы и успешно реализовал инновационную образовательную программу «Инновационная система подготовки специалистов нового поколения в области информационных и оптических технологий», что позволило выйти на качественно новый уровень подготовки выпускников и удовлетворять возрастающий спрос на специалистов в информационной, оптической и других высокотехнологичных отраслях науки. Реализация этой программы создала основу формирования программы дальнейшего развития вуза до 2015 года, включая внедрение современной модели образования.

1. Элементы симметрии кристаллов и их обозначение на стереографических проекциях

Атомы (ионы, молекулы...), составляющие кристалл, расположены в пространстве упорядоченно; они занимают фиксированные положения в узлах трехмерной кристаллической решетки. Упорядоченность расположения атомов кристалла и означает его симметрию. Определим свойство симметрии кристалла как его способность совмещаться самому с собой при пространственных преобразованиях системы координат. Такими преобразованиями могут быть:

- поступательное перемещение (трансляция);
- отражение в плоскости;
- поворот вокруг оси;
- отражение в точке (инверсия);
- сочетание (совместное действие) перечисленных выше преобразований.

Перечисленные выше преобразования называются преобразованиями симметрии кристалла. В дальнейшем предполагается, что система координат остается неподвижной, а преобразования симметрии осуществляются перемещением кристалла. Сам кристалл при этом должен быть неограничен в пространстве и иметь идеальную в геометрическом отношении кристаллическую решетку (в которой отсутствуют дефекты, примеси и другие нарушения упорядоченности расположения атомов). Кристалл с такими свойствами называется идеальным.

Преобразования симметрии кристаллов делятся на точечные (конечные) и пространственные (бесконечные). К точечным относятся такие преобразования симметрии, при которых хотя бы одна точка кристалла не изменяет своего положения, это: отражение в плоскости, поворот вокруг оси, инверсия, а также сочетание этих преобразований. К пространственным преобразованиям относятся преобразования симметрии, при которых смещаются все точки кристалла, а именно: трансляция и сочетание трансляции с другими преобразованиями симметрии.

Воображаемые плоскости, линии и точки, при помощи которых выявляется симметрия кристалла, называются элементами симметрии. Элементы симметрии принято изображать на стереографических проекциях. Стереографическая проекция представляет собой центральную проекцию (рис. 1); центрами проекции, из которых проводятся проектирующие лучи, являются южный S или северный N полюсы сферы единичного радиуса R=1. Проекции производятся на экваториальную плоскость (плоскость большого круга).

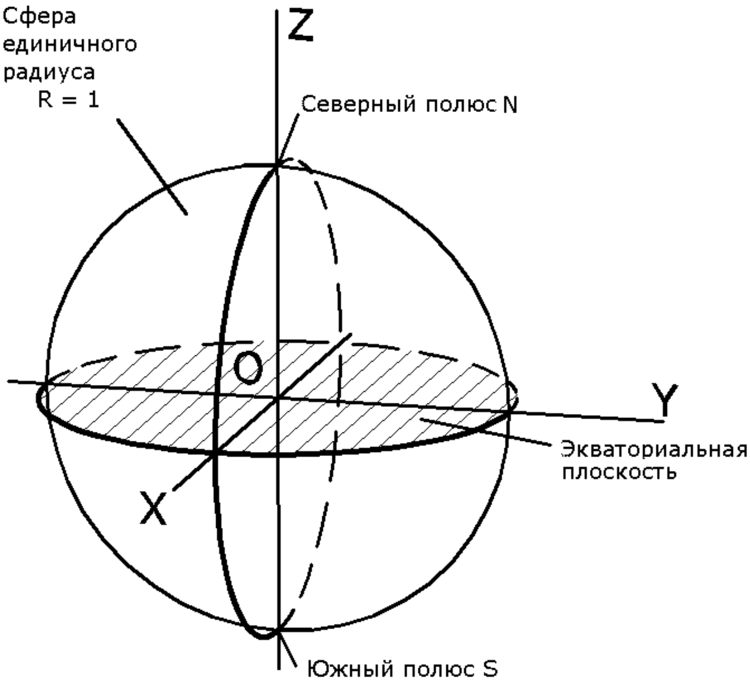


Рис. 1. Стереографическая проекция.

Стереографическая проекция направления представляет собой точку (рис. 2), которая получается при пересечении проектирующего луча, проводимого из одного из полюсов единичной сферы в точку пересечения интересующего направления с этой сферой, и плоскости проекции. Так для направления OA (рис. 2), пересекающего единичную сферу в точке A, проектирующий луч SA (проектирующий луч 1) проводим из южного полюса S. В результате получаем стереографическую проекцию A’, как точку

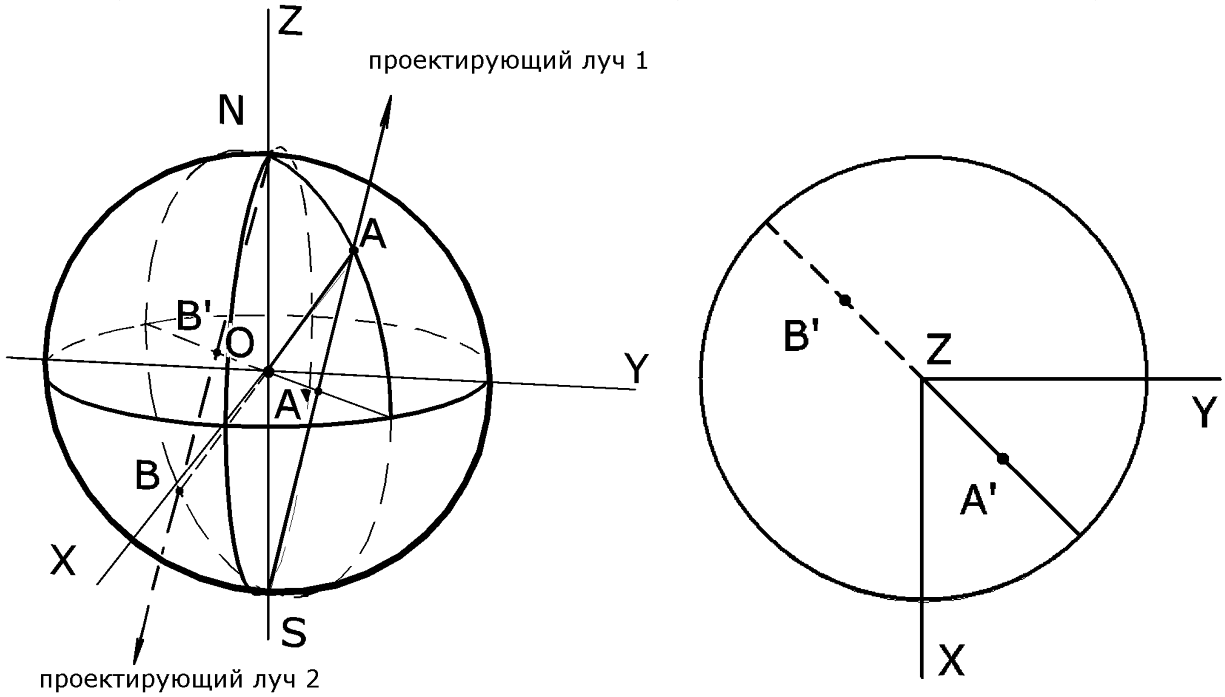
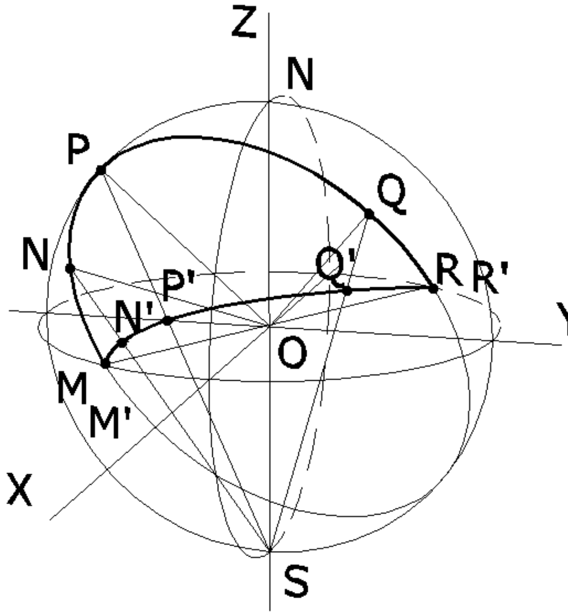


Рис. 2. Точка A’ – стереографическая проекция направления OA.

пересечения луча SA с экваториальной плоскостью. Если провести проектирующий луч из северного полюса N (луч 2 NB), то на плоскости большого круга будет получена еще одна стереографическая проекция B того же направления OA. Обе стереографические проекции направления A' и B' эквивалентны (дублируют друг друга), поэтому для изображения направления достаточно использовать одну из них.

Стереографической проекцией плоскости является дуга, образуемая на экваториальной плоскости как геометрическое место точек пересечения ее проектирующими лучами. Проектирующие лучи проводятся из одного из полюсов единичной сферы через дугу пересечения этой сферы и интересующей плоскости. На рис. 3 дуга M'N'P'Q'R' представляет собой стереографическую проекцию плоскости OMNPQR.



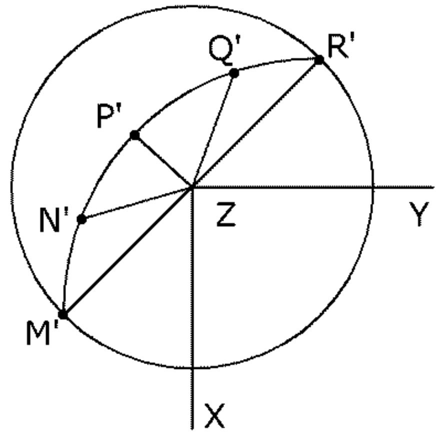


Рис. 3. Дуга M'N'P'Q'R' – стереографическая проекция плоскости OMNPQR.

Элементы точечной симметрии кристаллов принято разделять на элементы симметрии I рода, к которым относятся плоскость симметрии, оси симметрии и центр симметрии, а также элементы симметрии II-го рода. Последние представляют собой или действующие совместно ось симметрии и перпендикулярную к этой оси плоскость симметрии (такое сочетание оси и плоскости называется зеркально-поворотной осью симметрии) или же действующие совместно ось симметрии и центр симметрии (это сочетание называется инверсионной осью симметрии).

Дадим более подробное описание точечных элементов симметрии I-го рода.

Плоскость симметрии (обозначение m) представляет собой такую плоскость, относительно которой атомы расположены как предмет и его зеркальное изображение. Для примера на рис. 4 показаны плоскости симметрии некоторых геометрических многогранников: прямоугольного параллелепипеда, октаэдра (куба), тетраэдра (четырехгранника с гранями в

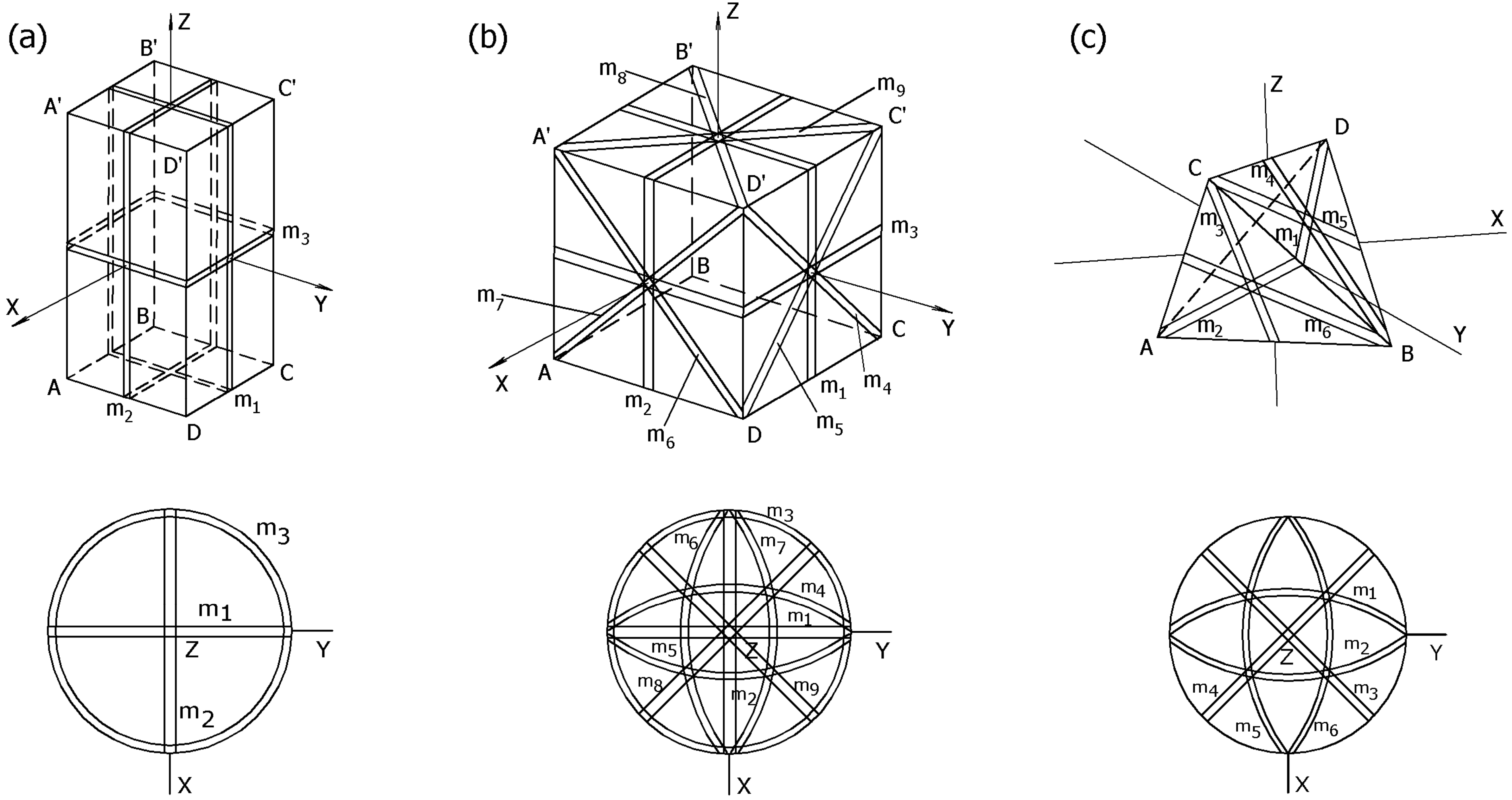


Рис. 4. Плоскости симметрии прямоугольного параллелепипеда (a), октаэдра (куба) (b), тетраэдра (c) и их изображение на стереографических проекциях.

