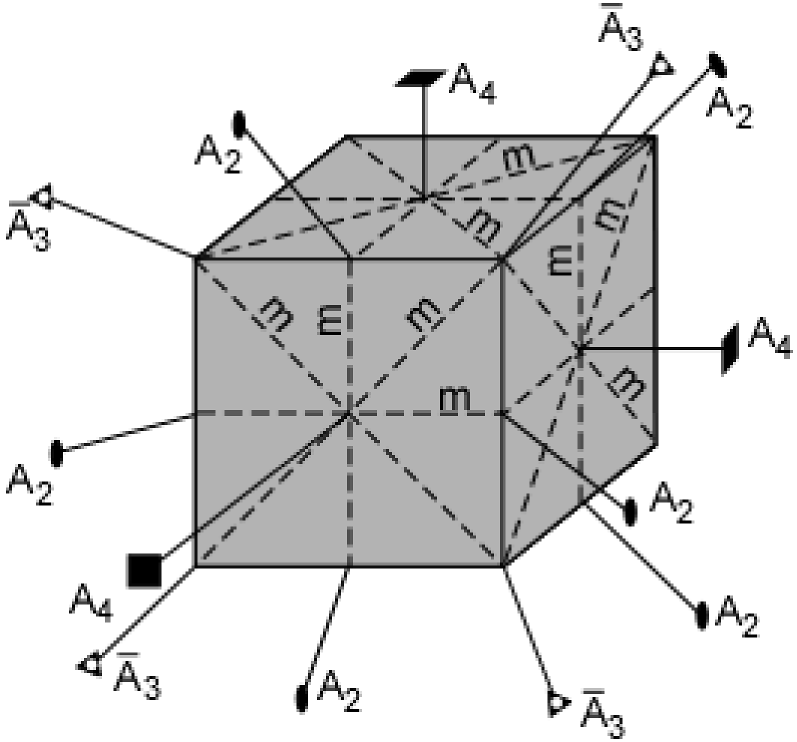
Лекція 4
ЕЛЕМЕНТИ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІВ



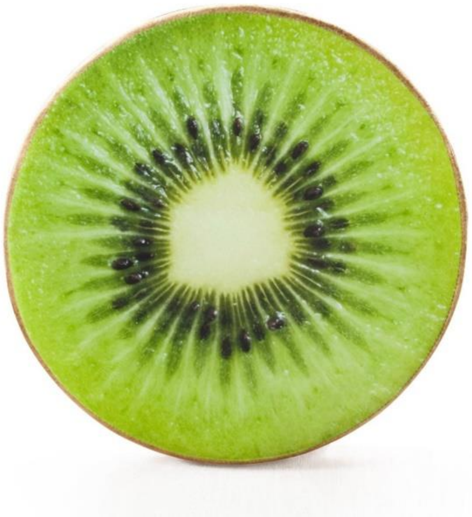
$3A_4$, $6A_2$, $4\bar{A}_3$, 9m, i
$4/m\bar{3}2/m$

Симетрія – ***з грец.*** **«співрозмірність».**

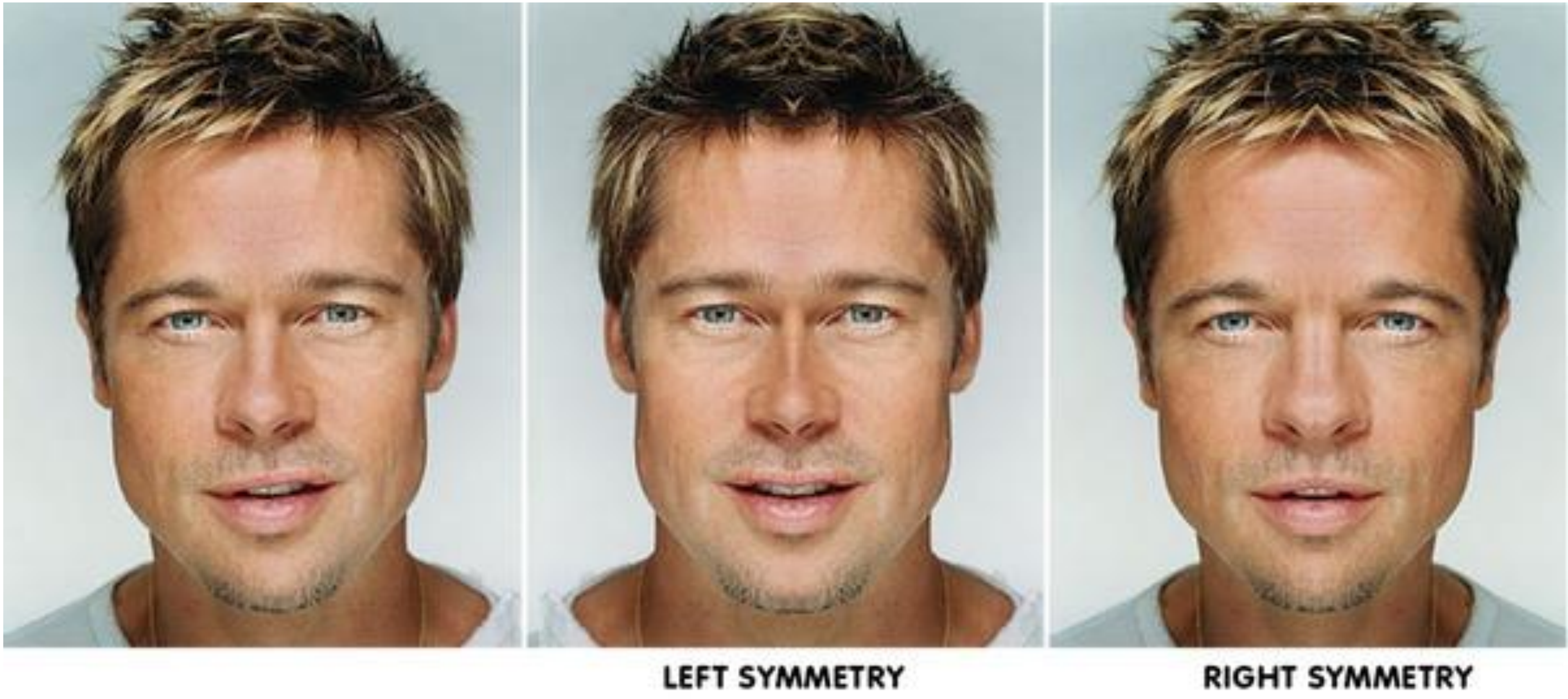
Симетричними ми називаємо тіла, які складаються з рівних, однакових частин, що мають закономірне повторення. Ці частини можуть суміщатися одна з одною.

Симетрія форм кристалів відображає симетрію їх фізичних властивостей, в першу чергу, симетрію швидкостей росту.

Симетрія в природі



Людське обличчя – не симетричне !

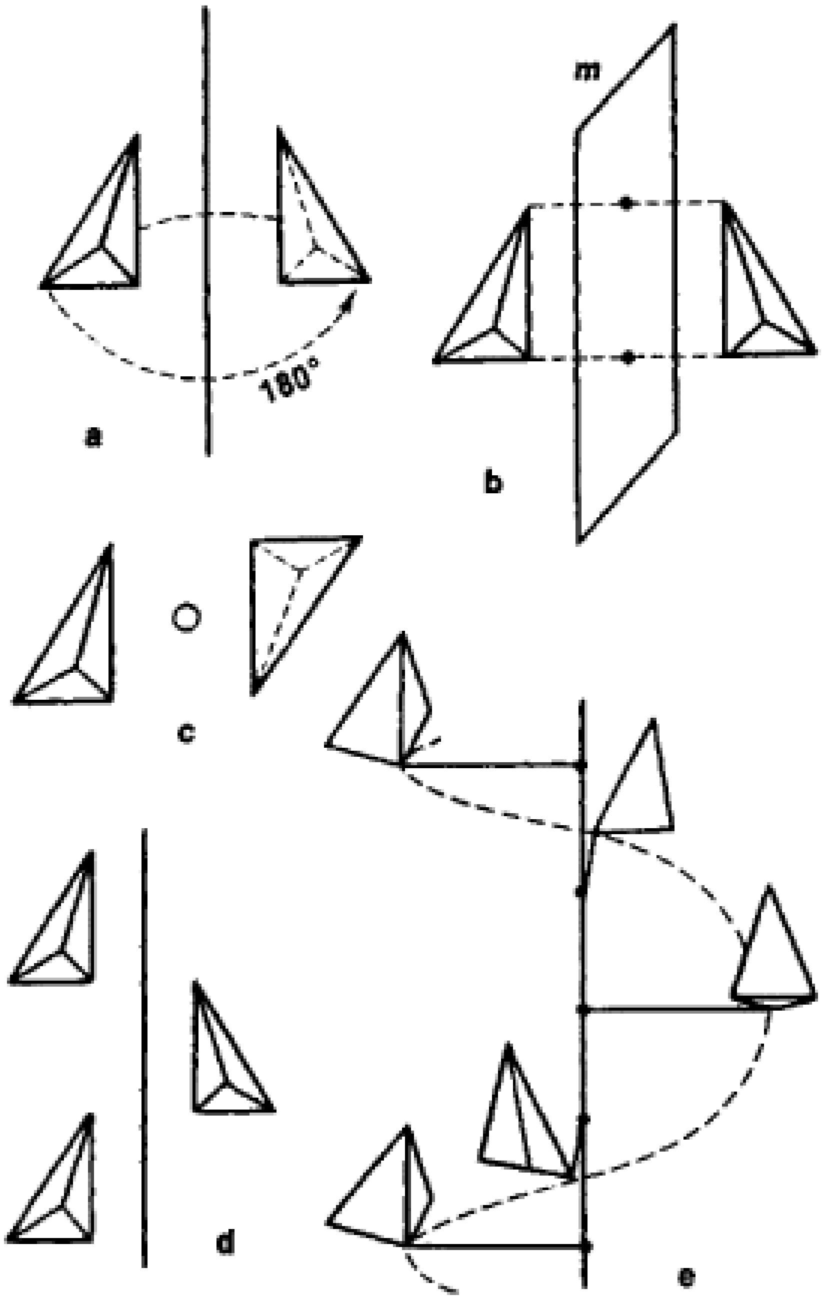


Операція симетрії — перетворення (дзеркальне відбиття, обертання, перенос), внаслідок якого простір чи фігура суміщаються з собою.

Операція, яка переводить систему (всю молекулярну частинку чи її частину) в положення, що збігається з вихідним.

Операції симетрії виконуються відносно точки, лінії чи площини.

Є *точкові операції симетрії* (перетворюють систему саму в себе) та *операції трансляції* (з обміном ідентичних частин).



Найпростіші операції симетрії:

(a) обертання,

(b) відбиття,

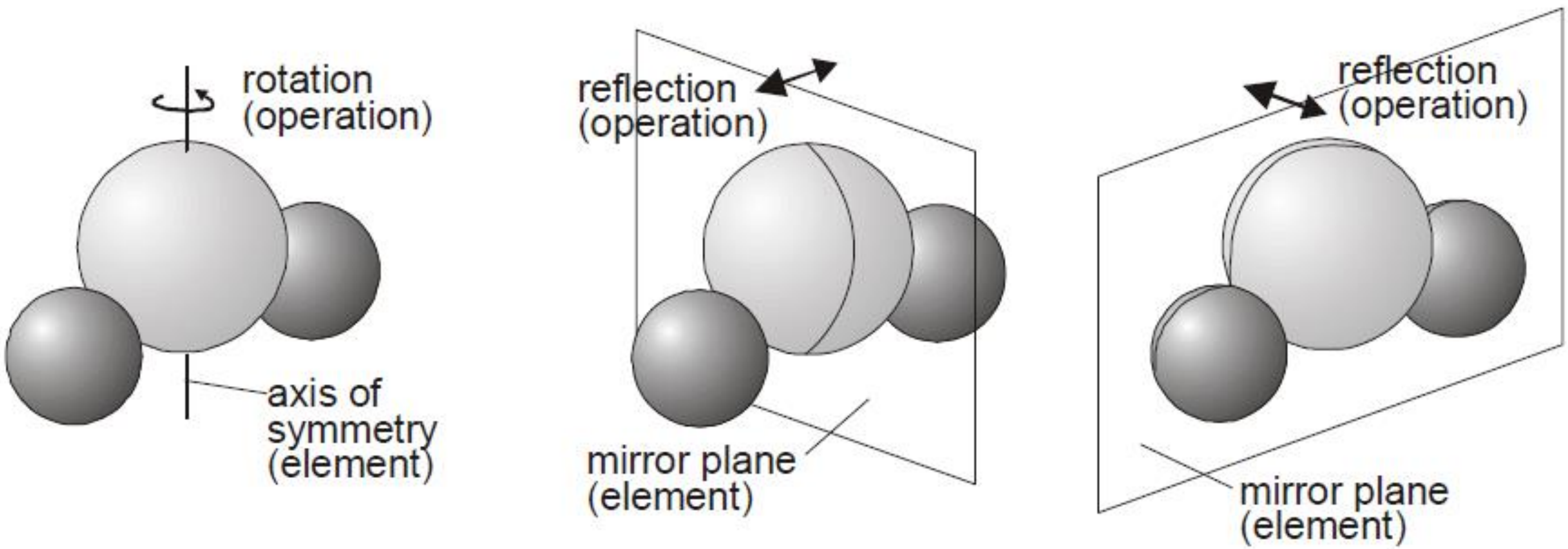
(c) інверсія,

(d) ковзання

(e) обертання навколо чотирикратної гвинтової осі

Операції симетрії поділяються на два типи:

- **точкові операції симетрії**, при яких хоча б одна точка фігури чи простору залишається на місці;
- **просторові операції симетрії**, при яких жодна точка фігури чи простору не залишається на місці.



