Symetria zewnętrzna kryształów - grupy punktowe

- Definicja grupy punktowej
- Kombinacja obrotu wokół osi n-krotnej właściwej:
 - z obrotem wokół prostopadłej osi 2-krotnej
 - z odbiciem w środku symetrii
 - z odbiciem w równoległej płaszczyźnie symetrii
- Grupy punktowe w poszczególnych układach krystalograficznych
- Centrosymetryczne i niecentrosymetryzne grupy punktowe
- Grupy punktowe w układzie regularnym

Grupy punktowe - definicja

☐ Elementy symetrii w budowie zewnętrznej kryształów:

 $\overline{1}$ m 1 2 3 4 6 $\overline{3}$ $\overline{4}$ $\overline{6}$

□ <u>Definicja:</u>

Grupa punktowa – kombinacja operacji symetrii, które mają przynajmniej 1 punkt niezmienny (tzn. wspólny).

Oryginalne (tzn. niedublujące się) kombinacje operacji symetrii w kryształach prowadzą do 32 grup punktowych.

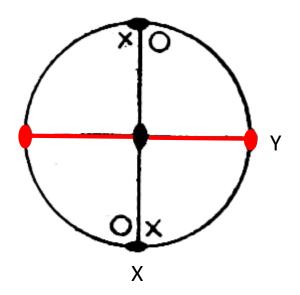
Grupa punktowa jest tworzona przez operacje symetrii, a nie przez elementy symetrii i spełnia matematyczną definicję grupy.

<u>Klasa krystalograficzna</u> – określa rodzaj symetrii kryształu.

Każda grupa punktowa ma swój symbol.

Współcześnie stosuje się symbole Hermanna-Mauguina, zwane również symbolami międzynarodowymi.

- □ Kombinacja obrotu wokół osi n-krotnej właściwej (2, 3, 4, 6) z obrotem wokół prostopadłej osi 2:
- ☐ Kombinacja obrotu wokół osi 2 z obrotem wokół prostopadłej osi 2:



Definicje:

- elementy pierwotne, elementy generujące, generatory z ich istnienia wynika istnienie innych elementów symetrii
- elementy wtórne, elementy wygenerowane ich istnienie wynika z istnienia innych elementów symetrii

Element wtórny: oś 2 (zaznaczona kolorem czerwonym)

Układ krystalograficzny: rombowy (dlaczego? trzy osie dwukrotne wzajemnie prostopadłe)

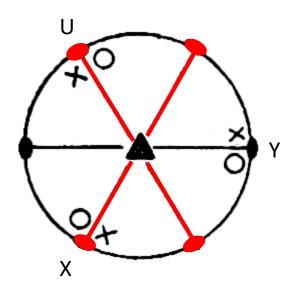
Symbol grupy punktowej (i klasy krystalograficznej): pierwsze miejsce w symbolu: X

drugie miejsce w symbolu: Y

trzecie miejsce w symbolu: Z

222

☐ Kombinacja obrotu wokół osi 3 z obrotem wokół prostopadłej osi 2:



Elementy wtórne: dwie osie 2 (zaznaczone kolorem czerwonym)

Układ krystalograficzny: trygonalny (dlaczego? jedna oś trójkrotna))

Symbol grupy punktowej (i klasy krystalograficznej): pierwsze miejsce w symbolu: Z

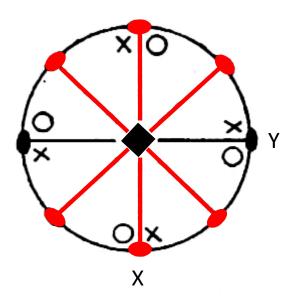
drugie miejsce w symbolu: X, Y, U

trzecie miejsce w symbolu: puste

32

Na rysunku widać wartości kątów między osiami krystalograficznymi – układ trygonalny nie jest prostokątny.

