МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

«СОГЛАСОВАНО»
Руководитель ОП
_____________ Крайнова Г. С.
(подпись)
« 19 » сентября 2018 г.

«УТВЕРЖДАЮ»
Заведующий кафедрой
физики низкоразмерных структур
_____________ Саранин А. А.
(подпись)
« 19 сентября » 2018 г.

Дальневосточный федеральный университет
Школа естественных наук
Для документов

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Кристаллография и кристаллофизика
Направление подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника

Форма подготовки очная

курс 3 семестр 6
лекции 36 час.
практические занятия не предусмотрены
лабораторные работы - 36 час.
в том числе с использованием МАО лек. _/л/р.18 час.
всего часов аудиторной нагрузки 72 час.
в том числе с использованием МАО 18 час.
самостоятельная работа 72 час.
в том числе на подготовку к экзамену
контрольные работы (количество) - 3
курсовая работа / курсовой проект не предусмотрены
зачет 6 семестр
экзамен не предусмотрен

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта, самостоятельно устанавливаемого ДВФУ, утвержденного приказом ректора от 18.02.2016 № 12-13-235 .

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры физики низкоразмерных структур, протокол № 1 от «19» сентября 2018 г.

Заведующий кафедрой Саранин А.А..

Составитель: к.ф.-м.н., профессор Крайнова Г. С.

Оборотная сторона титульного листа РПУД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от «_____» _________________ 20___ г. № ______

Заведующий кафедрой ________________________ Саранин А. А.
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от «_____» _________________ 20___ г. № ______

Заведующий кафедрой ________________________ Саранин А. А.
(подпись) (И.О. Фамилия)

ABSTRACT

Bachelor's degree in 11.03.04 Electronics and nanoelectronics

Course title: Crystallography and crystal physics

Elective courses of Block, 4 credits

Instructor: G. S. Kraynova, Cand. of Phys. and math., Docent, Professor Department of physics of low-dimensional structures. School of Natural Sciences of Far Eastern Federal University.

Learning outcomes:

GPC – 7 - ability to take into account modern trends in the development of electronics, measuring and computing equipment, information technologies in their professional activities;

PC-1 - the ability to build simple physical and mathematical models of devices, schemes, devices, and installations of electronics and nanoelectronics for various applications, and use standard software tools of their computer simulation.

Course description:

The overall complexity of the discipline is 4 WE (144 hours). The curriculum provides lectures (36 hours), laboratory work (36 hours), independent work of the student (72 hours). The discipline "Crystallography and crystal physics" is included in the variable part of the cycle of disciplines of the educational program, it is implemented on the 3rd year, in the 6th semester.

The course presented includes principles, laws, and laws for constructing solids. Based on a huge base of experimental data and theoretical concepts of the structure of solids, the fundamentals and tasks of creating physical and technological processes for obtaining new materials are revealed.

A special role is played by the question of obtaining single-crystal materials with given properties, which is impossible without knowledge of their atomic ordering. Currently, apart from the above mentioned materials, the use of so-called quasicrystals with properties and symmetry different from the traditional one is expanding. Therefore, there is a need for specialists who would be able to purposefully grow crystalline (mono-, poly-, quasi-) objects with the required properties; explore, count and apply these crystals. This requires active mastery of the mathematical apparatus of crystallography (group theory) and crystal physics (vector, tensor calculus).

Discipline is aimed at the formation of graduate professional competencies.

The purpose of studying the discipline is to form students' knowledge of the structure of crystalline, quasicrystalline and amorphous bodies at the atomic level, the connection of the structure of bodies with their physical properties.

Tasks:

- establishing links between the properties of individual atoms and molecules and the properties found when atoms or molecules join in association in the form of regularly ordered systems — crystals;
- an explanation of the properties of crystals and amorphous solids, based on simple physical models;
- a systematic description of the laws of macroscopic properties of crystals;
- presentation of the main ideas about the effect of symmetry on the macroscopic properties of crystals;
- a description of the anisotropy of the electrical, elastic, optical, and magnetic properties, the establishment of an explicit form of the physical properties in different syngonies, the determination of the number of independent parameters of the material tensors.

Main course literature:

1. R. P. Dikareva. Introduction to crystallography / / M: Science, 2007. - 240 p. http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:269126&theme=FEFU

2. Yu. K. Egorov-Tismenko . Crystallography and crystal chemistry : a textbook for high schools / under the editorship of V. S. Urusov]. M: Moscow State University, 2014. - 587 p.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:734049&theme=FEFU

3. Belov N. P., Prokoptseva O. K., A. D. Yaskov. The Basics of crystallography and kristallofiziki. Part I. introduction to the theory of crystal symmetry: a Training manual. – S-Pb: SPbSU ITMO, 2009.- 43 p.
http://window.edu.ru/resource/335/63335

4. Trushin V. N., Andreev P. V., Faddeev M. A. x-ray phase analysis of polycrystalline materials. Electronic educational and methodical manual. - Nizhny Novgorod: Nizhny Novgorod state University, 2012.-89 p.
http://window.edu.ru/resource/210/79

5. E. E. Lord, A. L. Mackay, S. Ranganathan. New geometry for new materials / / Per. with ang. ed. V. ya. Shevchenko, V. E. Dmitrienko, M: Fizmatlit, 2010, 260 p.
https://e.lanbook.com/book/48204

Form of final knowledge control: credit.

АННОТАЦИЯ

Учебная дисциплина «Кристаллография и кристаллофизика» разработана для студентов 3 курса бакалавриата по направлению подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника в соответствии с требованиями образовательного стандарта, самостоятельно устанавливаемого ДВФУ.

Общая трудоемкость освоения дисциплины составляет 4 ЗЕ (144 часа). Учебным планом предусмотрены лекции (36 часов), лабораторные работы (36 часов), самостоятельная работа студента (72 часа). Дисциплина «Кристаллография и кристаллофизика» входит в вариативную часть цикла дисциплин образовательной программы, реализуется на 3 курсе, в 6 семестре.

Представляемый курс включает в себя принципы, закономерности, законы построения твердых тел. Основываясь на огромной базе экспериментальных данных и теоретических представлений строения твердых тел, раскрываются основы, задачи создания физико-технологических процессов получения новых материалов. Особую роль играет вопрос получения монокристаллических материалов с заданными свойствами, что невозможно без знания их атомного упорядочения. В настоящее время кроме выше отмеченных материалов ширится использование так называемых квазикристаллов со свойствами и симметрией, отличными от традиционной. Поэтому существует потребность в специалистах, которые умели бы целенаправленно выращивать кристаллические (моно-, поли-, квази-) объекты с требуемыми свойствами; исследовать, рассчитывать и применять эти кристаллы. Для этого требуется активное владение математическим аппаратом кристаллографии (теорией групп) и кристаллофизики (векторное, тензорное исчисление).

Дисциплина направлена на формирование общепрофессиональных и профессиональных компетенций выпускника.

Цель изучения дисциплины - формирование у студентов знаний по строению кристаллических, квазикристаллических и аморфных тел на атомном уровне, связи структуры тел с их физическими свойствами.

Задачи:

- установление связей между свойствами индивидуальных атомов и молекул и свойствами, обнаруживаемыми при объединении атомов или молекул в ассоциации в виде регулярно упорядоченных систем – кристаллов;
- объяснение свойств кристаллов и аморфных твердых тел, опираясь на простые физические модели;
- систематическое описание закономерностей макроскопических свойств кристаллов;
- изложение основных представлений о влиянии симметрии на макроскопические свойства кристаллов;
- описание анизотропии электрических, упругих, оптических и магнитных свойств, установление явного вида физических свойств в различных сингониях, определение числа независимых параметров материальных тензоров.

Для успешного изучения дисциплины «Кристаллография и кристаллофизика» у обучающихся должны быть сформированы следующие общепрофессиональные и профессиональные компетенции:

ОПК-1 - способность представлять адекватную современному уровню знаний научную картину мира на основе знания основных положений, законов и методов;

ОПК-2 - способность выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат;

ПК-3 – готовность анализировать и систематизировать результаты исследований, представлять материалы в виде научных отчетов, публикаций, презентаций.

В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие профессиональные компетенции.

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
ОПК-7, способность учитывать современные тенденции развития электроники, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий в своей профессиональной деятельности	Знает	– основные расчетные формулы кристаллографии – основные системы и символики описания точечных и пространственных групп кристаллов, основные типы дефектов в реальных кристаллах
	Умеет	– объяснять влияние вида симметрии на возможность возникновения физических свойств – использовать теорию дефектов для описания различных физических явлений в реальных кристаллах
	Владеет	– - способностью применять полученные знания и навыки в практической и профессиональной деятельности для создания структур и материалов наноэлектроники
ПК-1, способность строить простейшие физические и математические модели приборов, схем, устройств и установок электроники и наноэлектроники различного функционального назначения, а также использовать стандартные программные средства их компьютерного моделирования	Знает	– основные законы кристаллографии – принципы построения кристаллографических проекций – элементы симметрии кристаллических многогранников и структур – принципы классификации кристаллов по кристаллографическим системам, категориям и сингониям – пространственные группы симметрии – методику описания физических свойств кристаллов
	Умеет	– описать особенности симметрии различных точечных и пространственных кристаллографических классов и групп – пользоваться моделью обратной решетки
	Владеет	- способностью применять полученные знания и навыки при освоении профильных дисциплин, а также в практической и профессиональной деятельности

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Кристаллография и кристаллофизика» применяются следующие методы активного/ интерактивного обучения:

- лекция
- коллективная мыслительная деятельность
- проблемная ситуация.

А также индивидуальные методы активного обучения:

• выполнение практических задач.

I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА (36 ЧАСОВ)

Раздел I. Введение в кристаллографию (2 часа).

Тема 1. История развития кристаллографии как науки (1 час)

Историческая справка о развитии кристаллографии как науки. Предмет кристаллографии и ее место среди других естественных наук. Сущность понятий «симметрии», «кристалл». Основные характеристики кристаллического вещества: однородность, анизотропия, способность самоограняться, симметрия.

Тема 2. Понятие симметрии (1 час)

Симметрия – фундаментальный закон науки и техники. Симметрия в природе (биологические объекты, геологические объекты, объяснение формы Земли с позиций симметрии). Симметрия физических законов.

Основные этапы становления и развития науки о кристаллах. Современные кристаллографические области знаний: математическая кристаллография, кристаллохимия, минералогическая кристаллография, органическая кристаллохимия, физическая кристаллография.

Раздел II. Симметрия кристаллов (12 часов)

Тема 1. Операции и элементы симметрии кристаллов (4 часа)

Платоновские фигуры. Дуальное сопряжение. Закон Эйлера. Закон постоянства углов. Закон Вульфа – Брэггов.

Операции и элементы симметрии конечных фигур I и II рода (ось симметрии – поворотные, зеркальные и инверсионные, плоскость симметрии и цент симметрии). Их обозначение в символике Браве. Основной закон симметрии кристаллов - невозможность осей симметрии V порядка и выше порядков.

Тема 2. Точечные группы симметрии кристаллов (6 часов)

Теоремы о сочетании элементов симметрии и их использование при выводе 32-х кристаллографических классов. Принцип Кюри. Координатные системы в кристаллографии, категории, сингонии. Международная символика и символика А. Шенфлиса точечных классов (групп) симметрии.

Кристаллографические проекции. Сферическая проекция, полярный комплекс кристалла. Стереографическая проекция. Гномостреографическая проекция. Сетка Вульфа.

Закон постоянства углов – основной закон кристаллографии.

Тема 3. Морфология кристалла (2 часа)

Понятие «простая форма кристалла», ее характеристики, симметрия простой формы. Понятие «облик» и «габитус» кристалла Простые формы кристаллов в классах разных сингоний. Комбинированные кристаллы.

Раздел III. Основные положения теории групп (6 часов)

Тема 1. Элементы математического аппарата теории групп (6 часов).

Понятие группы. Порядок группы, порядок элемента. Понятие циклической, абелевой групп. Четверная группа Клейна, четверная циклическая группа.

Понятие подгруппы. Нормальный делитель. Классы сопряженных элементов. Группа вращения равностороннего треугольника.

Точечные группы кристаллических многогранников.

Раздел IV. Симметрия кристаллических структур (10 часов)

Тема 1. Симметрия структуры кристаллов (6 часов).

Пространственная решетка – главный элемент симметрии кристаллических структур. Типы решеток Браве. Определение элементарной ячейки – ячейки Браве. Примитивная, условная ячейки Браве.

Трансляционные элементы симметрии – плоскости скользящего отражения, винтовые оси.

Общие представления о 230 пространственных группах симметрии. Правильные системы точек, их характеристики.

Тема 2. Основы кристаллохимии (2 часа)

Атомные и ионные радиусы. Основные понятия кристаллохимии: координационное число, координационный многогранник, число формульных единиц.

Тема 3. Типы химической связи в кристаллах (2 часа)

Типы связи в кристаллических структурах, их различия. Гомодесмические и гетеродесмические структуры. Координационные многогранники.

Основные типы структур (структура α-железа, меди, магния, вольфрама, поваренной соли, алмаза, графита, сфалерита и вюрцита, рутила).

Раздел VI. Основы кристаллофизики (6 часов).

Тема 1. Тензорное описание физических свойств кристаллов (2 часа)

Кристаллофизические системы координат. Скалярные физические свойства, векторные свойства кристаллов. Физические свойства кристаллов, описываемые тензором II ранга.

Тема 2. Физические свойства кристаллов (4 часа)

Магнитные свойства, двойное лучепреломление, тепловое расширение.

II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА (36 ЧАСОВ)

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ (36 часов).

Лабораторная работа № 1. Точечные группы симметрии кристаллов (6 часов).

1. Подбор и изучение теоретического материала (в т.ч. лекционного) по теме лабораторной работы.

2. Постановка задач, определение порядка проведения лабораторной работы, выполнения практической части лабораторной работы:

1) определение формулы симметрии;

2) определение точечного класса симметрии;

3) определение сингонии;

4) определение категории;

5) операции и элементы симметрии, решение задач;

6) вывод точечных групп симметрии, обозначение точечных классов симметрии по формуле симметрии, Шенфлису, международный символ.

3. Составление отчета, формулировка выводов.

4. Защита лабораторной работы: сдача краткой теории по теме работы, объяснение результатов работы.

Лабораторная работа № 2. Методы проецирования кристаллов (6 часов)

1. Подбор и изучение теоретического материала (в т.ч. лекционного) по теме лабораторной работы.

2. Постановка задач, определение порядка проведения лабораторной работы, выполнения практической части лабораторной работы:

а) определение симметрии кристаллического многогранника;

б) построение стререограмм кристаллических многогранников;

в) решение задач.

3. Составление отчета, формулировка выводов.

4. Защита лабораторной работы: сдача краткой теории по теме работы, объяснение результатов работы.

Лабораторная работа № 3. Метод кристаллического индицирования: символы узлов, ребер, граней кристалла; параметры Вейсса, индексы Миллера (6 часов)

1. Подбор и изучение теоретического материала (в т.ч. лекционного) по теме лабораторной работы.

2. Постановка задач, определение порядка проведения лабораторной работы, выполнения практической части лабораторной работы:

Закон Гаюи – закон рациональности отношения параметров граней. Понятие «единичная грань» и ее выбор в кристаллах разных сингоний. Уравнение плоскости, ее кристаллографическое прочтение. Связь символов граней и ребер кристалла.

Методы проецирования кристаллов

1) выбор кристаллографических координатных осей и единичной грани в кристаллах разных сингоний;
2) приемы определения символов граней кристаллов;
3) индицирование (на моделях) кристаллов различных классов, сингоний, категорий;
4) решение графических и расчетных задач с применением теорем взаимодействия элементов симметрии;
5) определение символов граней и ребер кристаллов различными способами;
6) решение задач.

3. Составление отчета, формулировка выводов.

4. Защита лабораторной работы: сдача краткой теории по теме работы, объяснение результатов работы.

Лабораторная работа № 4. Матричное представление элементов симметрии (6 часов)

1. Подбор и изучение теоретического материала (в т.ч. лекционного) по теме лабораторной работы.

2. Постановка задач, определение порядка проведения лабораторной работы, выполнения практической части лабораторной работы:

1) матричный метод описания элементов симметрии;

2) матрицы точечных операций и элементов симметрии;

3) точечные группы симметрии: изучение точечной симметрии кристаллов с использованием компьютерной программы PointGroups;

4) решение задач.

3. Составление отчета, формулировка выводов.

4. Защита лабораторной работы: сдача краткой теории по теме работы, объяснение результатов работы.

Лабораторная работа № 5. Элементы теории групп в описании кристаллических структур (6 часов)

1. Подбор и изучение теоретического материала (в т.ч. лекционного) по теме лабораторной работы.

2. Постановка задач, определение порядка проведения лабораторной работы, выполнения практической части лабораторной работы:

2. Выполнение практической работы:

1) основные положения теории групп;

2) абстрактные точечные группы;

3) 32 точечные группы симметрии кристаллов;

4) решение задач.

3. Составление отчета, формулировка выводов.

4. Защита лабораторной работы: сдача краткой теории по теме работы, объяснение результатов работы.

Лабораторная работа № 6. Описание пространственной группы симметрии кристаллов (6 часов)

1. Подбор и изучение теоретического материала (в т.ч. лекционного) по теме лабораторной работы.

2. Постановка задач, определение порядка проведения лабораторной работы, выполнения практической части лабораторной работы:

описание симметрии кристаллических структур по их пространственным моделям:

1) выбор элементарной ячейки;
2) определение типа решетки Браве;
3) подсчет числа атомов, приходящихся на ячейку;
4) подсчет числа формульных единиц;
5) определение координационных чисел и многогранников;
6) описание структуры кристалла в терминах плотнейших упаковок;
7) определение группы симметрии;
8) определение типа связи.

3. Составление отчета, формулировка выводов.

4. Защита лабораторной работы: сдача краткой теории по теме работы, объяснение результатов работы.

III. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Кристаллография и кристаллофизика» представлено в Приложении 1, включает в себя:

- характеристику заданий для самостоятельной работы обучающихся и методические рекомендации по их выполнению;
- требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;
- критерии оценки выполнения самостоятельной работы;

- методические пособия к выполнению лабораторных работ.

IV. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

<table>
<tr><th rowspan="2">№ п/п</th><th rowspan="2">Контролируемые разделы / темы дисциплины</th><th rowspan="2" colspan="2">Коды и этапы формирования компетенций</th><th colspan="2">Оценочные средства</th></tr>
<tr><th>текущий контроль</th><th>промежуточная аттестация</th></tr>
<tr><td rowspan="3">1</td><td rowspan="3">Тема 1. Симметрия структуры кристаллов</td><td rowspan="3">ПК -1, ПК-4</td><td>знает</td><td>Лабораторная работа (ПР-6)</td><td rowspan="3">зачет, вопросы 1 - 18</td></tr>
<tr><td>умеет</td><td>Домашнее задание (УО-1)</td></tr>
<tr><td>владеет</td><td>Контрольные работы (ПР-2)</td></tr>
<tr><td rowspan="3">2</td><td rowspan="3">Тема 2. Основные положения теории групп</td><td rowspan="3">ПК -1, ПК-4</td><td>знает</td><td>Устный опрос (УО-1)</td><td rowspan="3">зачет, вопросы 19 - 22</td></tr>
<tr><td>умеет</td><td>Работа на практических занятиях, выполнение домашних заданий (УО-1)</td></tr>
<tr><td>владеет</td><td>Контрольные работы (ПР-2)</td></tr>
<tr><td rowspan="3">3</td><td rowspan="3">Тема 3. Симметрия кристаллических структур. Основы кристаллохимии</td><td rowspan="3">ПК -1, ПК-4</td><td>знает</td><td>Устный опрос (УО-1), индивидуальные задания (ПР)</td><td rowspan="3">зачет, вопросы 23 - 29</td></tr>
<tr><td>умеет</td><td>Лабораторная работа (ПР-6)</td></tr>
<tr><td>владеет</td><td>Контрольные работы (ПР-2)</td></tr>
<tr><td rowspan="2">4</td><td rowspan="2">Тема 4. Основы кристаллофизики</td><td rowspan="2">ПК -1, ПК-4</td><td>знает</td><td>Коллоквиум (УО-2)</td><td rowspan="2">зачет, вопросы 30 – 34</td></tr>
<tr><td>умеет</td><td>Домашнее задание (УО-1)</td></tr>
</table>

			владеет	Письменная работа (ПР-1)	

Вопросы и типы заданий к зачету, типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности, а также критерии и показатели, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, представлены в Приложении 2.

V. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(электронные и печатные издания)

1. Р.П. Дикарева. Введение в кристаллографию // М: Наука, 2007. – 240 с. http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:269126&theme=FEFU

2. Ю. К. Егоров-Тисменко . Кристаллография и кристаллохимия : учебник для вузов / [под ред. В. С. Урусова]. М: МГУ, 2014. – 587 с. http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:734049&theme=FEFU

3. Белов Н.П., Покопцева О.К., Яськов А.Д. Основы кристаллографии и кристаллофизики. Часть I. Введение в теорию симметрии кристаллов: Учебное пособие. - СПб: СПбГУ ИТМО, 2009. - 43 с. http://window.edu.ru/resource/335/63335

4. Трушин В.Н., Андреев П.В., Фаддеев М.А. Рентгеновский фазовый анализ поликристаллических материалов. Электронное учебно-методическое пособие. - Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2012. - 89 с. http://window.edu.ru/resource/210/79

5. Э.Э. Лорд, А. Л. Маккей, С. Ранганатан. Новая геометрия для новых материалов // Пер. с анг. под ред.В. Я. Шевченко, В. Е. Дмитриенко , М: Физматлит, 2010, 260 с.

https://e.lanbook.com/book/48204

Дополнительная литература

(печатные и электронные издания)

1. Кристаллография. Лабораторный практикум. Под редакцией Е.В. Чупрунова // М: Физматлит, 2005. – 412 с.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:417643&theme=FEFU

2. Задачи по кристаллографии. Под ред. Проф. Е.В. Чупрунова и проф. А.Ф. Хохлова // М.: Физматлит, 2003. – 208 с.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:417720&theme=FEFU

3. М.П. Шаскольская. Кристаллогрвафия // М., Высшая школа, 1984, 392 с.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:244987&theme=FEFU

4. И. Костов. Кристаллография // М., Мир, 1965, 528 с.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:93135&theme=FEFU

5. Б.К. Вайнштейн. Современная кристаллография. // М., наука, 1979, 1200 с.
Т.1. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:67138&theme=FEFU
Т.2. Структура кристаллов.
Т.3. Образование кристаллов.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:42851&theme=FEFU
Т.4. Физические свойства кристаллов.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:44870&theme=FEFU

6. Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела // М., Мир, 1979, 402 с.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:67373&theme=FEFU

7. Г. Штрайтвольф. Теория групп в физике твердого тела // М., Мир, 1971, 262 с.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:670142&theme=FEFU

8. Дж. Най. Физические свойства кристаллов //. М., Мир. 1967, 376 с.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:68558&theme=FEFU

9. А.Б. Ройцин. Икосаэдрическая симметрия. Природа, 1993, N 8, с. 14-35.

10. Ю.К. Егоров-Тисменко, Г.П. Литвинская. Теория симметрии кристаллов // М.:ГЕОС, 2000, 410 с.
11. Ю.Г. Загальская, Г.П. Литвинская, Ю.К. Егоров-Тисменко. Геометрическая кристаллография // М.: МГУ, 1986, 168 с.
http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:52624&theme=FEFU
12. Г.Б. Князев. Введение в кристаллографию // Томск.: ТГУ , 1999, 219 с.
13. А.В. Шубников, В.А. Копцик. Симметрия в науке и искусстве // Москва, Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2004. – 567 с. http://www.iprbookshop.ru/16624.html
14. И. А. Батаев, А. А. Батаев. Кристаллография. Обозначение и вывод классов симметрии // Новосибирск, НГТУ, 2015 , 60 с.

VI. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

В общей трудоемкости дисциплины 144 час. (4 ЗЕ) аудиторные занятия составляют 54 часа, включая лекции (18 часов) и лабораторные занятия (36 часов).

По дисциплине предусмотрена внеаудиторная самостоятельная работа в объеме 90 часов на курс дисциплины.

Расписание аудиторных занятий включает в неделю 3 часа. Рекомендуется учащимся планировать внеаудиторную самостоятельную работу в объеме 5,0 часов в учебную неделю.

Для углубленного изучения теоретического материала курса дисциплины рекомендуются использовать основную и дополнительную литературу, указанную в приведенном выше перечне.

Рекомендованные источники доступны студентам в научной библиотеке (НБ) ДВФУ, а также в электронной библиотечной системе (ЭБС) IPRbooks.

Доступ к системе ЭБС IPRbooks осуществляется на сайте www.iprbookshop.ru под учётными данными вуза (ДВФУ):

логин **dvfu**, пароль **249JWmhe**.

Для подготовки к зачету определен перечень вопросов, представленный ниже, в материалах фонда оценочных средств дисциплины.

VII. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Образовательный процесс по дисциплине «Кристаллография и кристаллофизика» проводится в лекционных аудиториях корпуса L и лаборатории материаловедения и кристаллографии кафедры физики низкоразмерных структур (Кампус ДВФУ) с возможностью использования презентаций. Задания для самостоятельной работы и некоторые главы лекционного курса предоставляются студентам в распечатанном виде.

Приложение 1

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
Высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

по дисциплине «Кристаллография и кристаллофизика»

Направление подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника

Форма подготовки очная

Владивосток
2018

Лабораторный практикум. Практические занятия.

В течение семестра студенты выполняют лабораторные работы, включая практические задания по лабораторным работам.

На первом занятии преподаватель знакомит с правилами техники безопасности в лаборатории и с порядком выполнения лабораторных работ.

Перед каждым занятием студенты должны изучить теоретические основы работы, уяснить содержание, цель и порядок выполнения работы, заготовить необходимые таблицы.

В начале занятий проверяется готовность студентов к выполнению работы в объеме контрольных вопросов. Неподготовленные студенты к выполнению лабораторных работ не допускаются.

Защита выполненных и оформленных лабораторных работ проводится в виде индивидуального собеседования по ее содержанию.

Практические задания в соответствии с программой дисциплины формируются в виде задач в рамках некоторых глав теоретической части курса.

Перед каждым практическим заданием студенту выдается тема, по которой он должен подготовиться, поэтому обсуждение вопросов проходит в форме диалога, совместного решения поставленных задач. Контроль за усвоением материала осуществляется путем проведения контрольных работ.

Характеристика заданий для самостоятельной работы обучающихся и методические рекомендации по их выполнению

Задания и методические рекомендации для самостоятельной работы обеспечивают подготовку к контрольным работам, выполнение домашних заданий по определенным разделам дисциплины. Типовые домашние задания и вопросы к контрольным работам приведены в рабочей программе дисциплины и методических указаниях.

Требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы

Результаты самостоятельной работы отражаются в отчетах к лабораторным работам, письменных работах, отчетах по домашнему заданию, в защите контрольных работ.

Контрольные работы по дисциплине проводятся на аудиторных (лабораторных) занятиях по определенным разделам дисциплины, сопровождается самостоятельной подготовкой студентов.

К представлению и оформлению отчета по домашним заданиям предъявляются следующие требования.

Структура отчета по практической работе

Отчеты по домашним работам представляются в отдельной тетради, которая по требованию сдается преподавателю в течение семестра. Наличие выполненных домашних заданий является обязательным условием допуска к зачету.

Отчет по домашней работе должен быть обобщающим документом, включать всю информацию по выполнению заданий, в том числе, в виде построенных диаграмм, таблиц, графиков и т. д. Обязательным условием является формулировка физических законов, используемых при решении определенных задач.

Критерии оценки выполнения самостоятельной работы

Оценивание домашних работ проводится по критериям:

- полнота и качество выполненных заданий в соответствии с требованиями;
- качество оформления отчета;
- отсутствие фактических ошибок.

Для самостоятельного ознакомления студентам вынесены темы, которые были затронуты в других курсах направления подготовки «Электроника и наноэлектроника».

1. Внутренняя структура кристаллов.

Понятие кристаллографического репера. Распределение кристаллов по категориям, сингониям.

2. Понятие трансляционной симметрии. Решетка Браве.

Типы решеток Браве на плоскости и в трехмерном пространстве.

3. Распределение решеток Браве по сингониям.
4. 14 групп трансляций.
5. Элементы тензорного исчисления.
6. Тензоры нулевого, первого, второго порядков.
7. Скалярные, векторные, тензорные свойства кристаллов..
8. Электрические и магнитные свойства твердых тел.

Приложение 2

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
Высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

по дисциплине «Кристаллография и кристаллофизика»

Направление подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника

Форма подготовки очная

Владивосток
2018

Паспорт ФОС

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
ОПК-7, способность учитывать современные тенденции развития электроники, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий в своей профессиональной деятельности	Знает	– основные расчетные формулы кристаллографии – основные системы и символики описания точечных и пространственных групп кристаллов, основные типы дефектов в реальных кристаллах
	Умеет	– объяснять влияние вида симметрии на возможность возникновения физических свойств использовать теорию дефектов для описания различных физических явлений в реальных кристаллах
	Владеет	- способностью применять полученные знания и навыки в практической и профессиональной деятельности для создания структур и материалов наноэлектроники
ПК-1, способность строить простейшие физические и математические модели приборов, схем, устройств и установок электроники и наноэлектроники различного функционального назначения, а также использовать стандартные программные средства их компьютерного моделирования	Знает	– основные законы кристаллографии – принципы построения кристаллографических проекций – элементы симметрии кристаллических многогранников и структур – принципы классификации кристаллов по кристаллографическим системам, категориям и сингониям – пространственные группы симметрии – методику описания физических свойств кристаллов
	Умеет	– описать особенности симметрии различных точечных и пространственных кристаллографических классов и групп – пользоваться моделью обратной решетки –
	Владеет	- способностью применять полученные знания и навыки при освоении профильных дисциплин, а также в практической и профессиональной деятельности

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1	Тема 1. Симметрия структуры кристаллов	ОПК - 7, ПК-1	знает	Лабораторная работа (ПР-6)	зачет, вопросы 1-18

			умеет	Домашнее задание (УО-1)	
			владеет	Контрольные работы (ПР-2)	
2	Тема 2. . Основные положения теории групп	ОПК - 7, ПК-1	знает	Устный опрос (УО-1)	зачет, вопросы 19 - 22
			умеет	Работа на практических занятиях, выполнение домашних заданий (УО-1)	
			владеет	Контрольные работы (ПР-2)	
3	Тема 3. . Симметрия кристаллических структур. Основы кристаллохимии	ОПК - 7, ПК-1	знает	Устный опрос (УО-1), индивидуальные задания (ПР)	зачет, вопросы 23 - 29
			умеет	Лабораторная работа (ПР-6)	
			владеет	Контрольные работы (ПР-2)	
4	Тема 4. Основы кристаллофизики	ОПК - 7, ПК-1	знает	Коллоквиум (УО-2)	зачет, вопросы 30 - 34
			умеет	Домашнее задание (УО-1)	
			владеет	Письменная работа (ПР-1)	
			умеет	практические занятия	
			владеет	выполнение домашних заданий	

Шкала оценивания уровня сформированности компетенций

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции		критерии	показатели	баллы
ОПК-7, способность учитывать современные тенденции развития электроники, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий в своей профессиональной деятельности	Знает	основные расчетные формулы кристаллографии, основные системы и символики описания точечных и пространственных групп кристаллов, основные типы дефектов в реальных кристаллах	знает основные законы симметрии твердых тел для электроники и наноэлектроники с требуемой степенью точности и полноты	способность показать базовые знания и основные умения в использовании:	55 – 69 %
	Умеет	объяснять влияние вида симметрии на возможность возникновения физических свойств, использовать теорию дефектов для описания различных физических явлений в реальных кристаллах	решать задачи на основе знаний, законов на практике	способность применить полученные знания умения в практических задачах, выбор и обоснование стратегии решений по всем разделам дисциплины	70 – 84 %
	Владеет	способностью применять полученные знания и навыки в практической и профессиональной деятельности для создания структур и материалов наноэлектроники	решать усложненные нетипичные задачи на основе приобретенных знаний, умений и навыков	способность применить фактическое и теоретическое знание, практические умения по анализу и решению задач, реализовывать их на практике	85 - 100 %
ПК-1, способность строить простейшие физические и математические модели приборов, схем, устройств и установок электроники и наноэлектроники различного функционального назначения, а также использовать стандартные программные средства их компьютерного моделирования	знает (пороговый уровень)	основные законы кристаллографии, принципы построения кристаллографических проекций, элементы симметрии кристаллических многогранников и структур, принципы классификации кристаллов по кристаллографическим системам, категориям и сингониям, пространственные группы симметрии, методику описания физических свойств кристаллов	воспроизводить и объяснять учебный материал с требуемой степенью научной точности и полноты	способность показать базовые знания и основные умения в использовании: - подробный анализ и разбор основных задач всех разделов дисциплины; - применение соответствующих законов	55 – 69 %
	умеет (продвинутый)	описать особенности симметрии различных точечных и	решать типичные задачи на основе знания законов	способность применить знания и практические умения в задачах, выбор и обоснование	70 – 84 %

		пространственных кристаллографических классов и групп , пользоваться моделью обратной решетки	основных разделов; объяснять полученные результаты на лабораторных и практических занятиях	стратегии решений по всем разделам дисциплины, используя законы и математические преобразования	
	владеет (высокий)	способностью применять полученные знания и навыки при освоении профильных дисциплин, а также в практической и профессиональной деятельности	решать усложненные нетипичные задачи на основе приобретенных знаний, умений и навыков	способность применить фактическое и теоретическое знание, практические умения по анализу и решению задач, используя знания законов построения твердых тел, умение объяснить полученные результаты	85 - 100 %

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков

Текущая аттестация студентов. Текущая аттестация студентов по дисциплине «Кристаллография и кристаллофизика» проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной.

Текущая аттестация по дисциплине «Кристаллография и кристаллофизика» проводится в форме контрольных мероприятий (защита практических (домашних), контрольных работ, тестирование) по оцениванию фактических результатов обучения студентов осуществляется ведущим преподавателем.

Объектами оценивания выступают:

- учебная дисциплина (активность на занятиях, своевременность выполнения различных видов заданий, посещаемость всех видов занятий по аттестуемой дисциплине);
- степень усвоения теоретических знаний;
- уровень овладения практическими умениями и навыками по всем видам учебной работы;
- результаты самостоятельной работы.

Оценивание результатов освоения дисциплины на этапе текущей аттестации проводится в соответствии с используемыми оценочными средствами.

Критерии оценки по контрольным работам

Оценивание защиты контрольной работы проводится после написания работы на аудиторных занятиях, по двухбалльной шкале: «зачтено», «не зачтено».

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если он представляет к защите контрольную работу, удовлетворяющую требованиям по поставленным заданиям, по оформлению, демонстрирует знание физических законов, владение навыками работы с формулами, умение объяснить полученный результат.

Оценка «не зачтено» выставляется студенту, если он не знает физических законов, допускает существенные ошибки в работе, представляет отчет с существенными отклонениями от правил оформления письменных работ.

Критерии оценки практических (домашних) заданий

Оценивание домашних заданий проводится индивидуально.

Все домашние задания представляются в отдельной тетради и оцениваются по системе «зачтено» / «не зачтено».

В рамках текущего контроля уровня усвоения знаний по дисциплине допускается результат не ниже 80% решенных задач, входящих в блок «Домашние задания».

Промежуточная аттестация студентов.

Промежуточная аттестация по дисциплине «Кристаллография и кристаллофизика» проводится в виде зачета, форма зачета – устная.

Критерии выставления оценки студенту на зачете по дисциплине «Физика конденсированного состояния»:

Оценка зачета (стандартная)	Требования к сформированным компетенциям
«Зачтено»	Оценка «зачтено» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал. Исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно применяет его, умеет тесно увязывать теорию с практическими вопросами. Свободно справляется с дополнительными вопросами по всем

	разделам дисциплины, проводит связь между ними, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий.
«Не зачтено»	Оценка «не зачтено» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями формулирует основные законы.

Оценочные средства для промежуточной аттестации

(вопросы к зачету)

1. Введение в кристаллографию. Платоновские фигуры, дуальное сопряжение, формула Эйлера.
2. I закон кристаллографии - закон постоянства углов (понятие идеально развитого, искаженного кристаллов). Доказательство закона Вульфа-Брэггов.
3. Кристаллическое состояние. Макроскопические характеристики: габитус кристалла, простая, комбинированная кристаллические формы, зона, ось зоны кристалла.
4. Микроструктура кристаллического состояния вещества.
5. Метод кристаллического индицирования (символы узлов, ребер, плоскостей). Установка кристаллов. Понятие единичной грани. Связь между символами граней и ребер.
6. Сферическая проекция (полярный комплекс, сфера проекции, определение положения точки).
7. Стереографическая проекция (проецирование вертикальных и горизонтальных направлений).
8. Кристалл – однородная анизотропная симметричная среда. Понятие узлового ряда, узловой сетки. Трехмерная узловая сетка.
9. Решетка Браве: определение, основные характеристики.
10. Элементы симметрии кристаллических многогранников I рода (международный символ, обозначение по формуле симметрии, изображение в стереографической проекции).
11. Невозможность осей симметрии V порядка в кристаллах. Принцип Кюри. Взаимодействие элементов симметрии.

12. Элементы симметрии II рода. Формула симметрии. Эквивалентные, неэквивалентные элементы симметрии.

13. Матричные представления элементов симметрии.

14. Теоремы о сочетании элементов симметрии (доказательства).

15. Понятие единичного направления. Кристаллографические категории, сингонии. Определение класса симметрии.

16. Точечные группы симметрии. Простейший, центральный, планальный классы симметрии низшей и средней категории кристаллов.

17. Точечные группы симметрии. Аксиальный, инверсионно-примитивный, планаксиальный классы симметрии низшей и средней категории кристаллов.

18. Вывод классов симметрии кристаллов высшей категории.

19. Понятие группы; конечная группа, порядок группы, порядок элемента. Абелева группа, циклическая группа.

20. Четверная группа Клейна D_2, четверная циклическая группа.

21. Понятие подгруппы. Нормальный делитель, сопряженные классы элементов. Группа элементов вращения равностороннего треугольника D_3.

22. Точечные группы C_n, S_{2n}, C_{nh}, C_{nv}, D_n, D_{nh}, D_{nd}, T, T_d, T_h, O, O_h.

23. Принцип плотнейшей шаровой упаковки. Двухслойные, трехслойные структуры. Примеры. Понятия координационного числа и координационного многогранника.

24. Элементы симметрии кристаллических многогранников: плоскости скользящего отражения, винтовые оси.

25. Пространственные группы симметрии кристаллов. Группы трансляций решетки Браве.

26. Правильные системы точек. Кратность решетки Браве. Структура куприта Cu_2O.

27. Структура $NaCl$, α-Fe, Mg, сфалерита ZnS, вюрцита, рутила TiO_2, флюорита CaF_2.

28. Структура кристалла и химическая связь. Структуры алмаза, графита.

29. Икосаэдрическая симметрия. Квазикристаллы.

30. Физические свойства кристаллов: скалярные, векторные, тензорные.

31. Пироэлектрический эффект.
32. Диэлектрические свойства кристаллов.
33. Магнитные свойства кристаллов. Группы антисимметрии Шубникова.
34. Двойное лучепреломление.

Типовые задания к домашним работам

1. Найти индексы узлового ряда, проходящего через узлы [[321]] и [01-1]].

2. Задан узловой ряд [110]. Записать индексы нескольких узлов, лежащих на параллельном узловом ряду, проходящем через узел [[100]].