виде равносторонних треугольников), а также изображение этих плоскостей на стереографических проекциях (следы плоскостей симметрии на стереографических проекциях изображаются двойными линиями). Прямоугольный параллелепипед (рис. 4a) имеет три плоскости симметрии, направленные по плоскостям системы координат (координатные плоскости симметрии). У куба (рис. 4b) имеется девять плоскостей симметрии; три из них совпадают с координатными плоскостями (координатные плоскости симметрии), а ещё шесть плоскостей направлены вдоль диагоналей между координатными плоскостями (диагональные плоскости симметрии). Тетраэдр (рис. 4c) в системе прямоугольных координат, проходящих через середины противоположных ребер, имеет шесть диагональных плоскостей симметрии.

Ось симметрии (обозначение C_n или n, где n – порядок оси) представляет собой воображаемую прямую, поворот относительно которой на некоторые углы кристалла как целого приводит к совмещению его самого с собой. Число совмещений, которые кристалл имеет при одном полном обороте, называется порядком оси симметрии (n). Наименьший угол α, на который необходимо повернуть кристалл, чтобы он совпал с исходным положением, составляет $\alpha = 2\pi/n$. В кристаллах могут существовать только оси симметрии порядков n = 1; 2; 3; 4; 6, т. е. не может быть осей симметрии пятого порядка и порядков выше шестого. Приведем одно из большого числа доказательств этого положения (рис. 5).

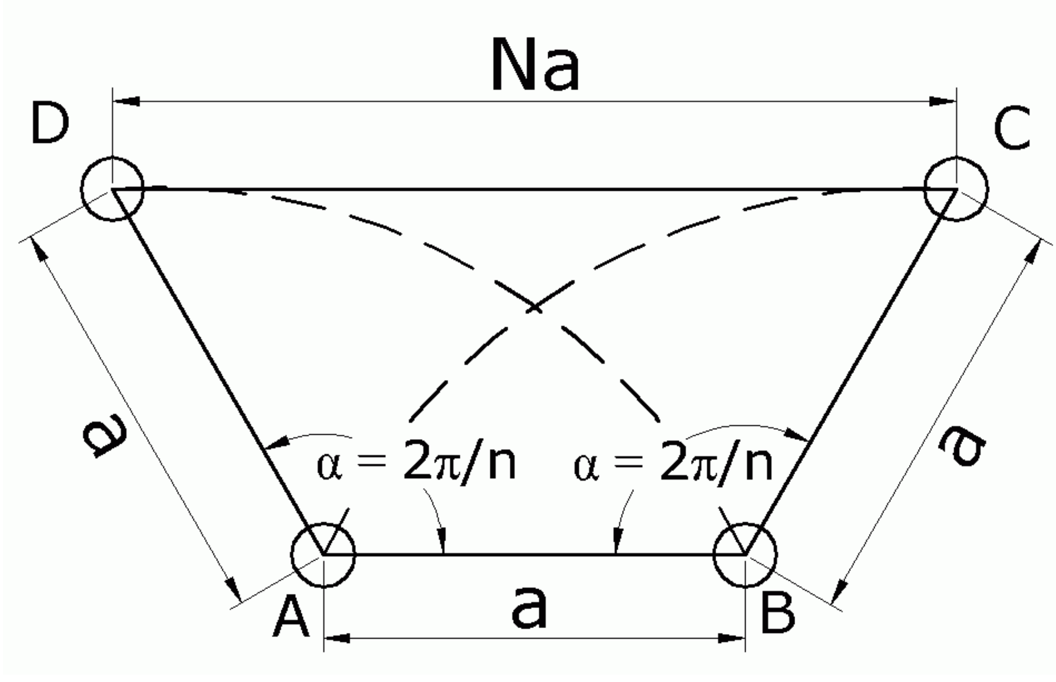


Рис. 5. К доказательству существования в кристаллах осей симметрии порядков n = 1; 2; 3; 4; 6.

Пусть через узел A кристаллической решетки перпендикулярно плоскости чертежа проходит ось симметрии C_n порядка n. Если B также узел кристаллической решетки, отстоящий от узла A на постоянную (период) *a* решетки, то такая же ось C_n проходит и через узел B. Повернем кристалл вокруг оси C_n в узле A на угол $\alpha = 2\pi/n$; в результате узел B перейдет в положение узла D, а кристалл совпадет с исходным положением. Повернем теперь кристалл вокруг такой же оси C_n в узле B на угол $\alpha = 2\pi/n$; в результате кристалл снова самосовместится, а узел A займет положение узла C. Узлы C и D принадлежат исходной кристаллической решетке, поэтому расстояние между ними кратно периоду, т. е. составляет N*a*, где N – целое число. Четырехугольник ABCD представляет собой трапецию, из которой следует соотношение

$$-1 \le Cos(\alpha) = (N-1)/2 \le 1 \qquad (1)$$

Условие (1) выполняется, если N, Cos(α), α и n принимают значения, приводимые в таблице 1.

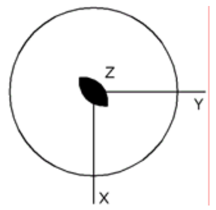
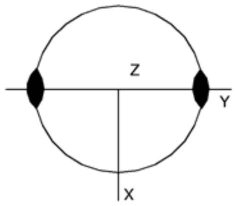
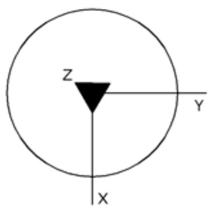
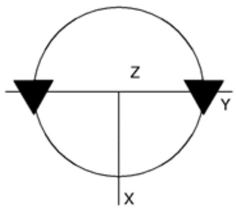
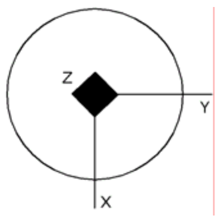
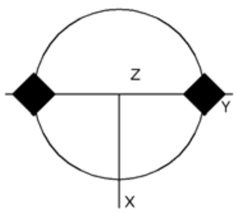
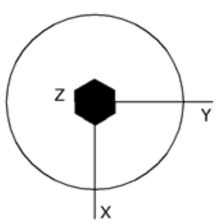
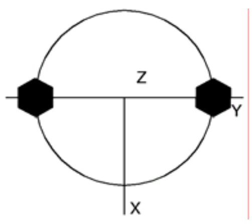
Ось симметрии	Вертикальная	Горизонтальная
2-го порядка		
3-го порядка		
4-го порядка		
6-го порядка		

Рис. 6. Изображение осей симметрии на стереографических проекциях.

Таблица 1

Возможные значения параметров N, Cos(α), α и n в соотношении (1)

N =	3	2	1	0	-1
Cos(α) =	1	1/2	0	-1/2	-1
α =	0	2π/6	2π/4	2π/3	2π/2
n =	1	6	4	3	2

Обозначения осей симметрии на стереографических проекциях даны на рис. 6. Невозможность существования в кристаллах осей симметрии порядков пятого и выше, чем шестого иллюстрируется рис. 7, где показано заполнение плоскости многоугольниками различной симметрии. Из этого рисунка видно, что сплошное (без пробелов) заполнение плоскости дают многоугольники с осями симметрии 2; 3; 4 и 6-го порядков, тогда как для многоугольников с другими осями симметрии появляются незаполненные области (отмечены на рис. 7 штриховкой), несовместимые с симметрией кристаллического пространства.

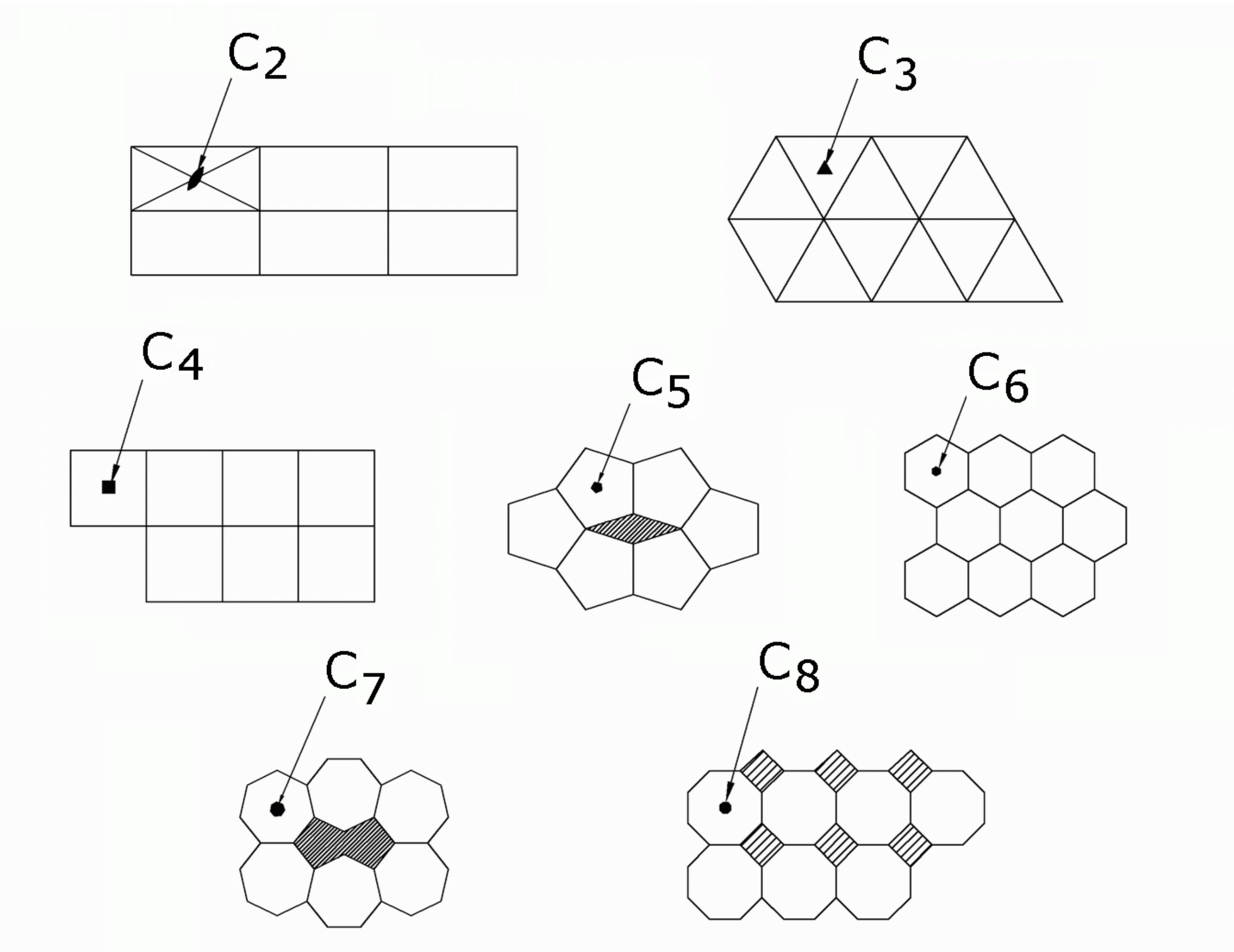


Рис. 7. Иллюстрация невозможности существования в кристаллах осей симметрии порядков пятого и выше шестого на примере плоской сетки.