☐ Kombinacja obrotu wokół osi 4 z obrotem wokół prostopadłej osi 2:



Elementy wtórne: trzy osie 2 (zaznaczone kolorem czerwonym)

Układ krystalograficzny: tetragonalny (dlaczego? Jedna oś czterokrotna)

Symbol grupy punktowej (i klasy krystalograficznej): pierwsze miejsce w symbolu: Z

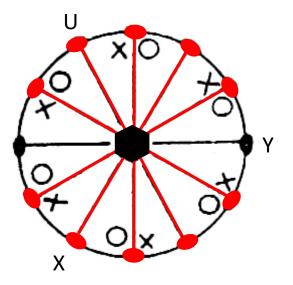
drugie miejsce w symbolu: X, Y,

trzecie miejsce w symbolu: dwusieczne kątów

między osiami X i Y

422

☐ Kombinacja obrotu wokół osi 6 z obrotem wokół prostopadłej osi 2:



Elementy wtórne: pięć osi 2 (zaznaczone kolorem czerwonym)

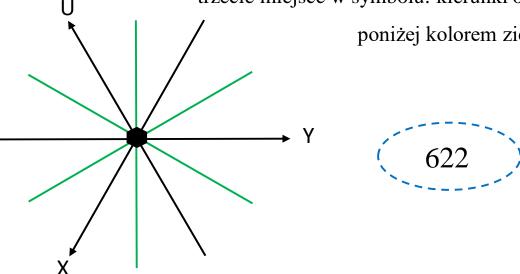
Układ krystalograficzny: heksagonalny (dlaczego? oś sześciokrotna)

Symbol grupy punktowej (i klasy krystalograficznej): pierwsze miejsce w symbolu: Z

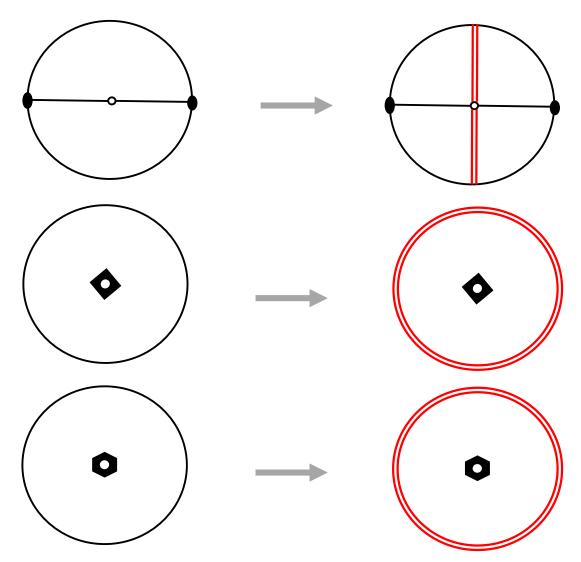
drugie miejsce w symbolu: X, Y, U

trzecie miejsce w symbolu: kierunki oznaczone

poniżej kolorem zielonym



- □ Kombinacja obrotu wokół osi parzystokrotnej właściwej (2, 4, 6) i odbicia w środku symetrii:
- ☐ Kombinacja obrotu wokół osi nieparzystokrotnej właściwej (3) i odbicia w środku symetrii:



Wnioski:

 Generuje się płaszczyzna symetrii prostopadła do osi parzystokrotnej.

Trzy elementy symetrii zawsze współistnieją: oś parzystokrotna, środek symetrii i płaszczyzna symetrii prostopadła do osi.

 Oś trójkrotna właściwa staje się osią trójkrotną inwersyjną.