3. Найти индексы плоскости, проходящей через три узла кристаллической решетки [[0-11]], [[3-20]], [[30-2]].

4. Найти индексы кристаллической решетки, лежащей в плоскости (100), проходящей через начало координат.

5. Узловая плоскость отсекает по координатным осям отрезки, равные 2а, 3в, с. Каковы ее индексы?

6. Изобразить в кубе заданные направления: [1-12], [03-1], [33-1], [40-1], [2-12], [02-1],

7. Изобразить в кубе заданные плоскости: (11-2), (021), (3-31), (4-10), (-2-21), (13-1), (221).

8. Найти аналитически направление линии пересечения пары плоскостей из п. 7 и изобразить в кубе.

9. Найти плоскость, в которой лежат два направления из п. 6, изобразить ее в кубе.

10. Найти угол между направлениями [110] и [112].

Типовые задания к контрольным работам

Контрольная работа I по курсу «Кристаллография и кристаллофизика»

Вариант 1

1. Найти произведение операций $2_z \bullet 2_x$ =
2. Расшифровать (записать по Браве), отметить некристаллографические классы: 3m, $\frac{8}{m}$ mm.
3. Пользуясь правилами взаимодействия элементов симметрии, дополнить (на стереографической проекции) элементы симметрии классов и записать их обозначения всеми способами:

Вариант 2

1. Найти произведение операций $4_x \bullet 2_z$ =
2. Расшифровать (записать по Браве), отметить некристаллографические классы: 23, $1\bar{1}m$.
3. Пользуясь правилами взаимодействия элементов симметрии, дополнить (на стереографической проекции) элементы симметрии классов и записать их обозначения всеми способами:

Контрольная работа III по курсу «Кристаллография и кристаллофизика»

Вариант 1

1. Какую операцию симметрии необходимо добавить к перечисленным операциям симметрии, чтобы получилась группа: a) { e, 2_x, m_z, …}; b) { 2x, 2y, 2u, 3^1, 3^2, …}; c) {e, 2, $\overset{0}{4}{}_1$, …}.
2. Показать эквивалентность зеркально-поворотной оси третьего порядка и инверсионной оси шестого порядка.
3. Записать квадрат Кейли для точечной группы C_{2h}.
4. Нарисовать стереографические проекции элементов симметрии точечных групп: C_3, S_4, C_{6h}.
5. Записать символ Шенфлиса и международный символ точечных групп, заданных кристаллографической формулой симметрии: a) $3L_2$, $L_2 2P$, $3L_2 3PC$; b) L_6, $L_6 6L2$, $L_6 6P$, L3P, $L_3 3L_2 4P$.
6. Вывести группу симметрии, приняв за генераторы операции отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, перпендикулярной к одной из плоскостей. Изобразить элементы симметрии на стереографической проекции, дать обозначения группы в международной символике, записать обозначение по Шенфлису. Записать элементы группового множества.

Контрольная работа III по курсу «Кристаллография и кристаллофизика»

Вариант 2

1. Какую операцию симметрии необходимо добавить к перечисленным операциям симметрии, чтобы получилась группа: a) { e, 2x, 2y, …}; b) { e, 3^1, 3^2, $\bar{3}^1$, $\bar{3}^{-1}$,…}; c) {e, 2x, 2y, 2z, m, $\overset{0}{4}{}^1$, $\overset{0}{4}{}^{-1}$,…}.
2. Показать эквивалентность зеркально-поворотной оси четвертого порядка и инверсионной оси четвертого порядка.
3. Записать символ Шенфлиса и международный символ группы, заданной символом Браве L_4 $4L_2$ 5PC.
4. Нарисовать стереографические проекции элементов симметрии точечных групп: Cs , C_4 , C_{3h} .
5. Записать символами Шенфлиса и международными символами точечные группы, заданные кристаллографической формулой симметрии: a) L_4 , L_4 PC, L_4 4P, $\bar{L}_4$ $2L_2$ 2P; b) $3L_2$ $4L_3$, $3L_4$ $4L_3$ $6L_2$, $3\bar{L}_4$ $4L_3$ 6P.
6. Вывести группу симметрии, приняв за генераторы операции отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, перпендикулярной к одной из плоскостей. Изобразить элементы симметрии на стереографической проекции, дать обозначения группы в международной символике, записать обозначение по Шенфлису. Записать элементы группового множества.

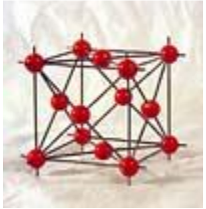
Контрольная работа №4

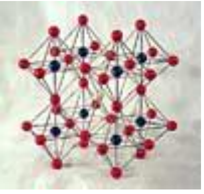
Вариант 1.

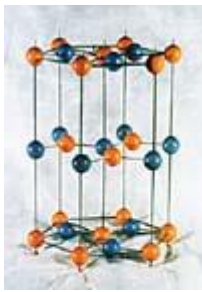
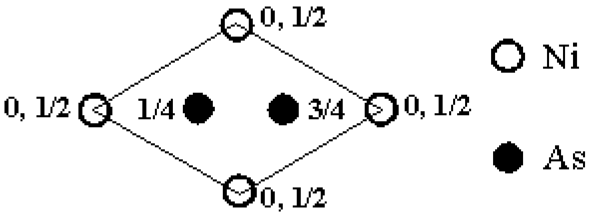
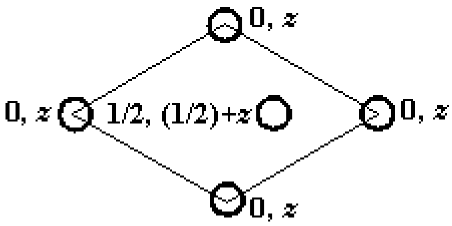
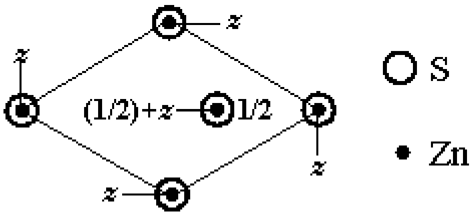
1. Перечислите сингонии средней категории кристаллов. Дайте их общую характеристику.
2. Изобразите ОЦК решетку. Обозначьте индексы всех атомов.
3. Даны кристаллы триклинной, тригональной, моноклинной и кубической сингоний. Расставьте кристаллы по мере убывания их анизотропии.
4. Дайте определение примитивной элементарной ячейки.
5. Какая операция симметрии является тождественной или единичной операцией?

Пример индивидуальных заданий:

	Описание некоторых простых кристаллических структур	
α-Po	Атомы в вершинах кубической ячейки	
α-Fe	Атомы в вершинах и в центре кубической ячейки	

Fe_3Al	Атомы Al в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней; атомы Fe в серединах всех ребер ячейки, в ее центре, а также в центрах восьми октантов [1)]	
Cu	Атомы в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней	
Cu_3Au	Атомы Au в вершинах кубической ячейки; атомы Cu в центрах всех граней ячейки	
CuAu	В тетрагональной ячейке атомы Au и Cu расположены в чередующихся слоях, перпендикулярных оси 4; отношение параметров $c/a = 1{,}41$. Для псевдокубической структуры, которой соответствует приведенная в данной таблице модель, отношение параметров $c/a = 1{,}07$	
Mg	Атомы в вершинах гексагональной ячейки и в центре одной из двух тригональных призм, на которые делится гексагональный параллелепипед плоскостью, проходящей через малые объемные диагонали ячейки. Отношение параметров $c/a = 1{,}62$	
CsCl	Атомы Cl в вершинах кубической ячейки; атом Cs в ее центре	
NaCl	Атомы Na в вершинах кубической ячейки и в центрах всех граней; атомы Cl в центре ячейки и в серединах всех ее ребер	
CaF_2	Атомы Ca в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней; атомы F в центрах всех восьми октантов	

Алмаз	Атомы C в вершинах кубической ячейки, в центрах ее граней и в центрах четырех из восьми октантов (в шахматном порядке)	
ZnS (сфалерит)	Атомы S в вершинах кубической ячейки и в центрах ее граней; атомы Zn в центрах четырех из восьми октантов (в шахматном порядке)	
Cu_2O	Атомы O в вершинах и в центре кубической ячейки; атомы Cu в центрах четырех из восьми октантов (в шахматном порядке)	
ReO_3	Атомы Re в вершинах кубической ячейки; атомы O в серединах всех ее ребер	
$CaTiO_3$	Атомы Ti в вершинах кубической ячейки, атом Ca в ее центре; атомы O в серединах всех ребер ячейки	
AlB_2	Атомы Al в вершинах гексагональной ячейки, атомы B в центрах обеих тригональных призм, на которые делится гексагональный параллелепипед плоскостью, проходящей через малые объемные диагонали ячейки. Отношение параметров c/a = 1,08	
Hg	Атомы в вершинах гексагональной ячейки; еще два атома на большой объемной диагонали ячейки (они делят эту диагональ на три равные части). Отношение параметров c/a = 1,92.	
In	Атомы в вершинах и в центре тетрагональной ячейки. Отношение параметров c/a = 1,52.	

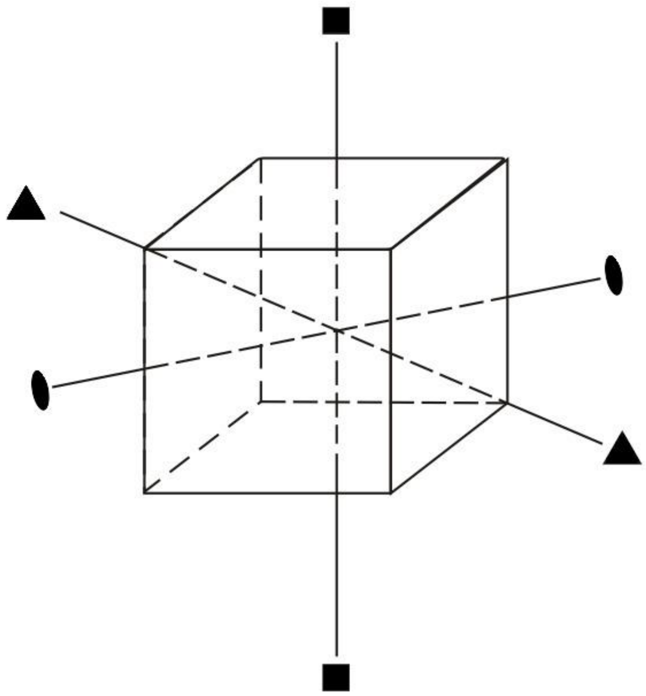
α-графит	Атомы C образуют слои, состоящие из сопряженных правильных шестиугольников. Слои налагаются по закону ...ABABAB...; слой B сдвинут относительно слоя A на величину вектора, равного связи C–C. Отношение параметров c/a = 2,72.	
BN	Атомы B и N, чередуясь (атом B окружен атомами N, атом N окружен атомами B), образуют слои, состоящие из сопряженных правильных шестиугольников. Слои налагаются так, что шестичленные циклы находятся друг над другом (атомы B над атомами N, атомы N над атомами B). Отношение параметров c/a = 2,66.	
NiAs	Гексагональная ячейка с отношением параметров c/a = 1,39.  Координаты атомов: Ni: 0, 0, 0; 0, 0, 1/2 As: 2/3, 1/3, 1/4; 1/3, 2/3, 3/4	
Лонсдейлит	Гексагональная ячейка с отношением параметров c/a = 1,63.  Координаты атомов: 0, 0, 0; 0, 0, z; 1/3, 2/3, 1/2; 1/3, 2/3, (1/2)+z, где $z \approx 3/8$	
ZnS (вюрцит)	Гексагональная ячейка с отношением параметров c/a = 1,64.  Координаты атомов: S: 0, 0, 0; 1/3, 2/3, 1/2 Zn: 0, 0, z; 1/3, 2/3, (1/2)+z, где $z \approx 3/8$	

Стандартный план описания кристаллической структуры

1. Проекция ячейки
2. Тип решетки (с обоснованием)
3. Число формульных единиц (Z)
4. Координационное число и координационный многогранник (для каждого сорта атомов)
5. Характер структуры и тип связей
6. Описание в терминах ПШУ-ПШК, если оно возможно
7. Структурный класс
8. N – число атомов, приходящихся на ячейку.

Методические указания по лабораторной работе

«ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ»



Владивосток 2018

ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

Целью работы является изучение точечной симметрии кристаллов с использованием компьютерной программы *PointGroups*

Операции и элементы симметрии

Операции симметрии — это преобразование пространства, при котором каждой его точке ставится в соответствие эквивалентная точка по определенному закону. В трехмерном пространстве операциями симметрии могут быть повороты вокруг некоторой оси, отражения относительно плоскости, инверсия в точке, параллельный перенос всего пространства (трансляция), а также комбинации любых из перечисленных преобразований.

Элементом точечной симметрии называется геометрическое место точек кристаллического пространства, неподвижных при симметрическом преобразовании. Операции поворота отвечает неподвижная прямая — **поворотная ось симметрии**, операции отражения — **зеркальная плоскость симметрии**, операции инверсии — **центр инверсии** (центр симметрии).

В структуре кристаллов естественно сохраняются и обычные элементы симметрии, однако под действием трансляции они бесконечно повторяются в кристаллическом пространстве, локализуясь в виде соответствующей группы в некоторых точках этого пространства.

Взаимодействие групп трансляций с плоскостями и осями симметрии приводит не только к их размножению, но и к появлению новых трансляционных элементов симметрии — плоскостей скользящего отражения, винтовых осей.

С каждым элементом симметрии связана некоторая циклическая группа операций. Ее порядок называется порядком элемента симметрии. Например, поворотной оси n-го порядка соответствует группа операций поворотов вокруг оси на углы φ, 2φ, …, $n\varphi = 360°$. Наименьший угол φ называется элементарным углом поворота оси. В кристаллах он может иметь только значения $\varphi_n = 360°/n$, при $n = 1, 2, 3, 4, 6$.

Существует три вида осей симметрии: **поворотные**, **зеркально-поворотные** и **инверсионные**. Зеркально-поворотная ось выполняет составное действие, состоящее из поворота на угол φ_n и последующее отражение в плоскости, перпендикулярной оси. Инверсионная ось выполняет составное действие, состоящее из поворота на угол φ_n и инверсию в точке.

Элементы симметрии обозначаются следующим образом: центр инверсии в тексте $\bar{1}$, на рисунке — символом **С**; плоскость симметрии соответственно m и жирной чертой; поворотные оси, рис.1.

Зеркально-поворотные оси находятся во взаимно однозначном соответствии с инверсионными осями:

$$\overset{\circ}{1} = \bar{2},\ \overset{\circ}{2} = \bar{1},\ \overset{\circ}{3} = \bar{6},\ \overset{\circ}{4} = \bar{4},\ \overset{\circ}{6} = \bar{3}.$$

Операции симметрии обозначают через элементы симметрии. Операция поворота обозначается цифрой, соответствующей порядку оси симметрии, операция отражения в плоскости — символом m и операция инверсии в точке — символом $\bar{1}$**.** Подстрочный индекс у оси симметрии указывает направление, вдоль которого идет эта ось, например 2_{xy}, 4_y, 6_z. Одна буква соответствует направлению оси кристаллографической системы координат, две буквы — диагонали квадранта, три буквы — диагонали октанта. Отрицательное направление координатной оси отмечается чертой над буквой. Надстрочный индекс определяет порядок операции симметрии. Например, 2_x, $2_{x\bar{y}}$, $3^1_{x\bar{y}z}$, 6^2, 4^{-1}. Подстрочный индекс у плоскости симметрии *(m_x, m_{xy})* определяет направление, параллельно которому идет нормаль к этой плоскости.

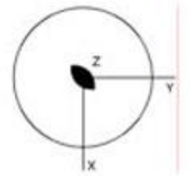
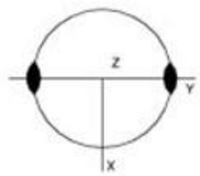
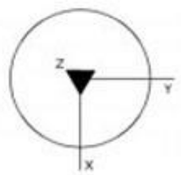
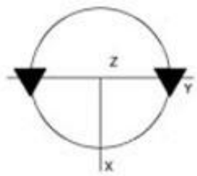
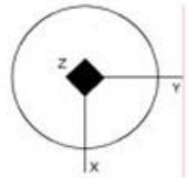
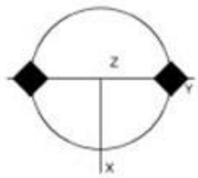
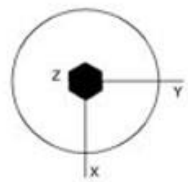
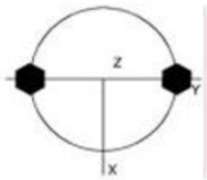
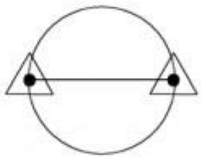
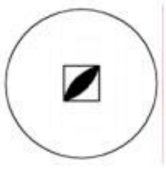
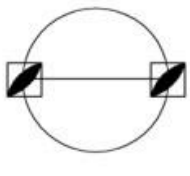
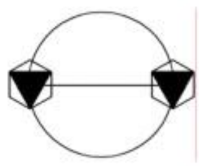
Ось симметрии	Вертикальная	Горизонтальная
2-го порядка		
3-го порядка		
4-го порядка		
6-го порядка		
Инверсионно-поворотная ось симметрии	Вертикальная	Горизонтальная
$\overline{3}$ -го порядка		
4-го порядка		
6-го порядка		

Рис. 1. Обозначения поворотных осей

Матричный метод описания операций симметрии

Преобразование кристаллического пространства можно описать эквивалентным преобразованием связанной с ним системы координат с помощью матриц (выбор осей координат в кристалле см. в Приложении 5) . В результате симметрического преобразования координатная система xyz перейдет в систему XYZ, а элементарная ячейка, заданная векторами **a**, **b**, **c** в системе xyz, преобразуется в системе XYZ в ячейку с векторами **A**, **B**, **C**. Новые оси выражаются через старые векторными формулами

$$A = \alpha_{11}\mathbf{a} + \alpha_{12}\mathbf{b} + \alpha_{13}\mathbf{c},$$

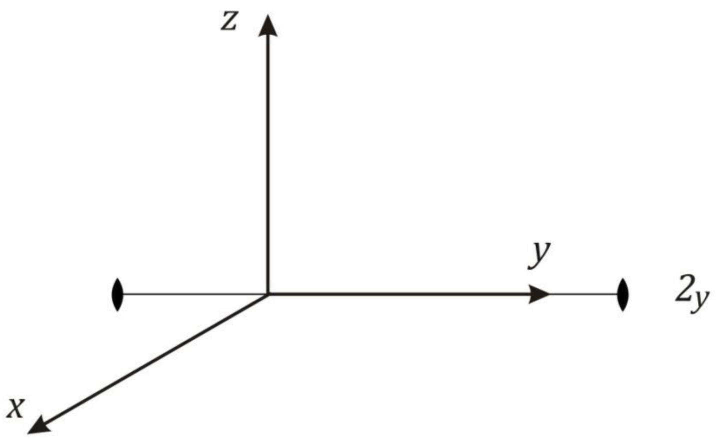
$$B = \alpha_{21}\mathbf{a} + \alpha_{22}\mathbf{b} + \alpha_{23}\mathbf{c},$$

$$C = \alpha_{31}\mathbf{a} + \alpha_{32}\mathbf{b} + \alpha_{33}\mathbf{c}.$$

Коэффициенты α_{ij} образуют квадратную матрицу, которая сопоставляется данной операции симметрии. Детерминант матрицы равен $|\alpha_{ij}| = \pm 1$. Если $|\alpha_{ij}| = 1$, то операция симметрии называется операцией первого рода, если $|\alpha_{ij}| = -1$ — второго рода.