Точкові операції симетрії

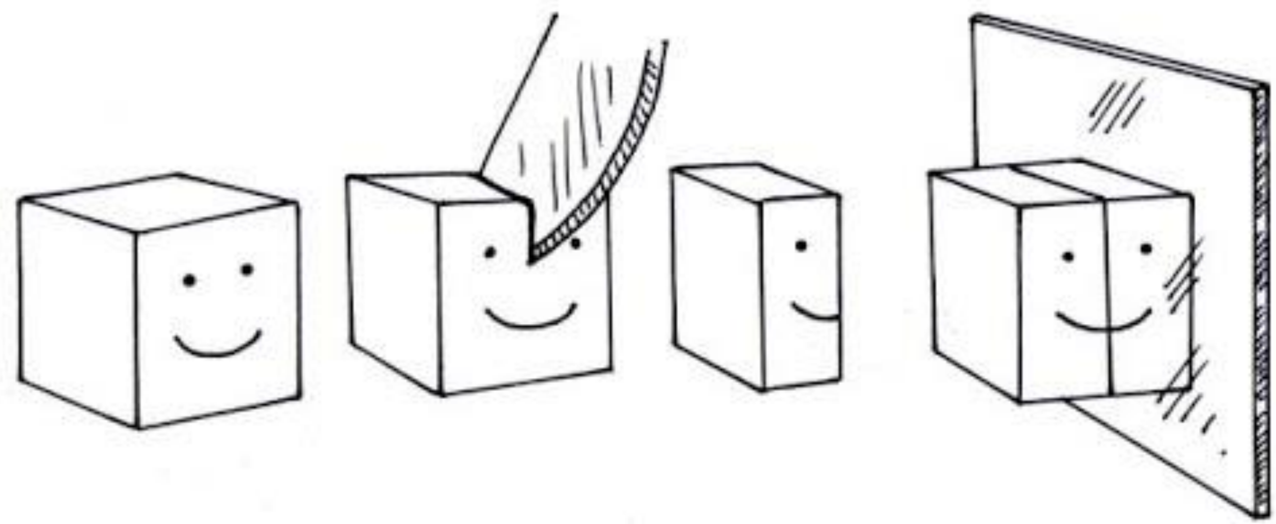
До точкових операцій симетрії, які зустрічаються в кристалографії, належать:

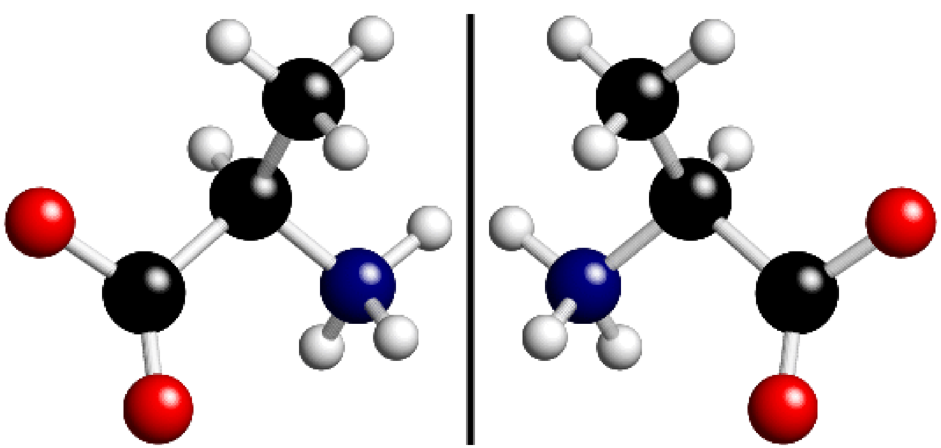
- ✓ **Площина симетрії**.
- ✓ **Вісь симетрії**.
- ✓ **Центр симетрії**
- ✓ **Інверсійна вісь симетрії**.

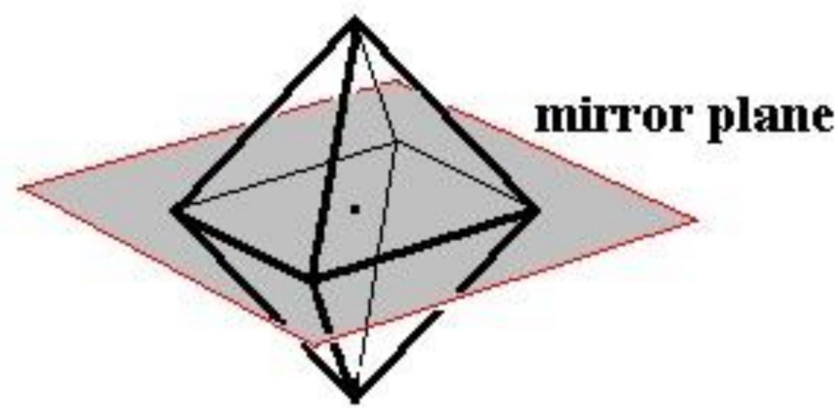
Позначення елементів симетрії кристалічних многогранників

Назва елемента симетрії		Міжнародний символ	Формула симетрії
Площина		m	P
Центр		$\bar{1}$	C
Поворотна вісь симетрії	будь-яка	n	L_n
	подвійна	2	L_2
	потрійна	3	L_3
	четверна	4	L_4
	шестерна	6	L_6
Інверсійна вісь симетрії	будь-яка	$\bar{n}$	$L_{\bar{n}}$
	потрійна	$\bar{3}$	$L_{\bar{3}}$
	четверна	$\bar{4}$	$L_{\bar{4}}$
	шестерна	$\bar{6}$	$L_{\bar{6}}$

Площиною симетрії називається площина, яка ділить фігуру на дві рівні частини, розташовані одна щодо іншої як предмет і його зображення в зеркалі.

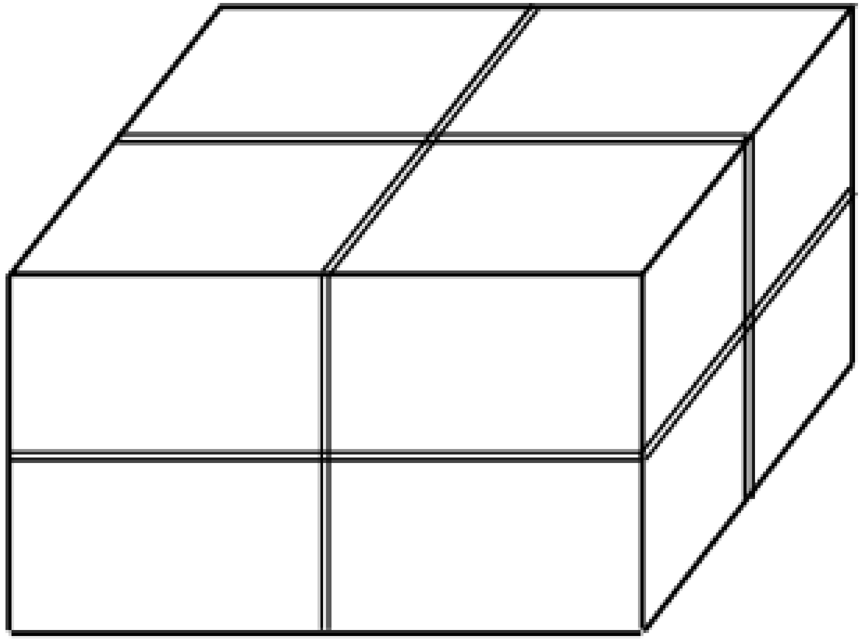




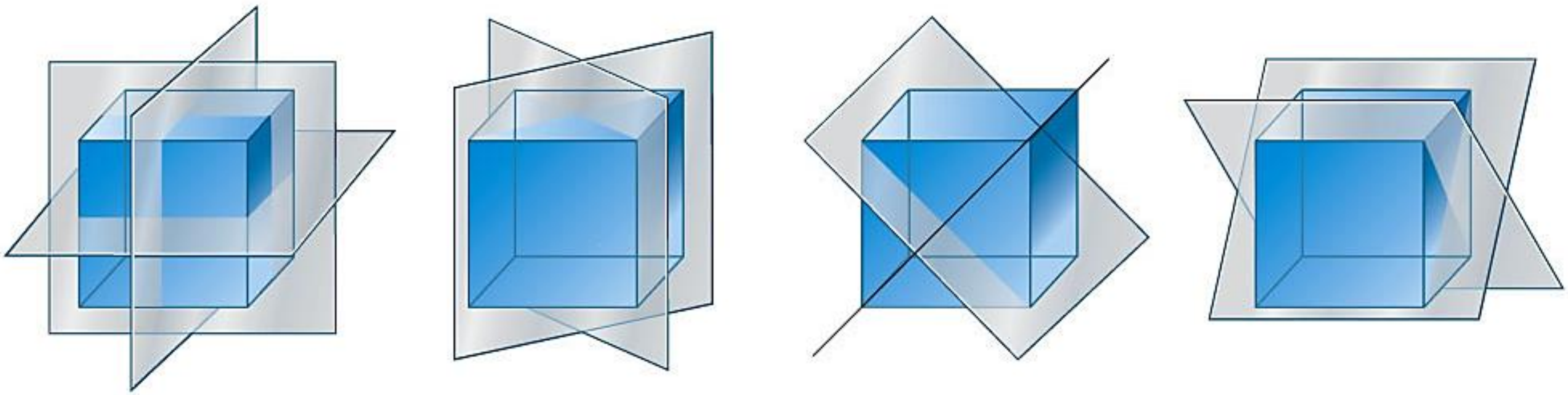


Площини симетрії проходять:

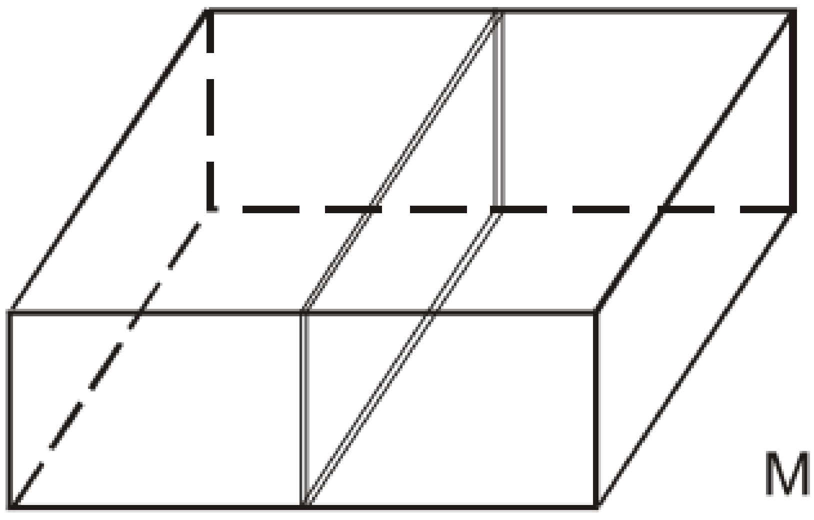
- ✓ або уздовж ребра кристала, утворюючи при цьому рівні кути з обома гранями,
- ✓ або по бісектрисі кута між ребрами кристала, що перетинаються,
- ✓ або перпендикулярно до однієї з граней кристала, поділяючи її на дві дзеркально рівні частини



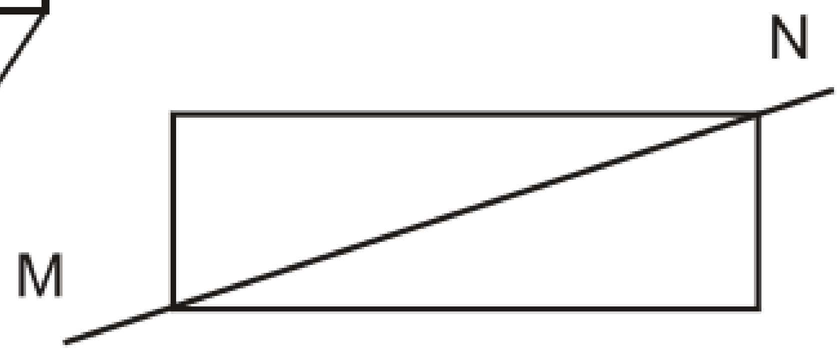
Наприклад, **куб має 9 площин симетрії**, три з яких проходять перпендикулярно до граней, а шість — по діагональних площинах.



Виявлення площин симетрії



а



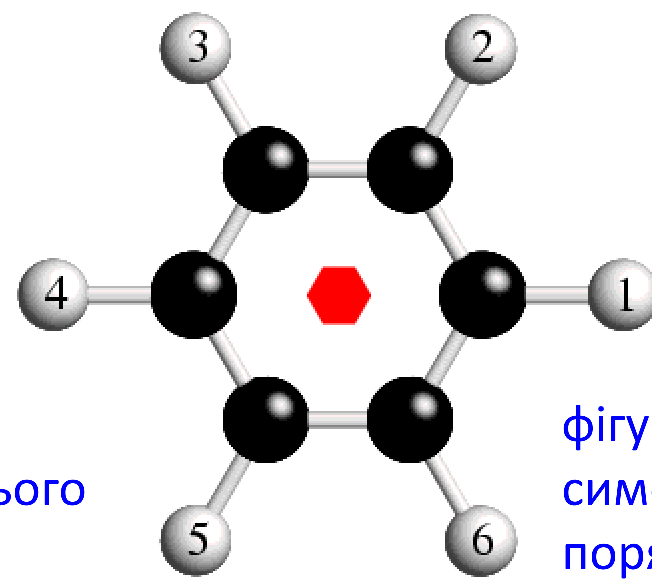
б

а - одна з площин симетрії у кристалі;
б - через пряму *MN* не проходить площина симетрії

Вісь симетрії

- **Віссю симетрії** називається пряма, при обертанні навколо якої фігура суміщається з собою.
- Осі симетрії характеризуються **порядком**: кількістю кутів, при повороті на які система суміщається з собою.
- Якщо найменший кут, при обертанні на який фігура суміщається з собою, дорівнює φ, то порядок осі дорівнює 2π/φ.
- В кристалах найбільший порядок осі симетрії дорівнює 6, найменший — 1 (будь-яка фігура суміщається з собою при обертанні навколо довільної осі на 360°).

фігура з віссю симетрії третього порядку



фігура з віссю симетрії шостого порядку

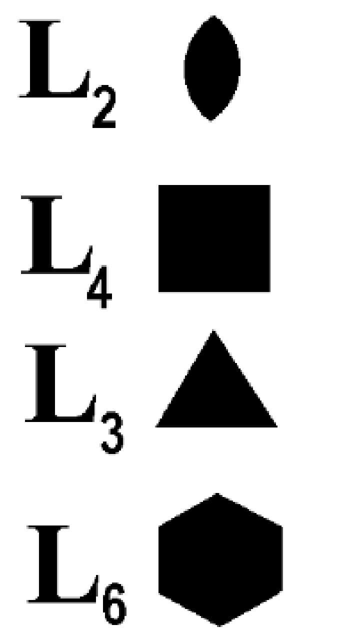
Вісь симетрії

Для осі симетрії з порядком 2 існує два кути повороту, при яких система суміщається з собою: 180° і 360°.

Загалом, для осі n-ного порядку відповідні кути повороту кратні 360°/n.