Zatem jeśli do następujących grup punktowych dodamy operację odbicia w środku symetrii, to wygenerują się następujące grupy punktowe o tzw. symbolach pełnych:

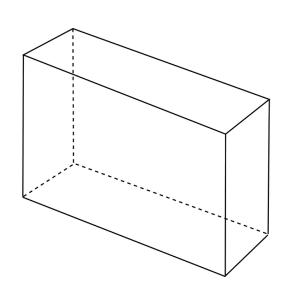
- $222 \rightarrow 2/m2/m2/m$
- $32 \rightarrow \overline{3}2/m$
- $\bullet 422 \rightarrow 4/m2/m2/m$
- $622 \rightarrow 6/\text{m}2/\text{m}2/\text{m}$

Symbole pełne nie są używane. Stosuje się tzw. symbole skrócone. Stosowane skracanie:

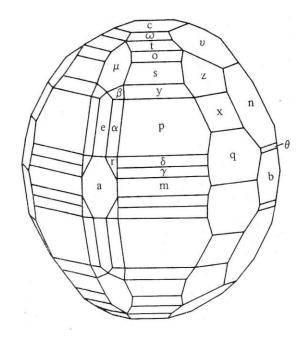
- $2/m \rightarrow m$
- w układzie regularnym dodatkowo skracamy 4/m → m
- w układzie jednoskośnym nie skracamy (dlaczego? symbol skrócony nie zawierałby kompletu generatorów)

Symbole skrócone dla powyższych symboli pełnych:

- mmm
- 3m
- 4/mmm
- 6/mmm

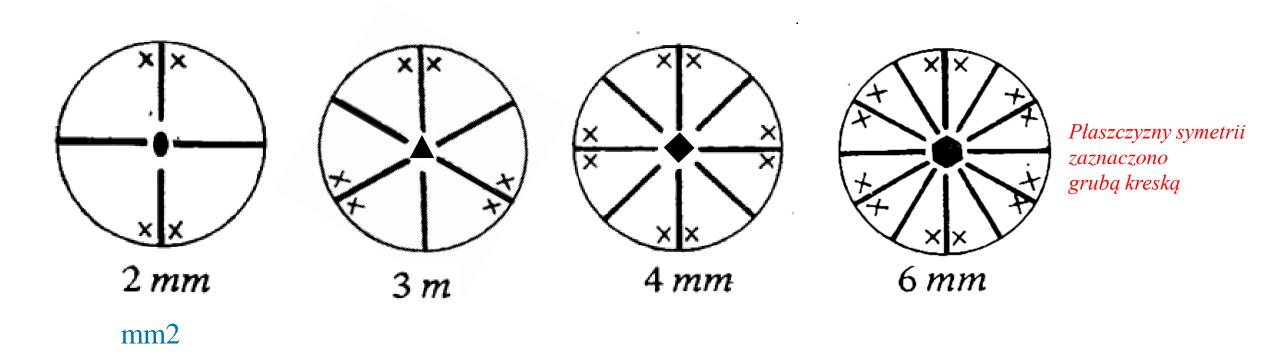


Pudełko zapałek Grupa punktowa mmm



Kryształ siarki rombowej Grupa punktowa mmm

☐ Kombinacja obrotu wokół osi właściwej (2, 3, 4, 6) i odbicia w równoległej płaszczyźnie symetrii:



Grupy punktowe w układach krystalograficznych

☐ Grupy punktowe w poszczególnych układach krystalograficznych:

Trójskośny: $1, \overline{1}$

Jednoskośny: 2, m, 2/m

Rombowy: 222, mm2, mmm

mmm - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 2/m2/m2/m

Tetragonalny: 4, $\bar{4}$, 4/m, 422, 4mm, 4/mmm, $\bar{4}$ 2m

4/mmm - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 4/m2/m2/m

Trygonalny: 3, $\overline{3}$, 32, 3m, $\overline{3}$ m

3m - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 32/m

Heksagonalny: 6, \(\bar{6}\), 6/m, 622, 6mm, 6/mmm, \(\bar{6}\)2m

6/mmm - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 6/m2/m2/m

Regularny: 23, m $\overline{3}$, 432, 43m, m $\overline{3}$ m - omówione na dalszych slajdach m $\overline{3}$ - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 2/m $\overline{3}$ m $\overline{3}$ m symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 4/m $\overline{3}$ 2/m

W sumie 6 grup punktowych posiada symbol skrócony.