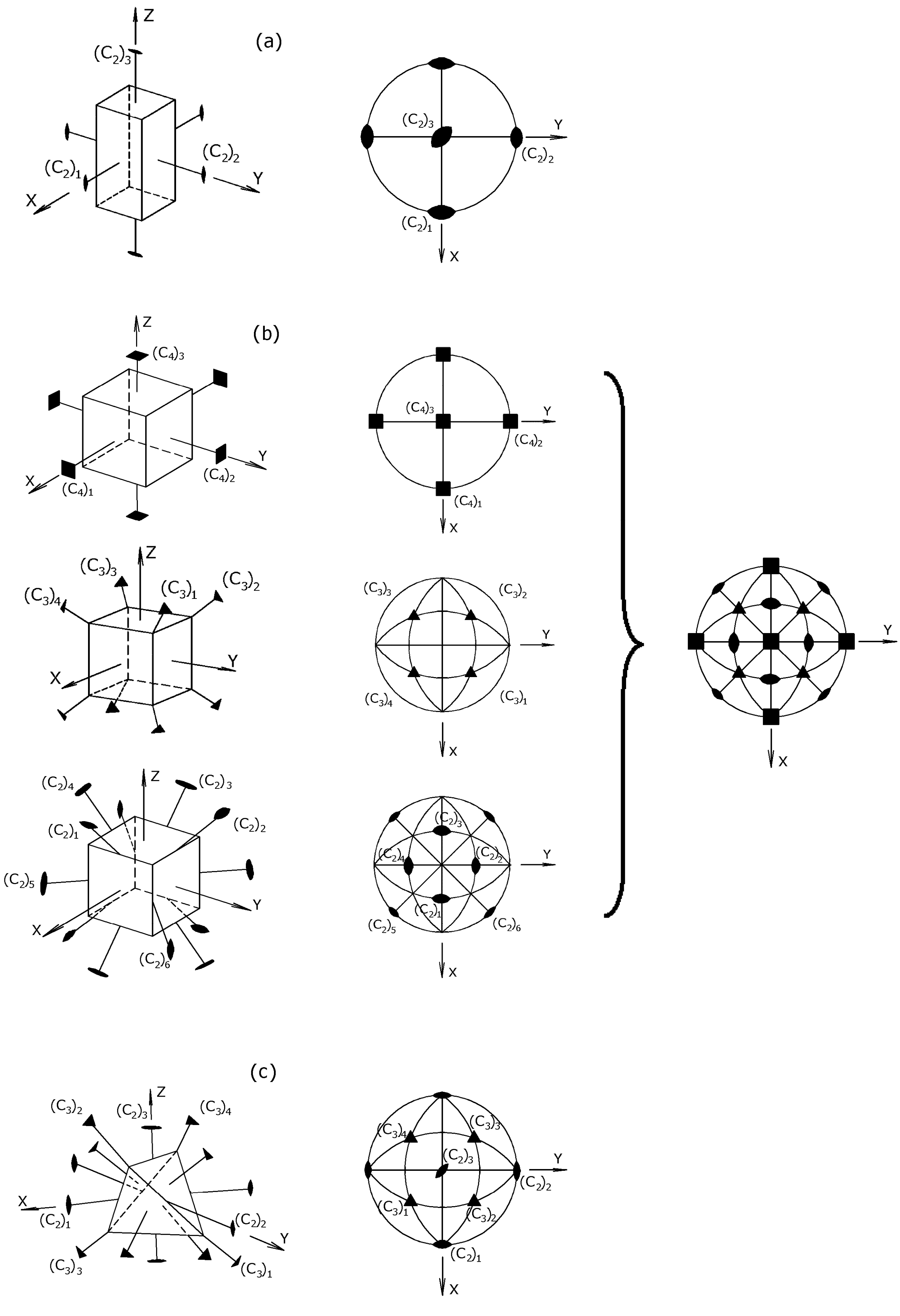


Рис. 8. Оси симметрии прямоугольного параллелепипеда, куба, тетраэдра.

Оси симметрии прямоугольного параллелепипеда, куба и тетраэдра, а также их изображение на стереографических проекциях приведены на рис. 8. Прямоугольный параллелепипед имеет три оси симметрии 2-го порядка (рис. 8а), направленные вдоль осей прямоугольной системы координат (такие оси симметрии называются координатными). У куба (рис. 8b) имеется три координатных оси симметрии 4-го порядка, четыре оси симметрии 3-го порядка, расположенные по направлению объемных диагоналей куба, а также шесть осей симметрии 2-го порядка, ориентированные по диагональным направлениям к осям координат (такие оси симметрии называются диагональными). Тетраэдр имеет три координатных оси симметрии 2-го порядка, а также четыре оси симметрии третьего порядка, проходящие через каждую из вершин и центр противоположной грани (рис. 8c).

Центр симметрии (обозначение I или C) представляет собой воображаемую точку, относительно которой замена знака координат ($\overline{R} = -\overline{R}$) приводит к самосовмещению атомов кристалла. Приведенное преобразование координат дается очевидным матричным выражением

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X \\ -Y \\ -Z \end{pmatrix}$$

Такой элемент симметрии имеет, например, параллелограмм, где каждой точке с координатой $\overline{R}$ соответствует эквивалентная точка с координатой $-\overline{R}$ (Рис. 9).

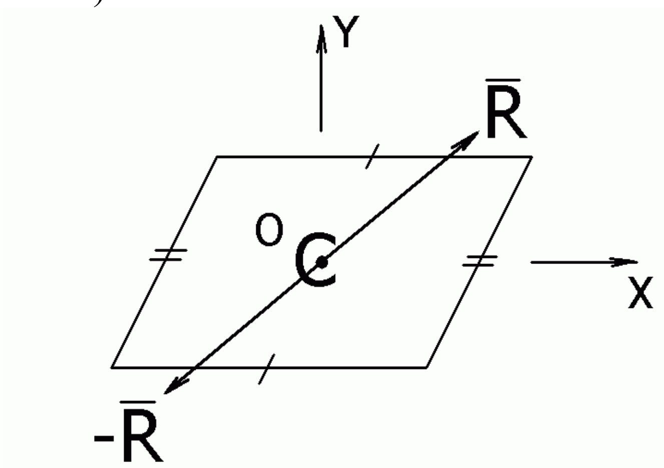


Рис. 9. Центр симметрии в параллелограмме.

Рассмотренных элементов симметрии I-го рода оказывается недостаточно, чтобы различить все варианты симметрии кристаллов, так как по сравнению с геометрическими многогранниками симметрия кристаллов более разнообразна. Приведем пример (рис. 10). Многоугольник на рис. 10 представляет собой прямоугольный параллелепипед с основанием в виде квадрата (CD = DG = GE = EC = HI = IP = PJ = JH) и с «крышами» на основаниях, развернутыми друг относительно друга на 90 градусов. Если бы этих «крыш» не было, многогранник имел бы вертикальную ось симметрии 4-го порядка. Существование «крыш» понижает порядок вертикальной оси с 4-го до 2-го. Но такую же ось симметрии 2-го порядка имеет прямоугольный параллелепипед с основанием в виде прямоугольника (рис. 8а). Т. е. при использовании только элементов симметрии I-го рода многогранники на рис. 8а и рис. 10 неразличимы по направлению оси Z. Элементы симметрии II-го рода позволяют «различить» эти многогранники. Так, в многограннике на рис. 10 вертикальная ось симметрии 4-го порядка может быть дополнена расположенным на этой оси и действующим с ней одновременно центром симметрии; такая ось симметрии представляет собой инверсионно-поворотную ось симметрии 4-го порядка.

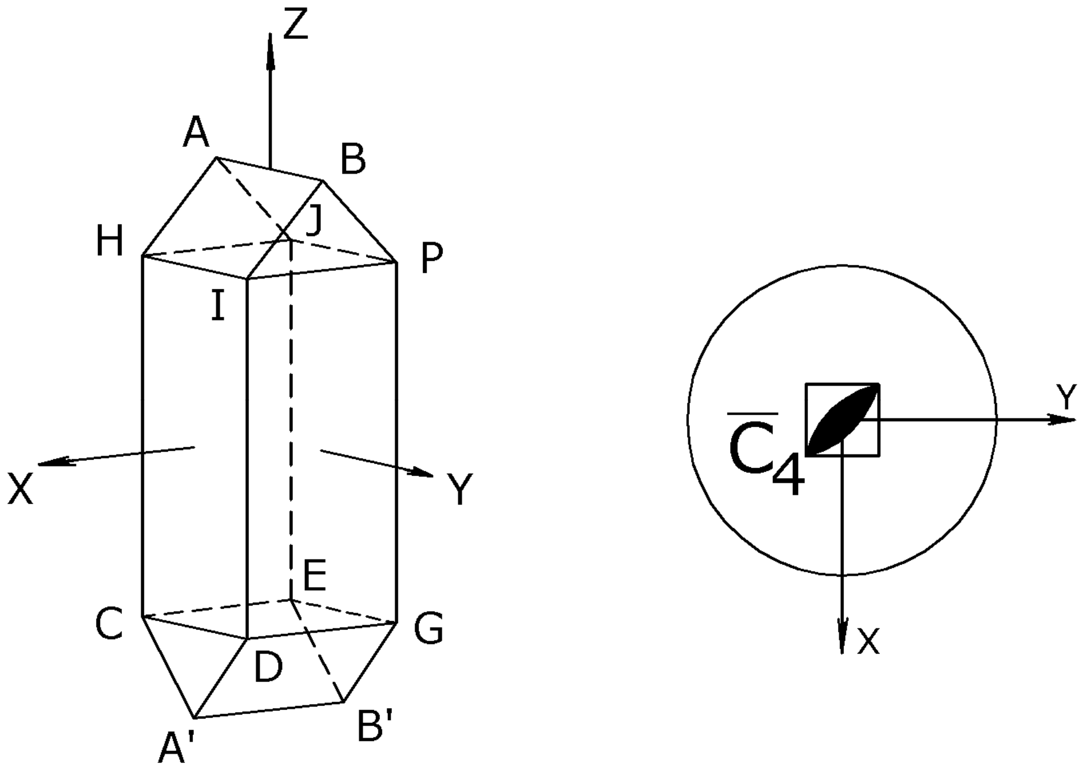


Рис. 10. Инверсионно-поворотная ось симметрии 4-го порядка.

<u>Инверсионно-поворотные оси симметрии</u> (обозначение $\overline{C}_n$, где n – порядок оси) представляют собой элементы симметрии II-го рода. Рассмотрим одновременное действие простой оси симметрии C_n (n = 1; 2; 3; 4; 6) и центра симметрии I:

$$
\begin{aligned}
&C_1 + I = I\\
&C_2 + I = m\\
&C_3 + I = \overline{C}_3\\
&C_4 + I = \overline{C}_4\\
&C_6 + I = \overline{C}_6
\end{aligned}
\qquad (4)
$$

Очевидно (соотношения (4)), что действие оси симметрии C_1 вместе с центром симметрии I дает центр симметрии, а оси симметрии C_2 и центра симметрии I – плоскость симметрии, перпендикулярную к оси C_2. Таким образом, новыми элементами симметрии (элементами симметрии II-го рода) являются инверсионные оси симметрии 3-го, 4-го и 6-го порядков ($\overline{C}_3$, $\overline{C}_4$, $\overline{C}_6$). Изображения этих осей на стереографических проекциях показаны на рис. 11. В некоторых книгах по кристаллографии в качестве элементов симметрии II-го рода используются зеркально-поворотные оси (Λ), которые представляют собой комбинацию действующих совместно оси симметрии и перпендикулярной к ней плоскости симметрии.

$$\begin{aligned} &C_1 + m = m \\ &C_2 + m = I \\ &C_3 + m = \Lambda_3 \\ &C_4 + m = \Lambda_4 \\ &C_6 + m = \Lambda_6 \end{aligned} \qquad (5)$$

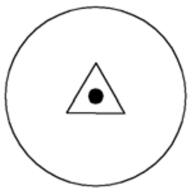
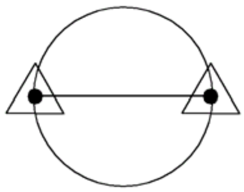
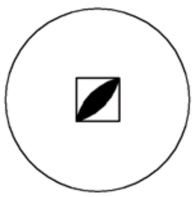
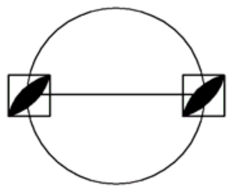
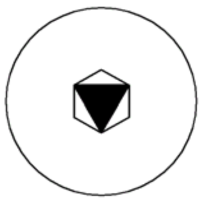
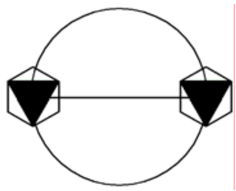
Инверсионно-поворотная ось симметрии	Вертикальная	Горизонтальная
$\overline{3}$-го порядка		
4-го порядка		
6-го порядка		

Рис. 11. Изображение инверсионно-поворотных осей симметрии на стереографических проекциях.

Таким образом полный набор элементов симметрии I-го и II-го рода включает в себя или m; C_1; C_2; C_3; C_4; C_6; I; $\overline{C}_3$; $\overline{C}_4$; $\overline{C}_6$ или же m; C_1; C_2; C_3; C_4; C_6; I; Λ_3; Λ_4; Λ_6. Здесь и далее мы будем использовать первый из этих наборов: m; C_1; C_2; C_3; C_4; C_6; I; $\overline{C}_3$; $\overline{C}_4$; $\overline{C}_6$.