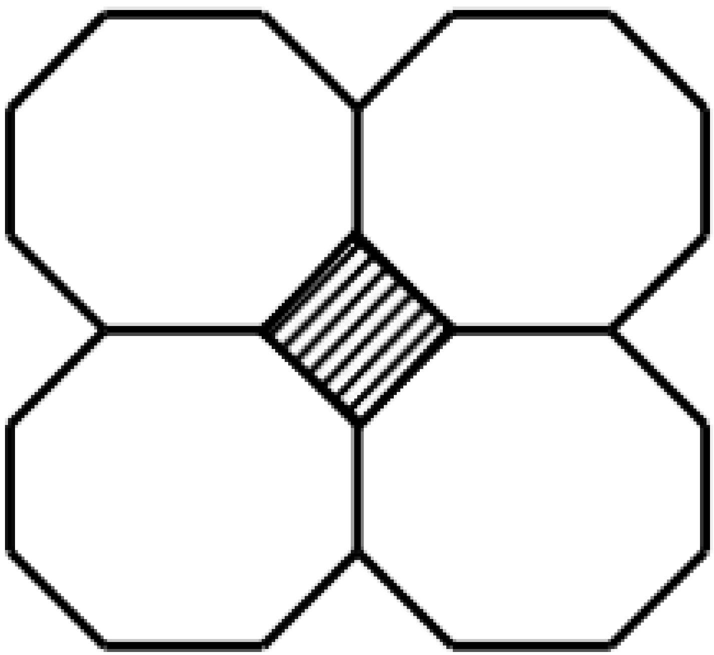
Так, для осі третього порядку кути дорівнюють 120°, 240°, 360°.

Зазвичай осі симетрії і відповідні їм групи позначаються L_n, де n — порядок осі.

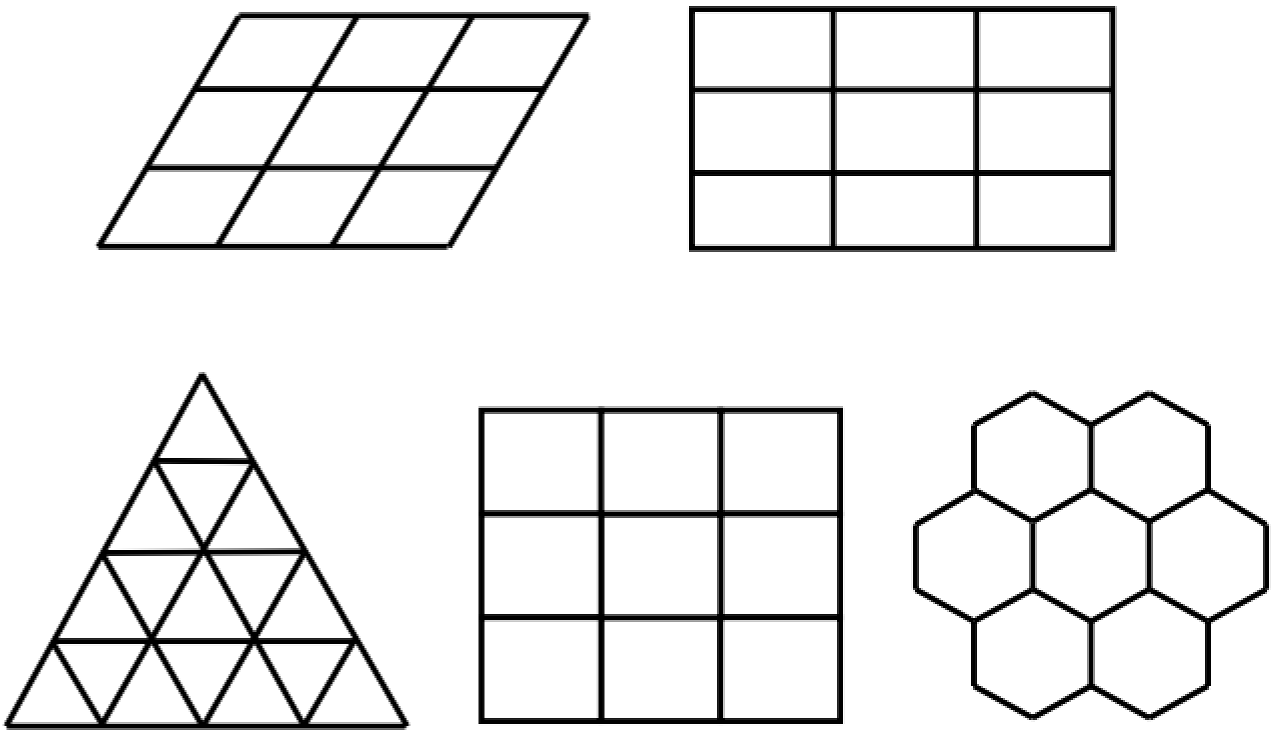


У кристалах можливе існування тільки осей 2, 3, 4 і 6 порядків

У кристалах відсутні осі симетрії п’ятого і вище шостого порядку, що обумовлено закономірною внутрішньою будовою кристалів. За наявності, припустимо, у кристалах осей симетрії п’ятого, сьомого або восьмого порядків, матеріальні частинки повинні розташовуватись у вершинах правильних п’яти-, семи- чи восьмикутників. За такого розташування вузлів пласка сітка не може бути побудована без проміжків

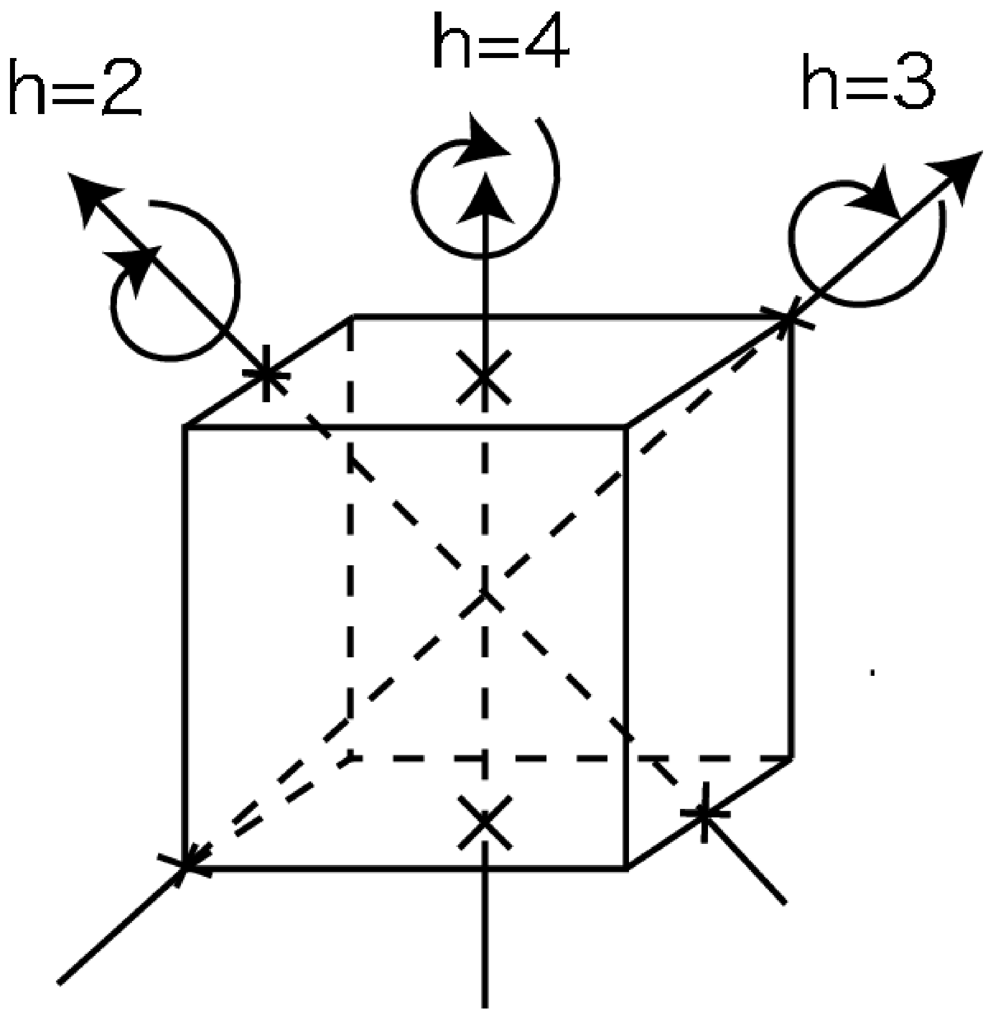


Наявність таких проміжків створювало б можливість для переміщення частинок, тобто призвело б до нестійкості структури, що не спостерігається у випадку правильних трикутників, шестикутників, прямокутників та квадратів:

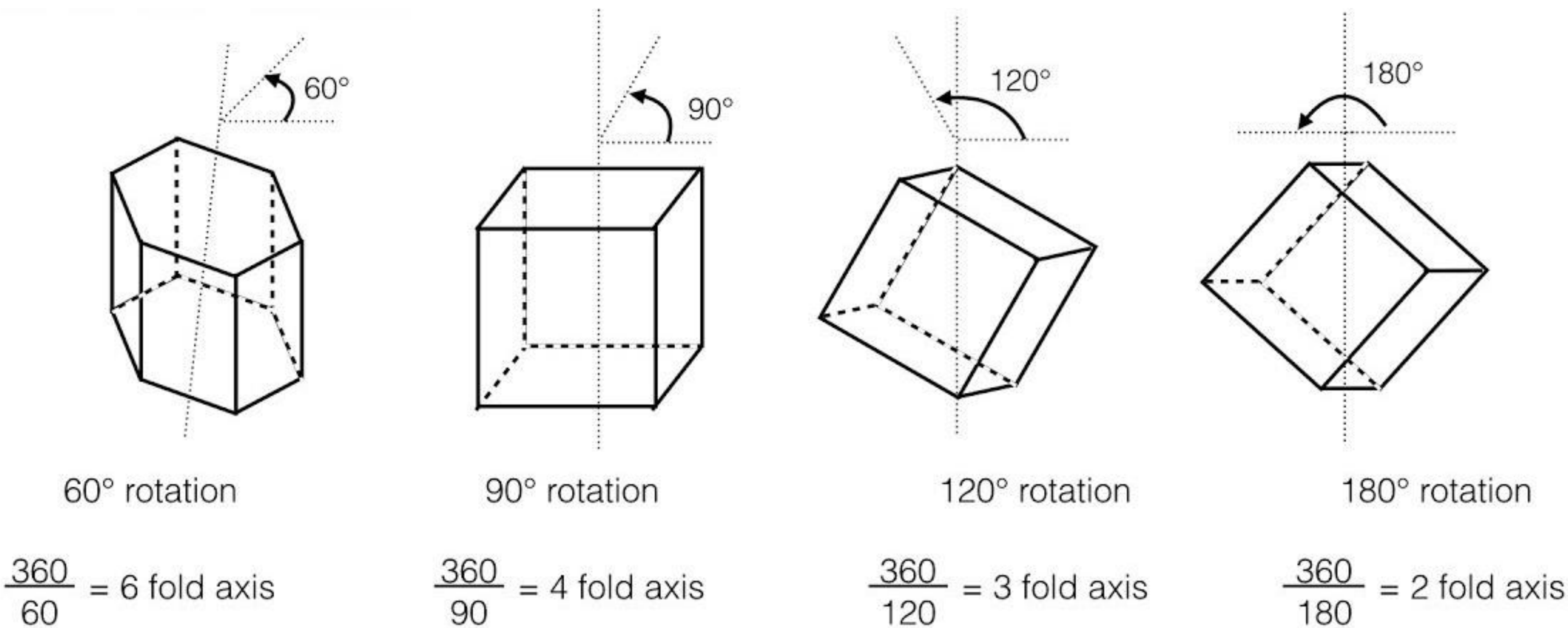


Пласкі сітки, складені з многокутників з осями симетрії 1, 2, 3, 4 і 6-го порядків

Осі симетрії можуть проходити через середини граней і ребер, а також через середину грані і ребра або вершину, через вершини.