Рассмотрим действие некоторых элементов симметрии:

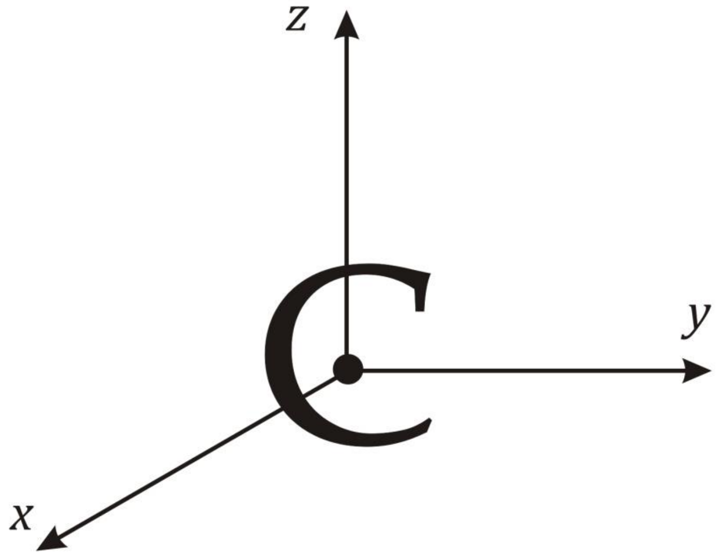
1. Поворотная ось второго порядка.



$$A(x, y, z) \xrightarrow{2_y} A'(-x, y, -z)$$

$$2_y \Rightarrow \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \Delta_{2_y} = 1$$

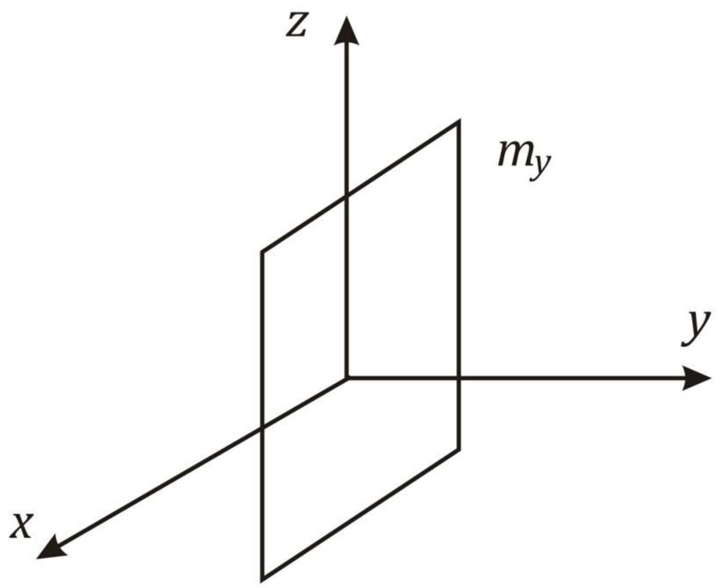
2. Центр симметрии.



$$A(x, y, z) \xrightarrow{\bar{1}} A'(-x, -y, -z)$$

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

3. Плоскость симметрии.



$$A(x, y, z) \xrightarrow{m_y} A'(x, -y, z)$$

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

Примем за координатную систему кристаллографическую систему координат. В этой системе коэффициенты матрицы α_{ij} будут иметь значения 0, 1, -1, поскольку операции симметрии просто переставляют между собой координатные оси и выполняются соотношения |a| = |A|, |b| = |B| и |c| = |C|.

В силу относительности движения системы координат и кристалла, матрица, описывающая вращение системы координат против часовой стрелки, будет описывать движение тела по часовой стрелке относительно неподвижной системы координат. В обозначении операции такого поворота ставится положительный надстрочный индекс. При вращении системы координат по часовой стрелке обозначение операции поворота имеет отрицательный надстрочный индекс.

Сопоставляя каждой операции симметрии матрицу, получим множество матриц, которое образует группу относительно операций их умножения. В этом случае говорят о матричном представлении кристаллографической группы.

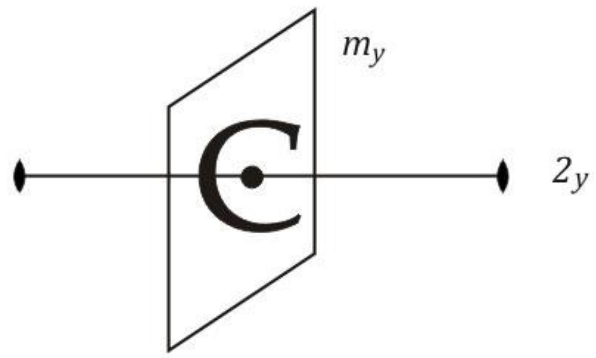
Для матричного описания всех операций симметрии любой кристаллографической группы достаточно использовать матрицы преобразований 48 операций симметрии голоэдрической кубической группы O_h и 24 матрицы, соответствующие всем преобразованиям голоэдрической гексагональной группы D_{6h} (см. приложения 1 и 2), поскольку любая из 32 точечных групп симметрии является подгруппой либо O_h, либо D_{6h}.

Два последовательных преобразования кристаллического пространства можно описать, перемножив соответствующие матрицы по закону умножения матриц:

$$c_{ij} = \sum a_{ik} b_{kj}$$

Полученная матрица описывает операцию симметрии, принадлежащую к этому же групповому множеству.

Например, рассмотрим в матричном представлении совместное действие двух элементов симметрии – поворотной оси 2_y и плоскости симметрии m_y.



$$m_y \times 2_y = \bar{1}$$

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

Следовательно, произведение $m_y \cdot 2_y = \bar{1}$, т.е. появился дополнительный элемент симметрии – центр обратного равенства. Такой набор симметрических преобразований соответствует точечной группе симметрии $\frac{2}{m}$.

Точечные группы симметрии

Операции симметрии, оставляющие неподвижной хотя бы одну точку кристаллического пространства, называются точечными. Элементы симметрии кристалла, если их больше одного, должны пересекаться, по меньшей мере, в одной точке, которая остается неподвижной при всех точечных преобразованиях. Элементы и соответствующие им операции точечной симметрии, взаимодействуя по определенным правилам, образуют конечное число возможных комбинаций, которые называют кристаллографическими точечными группами. Число таких групп равно 32. Совокупность элементов симметрии точечной группы принято изображать на стереографической проекции.

Группы обозначаются с помощью специальных символов, которые в краткой форме содержат информацию обо всей группе. Для описания группы нет необходимости перечислять все элементы группового множества, а достаточно записать множество порождающих элементов (генераторов). В случае кристаллографических групп за основу обозначений принимают наборы элементов симметрии — осей, плоскостей, центров инверсии — такие, что, перемножая между собой отвечающие им операции симметрии, можно получить все групповое множество. Обычно используют две системы символьных обозначений: по Шенфлису и по Герману-Могену. Вторая принята в качестве международной символики. Помимо этих двух, в учебном процессе используется система обозначений по Бравэ. Список 32 точечных групп и их обозначения в указанных системах приведены в приложении 3, а стереографические проекции — в приложении 4.

Программа *PointGroups*

Назначение программы *PointGroups* — построение стереографических проекций элементов симметрии кристаллографических точечных групп симметрии. Программа работает в операционной системе Windows с использованием стандартного интерфейса. Для нормального функционирования программы необходимо наличие графической библиотеки OpenGL, которая входит обычно в стандартный пакет поставки Windows.

Данная программа позволяет выполнить следующие операции: построить стереографическую проекцию элементов симметрии точечной группы симметрии в виде трехмерного изображения и модифицировать полученное изображение (увеличить или уменьшить размер, переместить в плоскости экрана, повернуть вокруг координатных осей). Для построения стереографической проекции реализованы две возможности — с использованием символа точечной группы, выбираемой из списка, и по генераторам, задаваемым в виде матрицы преобразования соответствующей операции симметрии.

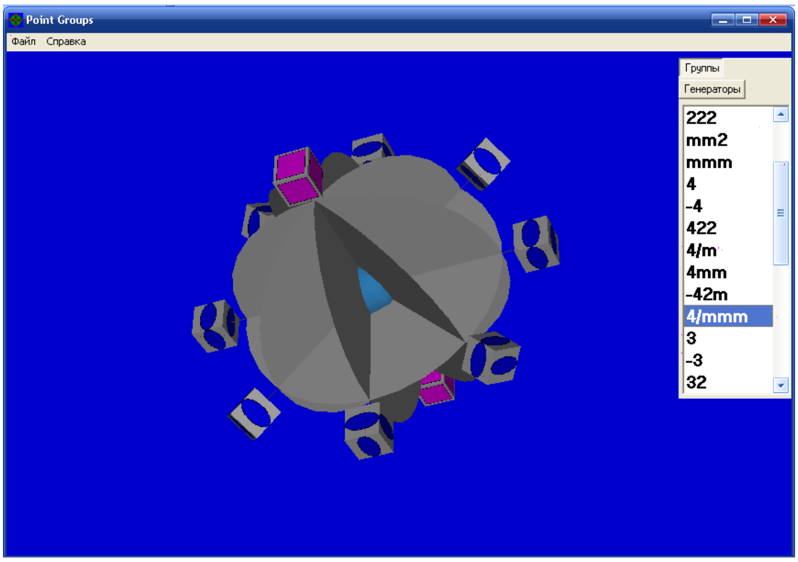


Рис. 2. Рабочее окно программы *PointGroups*

Для запуска программы необходимо щелкнуть левой кнопкой мыши по иконке ***PointGroups*.** На экране дисплея открывается окно (Рис. 2), содержащее главное меню, панель управления и поле изображения.

Главное меню содержит основные функции по управлению программой: сохранение изображения в виде файла, справочную информацию и вызов панели управления изображением.

Панель управления состоит из двух вкладок: **Группы** и **Генераторы.** Для построения стереографической проекции группы необходимо во вкладке **Группы** выбрать символ точечной группы симметрии из списка (щелкнуть два раза левой кнопкой мыши по выбранному символу) или воспользоваться всплывающим меню, выбрав в нем опцию **Построить.** Следует заметить, что символы точечных групп даны в международных обозначениях (по Герману-Могену), а знак инверсии стоит не над символом, а перед ним, т. е., например, символ группы $\bar{4}3m$ имеет вид -43m.

Для построения стереографической проекции точечной группы симметрии по заданным генераторам необходимо активировать вкладку **Генераторы.** Вкладка содержит поля ввода элементов матрицы операции симметрии и список уже введенных генераторов. Введя элементы матрицы операции симметрии, необходимо нажать кнопку **Добавить,** после чего в список генераторов будет добавлена эта матрица. В случае ввода неправильной матрицы или неправильного набора генераторов программа выдаст сообщение об ошибке. Удалить неверно введенную матрицу можно, выделив в списке соответствующий генератор и нажав кнопку **Удалить.** Для полной очистки списка генераторов следует использовать кнопку **Очистить.** Построение стереографической проекции группы выполняется после нажатия на кнопку **Построить.**

Управление изображением осуществляется мышью. Для поворота изображения необходимо нажать левую кнопку мыши и сдвинуть мышь в любом направлении. При этом скорость поворота изображения зависит от скорости перемещения мыши, а направление вращения от того, в какую сторону перемещается мышь. Для увеличения или уменьшения изображения необходимо нажать правую кнопку мыши и переместить мышь вверх или вниз. Если сдвинуть мышь вправо или влево, произойдет смещение изображения в ту же сторону.

Аналогичные операции можно выполнить, вызвав в главном или всплывающем меню диалог управления (опция **Управление...).** Диалог **Управление** состоит из набора движков, которые позволяют осуществлять повороты и смещения изображения. Возможно вращение изображения вокруг координатных осей, а также перемещение изображения вдоль них. Около угловых движков выводится информация о текущем угле поворота (значение по умолчанию — ноль). Перемещение вдоль оси Z увеличивает или уменьшает изображение, поскольку изображение построено с учетом перспективы. Ось Z направлена перпендикулярно плоскости экрана, ось X — горизонтально, а ось Y — вертикально.

Для сохранения результата построения необходимо в меню **Файл** выбрать опцию **Сохранить проекцию...** и поместить сохраняемый файл в папку ***PointGroups\Image*.**

Задание

1. Построить стереографические проекции точечных групп 2, m, $\frac{2}{m}$ в кристаллографической и минералогической установках.
2. Построить и сравнить стереографические проекции группы $mm2$ на плоскости xy, xz, yz.
3. Построить стереографические проекции для точечных групп $\bar{4}$2m, $\bar{6}$m2, $\bar{4}$3m.
4. Построить стереографические проекции для точечных групп $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$.
5. Построить стереографические проекции кубических точечных групп, используя символ группы.
6. Определить минимальный набор генераторов и построить по ним стереографические проекции точечных групп D_{2h}, D_{4h} ,D_{6h}
7. Определить минимальный набор генераторов для кубических точечных групп и построить по ним стереографические проекции.
8. Построить стереографические проекции точечных групп D_{nh}, используя генераторы.

9. Построить стереографические проекции точечных групп C_{nv} **и** C_{nh}, **используя генераторы.**

Задачи для самоконтроля

1. Какую операцию симметрии необходимо добавить к перечисленным операциям симметрии, чтобы получилась группа:
   1) $\{e, 2_{x,} m_z, \ldots\}$;
   2) $\{e, 2_{x,} 2_y, \ldots\}$;
   3) $\{3^1, 3^{-1}, \ldots\}$;
   4) $\{2_{x,} 2_y, 2_u, 3^1, 3^2, \ldots\}$;
   5) $\{e, 3^1, 3^2, \bar{3}^1, \bar{3}^{-1}, \ldots\}$;
   6) $\{e, 4^1, 4^{-1}, \ldots\}$;
   7) $\{e, 2, \mathring{4}^1, \ldots\}$;
   8) $\{e, 2_{x,} 2_y, 2_z, m, \mathring{4}^1, \mathring{4}^{-1}, \ldots\}$;
   9) $\{e, 2, 3^1, 3^{-1}, 6^{-1}, \ldots\}$;
   10) $\{e, m, 3^1, 3^{-1}, \bar{6}^{-1}, \ldots\}$?

2. Указать, какие из перечисленных множеств операций симметрии соответствуют одному элементу симметрии:
   1) $\{3^1, 3^2, 3^3\}$;
   2) $\bar{3}^1, \bar{3}^2, \bar{3}^3$;
   3) $\{e, \bar{1}, 3^1, 3^{-1}, \bar{3}^1, \bar{3}^{-1}\}$;
   4) $\{2, 4^1, 4^{-1}, 4^4\}$;
   5) $\{e, 2, \mathring{4}^1, \mathring{4}^{-1}\}$;
   6) $\{4^1, 4^2, 4^{-1}, 4^4, m\}$;
   7) $\{m, 3^1, 3^2, 3^3, \bar{6}^1, \bar{6}^{-1}\}$;
   8) $\{e, 2, 3^1, 3^{-1}, 6^1, 6^{-1}\}$;
   9) $\{m, \bar{1}, 3^1, 3^{-1}, \bar{3}^1, \mathring{6}^1\}$;

3. Записать матрицу преобразования операции симметрии в кристаллографической системе координат и определить какого рода эта операция:
   1) 2_x;
   2) 2_y;
   3) 2_z;
   4) 2_{xy};
   5) $2_{\bar{x}y}$
   6) 2_{xz};
   7) 2_{yz};
   8) m_x;
   9) m_y;
   10) m_z;
   11) m_{xy};
   12) $m_{\bar{x}y}$;
   13) $\bar{1}$;
   14) 3_z^1;
   15) 3_z^{-1};
   16) $\bar{3}_z^1$;
   17) 4_x^1;
   18) 4_y^1;
   19) 4_z^1;
   20) 4_z^{-1};
   21) $\bar{4}_z^1$;
   22) $\bar{4}_z^{-1}$;
   23) 6_z^1;
   24) 6_z^{-1};
   25) $\bar{6}_z^1$;
   26) $\bar{6}_z^{-1}$;
   27) 3_{xyz}^1;
   28) $3_{\bar{x}yz}^1$;
   29) $3_{\bar{x}\bar{y}z}^1$;
   30) $3_{x\bar{y}z}^1$.

4. Нарисовать полную стереографическую проекцию элементов симметрии точечных групп, для которых генераторы заданы графически на Рис. 2. Записать обозначения групп по Герману-Могену и Шенфлису.

5. ***Записать символами Шенфлиса и Германа-Могена точечные группы, заданные кристаллографической формулой (символом Бравэ):***
   1) L_2, P, L_2PC;
   2) $3L_2, L_22P, 3L_23PC$;
   3) $L_4, L_4PC, L_44L_2, L_44P, \bar{L}_4, \bar{L}_42L_22P$;
   4) $L_3, \bar{L}_3, L_33L_2, L_33P, \bar{L}_33L_23PC$;
   5) $L_6, L_66L_2, L_66P, L_66L_27PC, L_3P, L_33L_24P$;
   6) $3L_24L_3, 3L_24L_33PC, 3L_44L_36L_2, 3\,\bar{L}_44L_36P, 3L_44L_36L_29PC$.

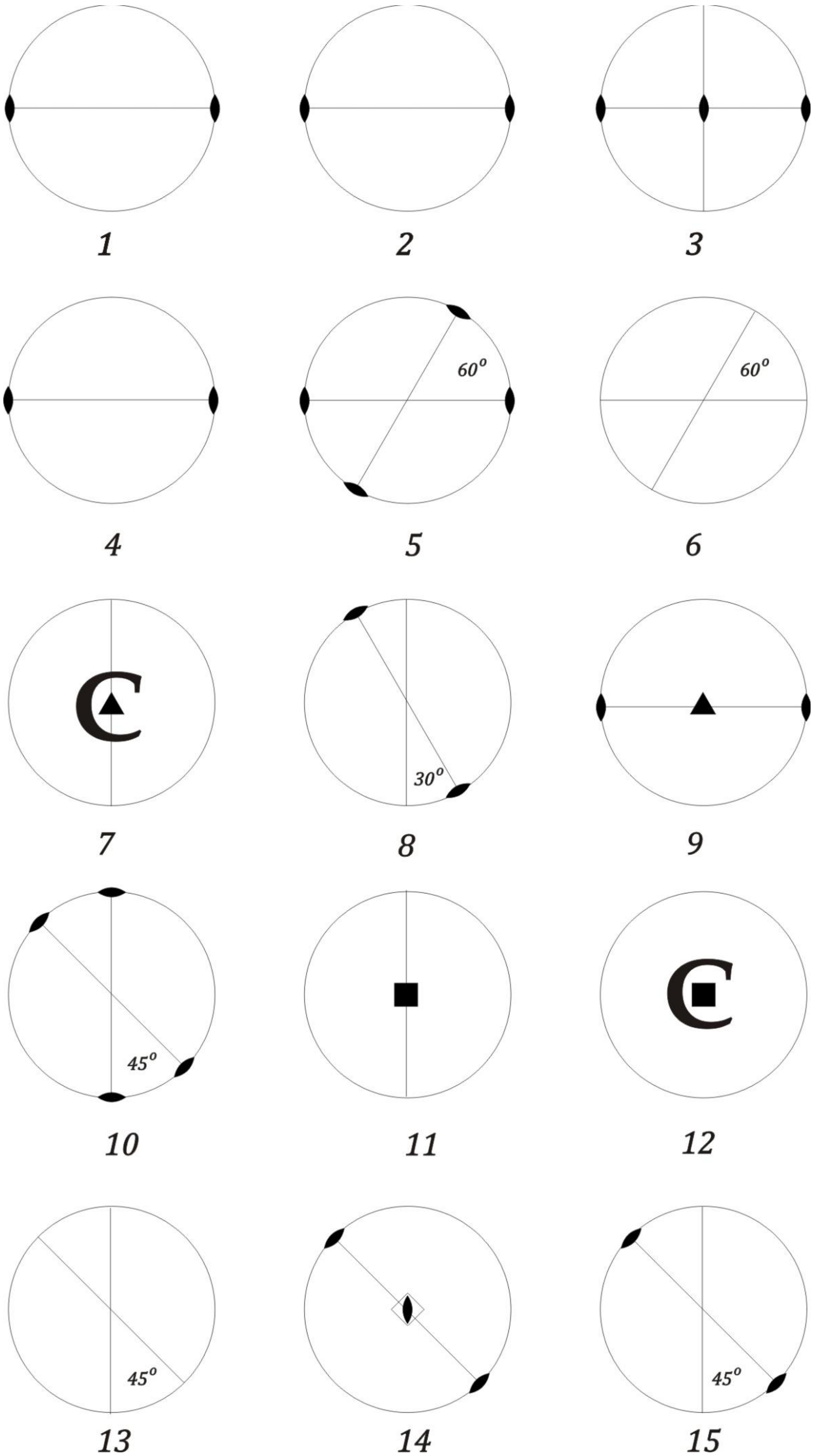


Рис. 2. К задаче 4 (начало)