2. Правила сочетания элементов симметрии

Взаимное расположение элементов симметрии в кристаллах не может быть произвольным. Например, ось симметрии 4-го порядка не может быть перпендикулярной к оси симметрии 3-го порядка. Возможные комбинации взаимного расположения элементов симметрии в кристаллах могут быть установлены на основании шести правил сочетания элементов симметрии. Приведем их здесь без доказательства, ограничившись геометрическими пояснениями преобразований симметрии многогранников на стереографических проекциях (рис. 12). Будем выделять элемент многогранника в виде треугольника (рис. 13a). Предполагаем также, что одна из сторон треугольника не окрашена (вид по A), а другая имеет окраску (вид по B); окрашенная сторона треугольного элемента (рис. 13a) показана через «отверстие» на поверхности элемента. Применение окраски одной из сторон элемента объясняется тем, что симметрия многогранников выше по сравнению с кристаллами: в кристаллах некоторые элементы симметрии, которые есть у многогранников, могут отсутствовать. Это понижение симметрии может быть учтено окраской граней многогранника. В качестве примера на рис. 13 (b, c, d) показано, как окраска влияет на симметрию прямоугольного параллелепипеда. У неокрашенного параллелепипеда (рис. 13b) имеется три координатных плоскости симметрии, три координатных оси симметрии 2-го порядка и центр симметрии. Окрашивание верхней грани A’B’C’D’ оставляет две продольных (направленных по оси Z) плоскости симметрии и продольную ось симметрии 2-го порядка (рис. 13c). Окраска граней, показанная на рис. 13d, оставляет только плоскости симметрии.

Сформулируем и поясним теперь правила сочетания элементов симметрии.

<u>Правило 1.</u> Линия пересечения двух плоскостей симметрии является осью симметрии, порядок которой определяется удвоенным углом между плоскостями (π/α).

На рис. 12a показано преобразование элемента многогранника последовательным отражение в двух плоскостях симметрии: плоскость m_1 переводит треугольный элемент из положения A в положение B, следующее отражение в плоскости m_2, расположенной по отношению к m_1 под углом α переводит элемент из B в C. Начальное положение элемента A и его конечное положение C расположены под углом 2α (это легко доказать

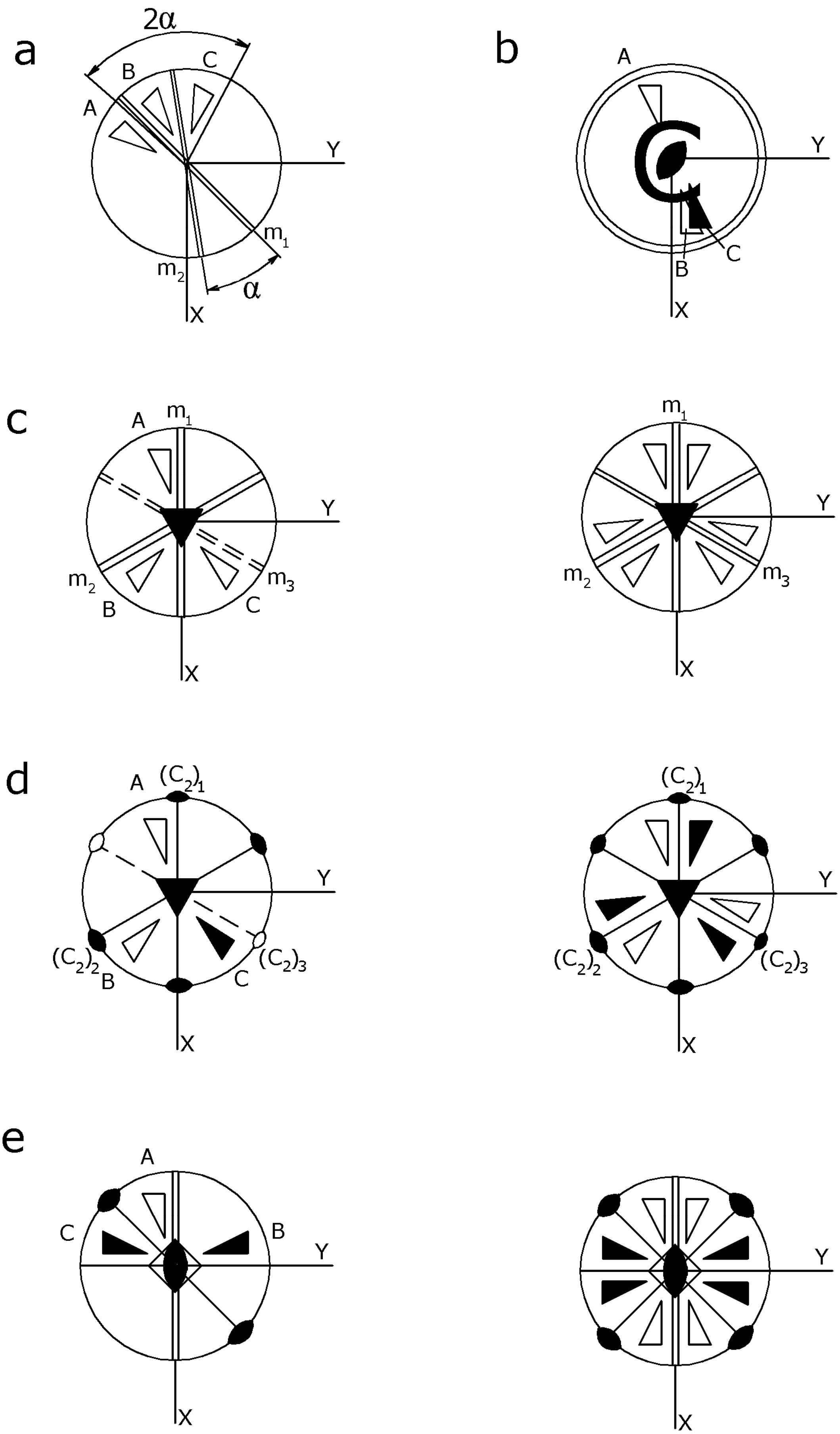


Рис. 12. К правилам сочетания элементов симметрии.

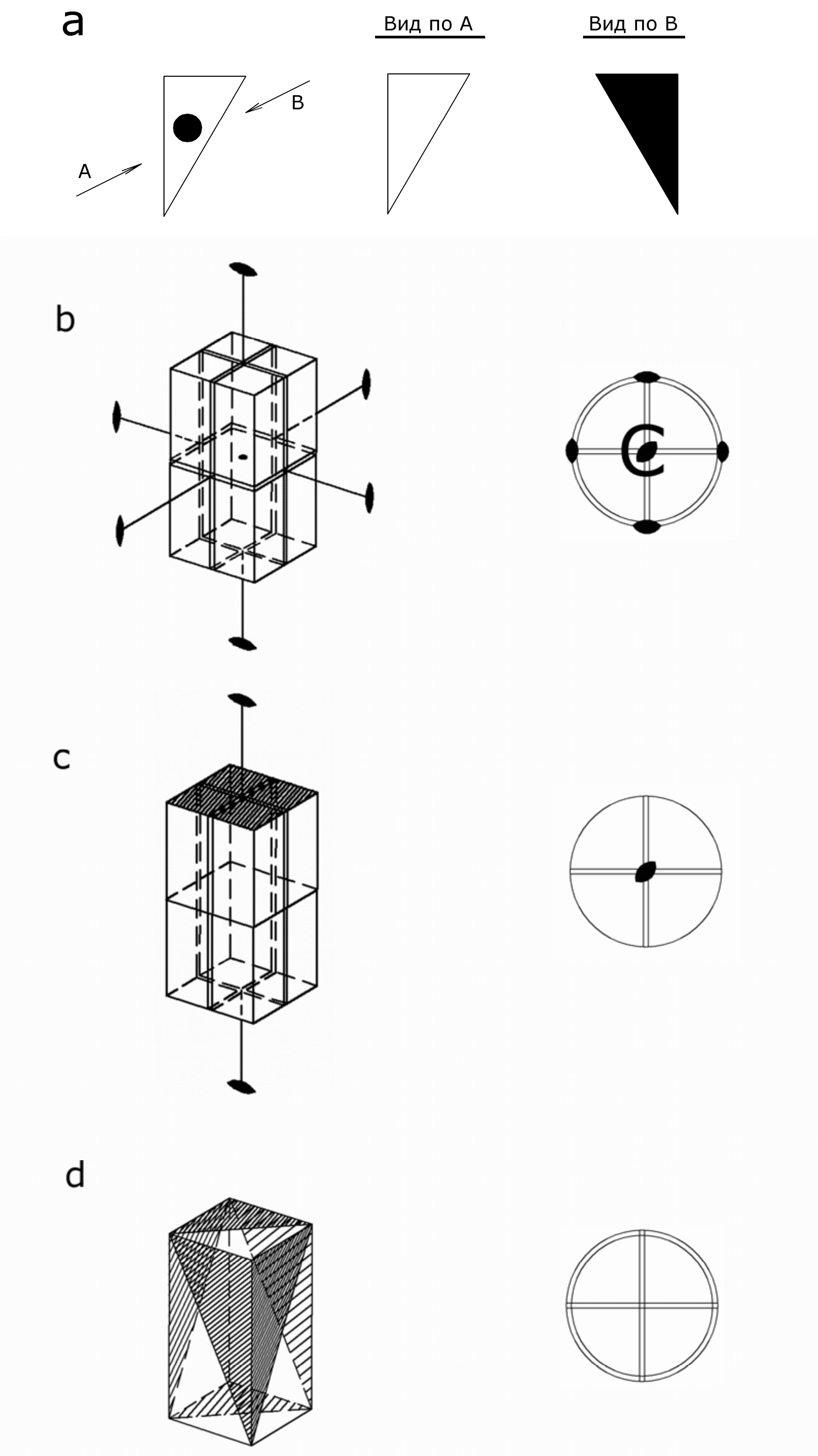


Рис. 13. (а) Элемент многогранника, имеющего «окраску», (b, c, d) влияние «окраски» граней на симметрию прямоугольного параллелепипеда.

геометрически). Последнее по существу и означает, что линия пересечения плоскостей m_1 и m_2 является осью симметрии порядка $n = 2\pi/2\alpha = \pi/\alpha$.

Правило 2. Если перпендикулярно плоскости симметрии проходит ось симметрии четного порядка, то точка пересечения оси и плоскости является центром симметрии.

Действие четной оси симметрии и поперечной плоскости симметрии показано на рис. 12b на примере оси симметрии 2-го порядка. Ось симметрии переводит треугольный элемент из положения A в положение B, оставляя его неокрашенной стороной сверху. Плоскость симметрии поворачивает элемент окрашенной стороной наверх (положение C, показано на рис. 12b со смещением относительно положения B). Начальное положение A и конечное положение C связаны между собой так, что требуют на пересечении оси и плоскости центра симметрии.

Справедливы также обратные правила.

Правило 2а. Если на оси симметрии четного порядка находится центр симметрии, то перпендикулярно этой оси через центр симметрии проходит плоскость симметрии.

Правило 2б. Если в плоскости симметрии находится центр симметрии, то перпендикулярно этой плоскости через центр симметрии проходит ось симметрии четного порядка.

Правило 3. Если вдоль оси симметрии порядка n проходит плоскость симметрии, то всего имеется n плоскостей симметрии, проходящих вдоль этой оси. Рассмотрим действие оси симметрии и проходящей вдоль нее плоскости симметрии (продольной плоскости) на примере оси симметрии 3-го порядка (рис. 12c). Пусть имеется ось симметрии 3-го порядка и продольная плоскость симметрии m_1 (рис. 12c, слева). Ось симметрии поворотом на 120 градусов переводит треугольный элемент из исходного положения A в положение B. Далее плоскость симметрии m_1 переводит элемент из положения B в положение C. Исходное положение A и конечное положение C требуют еще одной продольной плоскости m_2. Продолжив преобразования, найдем также третью продольную плоскость m_3. Расположение треугольных элементов для оси симметрии 3-го порядка и продольной плоскости симметрии показано на рис. 12c (справа).

Правило 4. Если перпендикулярно оси симметрии порядка n проходит ось симметрии 2-го порядка, то всего имеется n осей симметрии 2-го порядка, перпендикулярных оси симметрии порядка n.

На рис. 12d (слева) ось симметрии 2-го порядка $(C_2)_1$ расположена перпендикулярно оси симметрии порядка $n = 3$. Ось симметрии C_3 поворотом на 120 градусов переводит треугольный элемент из начального положения A в положение B. Отметим, что и в исходном положении A и в промежуточном положении B «сверху» находится неокрашенная сторона треугольного элемента. Далее ось симметрии $(C_2)_1$ переводит этот элемент из положения B в конечное положение C; при повороте вокруг оси $(C_2)_1$ треугольный элемент выходит из плоскости чертежа и поворачивается окрашенной стороной «наверх». Начальное положение A и конечное положение C таковы, что должна быть еще одна поперечная ось симметрии $(C_2)_2$, расположенная в плоскости чертежа под углом 120 градусов по отношению к оси $(C_2)_1$. Продолжая преобразования элемента A → B → C →, можем получить также и третью поперечную ось симметрии $(C_2)_3$; полная симметрия расположения треугольных элементов, получаемая преобразованием осью C_3 вместе с поперечными осями симметрии 2-го порядка $(C_2)_1$, $(C_2)_2$ и $(C_2)_3$ показана на рис. 12d (справа).

Правило 5. Две пересекающиеся оси симметрии могут быть заменены третьей осью симметрии, проходящей через точку пересечения осей.

Иллюстрацией этого правила (следствие теоремы Эйлера) может служить рис. 8, где в аксонометрии и на стереографических проекциях показаны пересекающиеся оси симметрии прямоугольного параллелепипеда, куба и тетраэдра.

Правило 6. Если вдоль инверсионной оси симметрии четного порядка ($\overline{C}_4$; $\overline{C}_6$) проходит плоскость симметрии, то перпендикулярно этой оси по диагональным направлениям между плоскостями расположены оси симметрии 2-го порядка.

