НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ
Факультет физики

Подготовка к экзамену

Работу выполнил студент 3 курса
Захаров Сергей Дмитриевич

Москва
2020

Содержание

1. Симметрия кристаллов, что это такое? Основные операции симметрии. Взаимодействие операций симметрии

Симметрия кристаллов — их свойство совмещаться самим с собой при различных преобразованиях, например поворотах вокруг осей, отражениях в плоскостях или точках (инверсия), параллельном переносе, или же комбинации этих операций.

В результате симметрических преобразований различные части или объект полностью самосовмещаются.

Если смотреть больше, то симметрия — инвариантность объектов при линейных преобразованиях системы координат, которую мы используем для описания объекта, т.е. операция $\hat{\mathbf{G}}(x, y, z) \to [X, Y, Z]$ операция симметрии если:

$$\hat{\mathbf{G}}[f(x, y, z)] = f(X, Y, Z) \tag{1}$$

Симметрия кристаллов выделяется с помощью элементов симметрии:

1) Центра симметрии
2) Плоскостей симметрии
3) Осей симметрии

А также особой симметрии: трансляционной.

Центр симметрии

Центр симметрии (инверсии) связывает противоположные инверсионно равные (или обращено равные) части кристалла. Он совпадает с геометрическим центром кристалла. От слова Centrum он обозначается буквой C (по символике Бравэ) или $\bar{1}$ (по интернациональной символике).

При наличии центра симметрии все диаметрально противоположные грани и ребра кристалла должны быть попарно инверсионно равны и параллельны. Это на пальцах можно проверить, положив кристалл на горизонтальную плоскость стола. Если все грани и ребра кристалла попарно параллельны и инверсионно равны, центр симметрии в кристалле есть. Если центр симметрии отсутствует, то в таком кристалле сверху окажется вершина, ребро, наклонная или параллельная, но не равная нижней, грань.

Плоскость симметрии

Плоскость симметрии делит кристалл на две зеркально-равные половины. Плоскость симметрии связывает зеркально равные части кристалла. От слова Planum обозначается буквой P (по Бравэ), от слова mirror (зеркало, отражать) обозначается буквой m (интернационально), графически обозначается сдвоенной линией (как двухсторонне зеркало).

Для определения плоскости симметрии кристалл мысленно рассекается плоскостью, проходящей через его центр. Если при этом слева и справа от плоскости симметрии все части кристалла (грани, ребра, вершины) будут повторяться как предмет и его зеркальное отображение, то такая плоскость будет являться плоскостью симметрии. В прямоугольнике (см. рисунок 1) можно провести только две плоскости симметрии. Плоскость, делящая прямоугольник на две равные части, но не зеркально, не является плоскостью симметрии.

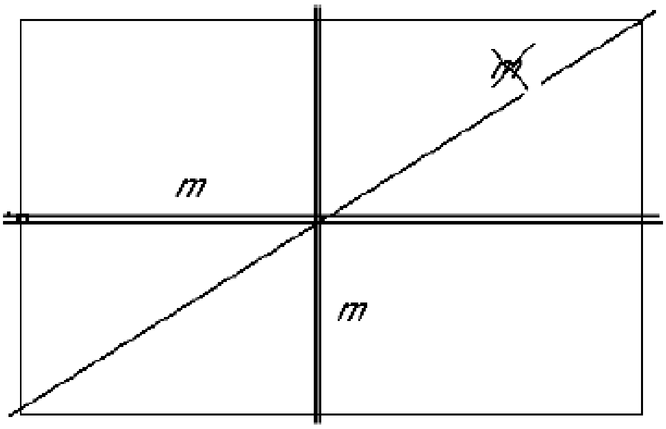

Рис. 1. Плоскости симметрии прямоугольника

Куб (см. рисунок 2) имеет 9 плоскостей симметрии: три- координатных Р (слева), шесть диагональных Р (справа).

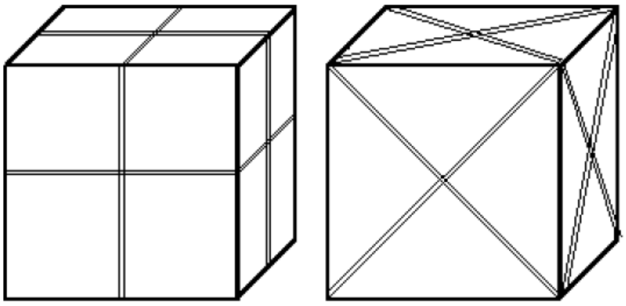

Рис. 2. Плоскости симметрии куба

Оси симметрии

Ось симметрии - это линии, которые симметрично связывает конгруэнтно равные (совместимо равные) части кристалла. Вокруг оси симметрии на равных угловых и линейных расстояниях располагаются конгруэнтно равные части кристалла, так что при полном повороте вокруг оси (на 360°) они повторяются n раз. Такие оси называют поворотными осями симметрии n-го порядка.