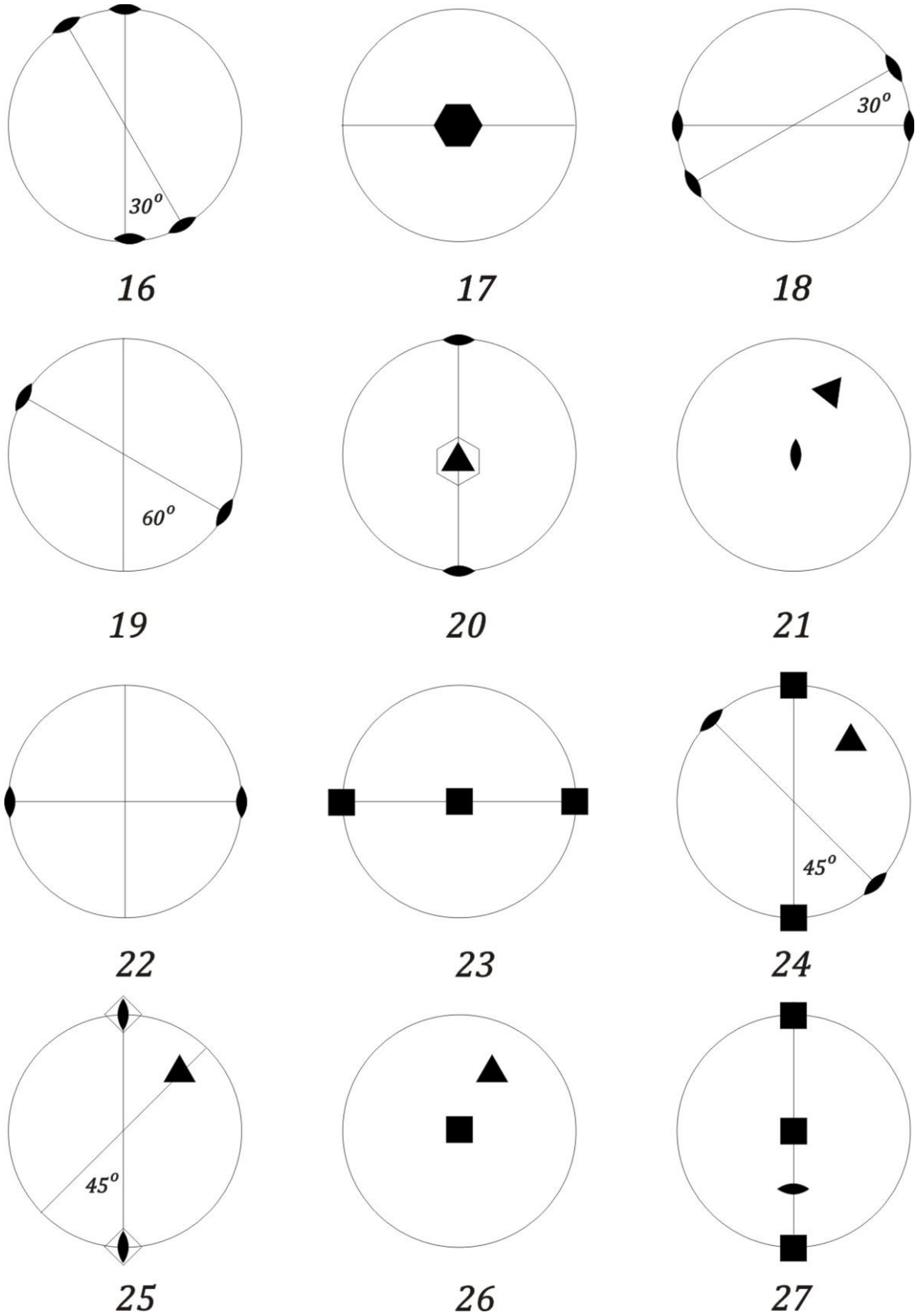


Рис. 2. К задаче 4 (продолжение)

Контрольные задачи

1. Показать, что групповое множество, отвечающее инверсионной оси третьего порядка, содержит в себе подмножество, соответствующее поворотной оси третьего порядка.

2. Показать, что групповое множество, отвечающее зеркально-поворотной оси четвертого порядка, содержит в себе подмножество, соответствующее поворотной оси второго порядка.
3. Показать, что групповое множество, отвечающее инверсионной оси шестого порядка, содержит в себе подмножество, соответствующее поворотной оси третьего порядка.
4. Показать, эквивалентность зеркально-поворотной оси третьего порядка и инверсионной оси шестого порядка.
5. Показать, эквивалентность зеркально-поворотной оси четвертого порядка и инверсионной оси четвертого порядка.
6. Показать, эквивалентность зеркально-поворотной оси шестого порядка и инверсионной оси третьего порядка.
7. Какой операции зеркального поворота соответствует операция инверсионного поворота:

1) $\bar{1}$; 2) $\bar{3}^3$; 3) $\bar{3}^5$; 4) $\bar{4}^1$; 5) $\bar{6}^1$?

8. Какой операции поворота с инверсией соответствует операция зеркального поворота: ∘

1) 1; 2) $\underset{\circ}{3}^1$; 3) $\underset{\circ}{4}^1$; 4) $\underset{\circ}{6}^3$; 5) $\underset{\circ}{6}^5$?

9. Какой операции симметрии эквивалентны операции:

1) 6^3; 2) $\bar{6}^3$; 3) $\underset{\circ}{6}^3$;

10. Какая операция симметрии связывает точки с координатами:

1) *x, y ,z* и *-x, -y, -z;*
2) *x, y ,z* и *x, -y, -z;*
3) *x, y ,z* и *x, y, -z;*
4) *x, y ,z* и *-y, x, z;*
5) *x, y ,z* и *y, -x, -z;*

11. В кристаллографической системе координат найти матрицу симметрического преобразования, эквивалентную последовательному действию двух операций симметрии и определить, какой операции симметрии она соответствует:

1) $2_z \times m_z$;
2) $2_z \times \bar{1}$;
3) $2_y \times 2_z$;
4) $2_x \times 2_{xy}$;
5) $2_x \times m_{xy}$;
6) $m_x \times m_y$;
7) $m_{xz} \times m_{xy}$;
8) $m_y \times \bar{1}$;
9) $4_z^1 \times m_z$;
10) $4_z^1 \times m_x$;
11) $4_z^1 \times 2_z$;
12) $\bar{4}_z^1 \times m_x$;
13) $\bar{4}_z^1 \times 2_x$;
14) $3_z^1 \times m_z$;
15) $3_z^1 \times m_x$;
16) $3_z^1 \times 2_y$;
17) $6_z^1 \times m_z$;
18) $6_z^1 \times m_y$;
19) $6_z^1 \times 2_x$;
20) $6_z^1 \times 2_u$;
21) $6_z^1 \times \bar{1}$;
22) $\bar{6}_z^1 \times m_x$;
23) $\bar{6}_z^1 \times 2_{yu}$;
24) $3_{xyz}^1 \times m_x$;
25) $3_{xyz}^1 \times 2_{xy}$;
26) $3_{xyz}^1 \times m_{xy}$;
27) $4_x^1 \times 4_y^1$;
28) $4_x^1 \times 2_{xy}$;
29) $4_x^1 \times 3_{xyz}^1$;
30) $4_z^1 \times m_{xz}$;

12. Проверить, будут ли выполнятся соотношения:

1) $2_x \times 2_y = 2_y \times 2_x$; 2) $m_x \times m_y = m_y \times m_x$;

3) $2_z \times m_z = m_z \times 2_z$;
4) $3_z^1 \times m_z = m_z \times 3_z^1$;
5) $6_z^1 \times \bar{1} = \bar{1} \times 6_z^1$;
6) $2_x \times 2_{xy} = 2_{xy} \times 2_x$;
7) $m_x \times m_{xy} = m_{xy} \times m_x$;
8) $\bar{6}_z^1 \times m_y = m_y \times \bar{6}_z^1$;
9) $4_x^1 \times 4_y^1 = 4_y^1 \times 4_x^1$;
10) $3_{xyz}^1 \times 2_x = 2_x \times 3_{xyz}^1$;

13. Какие координаты получит точка с координатами *x, y, z* после действия следующей операции симметрии:

1) m_y;
2) 2_z;
3) 2_{xz};
4) 2_{yz};
5) 4_x^1;
6) 4_y^1;
7) 4_z^1;
8) 4_z^{-1};
9) $\bar{4}_z^{-1}$;
10) 3_z^{-1};
11) $\bar{3}_z^1$;
12) 6_z^1;
13) $\bar{6}_z^1$;
14) 6_z^{-1};
15) 3_{xyz}^1?

14.Вывести точечные группы симметрии и записать их символы двумя способами. Генераторы заданы следующими операциями симметрии:

1) Поворот вокруг оси второго порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости симметрии;
2) Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, лежащей в этой плоскости;
3) Последовательные повороты вокруг двух взаимно перпендикулярных осей второго порядка;
4) Отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, лежащей в одной и перпендикулярной второй плоскости;

5)*Поворот вокруг оси четвертого порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости симметрии;*

6)*Два последовательных поворота вокруг осей второго порядка, составляющих между собой угол 45°;*

7)*Последовательные отражения в двух плоскостях симметрии, расположенных под углом 45° друг к другу;*

8)*Последовательные отражения в трех плоскостях симметрии, две из которых пересекаются под углом 45°, а третья им перпендикулярна;*

9)*Последовательные повороты вокруг взаимно перпендикулярных осей четвертого и второго порядка и отражение в центре инверсии;*

10)*Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг зеркальной оси четвертого порядка, лежащей в этой плоскости;*

11)*Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с ней угол 45°;*

12)*Повороты вокруг двух осей второго порядка, составляющих друг с другом угол 60°;*

13)*Последовательные отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 60°;*

14)*Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с плоскостью угол 30°;*

15)*Последовательные повороты вокруг перпендикулярных друг к другу оси шестого и оси второго порядка;*

16)*Последовательные отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 30°;*

17)*Последовательные отражения в трех плоскостях симметрии, две из которых пересекаются под углом 30°, а третья им перпендикулярна;*

18)*Отражения в двух пересекающихся под углом 30° плоскостях симметрии и центре инверсии;*

19)*Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с плоскостью угол 60°;*

20)*Последовательные повороты вокруг перпендикулярных друг к другу зеркальной оси третьего порядка и поворотной оси второго порядка.*

15. *Вывести точечные группы и записать их символы по Шенфлису и Герману-Могену. Генераторы заданы элементами симметрии:*

1) 4_z и 2_x;
2) $2_z, 2_x$ и $\bar{1}$;
3) $6_z, 2_x$ и $\bar{1}$;
4) 3_z и m_y;
5) $4_z, m_{xy}$ и 3_{xyz}.

16. *Записать символы Шенфлиса точечных групп, заданных международными символами:*

1) $\bar{1}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$;
2) $\bar{3}m, \bar{4}2m, \bar{6}m2, \bar{4}3m$.

17.*Записать стандартными международными символами точечные группы, заданные нестандартным образом в этой же системе обозначений:*

1) $\frac{2}{m}mm$;
2) $22m$;
3) $\frac{2}{m}m2$;
4) $42m$
5) $\bar{4}22$;
6) $\bar{4}mm$;
7) $43m$;
8) $\frac{4}{m}3$;
9) $23m$;
10) $62m$;

Ответы к задачам для самоконтроля

1

1) $\bar{1}$;
2) 2_z;
3) e;
4) e;
5) $\bar{1}$;
6) 2;
7) $\underset{\circ}{4}^{-1}$;
8) m_2;
9) 6^1;
10) $\bar{6}^1$.

2

1) 3;
3) $\bar{3}$;
4) 4;
5) $\underset{\circ}{4}$;
7) $\bar{6}$;
8) 6.

3

Матрицы операций симметрии приведены в Приложениях 1 и 2. В задачах 1-7, 14, 15, 17-20, 23, 24, 27,30 операции первого рода. В задачах 8-13, 16, 21, 22, 25, 26, операции второго рода.

4

Полные стереографические проекции точечных групп симметрии приведены в приложении 4:

1) $C_{2h} = \frac{2}{m}$;
2) $C_{2v} = mm2$;
3) $D_{2h} = mmm$;
4) $D_2 = 222$;
5) $D_3 = 32$;
6) $C_{3v} = 3m$;
7) $D_{3d} = \bar{3}m$;
8) $D_{3d} = \bar{3}m$;
9) $D_3 = 32$;
10) $D_4 = 422$;
11) $C_{4v} = 4mm$;
12) $C_{4h} = \frac{4}{m}$;
13) $D_{4h} = \frac{4}{m}mm$;
14) $D_{2d} = \bar{4}2m$;
15) $D_{2d} = \bar{4}2m$;
16) $D_6 = 622$;
17) $C_{6v} = 6mm$;
18) $D_{6h} = \frac{6}{m}mm$;
19) $D_{3h} = \bar{6}m2$;
20) $D_{3h} = \bar{6}m2$;
21) $T = 23$;
22) $T_h = m32$;
23) $O = 432$;
24) $O = 432$;
25) $T_d = \bar{4}3m$;
26) $O_h = m3m$;
27) $O_h = m3m$.

5

1) $L_2 = C_{2=2}, P = C_s = m, L_2PC = C_{2h} = \frac{2}{m}$;
2) $3L_2 = D_2 = 222, L_22P = C_{2v}$=mm2, $3L_2PC = D_{2h} = mmm$;
3) $L_4 = C_4 = 4, L_4PC = C_{4h} = \frac{4}{m}, L_44L_2 = D_4 = 422, L_44P = C_{4v} = 4mm,$
$\bar{L}_4 = S_4 = \bar{4}, \quad \bar{L}_42L_22P = D_{2d} = \bar{4}2m$;
4) L_3=C_3=3, $\bar{L}_3C = C_{3i} = \bar{3}$, $L_33L_2 = D_3 = 32, L_33P = C_{3v} = 3m,$
$\bar{L}_33L_22PC = D_{3d} = \bar{3}m$;
5) L_6=C_6=6, $L_6PC = C_{6h} = \frac{6}{m}, L_66L_2 = D_6 = 622,$ $L_66P = C_{6v} = 6mm,$
$L_66L_27PC = D_{6h} = \frac{6}{m}mm,, L_3P = C_{3h} = \bar{6}, L_33L_24P = D_{3h} = \bar{6}m2$;
6) $3L_24L_3 = T = 23, 3L_24L_33PC = T_h = m3, 3L_44L_36L_2 = O = 432,$
$3L_44L_36P = T_{hd} = \bar{4}3m$, $\quad 3L_44L_36L_29PC = O_h = m3m$;

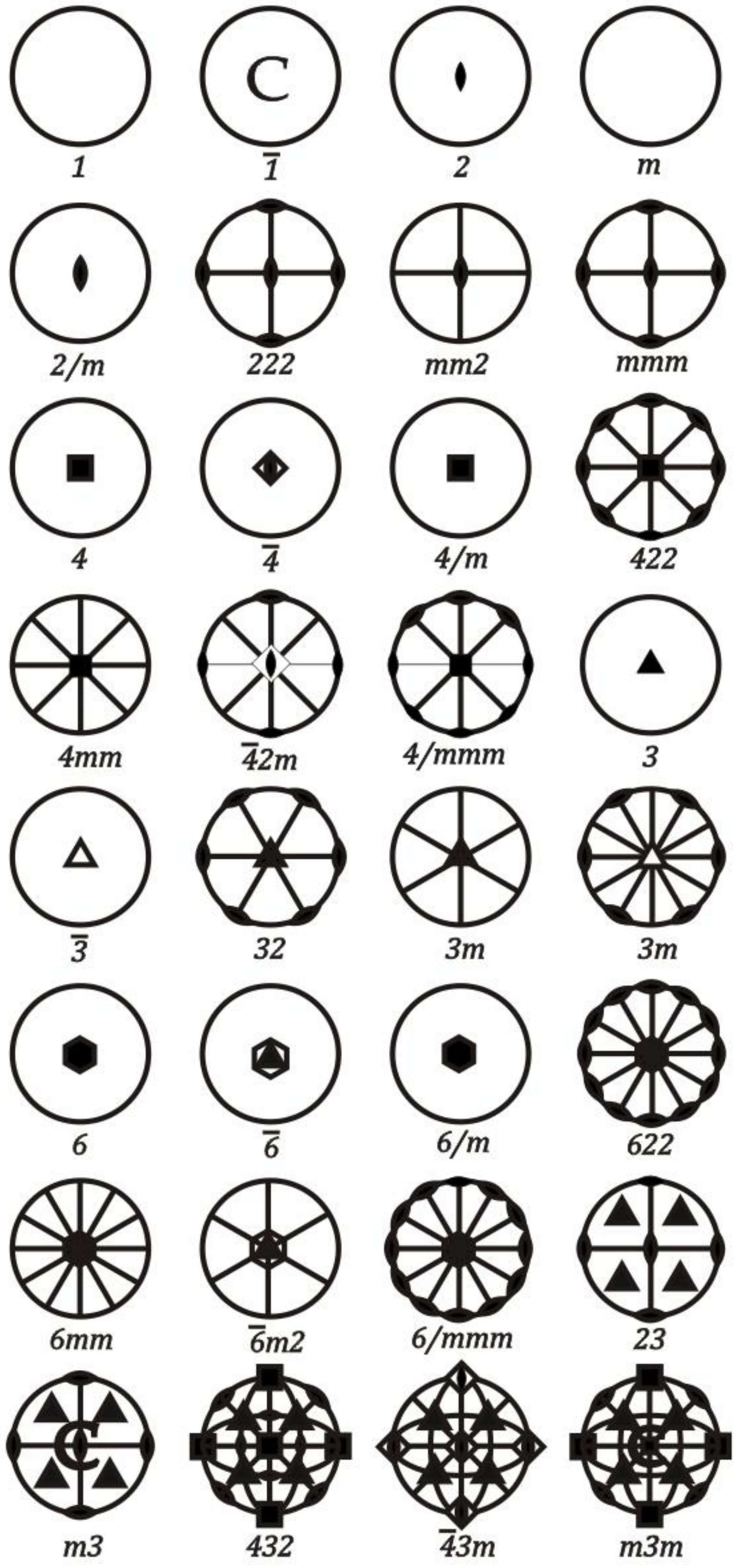
Приложение 1

32-точечные группы симметрии

	Сингония	**Обозначения**			**Порядок группы**
		По Шенфлису	**По Герману-Могену**	**По Бравэ**	
1	*Триклинная*	C_1	1	L_1	1
2		C_i	$\bar{1}$	C	2
3	*Моноклинная*	C_2	2	L_2	2
4		C_s	m	P	2
5		C_{2h}	$2/m$	L_2PC	4
6	*Ромбическая*	D_2	222	$3L_2$	4
7		C_{2v}	$mm2$	L_22P	4
8		D_{2h}	mmm	$3L_23PC$	8
9	*Тетрагональная*	C_4	4	L_4	4
10		C_{4h}	$4/m$	L_4PC	8
11		D_4	422	L_44L_2	8
12		C_{4v}	$4mm$	L_44P	8
13		D_{4h}	$4/mmm$	L_44L_25PC	16
14		S_4	$\bar{4}$	L_{4i}	4
15		D_{2d}	$\bar{4}2m$	$L_{4i}2L_22P$	8
16	*Тригональная*	C_3	3	L_3	3
17		$C_{3\mathrm{i}}$	$\bar{3}$	$L_{3i}C$	6
18		D_3	32	L_33L_2	6
19		C_{3v}	$3m$	L_33P	6
20		D_{3d}	$\bar{3}m$	$L_{3i}3L_23PC$	12
21	*Гексагональная*	C_6	6	L_6	6
22		C_{6h}	$6/m$	L_6	12
23		D_6	622	L_66L_2	12
24		C_{6v}	$6mm$	L_66P	12
25		D_{6h}	$6/mmm$	L_66L_27PC	24
26		C_{3h}	$\bar{6}$	L_3P	6
27		D_{3h}	$\bar{6}m2$	L_33L_24P	12
28	*Кубическая*	T	23	$3L_24L_3$	12
29		T_h	$m3$	$3L_24L_33PC$	24
30		O	432	$3L_44L_36L_2$	24
31		T_d	$\bar{4}3m$	$3L_{4i}4L_36P$	24
32		O_h	$m3m$	$3L_44L_36\,L_29PC$	48