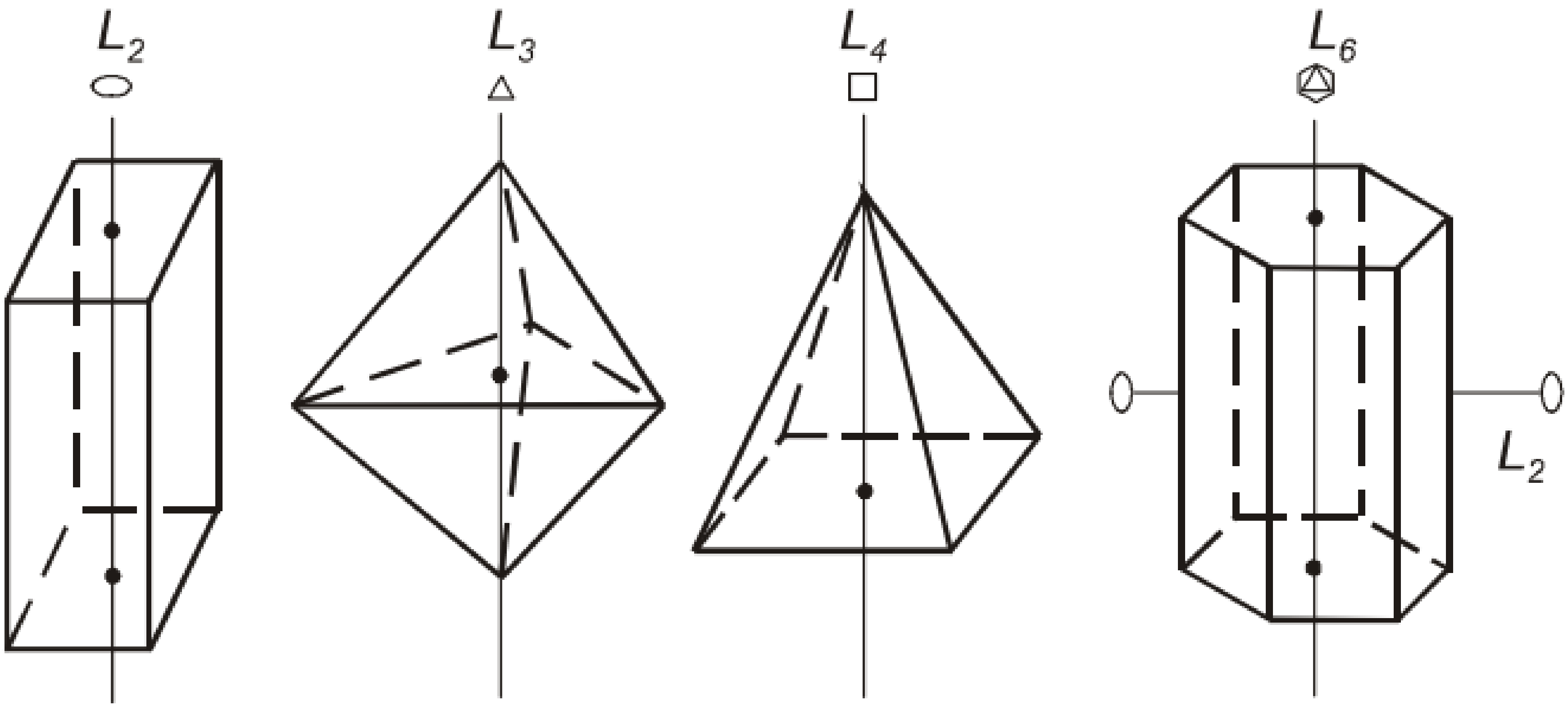


Вісь симетрії



L_6 L_4 L_3 L_2

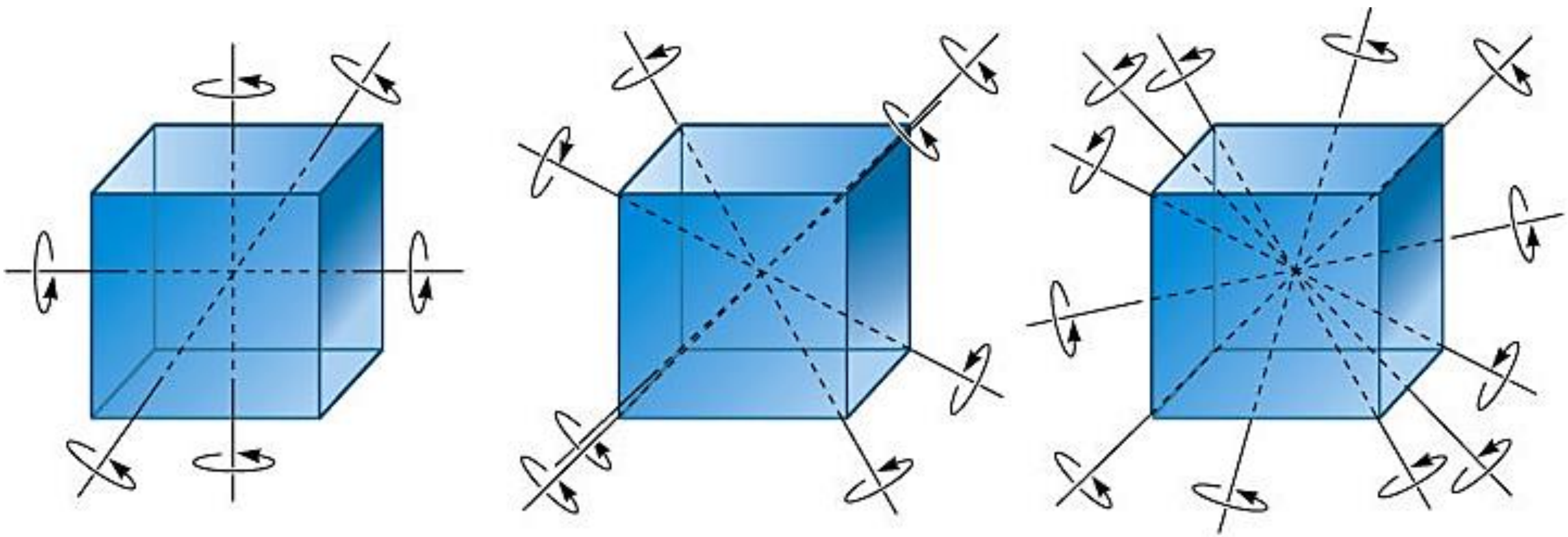
Можливі осі симетрії у кристалах та їх позначення при проектуванні



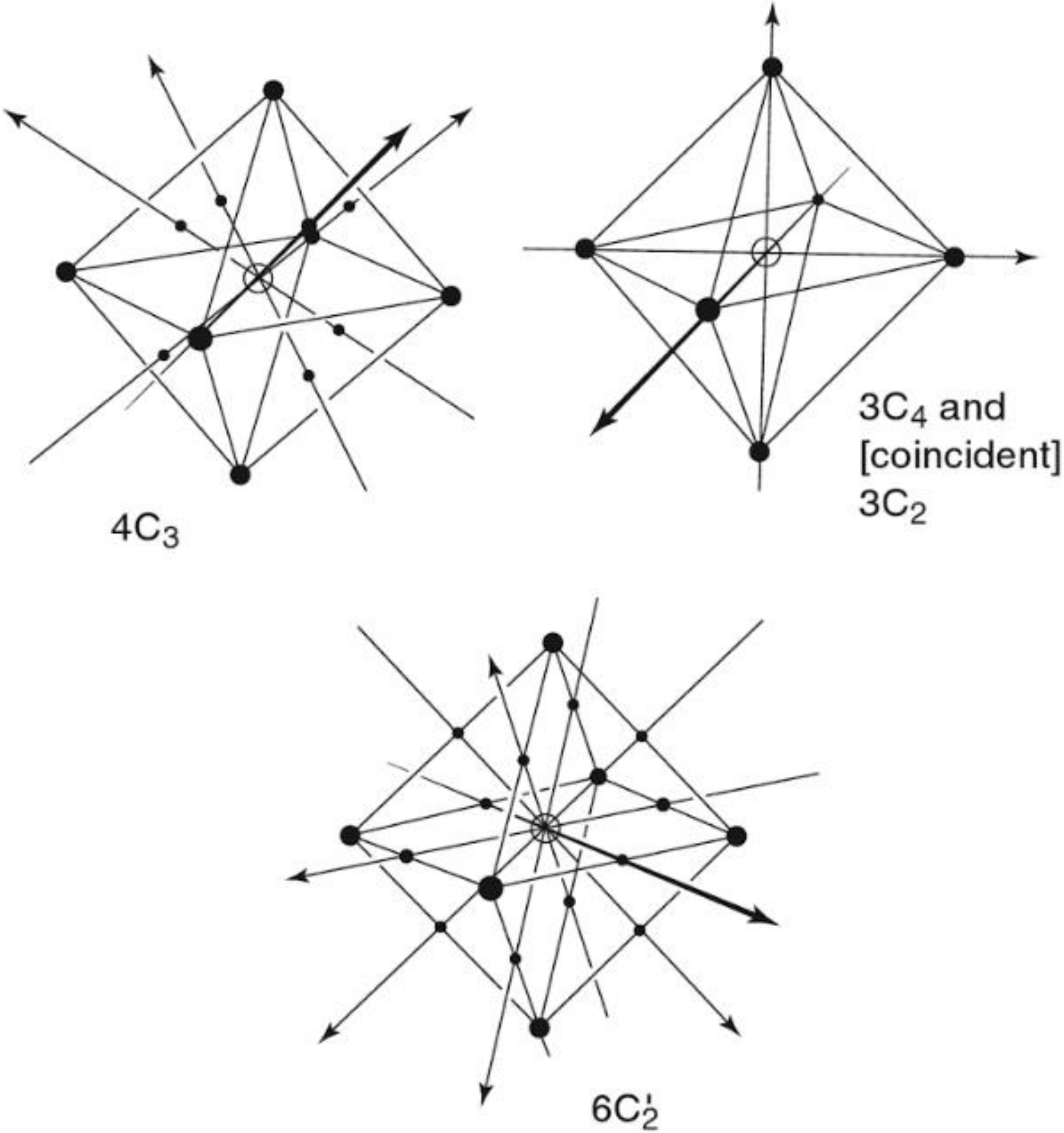
Таблиця 3.1 - Характеристики осей симетрії

Вісь симетрії	*Порядок осі, n*	α_{min}, *град.*
L_1	1	360
L_2	2	180
L_3	3	120
L_4	4	90
L_6	6	60

Осі симетрії в кубі

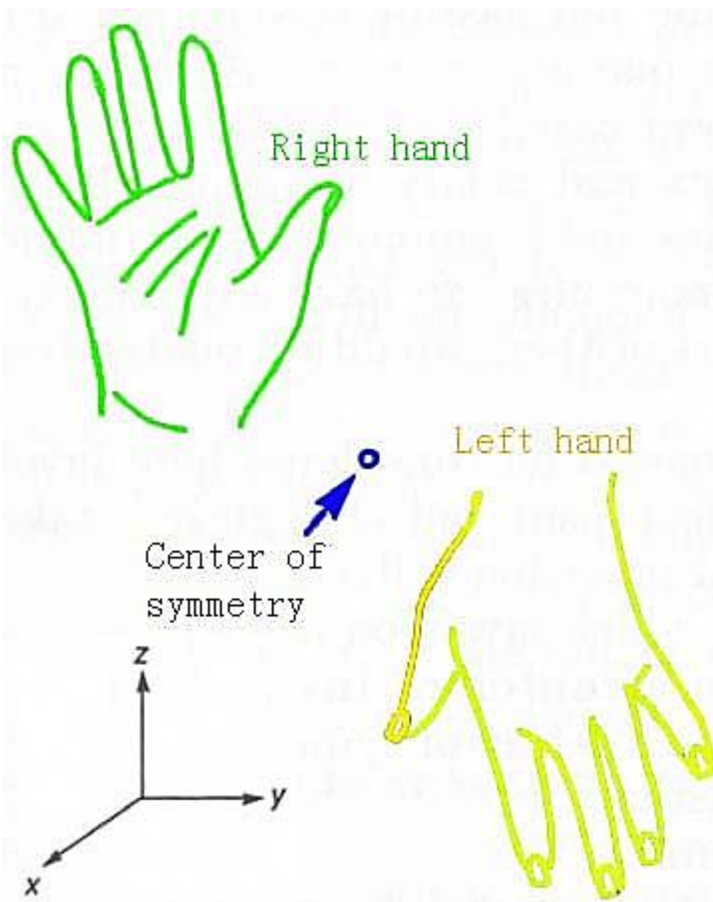


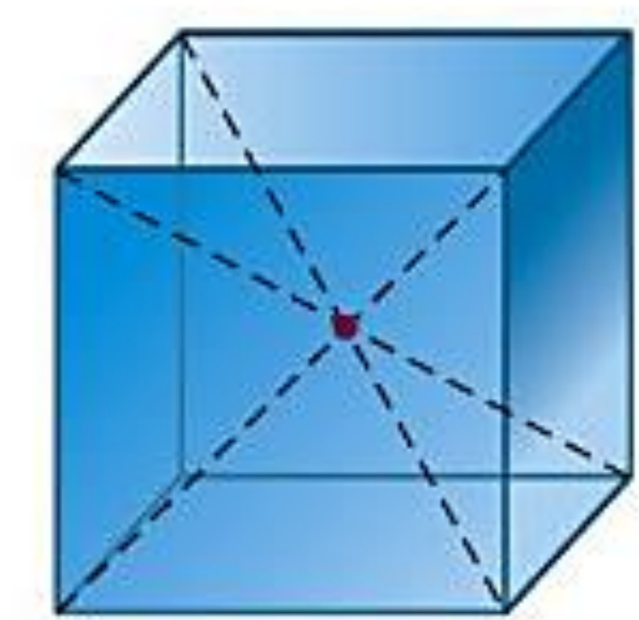
Three 4-fold axes | Four 3-fold axes | Six 2-fold axes



(a)

Центром симетрії називається особлива точка всередині фігури, яка має ту властивість, що будь-яка проведена через неї лінія по обидва боки від цієї точки зустрічає аналогічні точки фігури.