В некоторых кристаллах, помимо поворотных осей симметрии, могут быть инверсионные оси симметрии, в которых операция симметричного поворота вокруг оси совмещается с операцией симметричного отражения в центре кристалла. Порядок инверсионной оси удваивается по сравнению с порядком поворотной оси.

По Браве от слова Linie они обозначаются Ln (читается - ось симметрии n-го порядка). В кристаллах могут быть поворотные оси симметрии первого L1, второго L2, третьего L3, четвертого L4, шестого L6 порядков и инверсионные оси симметрии Li1, Li2, Li3, Li4, Li6. Кроме того, Li1 = C, Li2 = P, Li3 = L3C, Li4 = L2, Li6 = L3P (про запрем L5 см. далее в операции трансляции).

По интернациональной символике поворотные оси симметрии обозначаются числом, указывающим их порядок, т.е. 1, 2, 3, 4 и 6, а инверсионные оси симметрии — $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ и $\bar{6}$.

Графически оси симметрии обозначаются многоугольником, число углов которого равно порядку оси симметрии.

В кубе: 3L4 - (3 оси симметрии 4-го порядка) проходят через середины противоположных квадратных граней; 4L3 - (4 оси симметрии 3-го прядка) проходят через противоположные вершины; 6L2 - (6 осей симметрии 2-го прядка) проходят через середины противоположных ребер куба.

Для объяснения "на пальцах" полезно запомнить, что концы осей симметрии в кристаллах могут выходить через вершины, через центры граней и через середины ребер. Следовательно, при определении осей симметрии именно за эти элементы и нужно брать кристалл двумя пальцами и вращать его вокруг этой оси.

Операция трансляции

Если решетка кристалла состоит из повторяющихся в пространстве элементарных ячеек, то существует еще **трансляционная симметрия**, т.е. наличие некоторого *вектора трансляции*, с помощью которого можно построить всю бесконечную кристаллическую решетку путем переноса одной элементарной ячейки.

Трансляционная симметрия вкупе с операциями поворота и отражения в плоскости и в точке приводит к возникновению таких элементов симметрии как винтовая ось, инверсионная ось, плоскость скользящего отражения.

Кроме того, наличие трансляционной симметрии запрещает существование оси пятого порядка. Пусть у нас есть двумерная решетка, которая состоит из узловых рядов A_1, A_2, период транслции вдоль этого ряда есть t. Положим также, что перпендикулярно исследуемой плоскости проходит n-кратная ось симметрии (см. рисунок 3). Тогда A_1 переходит в точку B_1, A_2 — в B_2, угол поворота из кратности оси симметрии:

$$\alpha = \frac{2\pi}{n} \tag{2}$$

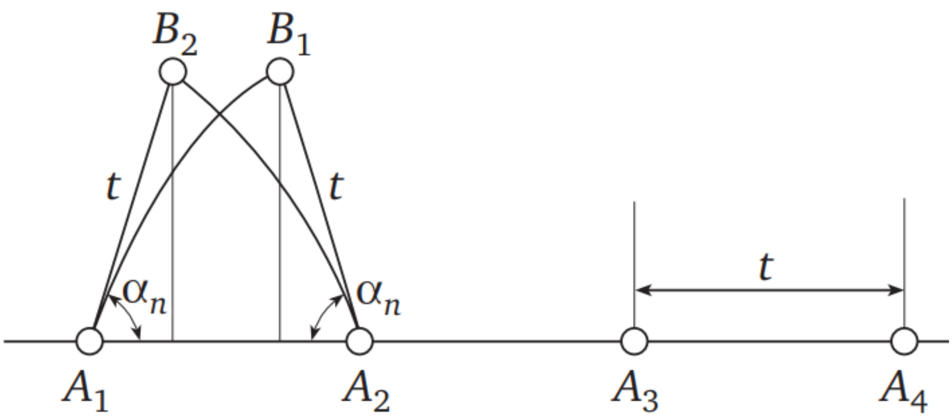

Рис. 3. К выводу запрета на L5

Понятно, что B_1 и B_2 определят ряд решетки, параллельный ряду $A_1 - A_2$. Тогда расстояние между точками B_1 и B_2 неминуемо должно быть кратно периоду трансляции t. По построению из трапеции:

$$B_1B_2 = t - 2t\cos\alpha = \xi t \quad \Rightarrow \quad \cos\alpha = \frac{1-\xi}{2} \tag{3}$$