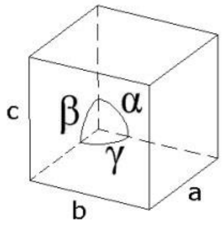
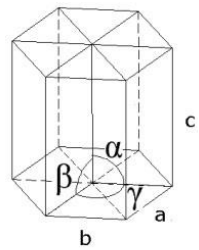
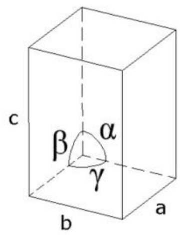
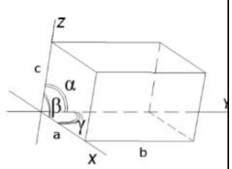
Приложение 2

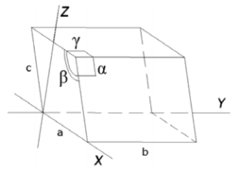
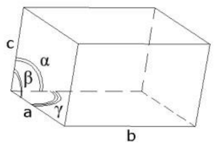
Стереографические проекции 32-точечных групп симметрии



Приложение 3

Установка кристаллов

Сингония	Координатный репер	Выбор осей координат в кристалле	Единичная грань (111)	Вид элементарной ячейки
Кубическая	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \lambda = 90°$	X, Y, Z – три оси L_4; при их отсутствии – три оси L_2	Грань октаэдра или тетраэдра	
Гексагональная и тригональная	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$	$Z - L_3, L_6$ *или* L_{i6} оси X, Y и U – три эквивалентных оси L_2; при их отсутствии – три нормали к плоскостям симметрии; при отсутствии плоскостей – три направления параллельные ребрам.	Грани тригональных и гексагональных пирамид, дипирамид, ромбоэдра с символами $(11\bar{1}1)(11\bar{2}1)$	
Тетрагональная	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	$Z - L_4$ *или* L_{i4} оси X и Y – две эквивалентных оси L_2 *или*, при их отсутствии – две нормали к плоскостям симметрии; при отсутствии плоскостей – два направления параллельные ребрам.	Грани тетрагональных пирамиды, дипирамиды, тетраэдра	
Ромбическая	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	$Z - L_2$(обычно по удлинению кристалла) X и Y – две другие оси второго порядка или нормали к плоскостям симметрии	Грани ромбических пирамиды, дипирамиды или тетраэдра	 прямоугольный параллелепипед

Моноклинная	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \lambda = 90° \neq \beta$	$Y - L_2$ или нормаль к плоскости, X и Z в плоскости перпендикулярной оси Y, параллельно ребрам.	Грани ромбической призмы или диэдра.	 параллелепипед со сторонами перпендикулярными плоскости $Y = 0$
Триклинная	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	Все координатные оси параллельны ребрам кристалла (осям соответствующих поясов).	Грани пинакоида или моноэдра.	 параллелепипед общего вида

Список литературы

1. Е. В. Чупрунов, А. Ф. Хохлов, М. А. Фаддеев Основы кристаллографии.— М.: Физматлит, 2004, 500 с.

2. Кристаллография: лабораторный практикум /под ред. Проф. Е. В. Чупрунова: Учебное пособие для вузов.— М.: Физматлит, 2005, 442 с.

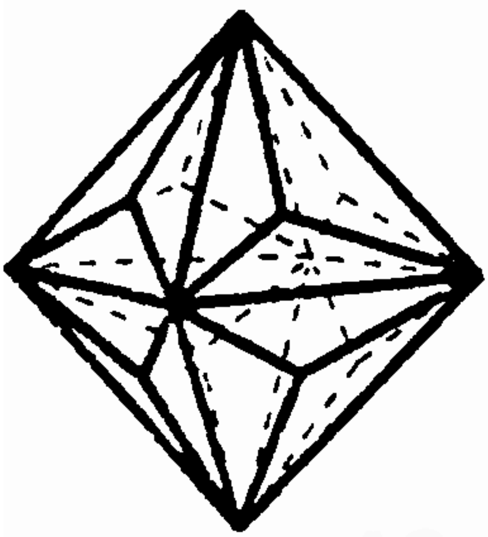
3. Задачи по кристаллографии: Учебное пособие для вузов/ под ред. Проф. Е. В. Чупрунова, А. Ф. Хохлова — М.: Физматлит, 2003, 208 с.

4. Г. Б. Князев Введение в кристаллографию: Учебное пособие — Томский государственный университет, 1999, 219 с.

ВИДЫ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОГРАННИКОВ

ТИПЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

Методические указания
по курсу «Кристаллография и кристаллофизика»



Владивосток
20 15

ВИДЫ СИММЕТРИИ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП, СИМВОЛОВ ГРАНЕЙ, ПЛОСКОСТЕЙ, РЕБЕР КРИСТАЛЛА.

I. Анизотропия и симметрия кристаллов.

В природе, в научных и заводских лабораториях кристаллы растут в виде красивых, правильных многогранников с плоскими гранями и прямыми ребрами. Симметрия и правильность внешней формы природных кристаллических многогранников - отличительная особенность кристаллов, но не обязательная. Часто выращивают кристаллы не многогранные, но их свойства от этого не изменяются. Из природных и искусственно выращенных кристаллов вырезают пластинки, призмы, стержни, линзы, в которых уже нет следов внешней многогранной формы кристалла, но сохраняется удивительная симметрия структуры и свойств кристаллического вещества.

Опыт показывает: если поместить пластину из кристалла в раствор или расплав того же вещества и дать ей возможность свободно расти, то опять вырастет кристалл в форме правильного симметричного многогранника. Это происходит из-за того, что скорость роста кристаллов в разных направлениях различна. Это лишь один пример ***анизотропии*** физических свойств кристалла. Почти все физические свойства кристаллов в разных направлениях различны, т.е. кристаллы анизотропны. Например, такое свойство кристаллов, как удельная электропроводность, определяется соотношением между двумя величинами (напряженностью электрического поля и плотностью тока), каждая из которых характеризуется как величиной, так и направлением. Следовательно, мы можем предполагать, что физическое свойство такого типа будет зависеть от направления, в котором оно измеряется. Действительно, эксперименты показывают, что электропроводность многих кристаллов меняется с направлением. Можно привести еще множество других примеров: распределение тепла, вызванное **grad T** (теплопроводность), поляризация, возникающая в диэлектриках, помещенных в электрическое поле (диэлектрическая восприимчивость); деформация, вызванная механическим напряжением (упругость); двойное лучепреломление под влиянием электрического поля (электрооптический эффект) и под влиянием механического напряжения (фотоупругость) и т.д. Но есть свойства, в отношении которых кристаллы изотропны, например, плотность.

Анизотропия и ***симметрия*** физических свойств - характерная особенность кристаллов, обусловленная ***закономерностью*** и ***симметрией их внутреннего строения.*** В кристаллическом многограннике и в вырезанной из него пластинке одинаково закономерное, симметричное, периодическое расположение частиц. Частицы, из которых сложены кристаллы, - атомы, ионы, молекулы образуют правильные симметричные ряды, сетки, решетки. Каждому кристаллическому веществу присущи определенный порядок, характерный «узор» и симметрия в расположении частиц, установившиеся расстояния между частицами, причем все эти закономерности можно определить качественно и количественно.

Закономерность расположения частиц, их природа, их энергетический спектр и силы связи между ними определяют физические свойства кристаллов. Закономерность и симметрия структуры кристалла - следствие динамического равновесия многих сил или процессов. Внешние воздействия (электрическое, магнитное поля, механические усилия или добавление чужеродных атомов) могут нарушать это динамическое равновесие и соответственно менять свойства кристалла. Это открывает широкие возможности управления свойствами кристаллов, используемых в современной технике.

Вследствие закономерности и симметрии структуры ***кристаллы однородны и анизотропны.***

Кристалл называется **однородным**, если для некоторой точки, взятой внутри него, найдется такая, что свойства в обеих этих точках совершенно аналогичны, причем вторая точка отстоит от первой на конечном расстоянии. Эксперимент дает, что это доли нанометра или несколько ангстрем.

Уже с самого начала видна двойственность подхода к описанию кристаллического вещества: кристаллы можно рассматривать как ***дискретные*** и как ***сплошные*** среды. Дискретность внутреннего строения означает, что свойства кристалла не могут быть одинаковыми там, где частица есть, и там, где частицы нет или в местах, где расположены частицы разных сортов. Однако, для описания многих свойств кристалла достаточно ограничиться рассмотрением объемов значительно больших, чем собственный объем частицы, и значительно меньших, чем объем кристалла в целом. Именно в таком понимании рассмотрим кристалл как среду сплошную и однородную. Вследствие того, что в структуре кристалла в разных направлениях различны расстояния и силы связи между частицами, большинство свойств кристалла анизотропно, но одинаково в направлениях симметричных друг другу.

Итак, **симметрия, периодичность и закономерность структуры** - основные характеристики кристаллического вещества. А основным методом кристаллографии является установление симметрии явлений, свойств, структуры и внешней формы кристалла.

В кристаллических многогранниках различают следующие элементы ограничения: *грани, ребра, вершины, углы.*

Грани – это плоскости, ограничивающие кристаллический многогранник.

Ребра - линии пересечения граней.

Вершины - точки пересечения ребер или схождение тождественных граней.

Углы - двугранный угол, образованный двумя пересекающимися гранями.

Все элементы ограничения связаны между собой зависимостью по **формуле** Декарта-Эйлера:

$$\mathbf{h + l = r + 2}$$

где: **h**- число граней; **r**- число ребер; **l** – число вершин.

В природных условиях кристаллы одного и того же минерала часто имеют искаженную форму и величину граней, недоразвитые вершины и ребра.

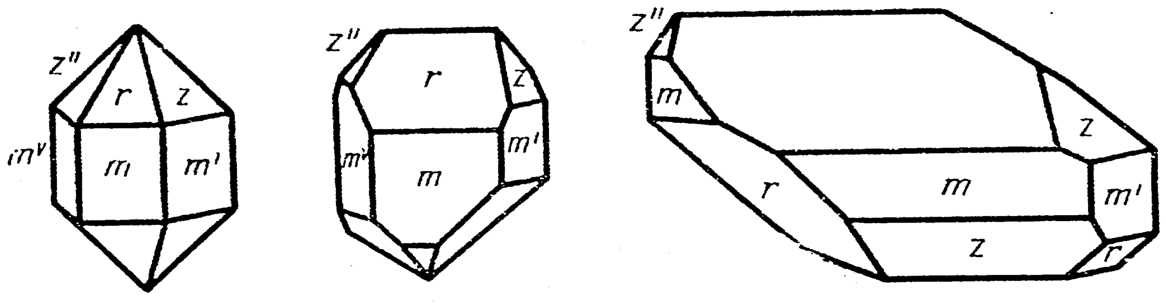


Рис. 1. Три различных кристалла кварца с разнотипным развитием соответствующих граней

Однако, несмотря на это обстоятельство, угол между ***соответствующими гранями кристалла одного и того же минерала всегда остается постоянным*** *(рис. 1).* В этом заключается один из основных законов кристаллографии

– ***закон постоянства углов***. Этот закон был открыт в 1669 г. Николой Стеноном.

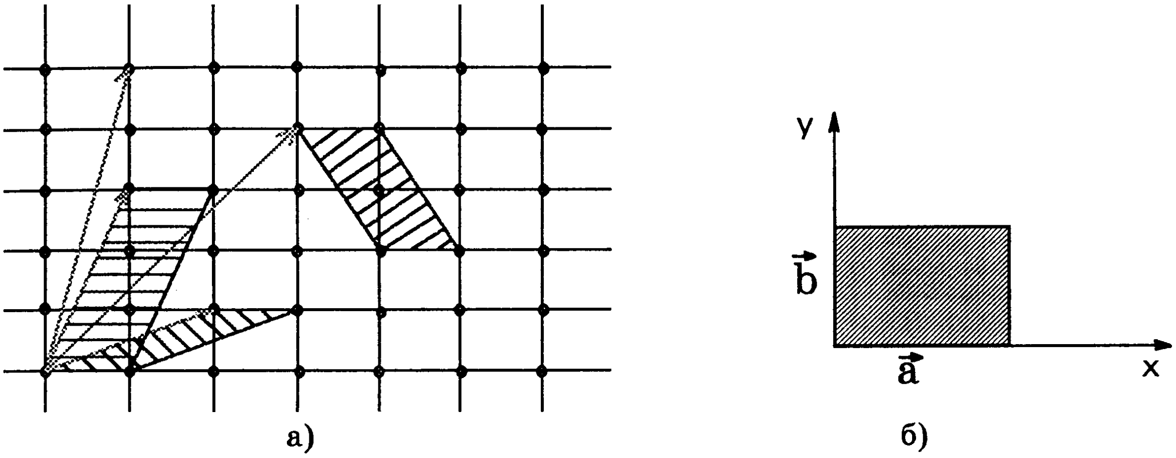
Закон постоянства углов является диагностическим. Он позволил характеризовать всякое вещество, встречающееся в виде кристаллов.

II. Структура кристалла и пространственная решетка.

В реальных кристаллах закономерное чередование частиц всегда немного нарушено из-за их теплового движения. Сейчас мы не будем учитывать дефекты и нарушения кристаллического строения, а будем рассматривать кристалл идеальный: в структуре этого кристалла нет нарушений, все одинаковые частицы расположены одинаковыми, параллельными рядами, которые всегда надо представлять бесконечными. В кристаллах существует ***дальний порядок!***

Расстояния между частицами в большинстве кристаллических веществ несколько ангстрем, так даже на длине 1 мм в кристалле располагается $\sim 10^7$ частиц, что практически можно считать бесконечным числом.

Кратчайшее из возможных расстояний между одинаковыми точками в ряду *называется* ***элементарной*** (кратчайшей) ***трансляцией*** или периодом идентичности; иногда употребляют названия период трансляции или параметр ряда (например, ***период трансляции*** "**а**" - вектор, показывающий направление элементарной трансляции).



а) б)

РИС. 2.

Если сдвинуть точки бесконечного ряда на один период идентичности вдоль направления трансляции, то все точки передвинутся на одинаковые расстояния, ряд совместится сам с собой, так что вид его не нарушится. Так производится ***симметричное преобразование***: ряд симметрично сдвигается на один период трансляции “**а**”. Симметричное преобразование, с помощью которого точки повторяются в пространстве, называется преобразованием с помощью трансляции или просто ***трансляцией***. Одинаковые точки, связанные между собой трансляциями "**а**" в бесконечном ряду, называются ***узлами*** ряда. Повторяя одинаковые точки с помощью другой трансляции, не параллельной первой, получим двумерную плоскую сетку, которая полностью определена двумя элементарными трансляциями "**а**" и "**б**", рис.2 *б* или тремя произвольными узлами, не лежащими на одной прямой. Параллелограммы, вершины которых являются узлами ряда, называются ***ячейками*** сетки. Плоскую сетку можно определить любой парой трансляций, не лежащих на одной прямой, рис.2а. Принято выбирать элементарные трансляции, которые лучше всего отражают симметрию сетки. Выберем в плоской сетке элементарную ячейку, повторяя её с помощью одинаковых трансляций, мы получим плоскую сетку, заполняющую всю плоскость без промежутков.

Элементарную ячейку можно выбирать по-разному, рис.2а, но принято выбирать так, чтобы она удовлетворяла условиям:

1) наилучшим образом отражала симметрию сетки;
2) имела бы прямые углы, если возможно;
3) обладала бы наименьшей площадью (объемом в трехмерном пространстве).

Примитивной элементарной ячейкой называется ячейка, внутри которой нет узлов, рис.2б. Каждый узел в вершине такой ячейки, принадлежит одновременно четырем ячейкам, поэтому на данную ячейку приходится 1/4 каждого узла, а всего 1/4*4=1 узел.

Итак, плоскую сетку (решётку) можно определить тремя способами:

1) как пару неколлинеарных трансляций;

2) как систему эквивалентных узлов, которые могу быть получены один из другого с помощью параллельного переноса;

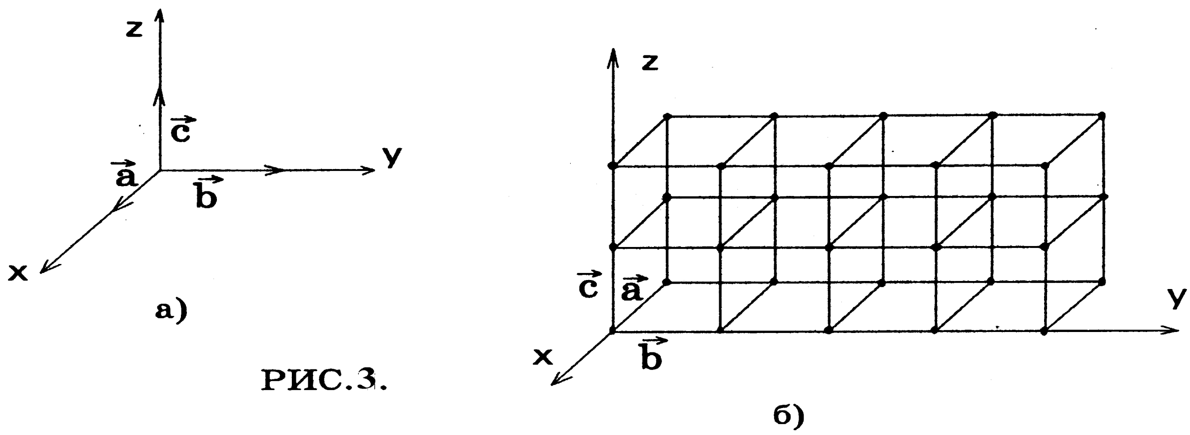


РИС.3.

3) как систему элементарных ячеек, прилегающих друг к другу, заполняющих плоскость без промежутков и совмещающихся друг с другом с помощью параллельных переносов.

Приложим теперь к произвольной точке три не лежащие в одной плоскости (некомпланарные) элементарные трансляции и повторим ее бесконечно в пространстве, (рис.3а и 3б). Получим ***пространственную решётку***, *т.е.* трехмерную систему эквивалентных узлов. Основную тройку трансляций – ***трансляционную группу*** или группу переносов для пространственной решетки выбирают также как для плоской сетки.

Параллелепипед, построенный на трех элементарных трансляциях "**а**", "**б**", "**с**", рис.4, называют ***элементарным параллелепипедом*** или ***элементарной ячейкой*** (α,β,γ - углы, лежащие соответственно против осей x,y,z). Объем V примитивной элементарной ячейки не зависит от ее формы и является величиной постоянной для данной решетки, он равен объему, приходящемуся на один узел. Пространственную решетку можно рассматривать так же, как систему элементарных ячеек, которые касаются друг друга целыми гранями и заполняют пространство без промежутков.

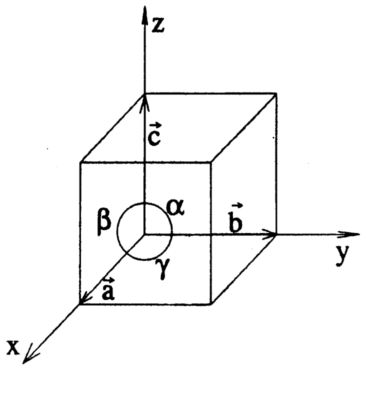


РИС.4.