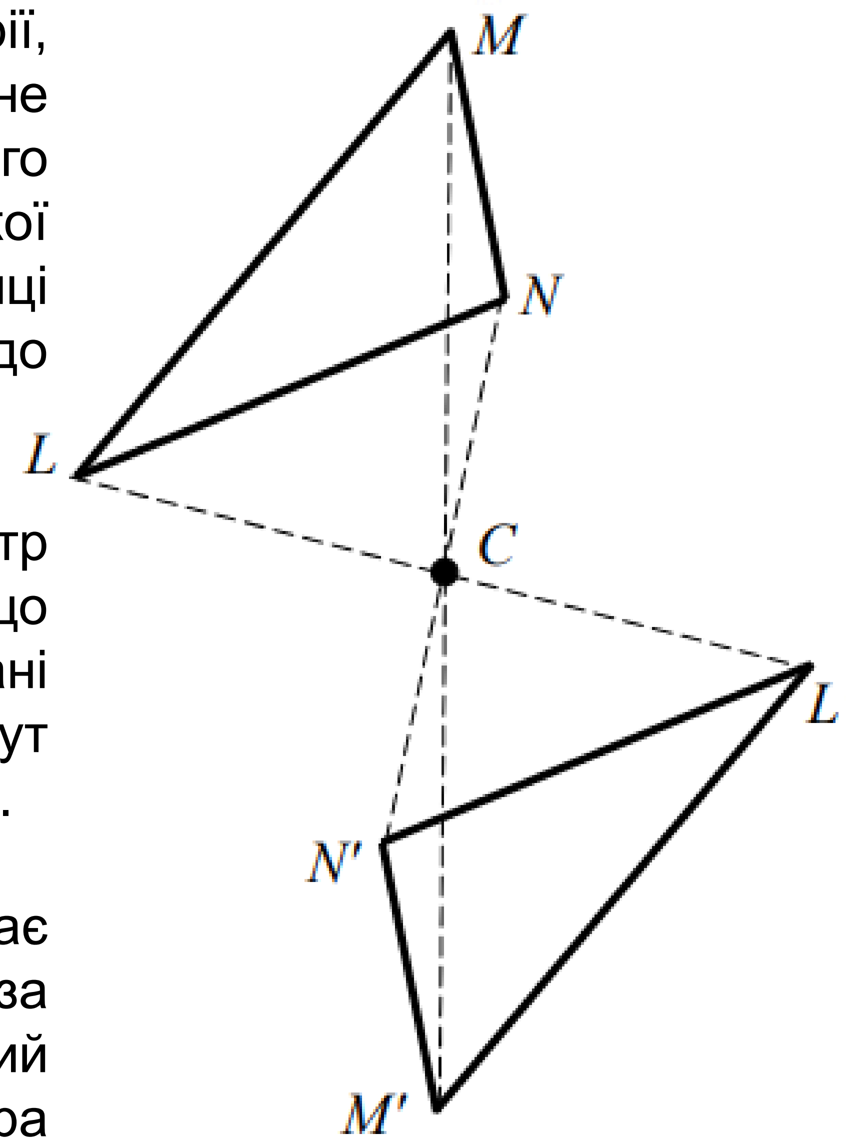




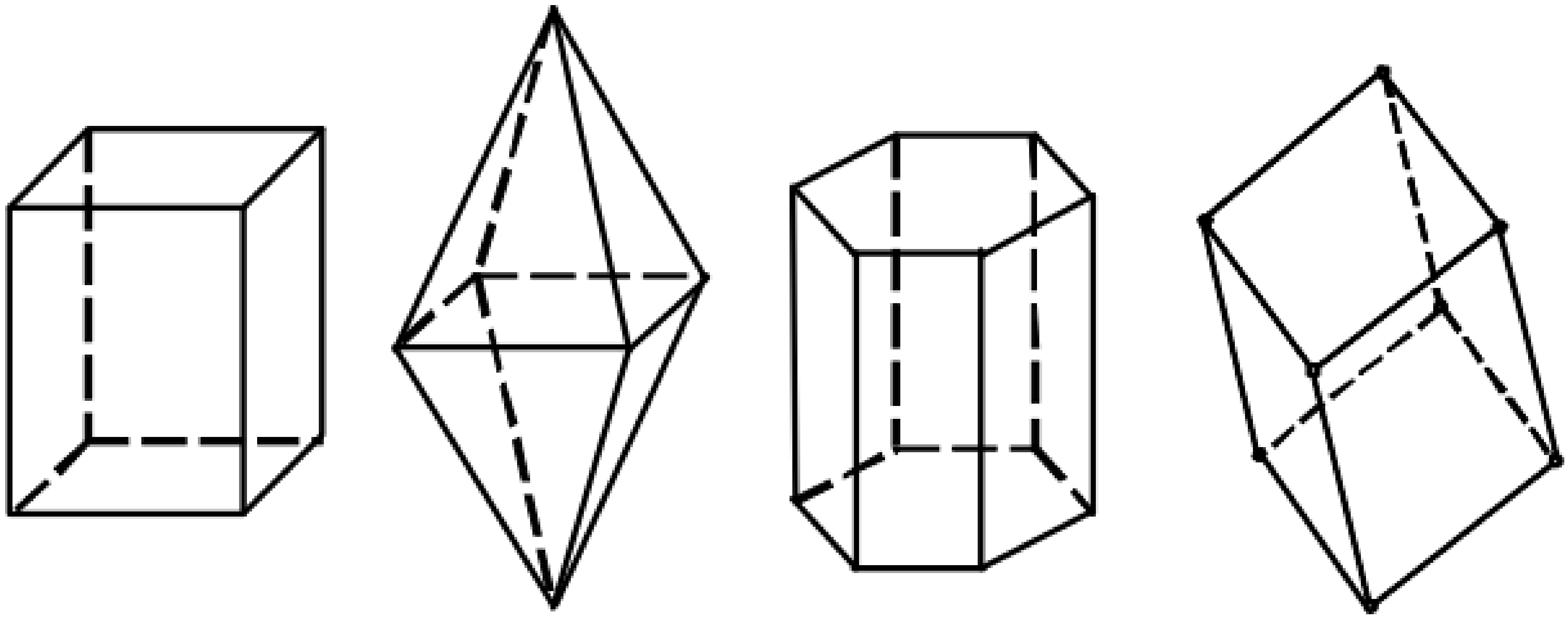
Центр симетрії це елемент симетрії, що дозволяє здійснити симетричне перетворення − відображення всього многогранника в цілому і будьякої його частини в центральній точці фігури, що приводить фігуру до самосуміщення (рис.).

Многогранники, які мають центр симетрії, характеризуються тим, що мають попарно паралельні грані розгорнуті одна відносно одної на кут 180 º та рівні за формою і розміром.

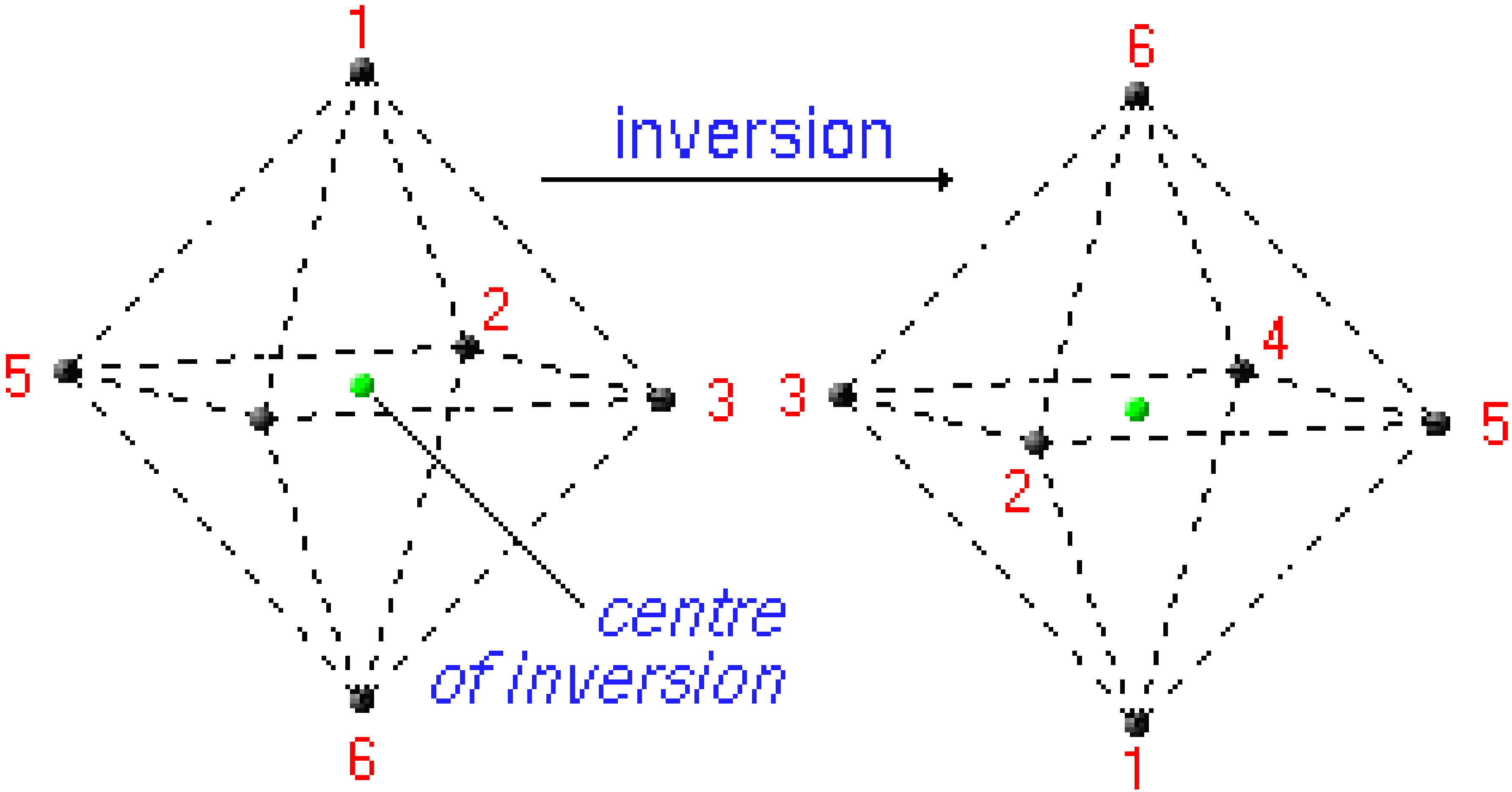
Якщо хоча б одна грань не має відповідної паралельної рівної за формою та розміром грані, то такий многогранник не має центра симетрії.

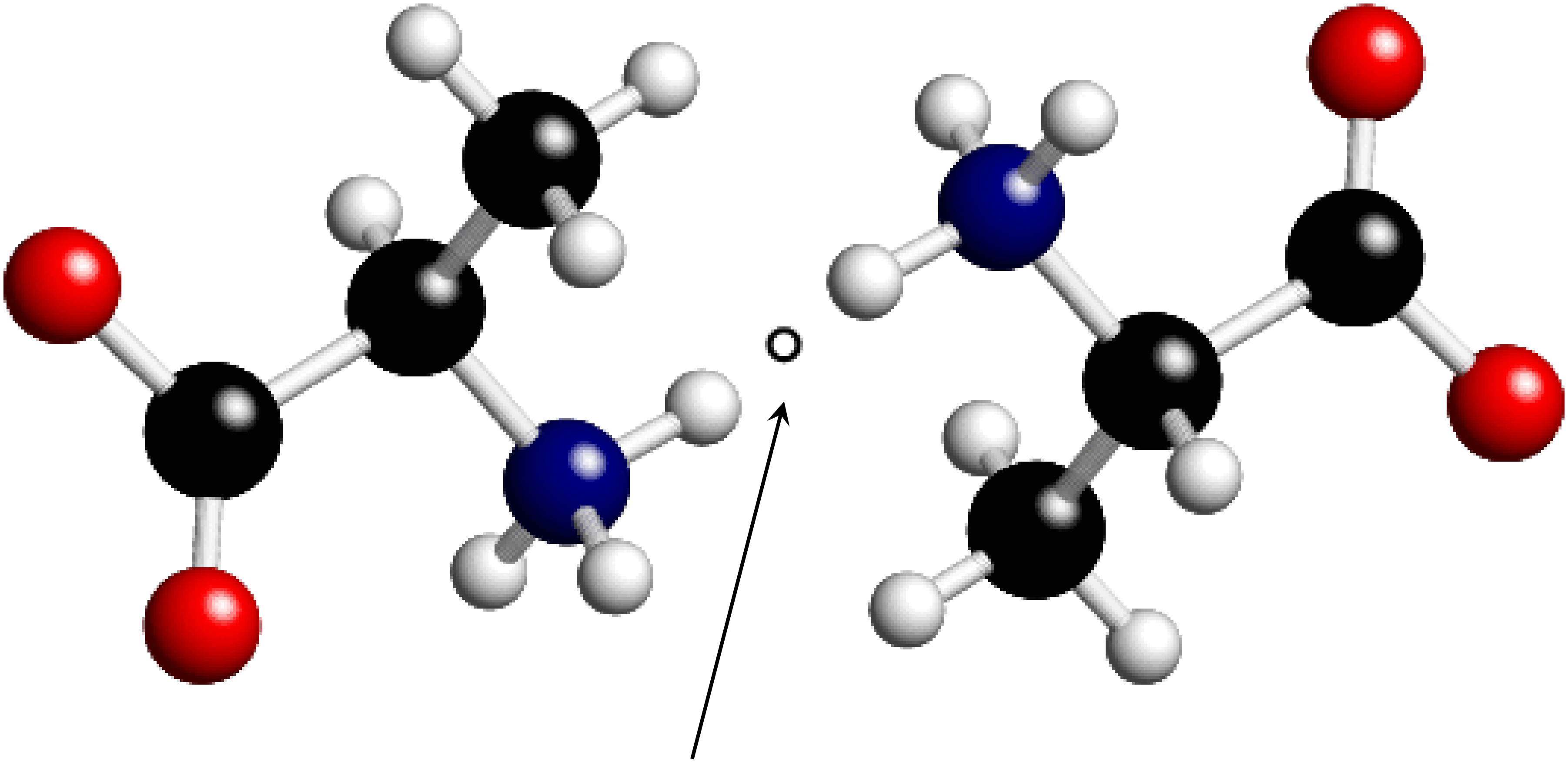


Приклади многогранників, що мають центр симетрії



Щоб переконатися в наявності центра інверсії, потрібно покласти кристал чи його модель на стіл; якщо за будь-яких положень кристала зверху знаходиться грань рівна і паралельна (антипаралельна), то центр симетрії присутній. Якщо ж хоча б для однієї грані не знайдено відповідної їй грань, то центр симетрії відсутній.


1
2
5
3
6
inversion
centre
of inversion
6
4
3
5
2
1



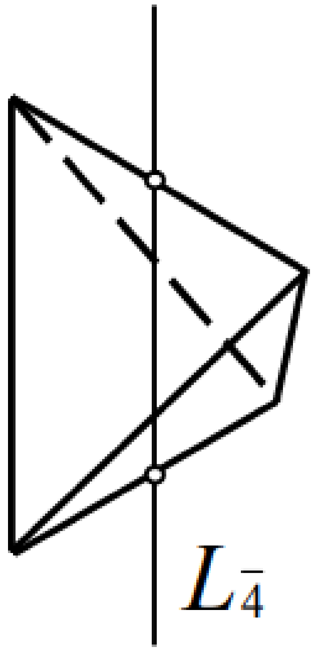
Центр інверсії

D-аланін **L-аланін**

Інверсійні осі симетрії

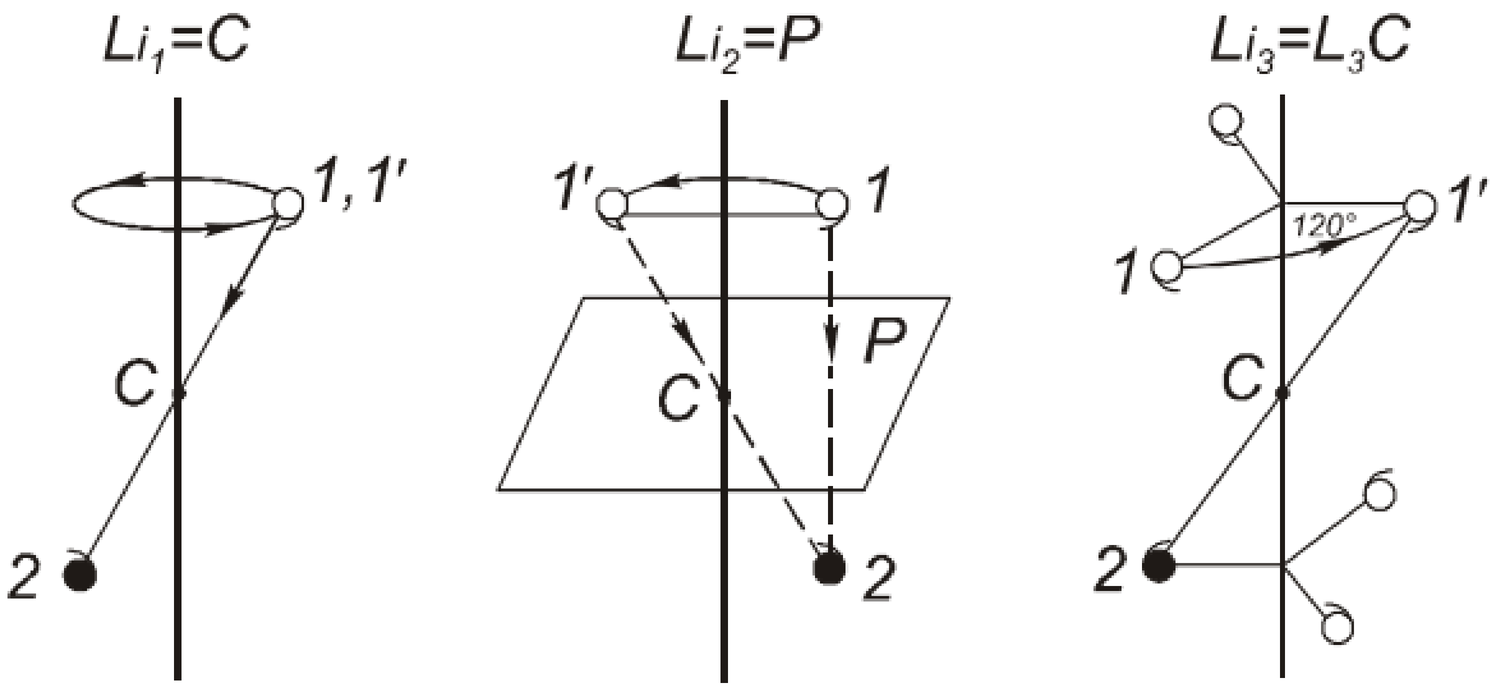
Інверсійні осі симетрії відносяться до складних елементів симетрії, для яких симетричні перетворення виконуються двома послідовними операціями.