Ясно, что на косинус существует условие его принадлежности к интервалу $[-1; 1]$. Проверив все возможные ξ, убедимся, что $\alpha = 2\pi/5$ (соответствует пятому порядку оси симметрии) соответствующего косинуса из 3 не находится. Кроме того, таким же образом оказывается, что порядка выше шестого быть также не может.

2. Методы изображения кристаллов. Стереографические проекции. Как они устроены?

Потенциально возможно изображать кристалл просто в изометрии, однако это неудобно по чисто человеческим причинам (требуется пространственное воображение и все такое), а также по причине отсутствия правильного представления об угловых параметрах кристалла. По этой причине используется метод кристаллографических проекций, для которого все плоскости заменяются нормалями к ним. После этого мы параллельно переносим их таким образом, чтобы они все пересекались в одной точке. Полученная совокупность нормалей называется **кристаллографическим комплексом**

После этого вокруг точки пересечения строится сфера. Сфера, по очевидным соображениям, "протыкается" нормалями, образуя так называемую **сферическую проекцию** плоскостей, которые мы заменили нормалями. Фактически мы получаем эдакий глобус, с помощью которого теперь уже можно измерять углы между плоскостями.

Этот обход однако не решает проблему использования изометрии, поэтому сферу необходимо спроецировать на плоскость. Сделать это можно по-разному, однако применение нашел способ проектирования на экваториальную плоскость (такие проекции называются **стереографическими**). Схема их построения приведена на рисунке 4.

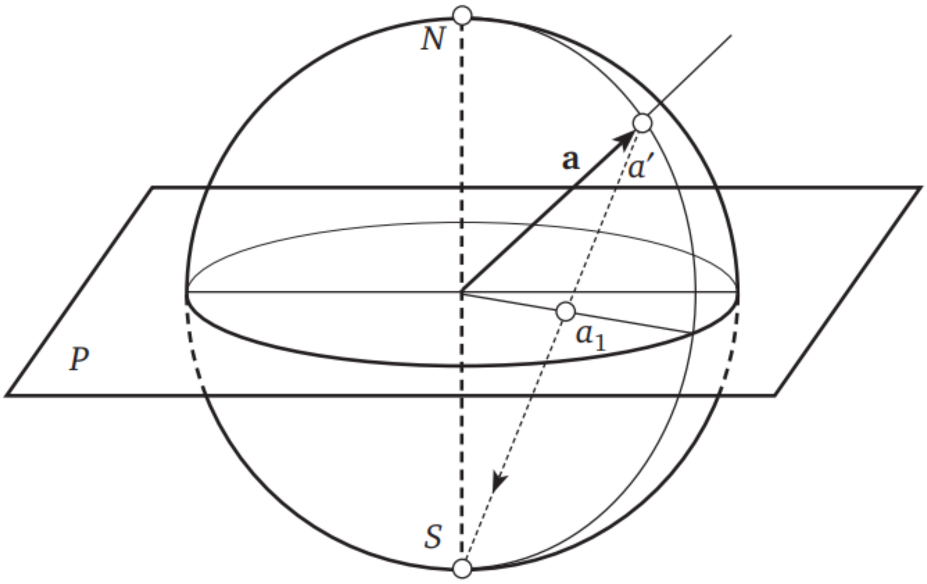

Рис. 4. К построению стереографической проекции. Точка a_1 есть **стереографическая проекция кристаллографической плоскости**.

Указанный метод, с одной стороны, позволяет проводить непосредственные измерения угловых параметров решетки, а с другой — позволяет сразу же видеть наличие или отсутствие той или иной симметрии.

Для того, чтобы удобно проводить угловые измерения, используется объект, называемый **сетка Вульфа** — фактически, стереографическая проекция всех параллелей и меридианов на "глобусе" с шагом 2°. Он может быть, например, исполнен на прозрачном материале и накладываться на стереографическую проекцию.

3. Определить индексы Миллера плоскости, проходящей через две телесные диагонали куба

К сожалению, верстать картинки пока что находится за гранью моего сознания, поэтому задача приложена как скан.