Centrosymetryczne grupy punktowe

□ <u>11 centrosymetrycznych grup punktowych:</u> ($\overline{1}$; oś parzystokrotna i prostopadła płaszczyzna symetrii; $\overline{3}$) podświetlone żółtym kolorem

Trójskośny: 1, 1

Jednoskośny: 2, m, 2/m

Rombowy: 222, mm2, mmm

mmm - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 2/m2/m2/m

Tetragonalny: 4, $\overline{4}$, $\overline{4/m}$, 422, 4mm, $\overline{4/mmm}$, $\overline{4}2m$

4/mmm - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 4/m2/m2/m

Trygonalny: 3, $\overline{3}$, 32, 3m, $\overline{3}$ m

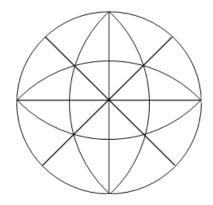
 $\overline{3}m$ - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego $\overline{3}2/m$

Heksagonalny: $6, \overline{6}, \frac{6}{m}, 622, 6mm, \frac{6}{mmm}, \overline{6}2m$

6/mmm - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 6/m2/m2/m

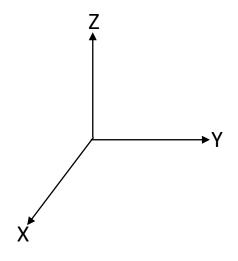
Regularny: 23, m3, 432, 43m, m3m

m3 - symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 2/m3 m3m symbol skrócony pochodzący od symbolu pełnego 4/m32/m

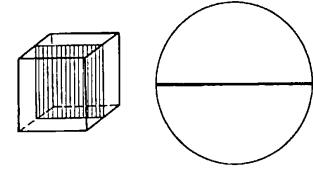


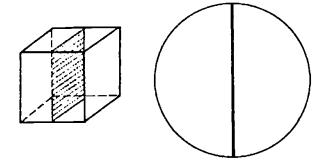
Rzut trójkątów sferycznych na kole projekcji

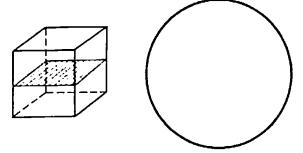




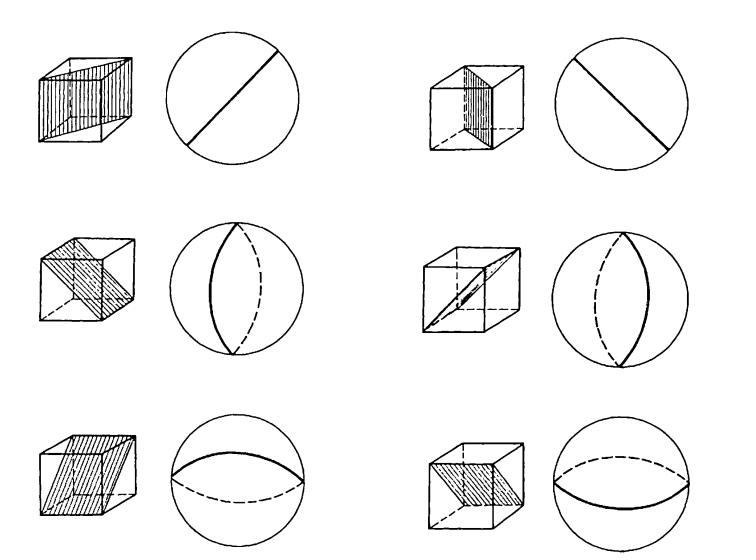
Skąd się biorą trójkąty sferyczne:

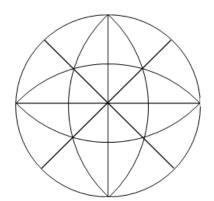


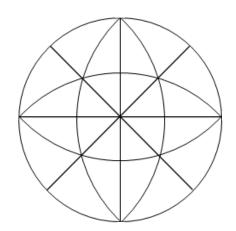




Skąd się biorą trójkąty sferyczne - ciąg dalszy:





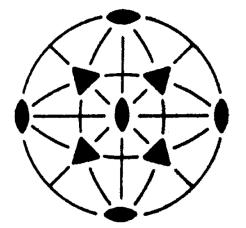


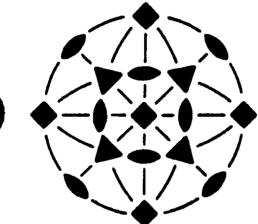
Osie trójkrotne – w przecięciu trzech kół wielkich

Osie czterokrotne – w przecięciu czterech kół wielkich

Osie dwukrotne – w przecięciu dwóch albo czterech

kół wielkich



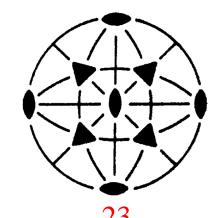


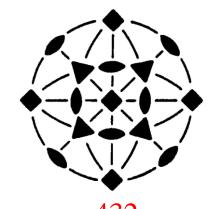
Symbole grup punktowych w układzie regularnym:

- Pierwsze miejsce: X, Y, Z (trzy kierunki)
- Drugie miejsce: kierunki przekątnych przestrzennych sześcianu (cztery kierunki)
- Trzecie miejsce: kierunki dwusiecznych kątów między osiami X, Y, Z (przekątne ścian sześcianu) (6 kierunków)

Przykład 1.

Jaki będzie symbol grupy punktowej?





15

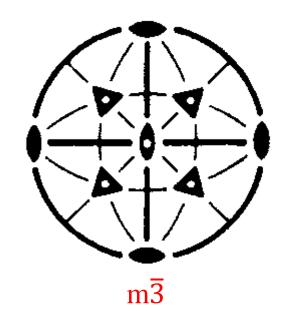
☐ Istnieje 5 grup punktowych w układzie regularnym:

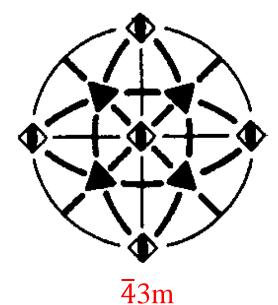
23 m $\overline{3}$ 432 $\overline{4}$ 3m m $\overline{3}$ m \leftarrow symbole skrócone $2/m\overline{3}$ \leftarrow symbole pełne

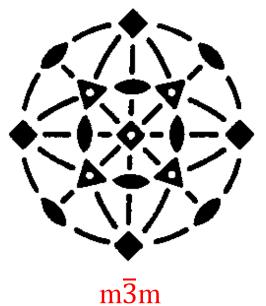
Przykład 2.

Należy zaznaczyć na kole projekcji elementy symetrii występujące w klasach krystalograficznych (grupach punktowych) m3, 43m oraz m3m.

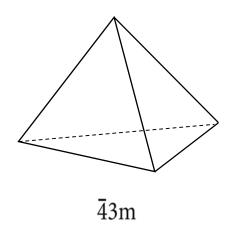
Na rysunkach grube linie oznaczają płaszczyzny symetrii.

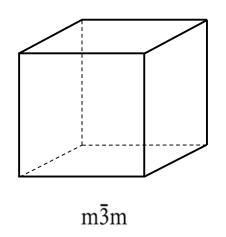


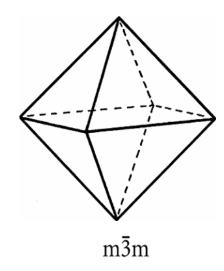




Przykłady kryształów układu regularnego:







Omówione zagadnienia:

- Definicja grupy punktowej
- Kombinacja obrotu wokół osi n-krotnej właściwej:
 - z obrotem wokół prostopadłej osi 2-krotnej
 - z odbiciem w środku symetrii
 - z odbiciem w równoległej płaszczyźnie symetrii
- Grupy punktowe w poszczególnych układach krystalograficznych, w tym w układzie regularnym
- Centrosymetryczne i niecentrosymetryzne grupy punktowe
- Grupy punktowe w układzie regularnym