Інверсійною віссю симетрії називається така пряма, обертання навколо якої на деякий кут α з наступним відображенням в центральній точці фігури – центрі інверсії, як в центрі симетрії, призводить до самосуміщення фігури.



Інверсійна вісь симетрії L_{4i} порядку в тетрагональному тетраедрі

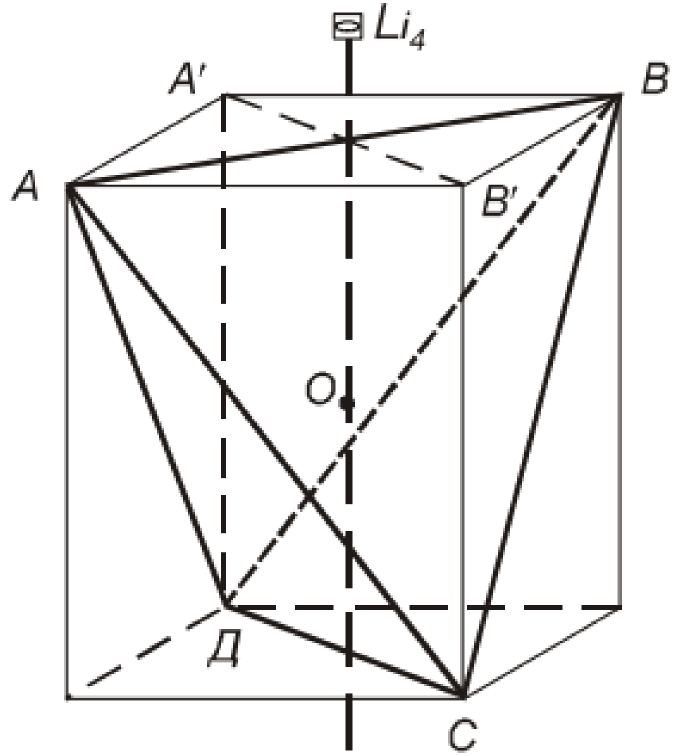
Перехід точки, позначеної цифрою 1, у точку (цифра 2) внаслідок дії відповідних елементів симетрії



а б в

Самостійними елементами симетрії є тільки інверсійні осі четвертого та шостого порядків ($L_{i4} \rightarrow L_2$, $L_{i6}=L_3+P$ ($P \perp L_3$)) тому що їх порядок вищий, ніж порядок поворотних осей L_2 та L_3, з якими вони збігаються.

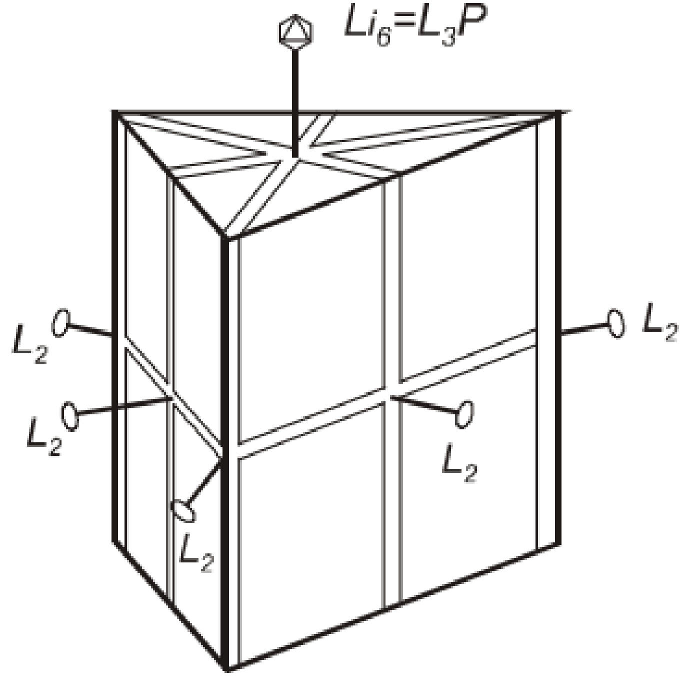
На рис. у тетрагональному тетраедрі існує інверсійна вісь четвертого порядку. Для наочності він вписаний в тетрагональну призму, основою якої є квадрат. Ребро АВ при повороті на 90° навколо осі L_{i4} дістане положення А'В'. При відображенні в уявній точці О точки А і В зустрінуть відповідні симетричні точки С та Д, а ребро А'В' буде відображено у нижнє ребро СД.



Інверсійна вісь четвертого порядку в тетрагональному тетраедрі

Виявлення інверсійних осей проводиться за таким порядком:

Кристал необхідно розташувати так, щоб досліджувана вісь була б вертикальною. Замітити у верхній половині кристала характерну грань або ребро. Уявно зробити розріз по горизонтальній площині і повернути тільки верхню половину кристала. Якщо після такого повороту на 60 або 90° верхня частина кристала при відображенні в уявній точці збігається з нижньою, то вісь є дійсно інверсійною. Аналіз симетрії кристала, зображеного на рис. 3.5.



Тригональна призма із симетрією $L_{i6}3L_23P$

Формула елементів симетрії

Елементи симетрії у формулі записуються у певній послідовності:

- ✓ Починається формула з осей симетрії вищого порядку, або таких, що обираються за координатні осі, наприклад, для кристалів кубічної сингонії, що не мають осей четвертого порядку, а мають осі другого порядку. Саме ці осі в формулі симетрії ставлять перед осями третього порядку, бо вони обираються за осі координат.
- ✓ Потім вказують осі нижчих порядків. Коефіцієнт, що стоїть перед позначенням осі певного порядку відповідає кількості таких осей в кристалічному многограннику.
- ✓ Після осей симетрії в формулі елементів симетрії записують площини симетрії. Коефіцієнт перед позначенням площини симетрії вказує на кількість таких площин.
- ✓ Закінчується формула записом символу центра симетрії, якщо він є у кристалічному многограннику. Якщо центра симетрії немає, то його у формулу не записують.

Формула елементів симетрії

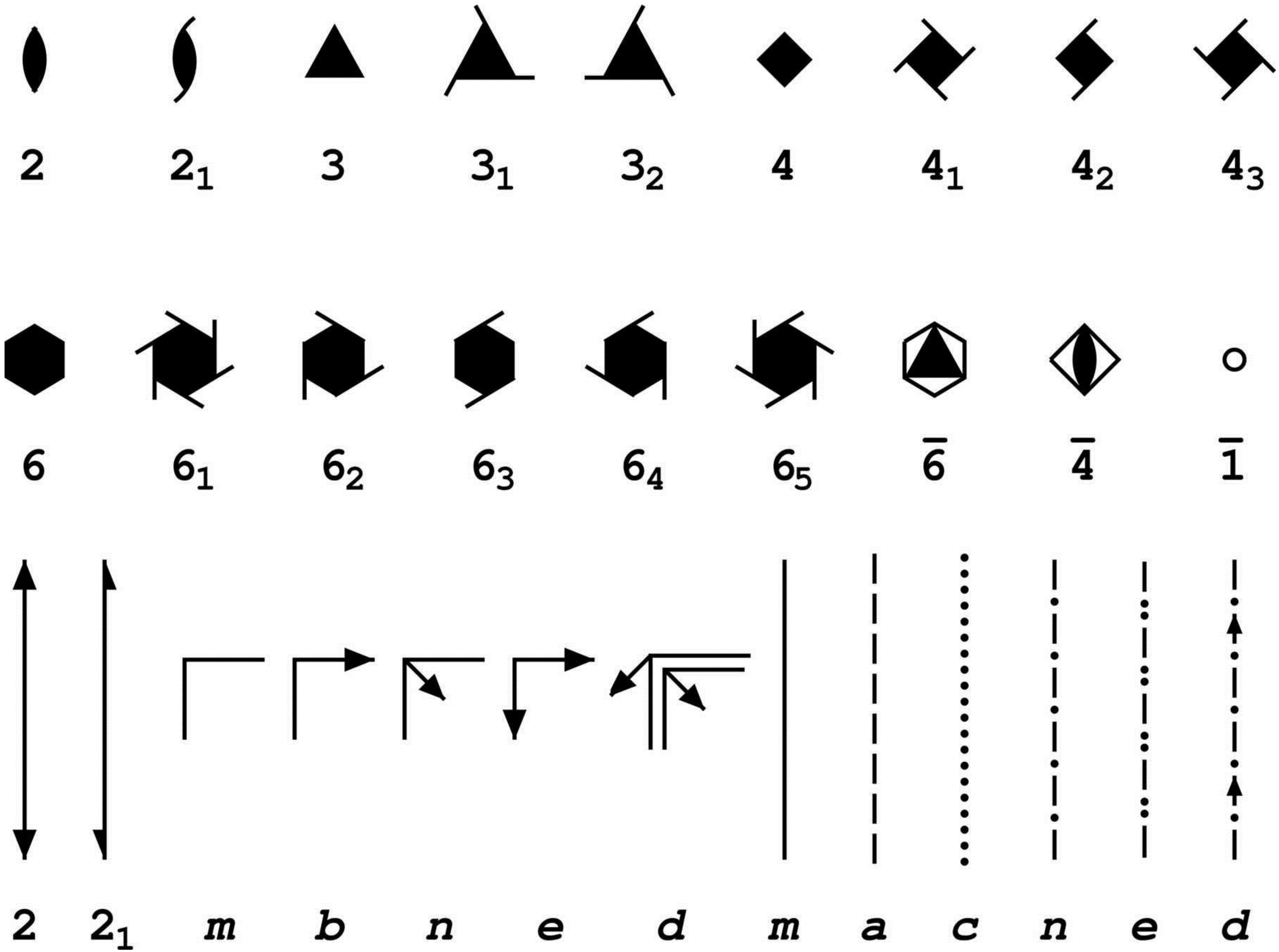
Наприклад, у кристалічному многограннику знайдено 1 вісь симетрії шостого порядку, 7 площин симетрії, центр симетрії та 6 осей симетрії другого порядку. Формула елементів симетрії тоді буде мати вигляд:

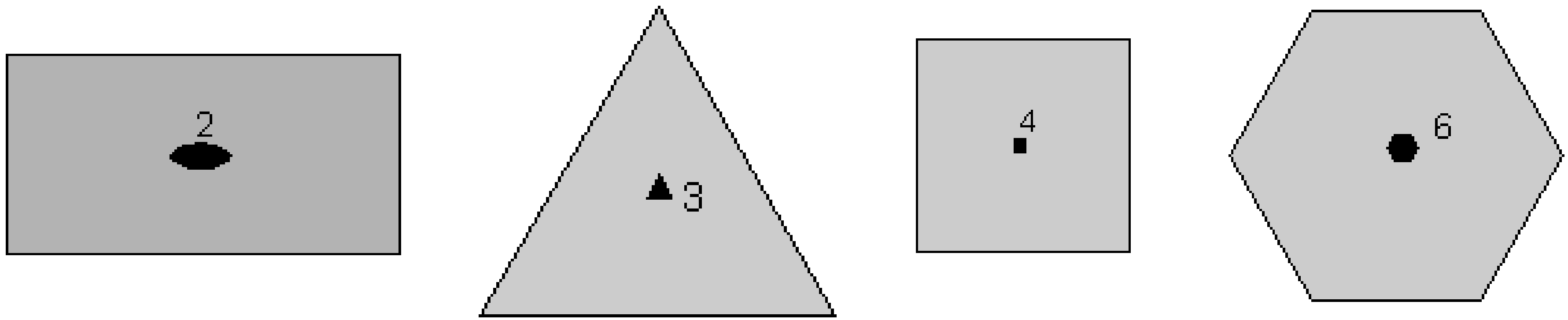
$$L_6 6L_2 7PC$$

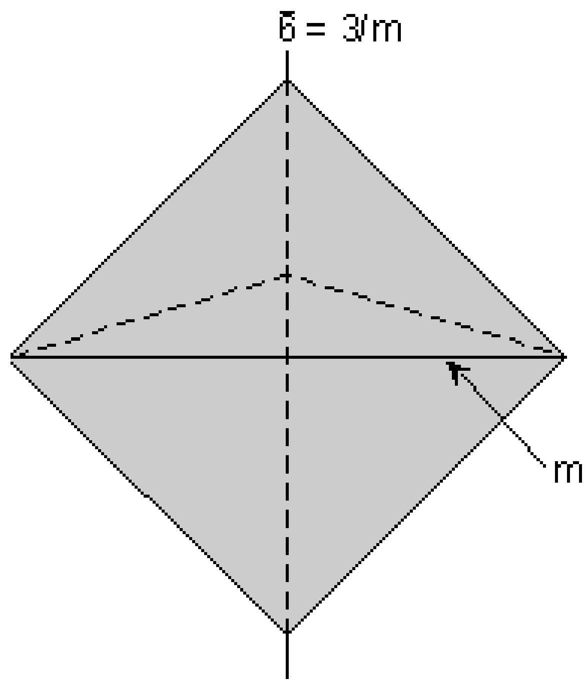
Або у кристалічному многограннику знайдено 4 осі третього порядку, 6 осей другого порядку, центр симетрії, 3 осі симетрії четвертого порядку і 9 площин симетрії, то формула буде мати вигляд:

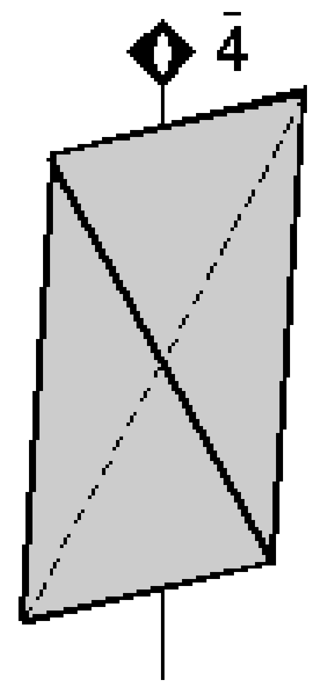
$$3L_4 4L_3 6L_2 9PC$$

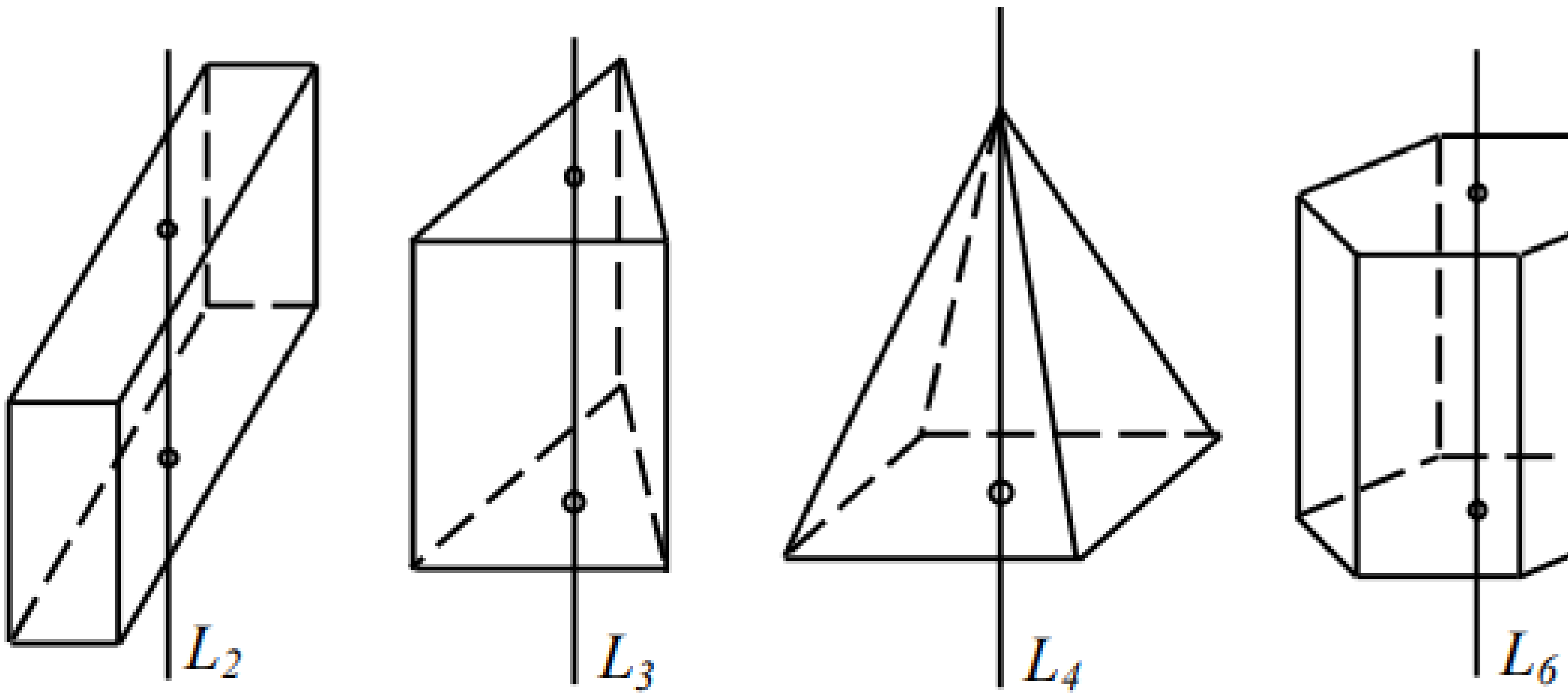
Позначення елементів симетрії




2
3
4
6


$\bar{6}$ = 3/m
m


$\bar{4}$

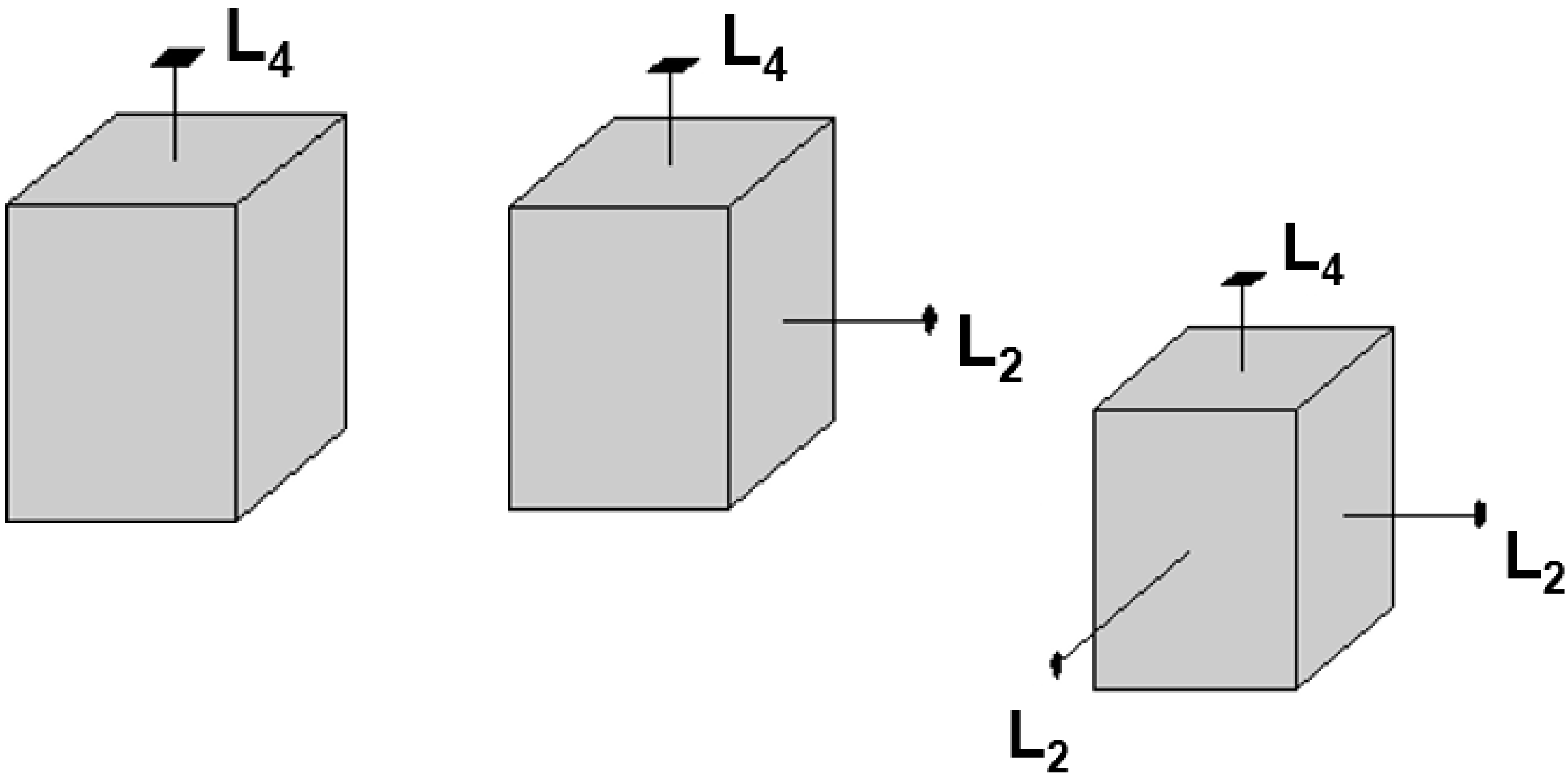


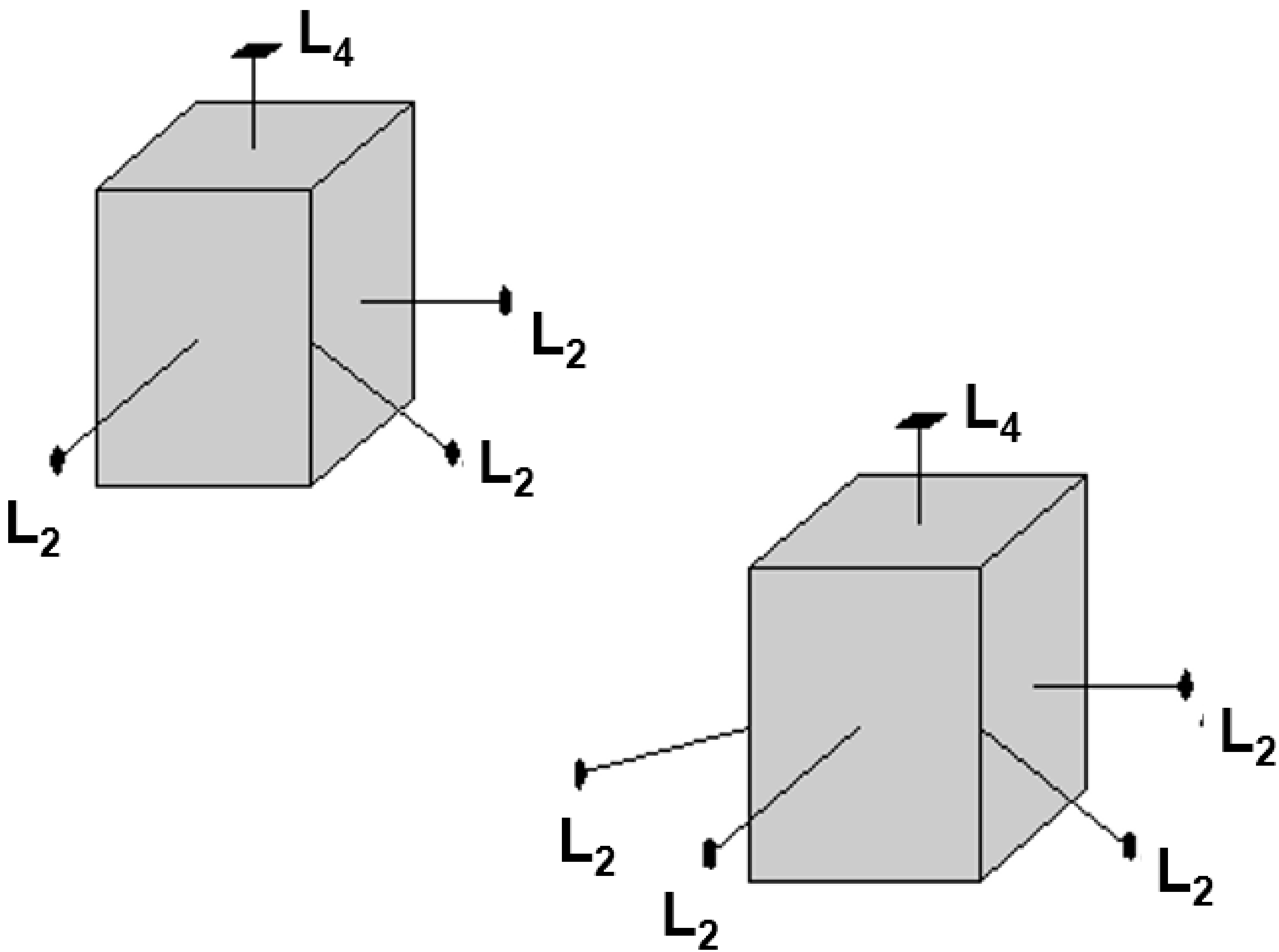
Многогранники з поворотними осями симетрії різного порядку

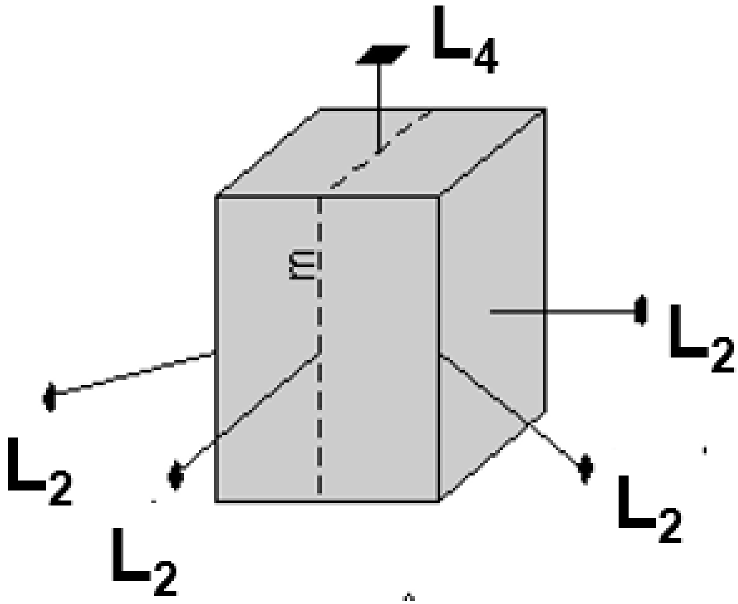
Приклад:

кристал має сторони прямокутної форми з квадратною формою зверху та знизу.

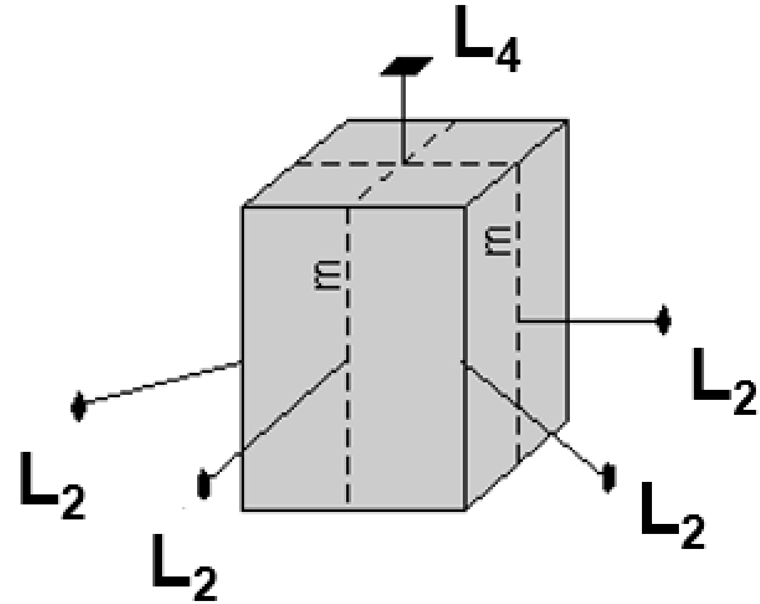
Верх квадратної форми вказує на те, що перпендикулярно грані квадратної форми повинна бути вісь симетрії 4 порядку.