На рис. 12e (слева) показано, как действие инверсионной оси симметрии и продольной плоскости симметрии может быть заменено поперечной диагональной осью симметрии 2-го порядка: ось $\overline{C}_4$ переводит треугольный элемент из положения A в положение B (при этом элемент оборачивается «наверх» окрашенной стороной), продольная плоскость симметрии переводит элемент из положения B в положение C. Начальное положение A и конечное положение C требуют поперечной оси симметрии второго порядка. Полная симметрия расположения элементов, получаемая при преобразовании инверсионной осью $\overline{C}_4$ вместе с продольной плоскостью симметрии, изображена на рис. 12e (справа).

3. Кристаллографические категории, сингонии и классы

Деление кристаллов на кристаллографические категории производится в зависимости от числа особых (единичных) направлений.

Особым или единичным направлением кристалла называется такое направление, которое не может быть повторено ни одним из его элементов симметрии.

Приведем примеры для многогранников (рис. 14).

Для четырехгранной пирамиды, основание которой представляет собой квадрат, особым направлением является ось симметрии 4-го порядка (рис. 14a): никакими преобразованиями симметрии для данной пирамиды невозможно получить еще одну ось симметрии 4-го порядка. Ось симметрии 4-го порядка остается единичным направлением также и для бипирамиды (рис. 14b), хотя ее симметрия выше по сравнению с пирамидой; у бипирамиды дополнительно имеется поперечная плоскость симметрии, четыре поперечных оси симметрии 2-го порядка, а также центр симметрии.

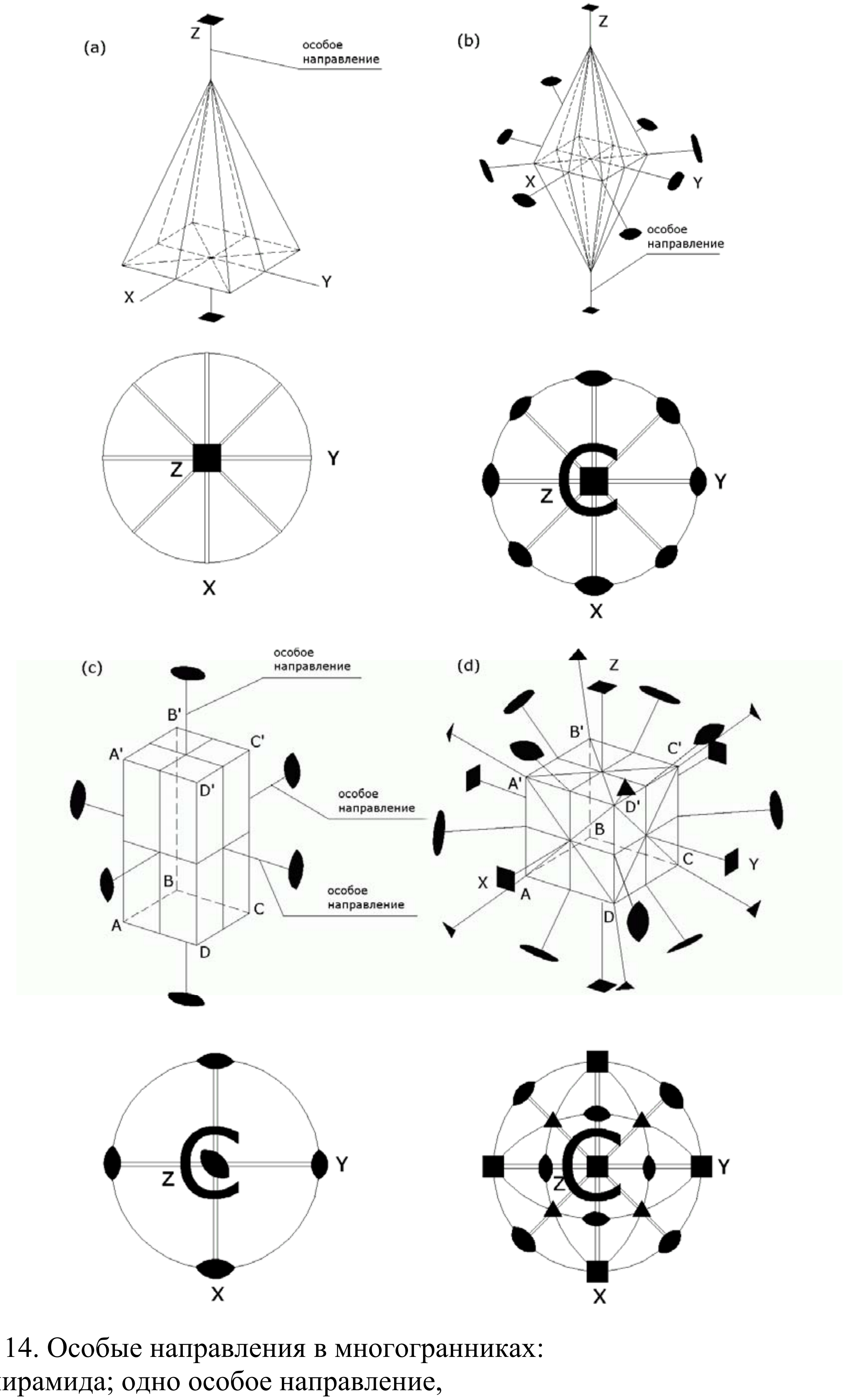


Рис. 14. Особые направления в многогранниках:
a – пирамида; одно особое направление,
b – бипирамида; одно особое направление,
c – прямоугольный параллелепипед; три особых направления,
d – куб; нет особых направлений.

Особо отметим прямоугольный параллелепипед, грани которого являются прямоугольниками (рис. 14c). Прямоугольный параллелепипед имеет три взаимно перпендикулярных оси симметрии 2-го порядка, каждая из которых является особым направлением. Легко убедиться, что никакими преобразованиями параллелепипеда имеющимися у него элементами симметрии (рис. 14c) невозможно совместить какую-либо из осей симметрии 2-го порядка, например, ось C_2 вдоль координатной оси X с любой и двух других осей C_2, направленных по координатным осям Y или Z.

Наконец, куб, изображенный вместе со стереографической проекцией элементов симметрии на рис. 14d, не имеет особых направлений, так как любая из его осей симметрии может быть повторена другими осями симметрии и (или) плоскостями симметрии.

В зависимости от числа особых направлений кристаллы делятся на три категории

- низшую,
- среднюю,
- высшую.

К низшей категории относятся кристаллы, которые имеют несколько особых направлений. В таких кристаллах нет осей симметрии порядка выше 2-го. Эти кристаллы с наиболее низкой симметрией. Анизотропия их свойств выражена наиболее сильно; по оптической классификации такие кристаллы являются оптически двуосными.

К средней категории относятся кристаллы, имеющие одно особое направление, которое совпадает с простой или инверсионной осью симметрии 3-го, 4-го или 6-го порядков. Вдоль особого направления могут быть расположены продольные плоскости симметрии; перпендикулярно особому направлению могут находиться поперечная плоскость симметрии, а также оси симметрии 2-го порядка. Это анизотропные кристаллы, по оптической классификации являющиеся одноосными.

К высшей категории относятся кристаллы, не имеющие особых направлений. Кроме осей симметрии 2-го порядка в этих кристаллах обязательно имеется четыре оси симметрии 3-го порядка, и могут быть также три простых или инверсионных оси симметрии 4-го порядка. Такие кристаллы являются изотропными (в т. ч. оптически изотропными).

Кристаллы делят также на семь сингоний (в переводе с греческого языка слово сингония означает «сходство углов»). В одну сингонию относят кристаллы, имеющие одинаковую симметрию элементарной ячейки и одинаковую систему координат. В кристаллах оси координат выбирают в соответствии с симметрией среды, которая в общем случае является анизотропной (вследствие различного расположения атомов в кристалле по различным направлениям). Поэтому в общем система координатных осей будет косоугольной с различными масштабными векторами по осям координат. Вид косоугольной системы координат и элементарной ячейки кристалла изображены на рис. 15, где $a \neq b \neq c$ и $\alpha \neq \beta \neq \gamma$.

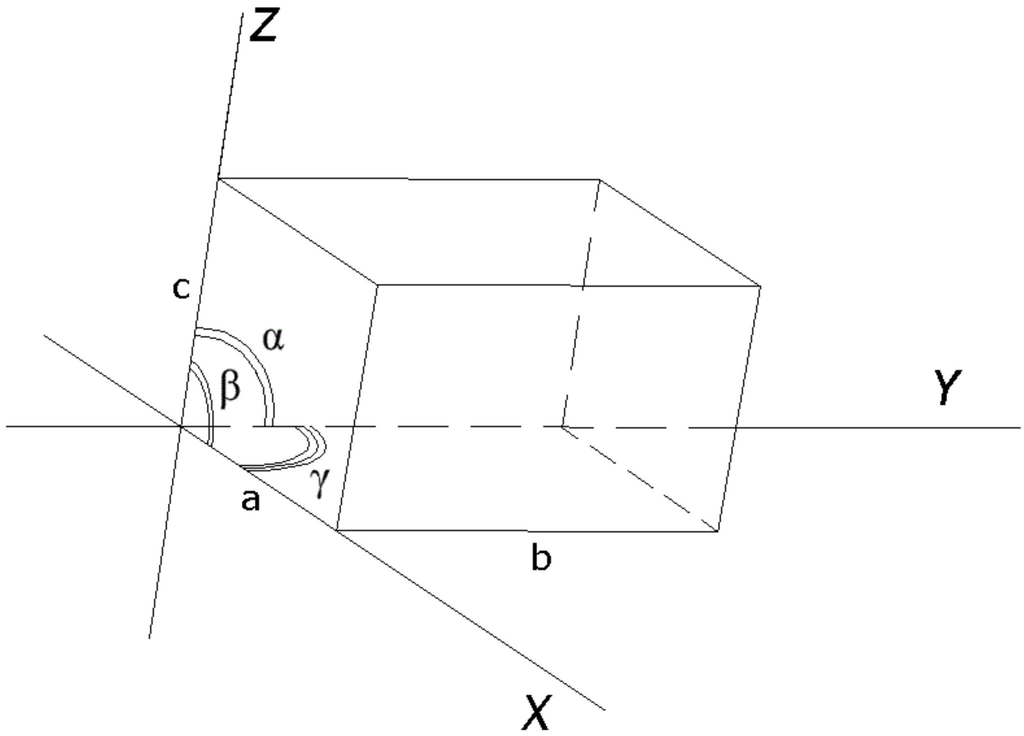


Рис. 15. Правила установки для определения кристаллографических сингоний.

Разделение кристаллов на сингонии приведено в таблице 2.

Три сингонии: триклинная, моноклинная и ромбическая относятся к низшей категории. Кристаллы триклинной сингонии, в соответствии с симметрией их элементарной ячейки, которая представляет собой косоугольный параллелепипед общего вида ($a \neq b \neq c$ и $\alpha \neq \beta \neq \gamma$) имеют центр симметрии (см. таблицу 2) или вообще не имеют элементов точечной симметрии. Исключить центр симметрии у элементарной ячейки триклинной сингонии в $a \neq b \neq c$ и $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ можно, например, понижая симметрию путём «окрашивания» граней параллелепипеда (аналогично рис. 13).

Элементарная ячейка моноклинной сингонии получается путем сдвига верхнего и нижнего оснований прямоугольного параллелепипеда так, что его ребра остаются перпендикулярными плоскости $Y = 0$. Характерными элементами симметрии для моноклинной сингонии в соответствии с метрикой элементарной ячейки $a \neq b \neq c$ и $\alpha = \gamma = 90^{\circ} \neq \beta$ являются ось симметрии 2-го порядка, перпендикулярная ей плоскость симметрии, а также центр симметрии. У элементарной ячейки моноклинной сингонии с «окрашенными» гранями может оставаться только ось симметрии 2-го порядка или плоскость симметрии; в соответствии с принятыми правилами эта ось должна быть направлена вдоль оси Y. Для плоскости симметрии кристаллов моноклинной сингонии вдоль оси Y направлена нормаль к плоскости. В кристаллах ромбической сингонии элементарная ячейка имеет форму прямоугольного параллелепипеда $a \neq b \neq c$ и $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$.

<u>Таблица 2</u>

Деление кристаллов на сингонии.