Выбор основных трансляций в структуре кристалла очень важен, потому что ими определяются кристаллографические системы координат. В анизотропной кристаллической среде удобно ориентироваться с помощью трехмерной системы координат, выбранной в соответствии с симметрией кристалла.

В общем случае это косоугольные координаты с неодинаковыми масштабами по осям:

$$\mathbf{a \neq b \neq c} \qquad\qquad \boldsymbol{\alpha \neq \beta \neq \gamma = 90^0}$$

Направления кристаллических осей координат соответствуют направлениям ребер элементарной ячейки кристалла, а масштабные отрезки по осям координат - длинам этих ребер.

В некоторых случаях удобнее характеризовать плоскую сетку и пространственную решетку не примитивной, а сложной элементарной ячейкой, у которой узлы есть не только в вершинах, но и внутри ячейки.

Пространственная решетка - это способ представления периодичности в пространстве отдельных материальных частиц или групп частиц. Не следует отождествлять пространственную решетку с кристаллической структурой. Структура кристалла - это конкретное расположение частиц в пространстве.

III. Метод кристаллографического индицирования.

Кристаллическая решетка характеризуется шестью параметрами элементарной ячейки: длинами ребер a,b,c и углами α,β,γ. Причем в общем случае $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^0$. Для описания кристаллических многогранников и структур применяется метод кристаллографического индицирования, удобный для всех кристаллографических систем координат независимо от того, прямоугольны они или косоугольны, одинаковы у них масштабные отрезки по осям или разные.

Символы узлов.

Если один из узлов решетки выбрать за начало координат, то любой другой узел решетки определяется радиус-вектором $\mathbf{R} = m\mathbf{a}+n\mathbf{b}+p\mathbf{c}$

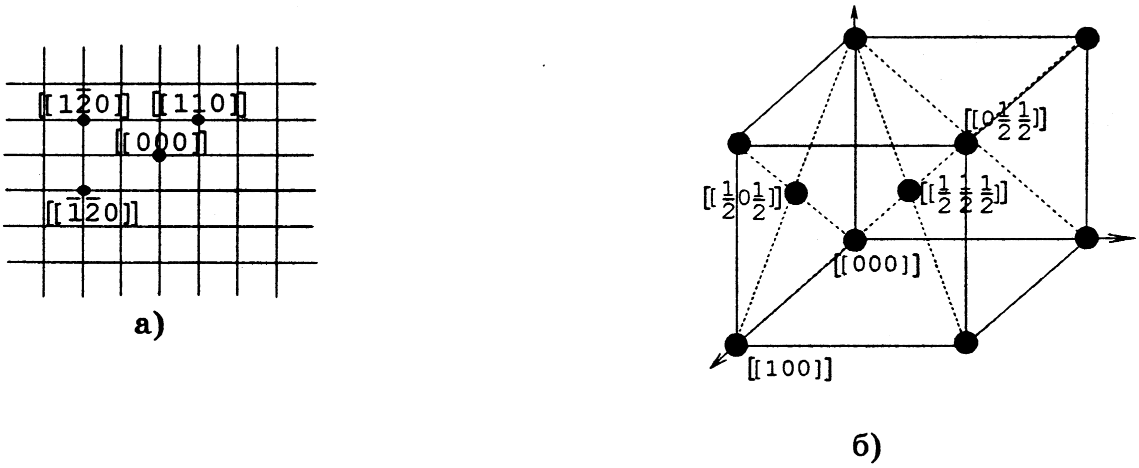


РИС. 5.

где m,n,p – три числа, которые называются ***индексами*** данного узла. Совокупность чисел m,n,p, записанная в двойных квадратных скобках [[mnp]] называется ***символом узла***. Числа в символе пишутся подряд, без запятых, читаются порознь. Знак "-" ставится над цифрой. Например, [[130]], [[023]]. На рис.5а показаны символы нескольких узлов в плоской сетке (индекс по третьей оси равен нулю). На рис. 5б - символы вершин, центров граней и центра трехмерной элементарной ячейки, если одна из вершин ячейки принята за начало координат.

Символы рядов (ребер)

Ряд или узловая прямая, а также ребро кристаллического многогранника характеризуется наклоном в выбранной системе координат. Если ряд не проходит через начало координат, мысленно сдвинем его параллельно самому себе так, чтобы он прошел через начало координат. Тогда направление ряда определяется двумя точками: началом координат и любым узлом ряда. Символ этого узла принимают за символ ряда и пишут в квадратных скобках [mnp]. Очевидно, этот символ характеризует семейство параллельных рядов.

Грани кристалла пересекающиеся по параллельным ребрам, образуют ***пояс*** или ***зону***, а общее направление этих ребер называется ***осью зоны***. Символ [mnp] характеризует ось зоны. На рис. 6а показаны символы нескольких направлений в плоской сетке. Видно, что, например, ряд [110] можно характеризовать и символом [220], [330] и т.п., но для определения символа ряда принято выбирать узел, ближайший к началу координат.

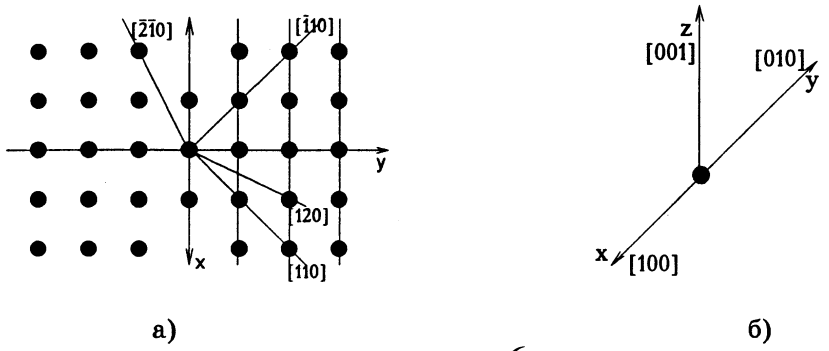


РИС. 6.

Оси координат OX,OY,OZ имеют соответственно символы [100], [010], [001], рис. 6б. Здесь видно одно из основных преимуществ кристаллической символики: символы осей координат не зависят от углов между осями координат.

Символы плоскостей, граней .

Плоские сетки в пространственной решетке и соответствующие им грани кристаллического многогранника тоже характеризуются наклоном в заданной системе координат. Любая грань кристалла параллельна какой-либо плоской сетке, а значит, бесконечному числу параллельных ей плоских сеток.

Пусть некая плоскость решетки пересекает все три оси координат, отсекая на них отрезки ma, nb, pc. Отношение чисел m:n:p характеризует наклон

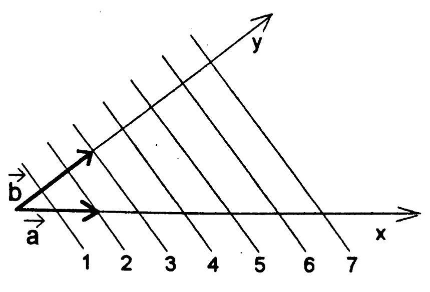


РИС.7

№	x	y	z	m:n:p
1	$\frac{a}{2}$	$\frac{b}{3}$	∞	$\frac{1}{2}:\frac{1}{3}:\infty = 3:2:\infty$
2	a	$2\frac{b}{3}$	∞	$1:\frac{2}{3}:\infty = 3:2:\infty$
3	$3\frac{a}{2}$	b	∞	$\frac{3}{2}:1:\infty = 3:2:\infty$
4	$2a$	$4\frac{b}{3}$	∞	$2:\frac{4}{3}:\infty = 3:2:\infty$

плоскости к осям координат. Таким же отношением определяется и ориентировка всего семейства параллельных ей плоскостей.

Для семейства плоскостей на рис.7:

Серию отношений рациональных чисел m:n:p для всех параллельных плоскостей можно представить как отношение целых взаимно простых чисел p:q:r, так называемых ***параметров Вейсса***. В нашем примере p:q:r =3:2:∞.

В кристаллографии плоскости принято характеризовать не параметрами, а ***индексами Миллера*** - величинами, обратными параметрам Вейсса, приведенными к целым числам. Если параметры плоскости p,q,r, то индексы Миллера определяются из соотношения

$$\mathbf{p^{-1}:q^{-1}:r^{-1}} = \boldsymbol{h:k:l}$$

В приведенном примере h:k:l =2:3:0.

Числа h,k,l называются индексами плоскости; индексы, написанные подряд и заключенные в круглые скобки, - (hkl) - называют символами плоскости. В нашем примере это (230). Символом (hkl) характеризуется вся совокупность параллельных плоскостей. Этот символ означает, что система параллельных плоскостей рассекает отрезок "a" на h частей, "b" на k частей, "c" на l частей,

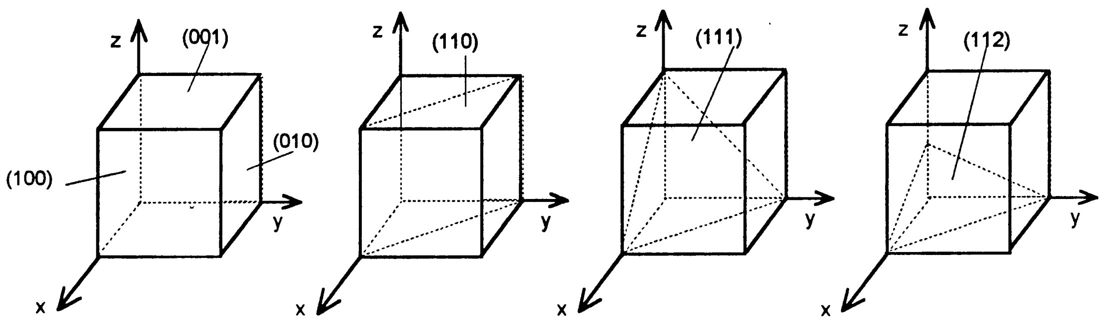


РИС.8.

т.е. отсекает на осях координат отрезки a/h, b/k c/l. Значит, чтобы построить плоскость (hkl), надо нанести на осях координат эти отрезки и провести через них плоскость. В общем виде уравнение плоскости (hkl) и всего семейства параллельных ей плоскостей будет hx+ky+lz = N, где N- всегда целое число, h,k,l - взаимно простые, целые числа. Символы некоторых плоскостей в кубической решетке даны на рис. 8.

Чтобы найти индексы Миллера любой кристаллографической плоскости, надо выбрать начало координат, затем найти число единичных отрезков, отсекаемых плоскостью на осях координат, через осевые отрезки a,b,c; найти обратные значения этих величин, привести к общему знаменателю, отбросить общий знаменатель и заключить полученные три числа в круглые скобки. Чтобы построить плоскость (hkl), нужно нанести на осях координат отрезки a/h, b/k c/l. Через полученные таким образом точки проходит плоскость семейства (hkl), ближайшая к началу координат.

IV. Элементы симметрии кристаллических многогранников.

Симметричной фигурой (или симметричным многогранником) называется фигура (многогранник), которая может совместиться сама с собой в результате симметричных преобразований.

Операции и элементы симметрии I и II рода.

Отражения и вращения, приводящие многогранник в совмещение с самим собой, называются ***преобразованиями симметрии*** или ***симметричными операциями.***

Воображаемые плоскости, линии и точки, с помощью которых осуществляются эти отражения и вращения, называются ***элементами симметрии.***

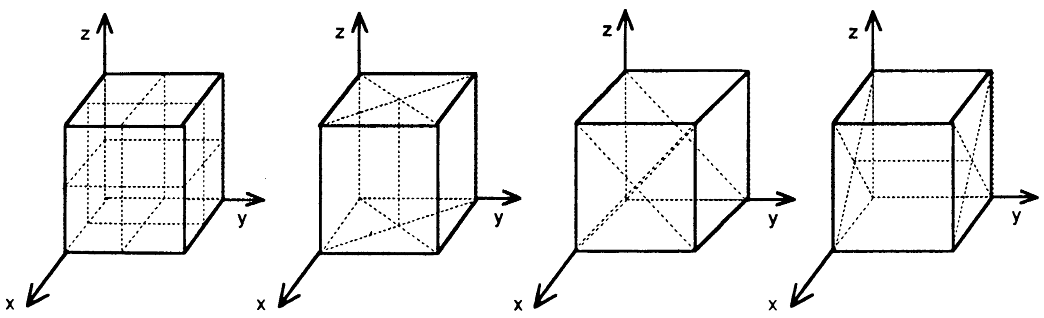
Плоскости симметрии, оси симметрии, центр симметрии - характерные ***элементы симметрии*** кристаллических многогранников. Для обозначения симметричных преобразований и соответствующих им элементов симметрии в кристаллографии пользуются условными символами, приведенными в таблице:

Название	Обозначение	
	международный символ	по формуле симметрии
Плоскость симметрии	m	p
Центр симметрии	$\bar{1}$	c
Поворотная ось симметрии:	n	L_n
двойная	2	L_2
тройная	3	L_3
четверная	4	L_4
шестерная	6	L_6
Инверсионная ось симметрии:	$\bar{n}$	$L_{\bar{n}}$
тройная	$\bar{3}$	$L_{\bar{3}}$
четверная	$\bar{4}$	$L_{\bar{4}}$
шестерная	$\bar{6}$	$L_{\bar{6}}$

__Плоскость симметрии__ - плоскость, которая делит фигуру на две части, расположенные друг относительно друга как предмет и его зеркальное отражение, как правая и левая рука.

В кубе три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии делят пополам противоположные ребра куба, шесть плоскостей симметрии проходят по диа-

РИС.9.



гоналям граней куба. Все девять плоскостей симметрии пересекаются в одной точке - центре куба, рис. 9.

Осью симметрии называется прямая линия, при повороте вокруг которой на некоторый определённый угол фигура совмещается сама с собой. Порядок оси симметрии n показывает сколько раз фигура совместится сама с собой при полном обороте вокруг этой оси. У куба есть три оси 4-го порядка (4, L_4), которые проходят через центры противоположных граней куба, четыре оси 3-го порядка (3, L_3), являющиеся пространственными диагоналями куба, шесть осей 2-го порядка (2, L_2), проходящих через середины пар противоположных рёбер, рис. 10.

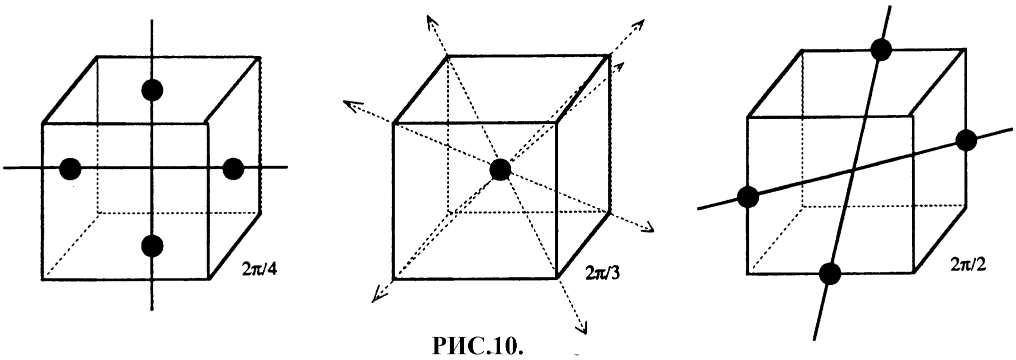


РИС.10.

Все оси симметрии куба пересекаются в одной точке - в центре куба.

Центр симметрии (центр инверсии, центр обратного равенства) - особая точка внутри фигуры, характеризующаяся тем, что любая прямая, проходящая через центр симметрии, встречает одинаковые (соответственные) точки фи-

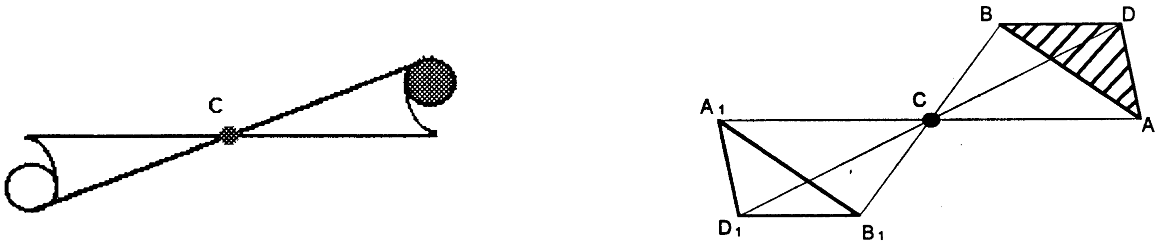


РИС.11.

гуры по обе стороны от центра на равных расстояниях, рис. 11. Симметричное преобразование в центре симметрии - это зеркальное отражение в точке.

При всех симметричных преобразованиях все расстояния между точками фигуры остаются неизменными, т.е. фигура не испытывает растяжения, сжатия, изгиба. Отражение в плоскости, поворот вокруг оси симметрии, зеркальное отражение в центре симметрии представляют собой ***конечные*** или ***точечные симметричные преобразования.*** При этих преобразованиях фигура не перемещается как целое и хотя бы одна ее точка остается на месте.

В кристаллографии нет оси 5-го порядка. В природе и в произведениях искусства можно найти примеры осей симметрии различного порядка. Сейчас обнаружена пятая ось симметрии в квазикристаллах.

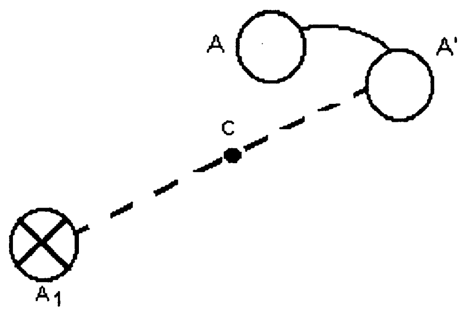
Формально можно говорить и об оси симметрии 1-го порядка: любая фигура, даже несимметричная, совместится сама с собой при полном обороте вокруг любой оси, проходящей через эту фигуру.

Кроме того, к числу операций симметрии относится также ***тождественная*** или ***единичная операция*** - это операция преобразования фигуры в себя путем оставления ее на месте. Обозначается она символом 1 (Е).

Сложные элементы симметрии.

Инверсионная ось симметрии представляет собой совместное действие оси вращения и одновременного отражения (инверсии) в центре симметрии. Инверсионных осей порядка 5 или большего, чем 6 в кристаллах не может быть.

Симметричное преобразование $\bar{6}$



Полное сочетание элементов симметрии кристаллического многогранника называется его *классом симметрии* или *точечной группой симметрии.*

Кристаллографические категории, сингонии.
Кристаллографические системы координат.

Плоскости симметрии, оси симметрии (простые и инверсионные), центр симметрии обнаруживаются в кристаллах в различных сочетаниях. Например, поваренная соль ($NaCl$) кристаллизуется в форме кубов, алмаз, кварцы - в форме октаэдров (восьмигранников). Но полный набор элементов симметрии у этих разных многогранников один и тот же: девять плоскостей m(P) - три координатные и шесть диагональных, три оси 4(L_4), четыре оси 3(L_3), шесть осей 2(L_2) и центр симметрии С. В шестигранном карандаше отчетливо проявляется иная симметрия, в которой ось симметрии 6(L_6) является единственной и ее нельзя повторить никакими другими операциями симметрии, свойственными этим кристаллам. Единственное, не повторяющееся в многограннике направление называется ***особым*** или ***единичным.***

Единичным направлением является ось 6 в шестигранной призме или пирамиде, ось 4 - в четырехгранной призме или пирамиде. Но ось 4 в кубе или октаэдре - уже не единичная. Этих осей здесь три и каждая из них может совместиться с другой такой же осью путем отражения в плоскости симметрии.