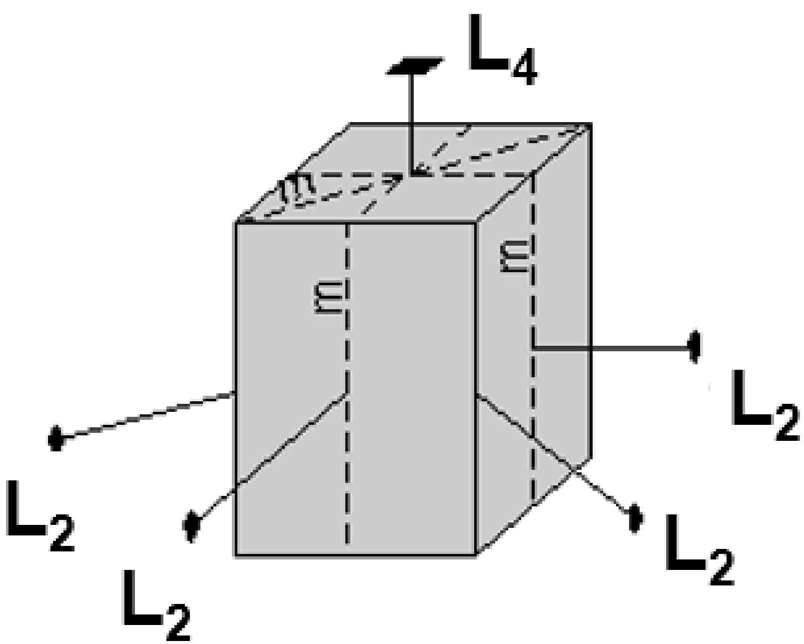

L_4
L_2
L_2
L_2
L_4
L_2
L_2
L_2
L_2



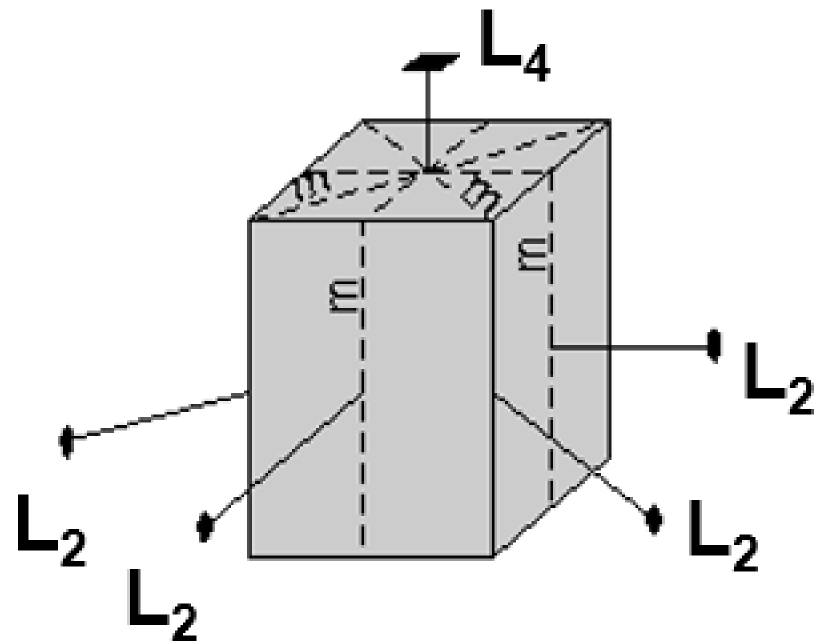
L_4
m
L_2
L_2
L_2
L_2



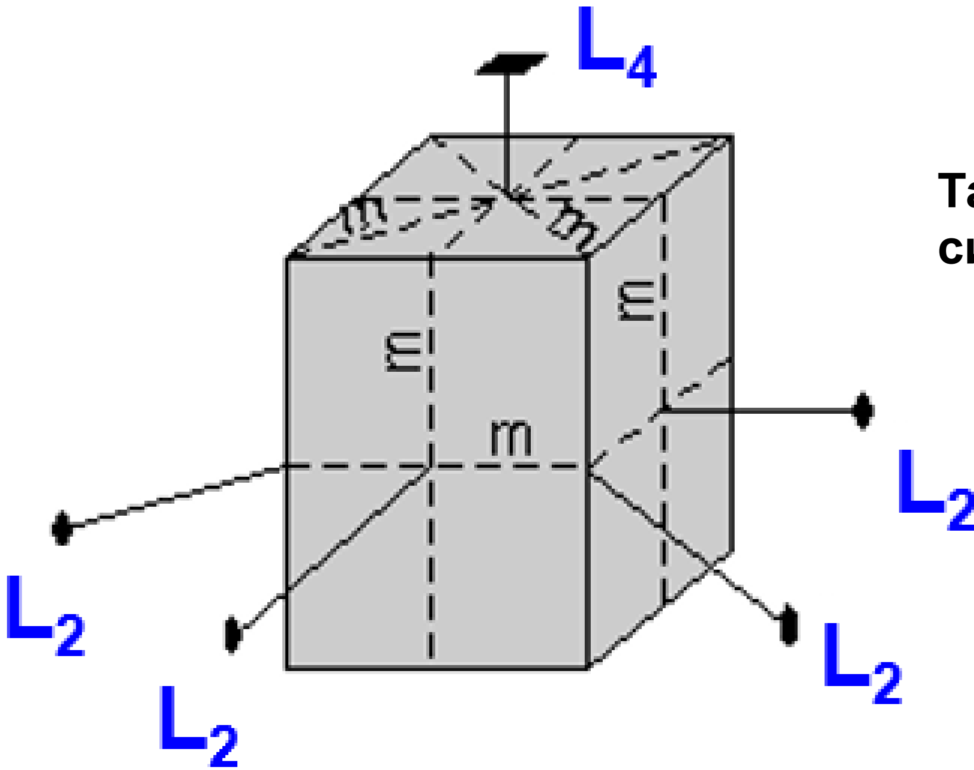
L_4
m
m
L_2
L_2
L_2
L_2



L_4
m
m
m
L_2
L_2
L_2
L_2



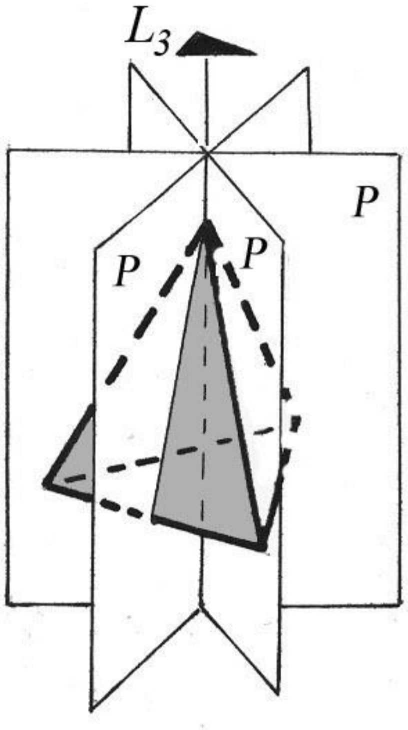
L_4
m
m
m
m
L_2
L_2
L_2
L_2



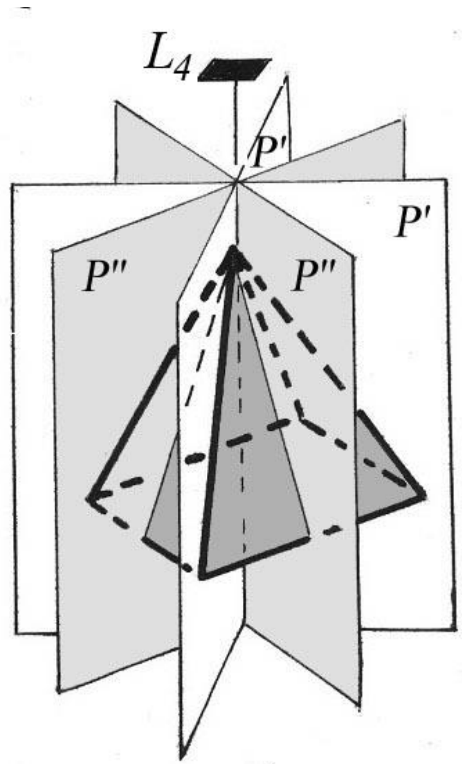
Таким чином, формула елементів симетрії цього кристалу:

$$iL_4 4L_2 5m$$

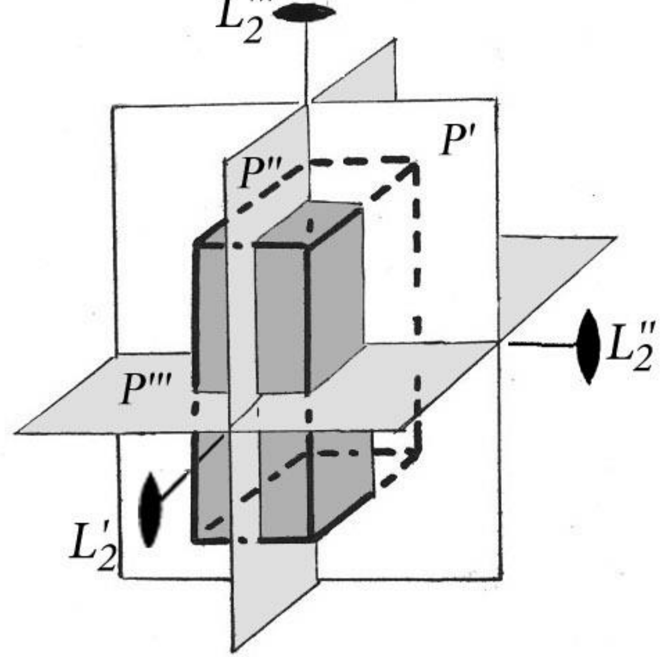
1 вісь симетрії 4 порядку (А4)
4 осі 2-порядку (А2), 2 проходять через грані і 2 проходять через ребра.
5 площин симетрії (m), 2 проходять через грані , 2 проходять через ребра і одна площина горизонтальна через центр.
центр симетрії (і).



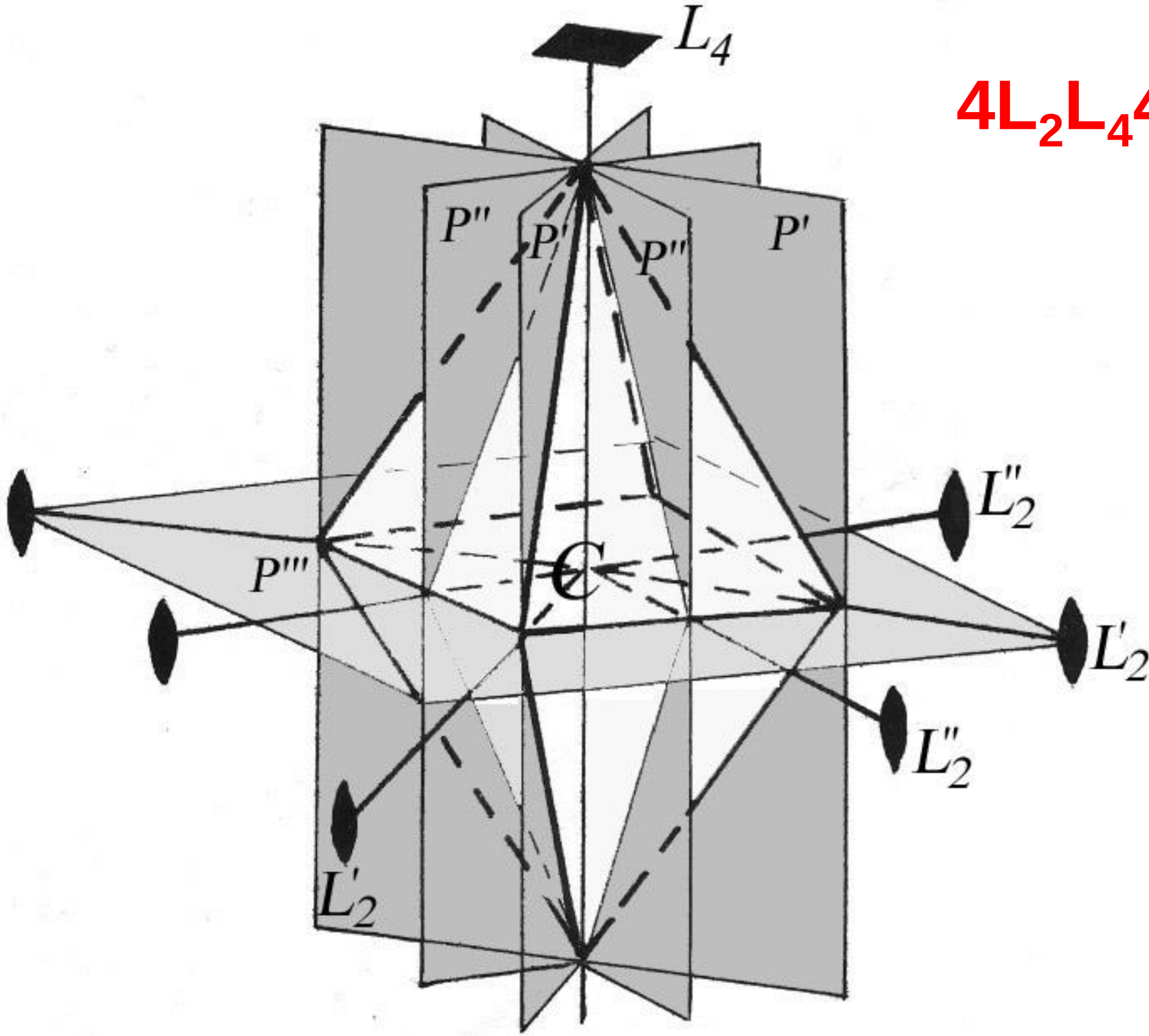
$L_3 3P$



$L_4 4P$



$3L_2 3PC$



$4L_2L_44PC$