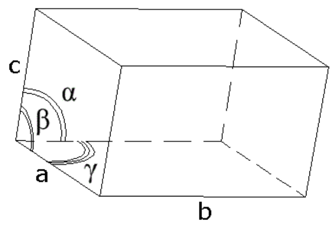
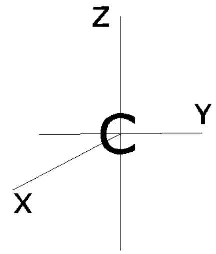
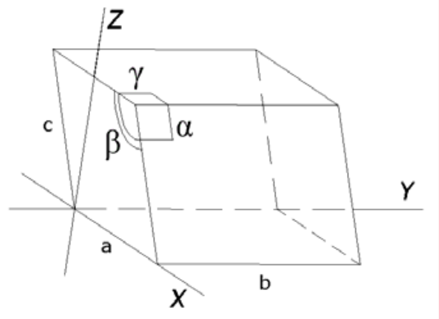
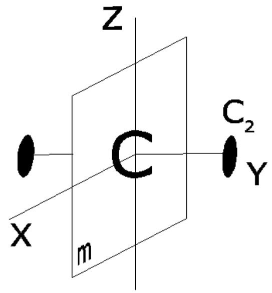
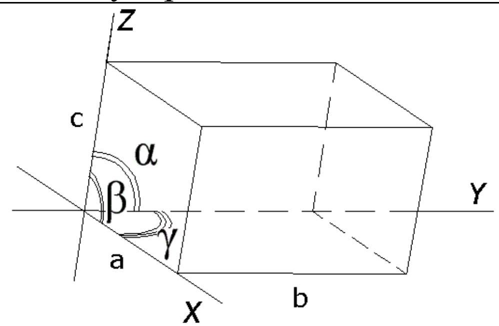
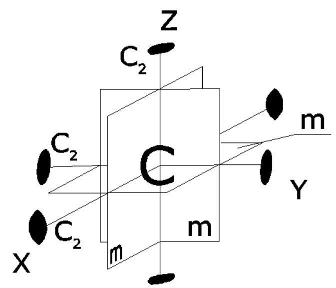
Сингония	Система координат	Вид элементарной ячейки	Категория	Характерные элементы симметрии
триклинная	a ≠ b ≠ c, α ≠ β ≠ γ	 параллелепипед общего вида	низшая	
моноклинная	a ≠ b ≠ c, α = γ = 90° ≠ β	 параллелепипед со сторонами, перпендикулярными плоскости Y = 0	низшая	
ромбическая	a ≠ b ≠ c, α = β = γ = 90°	 прямоугольный параллелепипед	низшая	

Таблица 2 (продолжение)

Деление кристаллов на сингонии.

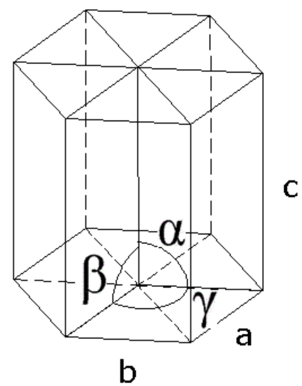
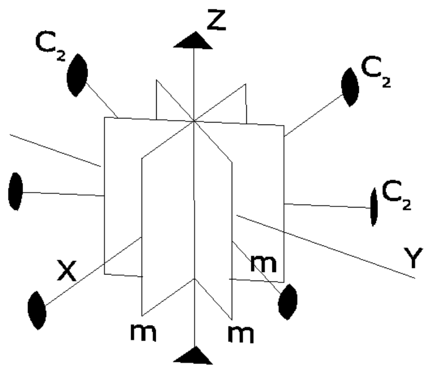
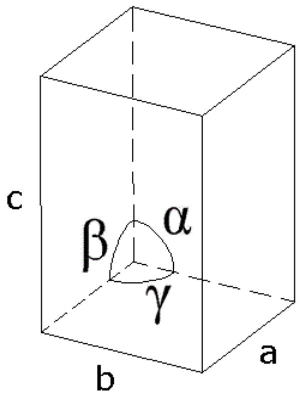
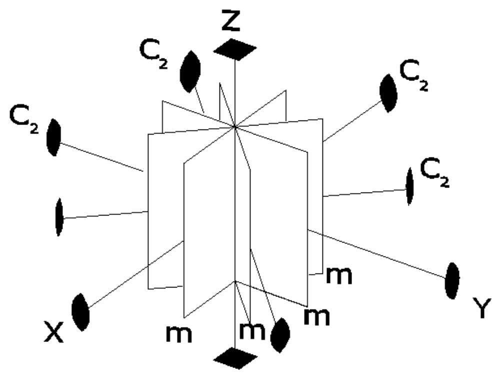
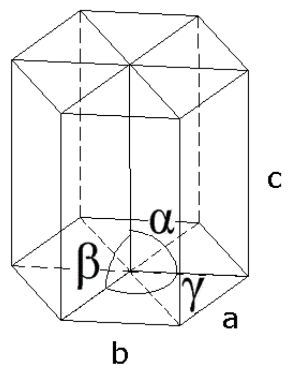
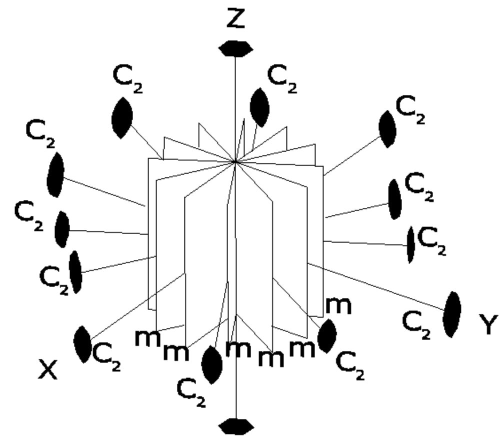
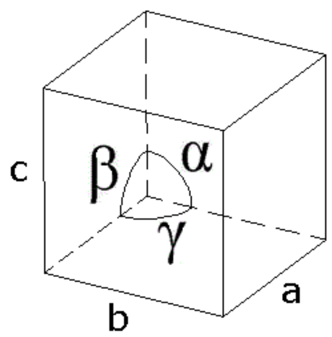
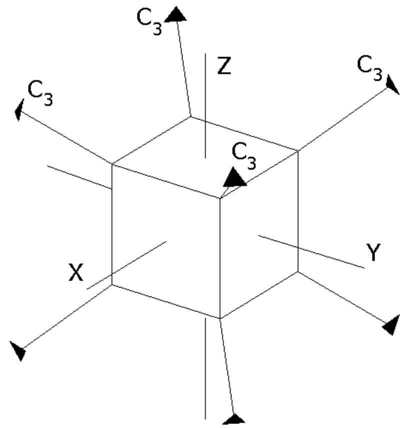
Сингония	Система координат	Вид элементарной ячейки	Категория	Характерные элементы симметрии
тригональная	призма с гранями, перпендикулярными плоскости Z = 0; в основании ромб с углом 120 градусов		средняя	
тетрагональная	прямоугольный параллелепипед; в основании квадрат		средняя	

Таблица 2 (продолжение)

Деление кристаллов на сингонии.

Сингония	Система координат	Вид элементарной ячейки	Категория	Характерные элементы симметрии
гексаногальная	призма с гранями, перпендикулярными плоскости Z = 0; в основании ромб с углом 120 градусов		средняя	
кубическая	куб		высшая	

Характерными элементами симметрии такой элементарной ячейки являются оси симметрии 2-го порядка и плоскости симметрии, направленные вдоль осей координат, а также центр симметрии. Понижения симметрии здесь также можно добиться «окрашиванием» граней элементарной ячейки.

Следующие три сингонии: тригональная, тетрагональная и гексагональная принадлежат к средней категории. Характерными элементами симметрии для элементарных ячеек кристаллов этих сингоний являются простые или инверсионные оси симметрии 3-го, 4-го или 6-го порядков, которые по принятым правилам должны быть направлены по оси Z системы координат и определяют особое направление кристалла средней категории. Вдоль названных осей могут быть расположены плоскости симметрии, число которых согласно правилу 3 (п. 2) совпадает с порядком оси. В поперечном направлении могут находиться плоскость симметрии или оси симметрии 2-го порядка; число поперечных осей C_2 в соответствии с правилом 4 (п. 2) задается порядком оси симметрии C_3; C_4; C_6 (или $\overline{C}_3$; $\overline{C}_4$; $\overline{C}_6$), направленной вдоль координаты Z. На пересечении осей симметрии четного порядка (C_4; C_6 или $\overline{C}_4$; $\overline{C}_6$) с поперечной плоскостью симметрии находится центр симметрии. Отметим, что в кристаллах тригональной и гексагональной сингоний используется одинаковая система координат и в них может быть выбрана одинаковая элементарная ячейка (см. таблицу 2). Три такие элементарные ячейки, сложенные вместе, образуют шестигранную призму. Различие заключается в том, что в тригональной сингонии элементарная ячейка может быть взята в виде ромбоэдра, который можно получить, если куб вытянуть по направлению одной из его объемных диагоналей. Выбор элементарной ячейки тригональной сингонии в виде ромбоэдра показан на рис. 16. По этой же причине тригональную сингонию называют также ромбоэдрической.

Кубическая сингония является единственной сингонией высшей категории. Элементарная ячейка здесь представляет собой куб. Характерными элементами симметрии, которые имеются у всех кристаллов кубической сингонии, являются четыре оси симметрии 3-го порядка, направленные вдоль объемных диагоналей куба. Полный набор осей и плоскостей симметрии куба были показаны на рис. 4b и рис. 8b.

Классом симметрии кристалла называется полная совокупность элементов симметрии. Всего имеется тридцать два класса симметрии кристаллов, которые можно получить путем перебора возможных сочетаний элементов симметрии (п. 1), определяемых правилами сочетания элементов симметрии (п. 2).

Последовательное применение к кристаллу двух или более преобразований симметрии, входящих в его класс симметрии, эквивалентно (может быть заменено) одним элементом симметрии из данного класса. Сказанное поясняется таблицей 3 для класса симметрии 2/m. Взаимное расположение элементов симметрии в этом классе показано на рис. 17.

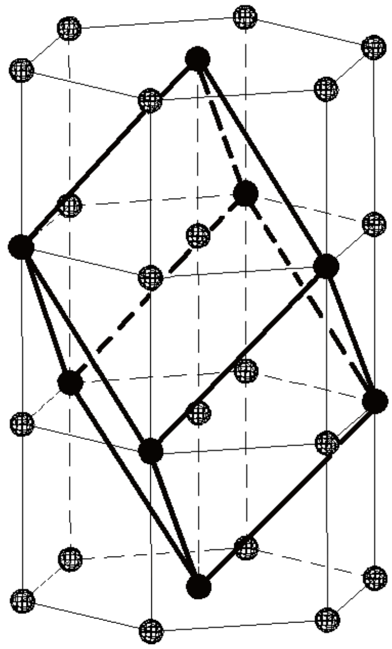


Рис. 16. Выбор элементарной ячейки тригональной (ромбоэдрической) сингонии в виде ромбоэдра.

Класс включает в себя ось симметрии C_2, перпендикулярную ей плоскость симметрии m, а также центр симметрии I, расположенный на пересечении оси и плоскости. В класс симметрии включен также единичный элемент симметрии E, применение которого возвращает кристалл в исходное положение.

Таблица 3

Таблица умножения элементов симметрии класса 2/m.

	E	m	C_2	I
E	E	m	C_2	I
m	m	E	I	C_2
C_2	C_2	I	E	m
I	I	C_2	m	E

Нетрудно убедиться, что последовательное применение элементов, записанных в верхней строке и левом столбце таблицы 3, дает третий элемент, расположенный на пересечении соответствующего столбца и строки. Например, $C_2 + I = m$ (рис. 17), т. е. действие оси симметрии 2-го порядка C_2 (третья позиция верхней строки табл. 3) и затем центра симметрии I (четвертая позиция левого столбца табл. 3) преобразует точку кристалла также, как плоскость симметрии (пересечение третьего столбца и четвертой строки таблицы 3). Отметим здесь, что класс симметрии представляет собой математическую группу, а таблица 3 является таблицей умножения группы.

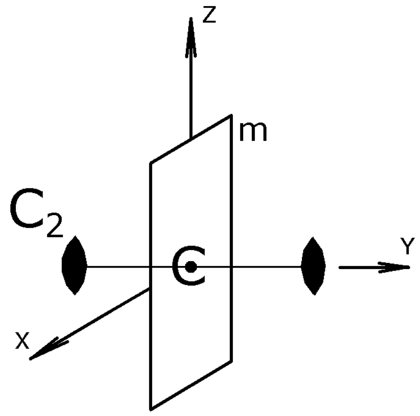


Рис. 17. Взаимное расположение элементов симметрии для класса симметрии 2/m.

4. Международные обозначения классов симметрии кристаллов

Определить класс симметрии кристалла можно, просто последовательно перечислив все его элементы симметрии и указав их число. Взаимное расположение элементов симметрии можно определить на основании правил 1 – 6 (о сочетании элементов симметрии кристаллов). Такой способ обозначения симметрии называется формулой симметрии. Например, формула симметрии куба выглядит как $3C_44C_36C_29mI$. Здесь сначала перечислены оси симметрии по мере убывания порядка n, далее – плоскости симметрии, и, наконец, указывается центр симметрии. Однако формула симметрии, с одной стороны, содержит избыточную информацию об элементах симметрии, а с другой стороны в ней нет никаких указаний на взаимное расположение элементов симметрии. Поэтому в кристаллографии получили распространение так называемые международные обозначения. Международные обозначения содержат до трех символов, обозначающих основные (или так называемые порождающие элементы симметрии), порядок записи которых определяет их взаимное расположение. Не вошедшие в международное обозначение элементы симметрии легко могут быть найдены при помощи правил 1 – 6. В качестве символов, записываемых в международные обозначения, используются символы, обозначающие как отдельные элементы симметрии, так и их сочетания, а именно:

n – ось симметрии (n = 1, 2, 3, 4, 6);

$\bar{n}$ – инверсионная ось симметрии ($\bar{n}$ = 3, 4, 6);

m – плоскость симметрии;

nm – ось симметрии порядка n и плоскость симметрии m, направленная вдоль оси (продольная плоскость симметрии);

n/m – ось симметрии порядка n и плоскость симметрии m, направленная перпендикулярно оси (поперечная плоскость симметрии);

n_2 – ось симметрии порядка n и плоскость симметрии m, направленная перпендикулярно оси (поперечная плоскость симметрии);

(n/m)m = n/mm – ось симметрии порядка n, плоскость симметрии m, направленная перпендикулярно оси (поперечная плоскость симметрии), а также n продольных плоскостей симметрии (направленных вдоль оси симметрии C_n).

Смысл символов международных обозначений различен для различных кристаллографических сигноний. Поэтому рассмотрим международные обозначения последовательно для каждой из сингоний. Результаты этого рассмотрения сведем в таблицу 4.

Элементарная ячейка триклинной сингонии представляет собой «косоугольный» параллелепипед общего вида. Такая элементарная ячейка или не имеет вообще макроскопических элементов точечной симметрии или имеет центр симметрии I. Поэтому международное обозначение для кристаллографических классов моноклинной сингонии содержит только один символ 1 или $\bar{1}$; в международном обозначении симметрии таких кристаллов не содержится символов, записываемых на 2-й и 3-й позициях (таблица 4).

В моноклинной сингонии элементарная ячейка имеет вид параллелепипеда с ребрами, перпендикулярными плоскости Y = 0. Такая элементарная ячейка имеет ось симметрии C_2 вдоль оси Y или (и) плоскость симметрии m. Очевидно, что и здесь для обозначения класса симметрии достаточно одного из приведенных выше символов: 2; m или 2/m (в случае сочетания оси симметрии C_2 и плоскости симметрии m). Второго и третьего символов в обозначениях классов симметрии моноклинной сингонии не имеется.

В ромбической сингонии элементарная ячейка является прямоугольным параллелепипедом. Характерными элементами симметрии здесь будут оси C_2 и (или) плоскости m, направленные по осям координат (продольные оси симметрии и (или) поперечные плоскости симметрии). Возможен также центр симметрии. Международное обозначение в этой сингонии состоит из трех символов 2 или m, обозначающих оси симметрии или плоскости симметрии вдоль осей координат X, Y, Z. Если по данному направлению в кристалле имеются одновременно и ось C_2 и плоскость симметрии m, то, по действующим соглашениям, приоритет отдается плоскостям, т. е. в международном обозначении будет стоять символ плоскости m.

Для кристаллов средней категории (тригональная (ромбоэдрическая), тетрагональная и гексагональная сингонии) первый символ международного обозначения класса симметрии определяет особое направление, которым является простая или инверсионная ось симметрии C_3; C_4; C_6; $\bar{C}_3$; $\bar{C}_4$ или $\bar{C}_6$.

Таким образом на первом месте в обозначении классов симметрии средней категории стоит один из символов (таблица 4):

3 или $\bar{3}$

4 или $\bar{4}$

6 или $\bar{6}$.

Если кристалл средней категории имеет плоскости симметрии m вдоль особого направления (продольные плоскости симметрии) или (и) оси симметрии 2-го порядка, перпендикулярные к особому направлению (поперечные оси симметрии C_2), то 2-й и 3-й символы международного обозначения класса симметрии задают эти продольные плоскости m или поперечные оси C_2. Второй символ m или 2 при этом задает плоскости m и (или) оси C_2, направленные по осям координат (координатные элементы симметрии).

Третий символ (им также является m или 2) – обозначает плоскости m и (или) оси C_2, направленные по «диагоналям» между осями координат (диагональные элементы симметрии). Если по данному направлению имеются одновременно и ось, и плоскость симметрии, то в международном обозначении указываются плоскости.

Для кристаллов средней категории, не имеющих продольных плоскостей m и (или) поперечных осей C_2, международное обозначение состоит из одного символа (символа особого направления). Если же кристалл средней категории не имеет диагональных элементов симметрии, то его обозначение состоит из двух символов: символа особого направления и символа координатных элементов симметрии. И, наконец, если кристалл имеет также и диагональные элементы симметрии, то его международное обозначение содержит три символа.

Характерным признаком кристаллов высшей категории (кубическая сингония) является существование у них четырех осей симметрии C_3. Поэтому в международном обозначении кристаллов высшей категории вторым символом всегда является 3 (этот символ записывается во вторую, а не в первую позицию, чтобы не было совпадений с обозначениями классов тригональной сингонии). На первой позиции обозначений классов кубической сингонии записываются координатные элементы симметрии, на третьей позиции – диагональные элементы симметрии (таблица 4).

Таблица 4

Содержание символов международных обозначений классов симметрии кристаллов в различных сингониях.

Категория	Сингония	Характерные элементы симметрии	1-й символ	2-й символ	3-й символ
Низшая	Триклинная	не имеется; центр симметрии I = $\bar{1}$	1 или $\bar{1}$	нет	нет
	Моноклинная	Ось C_2 вдоль оси Y; плоскость m перпенд. оси Y; сочетание оси C_2 и плоскости m 2/m	m; 2 или 2/m	нет	нет
	Ромбическая	Оси C_2 вдоль осей X; Y; Z; и (или) плоскости m перпенд. осям координат X; Y; Z	Ось C_2 и (или) плоскость m вдоль X	Ось C_2 и (или) плоскость m вдоль Y	Ось C_2 и (или) плоскость m вдоль Z
Средняя	Тригональная (ромбоэдри-ческая)	Особое направление ось C_3 или $\bar{C}_3$	3 или $\bar{3}$	Поперечные оси C_2 или продольные плоскости m по направлениям осей координат (координатные элементы симметрии)	Поперечные оси C_2 или продольные плоскости m по направлениям диагоналей между осями координат (диагональные элементы симметрии)
	Тетрагона-льная	C_4 или $\bar{C}_4$	4 или $\bar{4}$		
	Гексагона-льная	C_6 или $\bar{C}_6$; продольные плоскости m; и (или) поперечные оси C_2	6 или $\bar{6}$		
Высшая	Кубическая	Четыре оси C_3 по направлениям объемных диагоналей между осями координат	Координатные элементы симметрии	3	Диагональные элементы симметрии

5. Вывод и описание двадцати семи классов симметрии кристаллов низшей и средней категорий

В настоящем разделе мы должны будем найти и описать все возможные сочетания элементов симметрии кристаллов низшей и средней категорий и таким образом определить в этих категориях кристаллографические классы симметрии. Напомним, что в кристаллах низшей и средней категорий имеются особые направления (одно – для средней категории или более чем одно – для низшей категории), т. е. таких направлений, которые не могут быть повторены никакими элементами симметрии кристалла. Кроме особого направления в кристаллах средней и низшей категорий могут быть центр симметрии, оси симметрии второго порядка, расположенные перпендикулярно особому направлению, а также плоскости симметрии, расположенные перпендикулярно особому направлению, а также плоскости симметрии, расположенные вдоль или (и) перпендикулярно особому направлению (расположение осей C_2 или плоскостей m под произвольным углом к особому направлению в результате поворота вокруг оси или отражения в плоскости повторило бы это направление, в результате чего оно перестало бы быть особым).

Перебор возможных сочетаний элементов симметрии, задаваемых правилами 1 – 6, можно провести различными способами. Здесь будем придерживаться следующей схемы. Зададим сначала так называемые порождающие комбинации элементов симметрии, а затем к этим порождающим комбинациям применим правила 1 – 6. В средней и низшей категории порождающие комбинации практически очевидны (рис.18).

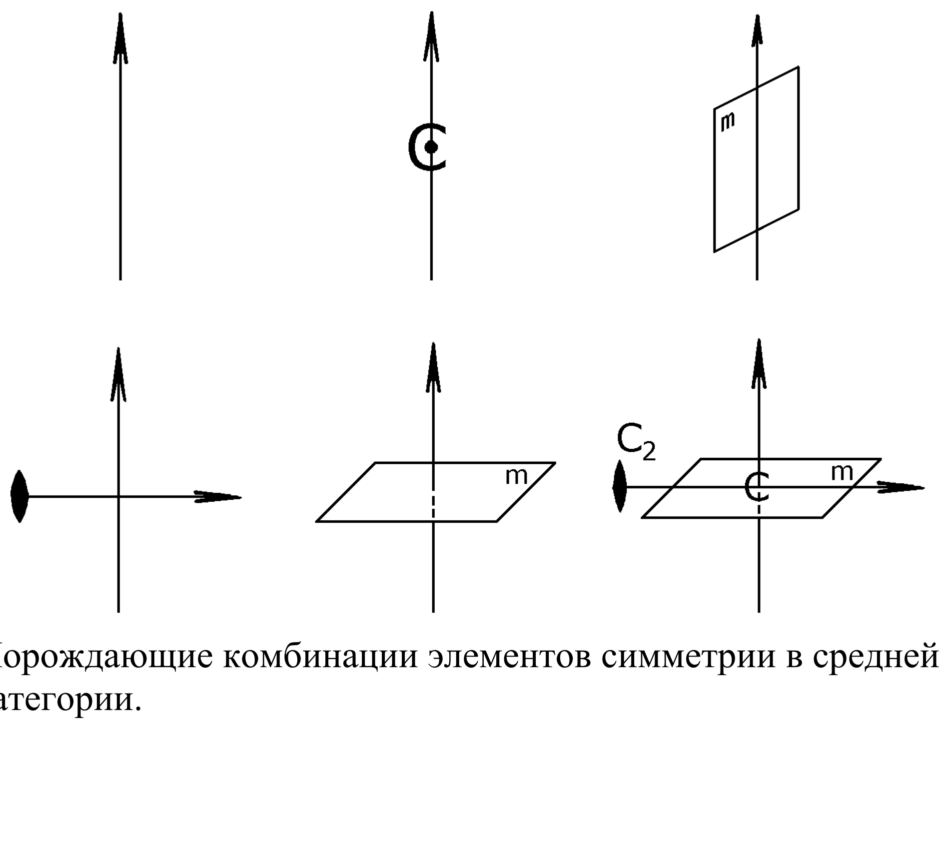


Рис. 18. Порождающие комбинации элементов симметрии в средней и низшей категории.

Примем за начальную порождающую комбинацию простую ось симметрии C_n (рис.18а). Очевидно, что правила 1 – 6 не могут добавить к этой оси никаких других элементов симметрии, поэтому указанная порождающая комбинация даст пять простых (примитивных) классов симметрии (таблица 5). Международные обозначения этих классов: 1; 2; 3; 4; 6 (таблица 5).

Обратим здесь внимание на то, что особое направление в простых классах симметрии является полярным. Это означает, что «концы» такого направления не эквивалентны, и их невозможно совместить никакими преобразованиями симметрии.

В качестве следующей порождающей комбинацией возьмем инверсионную ось симметрии $\overline{C}$. Правила 1 – 6 здесь также не добавляют новых элементов симметрии; в результате будут получены четыре инверсионно-примитивных класса симметрии (таблица 5), обозначаемых в международной системе как

$\overline{1}$; $\overline{3}$; $\overline{4}$; $\overline{6}$.

Следующую порождающую комбинацию элементов симметрии образуем добавлением к простой поворотной оси симметрии C_n центра симметрии I. Это порождающая комбинация дает центральные классы симметрии (таблица 5). Согласно правилу 2, в случае оси симметрии C_n четного порядка (n = 2; 4; 6) имеется еще расположенная перпендикулярно этой оси плоскость симметрии m. Полученные в результате классы симметрии приведены в таблице 5 (продолжение). Заметим здесь, что комбинация простой поворотной оси симметрии первого порядка C_1 и центра симметрии I, а также комбинация простой поворотной оси симметрии третьего порядка и центра симметрии I эквивалентны, соответственно, инверсионно-поворотной оси первого порядка $\overline{C}_1$ и инверсионно-поворотной оси третьего порядка $\overline{C}_3$ (действуют также как оси $\overline{C}_1$ или $\overline{C}_3$). Таким образом, из пяти классов симметрии, два были рассмотрены ранее (это классы $\overline{1}$ и $\overline{3}$) и отнесены к инверсионно-примитивным классам. Еще три класса симметрии из числа центральных классов 2/m; 4/m; 6/m являются новыми. Международное обозначение этих классов симметрии формируется в соответствии с таблицей 4, т. е. содержит один символ, обозначающий поворотную ось симметрии в сочетании с перпендикулярной к ней плоскостью симметрии.

Отметим здесь, что особое направление (а также любое другое направление) в инверсионно-примитивных и центральных классах симметрии являются неполярными, т. е. различные концы таких направлений эквивалентны.

Рассмотрим теперь порождающую комбинацию, состоящую из поворотной оси симметрии C_n и продольной плоскости симметрии m. По теореме 3 (п. 1.2) всего имеется n продольных плоскостей m, направленных вдоль этой оси. Такая порождающая комбинация образует планальные

<u>Таблица 5</u>

Вывод и описание 27 классов симметрии кристаллов низшей и средней категорий.

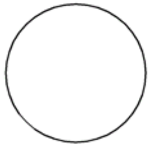
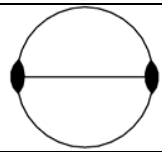
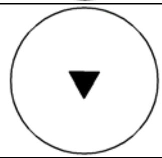
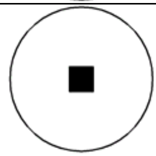
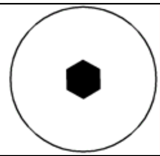
Порождающая комбинация элементов симметрии		Элементы симметрии, добавленные по правилам 1 - 6	Стереографическая проекция	Сингония	Международное обозначение класса симметрии	Название классов симметрии
	n = 1	нет		триклинная	1	простые (примитивные)
	2			моноклинная	2	
	3			тригональная	3	
	4			тетрагональная	4	
	6			гексагональная	6	

Таблица 5 (продолжение)

Вывод и описание 27 классов симметрии кристаллов низшей и средней категории.

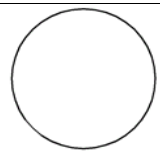
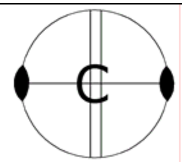
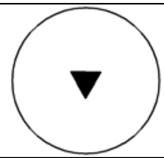
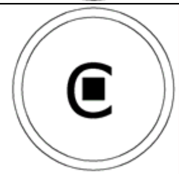
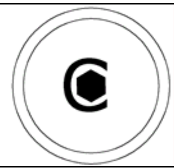
Порождающая комбинация элементов симметрии			Элементы симметрии, добавленные по правилам 1 - 6	Стереографическая проекция	Сингония	Международное обозначение класса симметрии	Название классов симметрии
C_n 	n = 1	+ I	нет		триклинная	$\bar{1}$	центральный
	2		поперечная плоскость симметрии m		моноклинная	2/m	центральный
	3		$C_3 + I = \bar{C}_3$		тригональная	$\bar{3}$	инверсионно-примитивный
	4		поперечная плоскость симметрии m		тетрагональная	4/m	центральный
	6		поперечная плоскость симметрии m		гексагональная	6/m	центральный

Таблица 5 (продолжение)

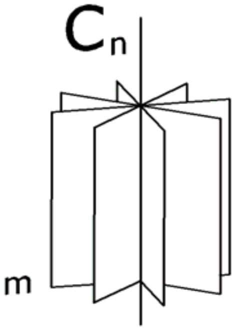
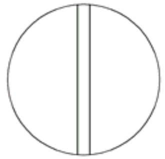
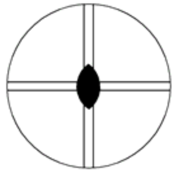
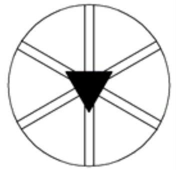
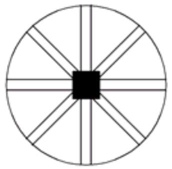
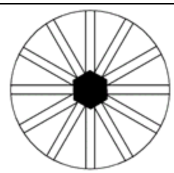
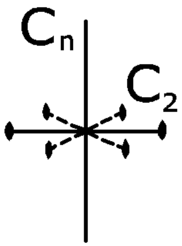
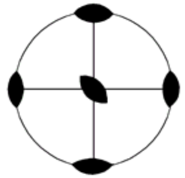
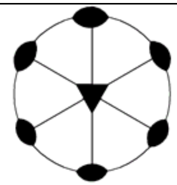
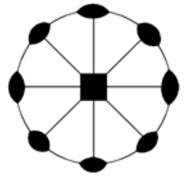
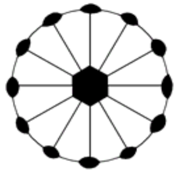
Порождающая комбинация элементов симметрии			Элементы симметрии, добавленные по правилам 1 - 6	Стереографическая проекция	Сингония	Международное обозначение класса симметрии	Название классов симметрии
	n = 1	+ продольная плоскость симметрии m	n – продольных плоскостей симметрии m		моноклинная	m	планальные
	2				ромбическая	mm2	
	3				тригональная	3m	
	4				тетрагональная	4mm	
	6				гексагональная	6mm	

Таблица 5 (продолжение)

Порождающая комбинация элементов симметрии			Элементы симметрии, добавленные по правилам 1 - 6	Стереографическая проекция	Сингония	Международное обозначение класса симметрии	Название классов симметрии
	n = 1	+ поперечная ось симметрии C_2	n – поперечных осей симметрии C_2		моноклинная	2	аксиальные
	2				ромбическая	222	
	3				тригональная	322	
	4				тетрагональная	422	
	6				гексагональная	622	

классы симметрии (таблица 5). В соответствии с таблицей 4 эти классы обозначаются как

m; mm2; 3m; 4mm; 6mm.

Следующая порождающая комбинация состоит из оси симметрии C_n и перпендикулярной к ней оси симметрии второго порядка C_2. В соответствии с правилом 4 (п. 2), всего имеется n поперечных осей симметрии, перпендикулярных к оси C_n. Из пяти получающихся таким образом классов симметрии, новыми являются четыре. Эти классы обозначаются как (таблица 4)

222; 322; 422; 622

и называются <u>аксиальными</u> классами симметрии.

Моноклинный класс симметрии 2 (таблица 5) был рассмотрен выше и отнесен к простым классам симметрии.

Далее порождающую комбинацию образуем из оси симметрии C_n, центра симметрии, находящегося на этой оси, продольной плоскости симметрии m, оси симметрии 2-го порядка, перпендикулярной к плоскости симметрии m и к оси C_n (таблица 5). В соответствии с теоремами 3 и 4, в такой порождающей комбинации для оси симметрии C_n имеются n продольных плоскостей симметрии m и n поперечных осей симметрии 2-го порядка C_2. Для осей симметрии C_n четных порядков ($n = 2, 4, 6$) будет еще поперечная плоскость симметрии. Из пяти образованных в результате классов симметрии, называемых <u>планаксиальными классами</u>, не рассмотренными выше являются четыре класса

mmm; 3m; 4/mmm; 6/mmm.

Класс симметрии 2/m был описан ранее как центральный класс симметрии (таблица 5).

Еще одна порождающая комбинация может быть составлена из оси симметрии C_n и поперечной плоскости симметрии m. Классы симметрии, которые получаются при этом, сведены в таблицу 5. Все они уже были рассмотрены ранее, так что не имеется специального названия для классов, образуемых из данной порождающей комбинации.

И, наконец, еще два класса симметрии могут быть получены на основании теоремы 6 с порождающими инверсионно-поворотными осями 4-го и 6-го порядков. Это классы

$\bar{4}2m$; $\bar{6}m2$,

которые называются <u>инверсионно-планальными</u>.

Перечисленные в таблице 5 сочетания элементов симметрии исчерпывают все возможные их комбинации для кристаллов, имеющих особые направления, таким образом, всего в низшей и средней категориях имеются 27 классов симметрии.

6. Вывод и описание пяти классов симметрии кристаллов высшей категории

Кристаллы высшей категории не имеют особых направлений, так что любое направление может быть повторено одним или несколькими элементами симметрии. Порождающие комбинации осей симметрии для таких кристаллов определяются правилом 5 (теорема Эйлера). Без доказательства сразу приведем, как это устанавливает правило 5, два возможных сочетания осей симметрии в кристаллах высшей категории. Эти сочетания будут такими же, как сочетания осей симметрии в геометрических многогранниках: кубе (октаэдре) и тетраэдре. Аксонометрические изображения и стереографические проекции осей симметрии куба и тетраэдра изображены на рис. 8 (b и c). Рассмотренные порождающие комбинации дают два класса симметрии высшей категории: это тетраэдрический класс 23 и кубический класс 432, рис. 19 (оба эти класса принадлежат одной и той же кубической сингонии).

Остальные классы симметрии высшей категории получим аналогично п. 5, последовательно добавляя к порождающим комбинациям рис. 8 (b и c) центр симметрии I, координатную плоскость симметрии m (направленную вдоль оси симметрии второго порядка C_2), или же диагональную плоскость симметрии (здесь она направлена вдоль оси симметрии третьего порядка C_3).

Рассмотрим сначала порождающую комбинацию из осей симметрии тетраэдра (рис. 8c). Добавление центра симметрии к поворотной оси симметрии четного порядка (здесь это ось симметрии C_2) приводит согласно правилу 2 к появлению поперечной плоскости симметрии m. Для трех взаимно перпендикулярных осей симметрии C_2, имеющихся в тетраэдре (рис. 8c), всего получится три ортогональных плоскости симметрии совпадающих с координатными плоскостями (три координатных плоскости симметрии m). В результате мы получаем еще один кубический класс симметрии, стереографическая проекция которого показана на рисунке 19, международное обозначение этого класса в соответствии с п. 4 (таблица 4) будет m3 (так как вдоль осей координат в данном классе симметрии имеются и координатные оси симметрии C_2 и координатные плоскости симметрии m, то первым символом международного обозначения будет m, обозначающий координатную плоскость симметрии).

При добавлении к порождающей комбинации осей симметрии тетраэдра (рис. 8c) координатной плоскости симметрии также будет образован класс m3, так как по правилу 3 мы получим три координатных плоскости симметрии, а поскольку эти плоскости перпендикулярны осям C_2 (четного порядка), то на их пересечении будет находиться центр симметрии I.

И, наконец, если к порождающей комбинации осей симметрии тетраэдра прибавить диагональную плоскость симметрии m, направленную вдоль оси C_3, то в соответствии с правилом 3 будет получено шесть таких плоскостей симметрии. Одновременно оси симметрии C_2 преобразуются в

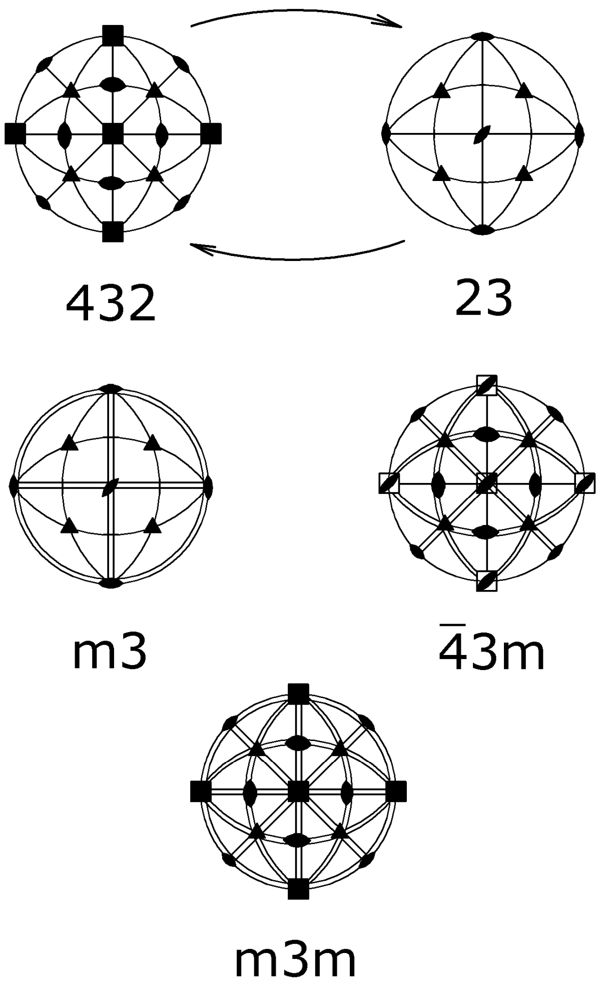


Рис. 19. Стереографические проекции элементов симметрии пяти классов симметрии высшей категории.

инверсионно-поворотные оси симметрии $\bar{C}_4$. В результате получится класс симметрии, стереографическая проекция которого показана на рисунке 19; международное обозначение этого класса $\bar{4}3$m, где символ 4 определяет три координатных инверсионно-поворотных оси симметрии 4-го порядка, а символ m – шесть диагональных плоскостей симметрии.

Для порождающей комбинации осей симметрии куба (рис. 8b) добавление центра симметрии I, координатной плоскости симметрии m (направленной вдоль оси C_2), или же диагональной плоскости симметрии (направленной вдоль оси C_3) дает согласно теоремам 2 и 3 один и тот же класс симметрии с полным набором элементов симметрии куба (полносимметричный кубический класс симметрии). Стереографическая проекция элементов симметрии этого класса изображена на рисунке 19; международное обозначение этого класса имеет вид m3m (так как вдоль координатных и диагональных направлений имеются одновременно и оси симметрии и плоскости симметрии, то в международном символе используются символы плоскостей симметрии).

Рекомендуемая литература

1. Шаскольская М. П. Кристаллография: учебник для втузов. – М., Высш. школа, 1976.
2. Най Дж. Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц. – М., Мир, 1967.
3. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. – М., Мир, 1979.

Содержание

Николай Павлович Белов
Ольга Константиновна Покопцева
Андрей Дмитриевич Яськов

ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОФИЗИКИ
ЧАСТЬ I
ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

Учебное пособие

В авторской редакции
Дизайн и верстка О. К. Покопцева
Редакционно-издательский отдел Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики
Зав. РИО Н.Ф. Гусарова
Лицензия ИД № 00408 от 05.11.99
Подписано к печати 15.05.09
Заказ № 2113
Тираж 100 экз.
Отпечатано на ризографе

СПбГУ ИТМО стал победителем конкурса инновационных образовательных программ вузов России на 2007–2008 годы и успешно реализовал инновационную образовательную программу «Инновационная система подготовки специалистов нового поколения в области информационных и оптических технологий», что позволило выйти на качественно новый уровень подготовки выпускников и удовлетворять возрастающий спрос на специалистов в информационной, оптической и других высокотехнологичных отраслях науки. Реализация этой программы создала основу формирования программы дальнейшего развития вуза до 2015 года, включая внедрение современной модели образования.

КАФЕДРА ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

Редакционно-издательский отдел
Санкт-Петербургского государственного
университета информационных
технологий, механики и оптики
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

ИТМО
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