По симметрии и числу единичных направлений кристаллы делятся на ***три***

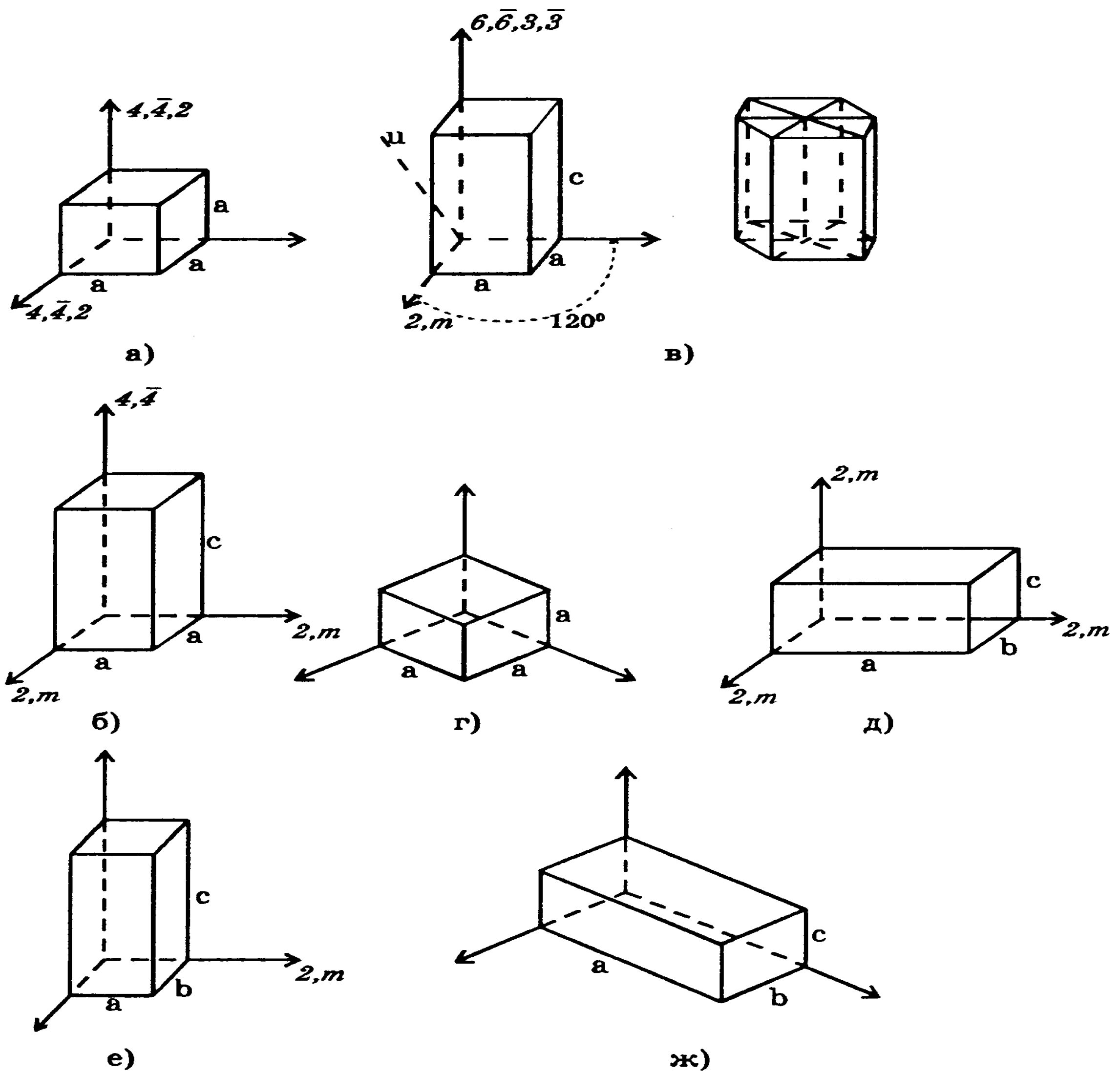


РИС.12. Примитивные ячейки семи сингоний:
а - кубическая; б - тетрагональная;
в - тригональная и гексагональная (три примитивные ячейки вместе составляют гексагональную призму); г- тригональная (ромбоэдрическая); д - ромбическая;
е - моноклинная; ж - триклинная.

категории: высшую, среднюю и низшую.

Кристаллы ***высшей*** категории не имеют единичных направлений. У них обязательно есть несколько осей порядка выше, чем 2. Это высокосимметричные кристаллы: любому направлению соответствуют другие симметрично эквивалентные направления. Свойства кристалла в симметрично эквивалентных направлениях одинаковы, поэтому анизотропия свойств в кристаллах высшей категории выражена слабее всего. Многие физические свойства (электропроводность, теплопроводность, показатель преломления) в этих кристаллах изотропны, а анизотропия других свойств гораздо слабее. Внешняя форма кристаллов высшей категории, как правило, изометрична, т.е. развита примерно одинаково во все стороны, как у куба, октаэдра, тетраэдра.

Кристаллы ***средней*** категории имеют одно особое направление: одна ось симметрии порядка выше, чем 2 (ось 3,4 или 6-го порядка, простая или инверсионная). Анизотропия физических свойств у этих кристаллов гораздо сильнее. Особенно заметно различие свойств вдоль и поперек главной оси симметрии. Характерные формы кристаллов средней категории - призмы, пирамиды.

К ***низшей*** категории относятся кристаллы, у которых нет осей симметрии порядка выше, чем 2, а единичных направлений несколько. Это наименее симметричные кристаллы с ярко выраженной анизотропией свойств.

Три категории, в свою очередь делятся на 7 ***сингоний.*** В сингонию объединяются те кристаллы, для которых одинакова симметрия элементарных ячеек их структур и одинакова система координат, рис. 12.

Трехмерная система координат в анизотропной кристаллографической среде выбирается в соответствии с симметрией среды. В общем случае - это косоугольные координаты с неодинаковыми масштабными отрезками по осям. В кристаллографических системах координат можно описывать любую грань и любое ребро кристалла тремя простыми целыми числами.

В кристаллографии пользуются всегда правой системой координат. Оси координат выбираются по осям симметрии или по нормалям к плоскостям симметрии, а если нет ни тех, ни других (в низшей категории), то по ребрам кристаллического многогранника. Классификация кристаллов по сингониям определяется выбором кристаллографической системы координат, т.е. элементарной ячейки кристалла (ее так называемой метрики –

a,b,c,α,β,γ). В **таблице** дано разделение кристаллов на категории и сингонии, а на рис.12 приведены формы примитивных элементарных ячеек.

Кристаллографические категории и сингонии и их характеристики

Количество еденичных направлений	Сингония	Оси координат	Характерная симметрия	Принятое расположение осей	Форма элементарной ячейки	Характерные параметры вещества
			НИЗШАЯ КАТЕГОРИЯ			
Несколько	Триклинная	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma = 90^0$	Ось *1* или $\bar{1}$	По рёбрам кристалла	Косоугольный параллелепипед	a, b, c α, β, γ
	Моноклинная	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^0 \neq \beta$	Ось *2* или плоскость *m*	Ось $Y \parallel$ оси *2* или перпендикулярна *m*	Прямая призма (в её основании параллелограмм	a, b, c, β
	Ромбическая	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$	Три оси *2* или три плоскости *m*	Оси $X, Y, Z \parallel$ оси *2* или перпендикулярны *m*	Прямоугольный параллелепипед	$a \neq b \neq c$
			СРЕДНЯЯ КАТЕГОРИЯ			
Одно	Тригональ-ная	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^0$ $\gamma = 120^0$	Ось 3 или $\bar{3}$	Главная ось *Z*, остальные в плоскости *XY*	Призма (в её основании ромб с углом 120^0)	c/a
	Гексагональная		Ось 6 или $\bar{6}$			
	Тетрагональная	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$	Ось 4 или $\bar{4}$		Призма с квадратным основанием	
			ВЫСШАЯ КАТЕГОРИЯ			
Нет	Кубическая	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$	Четыре оси 3	Оси $X, Y, Z \parallel$ трём взаимно перпендикулярным осям *4* или $\bar{4}$, или *2*	Куб	a

В ***высшей*** категории одна сингония - ***кубическая***. Это единственная сингония, симметрии которой отвечает декартова система координат.

К ***средней*** категории относятся три сингонии: ***тригональная, тетрагональная, гексагональная***. За главную ось симметрии в этих трех сингониях всегда принимается ось Z, а оси X, Y расположены в плоскости, перпендикулярной главной оси. Единичные отрезки по осям X,Y одинаковы (a = b), поэтому метрика кристаллов средней категории характеризуется отношением с/а, являющимся константой анизотропии вещества.

К ***низшей*** категории относятся три сингонии: ***ромбическая, моноклинная*** и ***триклинная.*** Для каждой сингонии надо знать установленный условный порядок расположения осей координат - так называемые правила кристаллографической установки (таблица и рис.12), поэтому от расположения осей зависят кристаллографические индексы.

Классом или ***видом симметрии*** какого-либо объекта называют полную совокупность операций симметрии (иначе говоря, возможных симметричных преобразований) этого объекта. Все многообразие симметрии кристаллических многогранников и их физических свойств описывается 32 классами симметрии.

Формула симметрии состоит из записанных подряд всех элементов симметрии данного объекта.

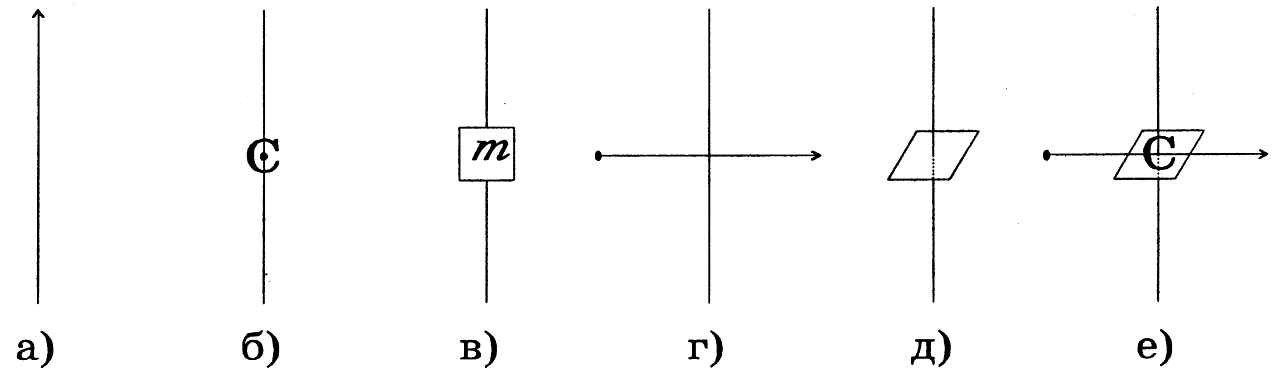


РИС.13.

На первом месте принято писать оси симметрии от высших к низшим, на втором - плоскости симметрии, затем центр. Так, формула симметрии куба $3L_4 4L_3 6L_2 9PC$. Для вывода всех возможных классов симметрии кристаллов примем ось симметрии за основной порождающий элемент симметрии. Добавляя поочередно другие элементы, образуем все возможные их сочетания, рис.13. Сначала рассмотрим случаи, когда выбранная ось симметрии является единичным направлением.

Простейшие (примитивные) классы симметрии**.** Имеется только одна

Сочетания симметрии:

Элемент симметрии	Формула симметрии	Символ Шенфлиса	Сингония
1	L_1	C_1	Триклинная
2	L_2	C_2	Моноклинная
3	L_3	C_3	Тригональная
4	L_4	C_4	Тетрагональная
6	L_6	C_6	Гексагональная

ось симметрии n-порядка вдоль единичного направления (рис.13а).

Центральные классы симметрии: добавляется к единичной оси центр симметрии, рис.13б.

Элемент симметрии		Класс симметрии		Сингония
порождающий	порождённный	формула симметрии	символ Шенфлиса	
1	-	C	C_1	Триклинная
2	m	L_2PC	C_{2h}	Моноклинная
3	$\bar{3}$	$L_{\bar{3}}$	$C_{3i}=S_6$	Тригональная
4	m	L_4PC	C_{4h}	Тетрагональная
6	m	L_6PC	C_{6h}	Гексагональная

Планарные классы симметрии: вдоль порождающей оси симметрии проводится плоскость симметрии, рис.13в.

Элемент симметрии			Класс симметрии Формула симметрии	Сингония
порождающий		порождённный		
1	Плоскость m вдоль оси	n плоскостей вдоль оси	P	Триклинная
2			L_22P	Моноклинная
3			L_33P	Тригональная
4			L_44P	Тетрагональная
6			L_66P	Гексагональная

Аксиальные классы симметрии получаются, если добавить ось 2 перпендикулярно единственной оси симметрии, рис.13г.

Добавляя к порождающей оси симметрии поперечную плоскость (рис.13д), получим лишь одно новое сочетание - **инверсионно-примитивный класс** 6. Этот класс относят к гексагональной сингонии.

Планаксиальные классы симметрии получаются, если к порождающей оси симметрии n-го порядка добавить центры симметрии, параллельные плоскости симметрии и перпендикулярные оси 2 (рис.13е). Для четных осей при этом появятся еще и поперечные плоскости m.

Ниже приведена сводка обозначений и названий классов симметрии.

Сводка различных обозначений и названий 32 классов симметрии

Международный символ: сокращённый	Международный символ: полный	Формула симметрии	Символ Шенфлиса	Символ Шубникова	Назание класса: по номенклатуре Фёдоровского института	Назание класса: по Шенфлису	Назание класса: по Гроту
ТРИКЛИННАЯ СИНГОНИЯ							
1	1	L_1	C_1	1	Примитивный	Гемиэдрия	Моноэдрический
$\bar{1}$	$\bar{1}$	C	$C_i=S_2$	$\bar{2}$	Центральный	Голоэдрия	Пинакоидальный
МОНОКЛИННАЯ СИНГОНИЯ							
2		L_2	C_2	2	Аксиальный	Гемиэдрия	Диэдрический осевой
m		P	$C_s=C_{1h}$	m	Планальный	Гемиморфия	Доматический
$2/m$	$\frac{2}{m}$	L_2PC	C_{2h}	$2:m$	Планаксиальный	Голоэдрия	Призматический
РОМБИЧЕСКАЯ СИНГОНИЯ							
222		$3L_2$	$D_2=V$	$2:2$	Аксиальный	Энантиоморфная гемиэдрия	Ромбо-тетраэдрический
$mm2$	$2mm=mm2$	L_22P	C_{2v}	$2\cdot m$	Планальный	Гемиморфия	Ромбо-пирамидальный
mmm	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$3L_23PC$	$D_{2h}=V_h$	$m\cdot 2\cdot m$	Планаксиальный	Голоэдрия	Ромбо-дипирамидальный
ТРИГОНАЛЬНАЯ СИНГОНИЯ							
3		L_3	C_3	3	Примитивный	Ромбоэдрическая тетартоэдрия	Тригонально-пирамидальный
$\bar{3}$		$L_3C=L_{3i}$	$C_{3i}=S_6$	$\bar{6}$	Центральный	Гексагональная тетартоэдрия	Ромбоэдрический
32		L_33L_2	D_3	$3:2$	Аксиальный	Энантиоморфная гемиэдрия	Тригонально-трапецоэдрический
$3m$		L_33P	C_{3v}	$3\cdot m$	Планальный	Гемиморфная гемиэдрия	Дитригонально пирамидальный
$\bar{3}$	$\bar{3}\frac{2}{m}$	L_33L_23PC	D_{3d}	$\bar{6}\cdot m$	Планаксиальный	Ромбоэдрическая голоэдрия	Дитригонально -скаленоэдрический
ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ СИНГОНИЯ							
6		L_6	C_6	6	Примитивный	Гексагональная тетартоэдрия	Гексагонально-пирамидальный
$\bar{6}$		L_3P	C_{3h}	$3:m$	Инверсионно-примитивный	Тригонально-параморфная гемиэдрия	Тригонально-дипирамидальный
$6/m$	$\frac{6}{m}$	L_6PC	C_{6h}	$6:m$	Центральный	Параморфная гемэдрия	Гексагонально-дипирамидальный

Международный символ		Формула симметрии	Символ Шенфлиса	Символ Шубникова	Назание класса		
сокращён-ный	полный				по номенклатуре Фёдоровского института	по Шенфлису	по Гроту
622		$L_6 6L_2$	D_6	$6:2$	Аксиальный	Энантиом-орфная гемиэдрия	Гексагонально трапецоэдрический
$6mm$		$L_6 6P$	C_{6v}	$6 \cdot m$	Планальный	Гемиморф-ная гемиэдрия	Дигексагонально дипирамидальный
$\bar{6}\,m2$		$L_{6i} 3L_2 3P$ ($L_3 3L_2 4P$)	D_{3h}	$m \cdot 3:m$	Инверсионно-планальный	Тригональ-ная голоэдрия	Дитригонально-дипирамидальный
$6/mmm$	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$L_6 6L_2 7PC$	D_{6h}	$m \cdot 6 \cdot m$	Планаксиаль-ный	Голоэдрия	Дигексагонально дипирамидальный
ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ СИНГОНИЯ							
4		L_4	C_4	4	Примитивный	Тетарто-эдрия	Тетрагонально- дипирамидальный
$\bar{4}$		$L_{\bar{4}}$ или L_{4i}	$\bar{S}_4$	$\bar{4}$	Инверсионно-примитивный	Тетарто-эдрия 2-го рода	Тетрагонально-тетраэдрический
$4/m$	$\frac{4}{m}$	$L_4 PC$	C_{4h}	$4:m$	Центральный	Параморф-ная гемиэдрия	Тетрагонально- дипирамидальный
422		$L_4 4L_2$	D_4	$4:2$	Аксиальный	Энантио-морфная гемиэдрия	Тетрагонально-трапецоэдрический
$4mm$		$L_4 4P$	C_{4v}	$4m$	Планальный	Гемиморф-ная гемиэдрия	Дитетрагонально пирамидальный
$\bar{4}2\,m$		$L_4\text{-}2L_2 2P$	$C_{2d}=V_d$	$\bar{4}\,m$	Инверсионно-планальный	Гемиэдрия 2-го рода	Тетрагонально скаленоэдрический
$4/mmm$	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$L_4 4L_2 5PC$	D_{4h}	$m \cdot 4:m$	Планаксиаль-ный	Голоэдрия	Дитетрагонально дипирамидаьный
КУБИЧЕСКАЯ СИНГОНИЯ							
23		$3L_2 4L_3$	T	$3/2$	Примитивный	Параморф-ная тетарто-эдрия	Тритетраэдрический
$m3$	$\frac{2}{m}\bar{3}$	$3L_2 4L_3 3PC$	T_h	$\bar{6}\,/2$	Центральный	Гемиэдрия	Дидодекаэдрический
432		$3L_4 4L_3 6L_2$	O	$\bar{3}\,/4$	Аксиальный	Энантио-морфная гемиэдрия	Триоктаэдрический
$\bar{4}3\,m$		$3L_4 4L_3 6P$	T_d	$3/\bar{4}$	Планальный	Гемиморф-ная гемиэдрия	Гексатетраэдрический
$m3m$	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$3L_4 4L_3 6L_2 9PC$	O_h	$\bar{6}\,/4$	Планаксиаль-ный	Голоэдрия	Гексоктаэдрический

ЗАДАЧА 1.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ И ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МОГОГРАННИКОВ.

1.Определить элементы симметрии для 3 фигур конечной формы. Составить формулу симметрии многогранника.

2. Установить точечные группы этих фигур и доказать, что набор элементов симметрии образует группу .

3. Определить класс кристалла, сингонию кристалла и его категорию.

ЗАДАЧА 2

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИНДЕКСОВ УЗЛОВ, РЕБЕР, НАПРАВЛЕНИЙ, ГРАНЕЙ И ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛА.

1. Для куба и октаэдра установите символы граней, осей симметрии, ребер и т.д.
2. Определить угол между направлением грани (hkl) и направлением [hkl].
3. Перечислите плоскости, входящие в семейство $\{111\}$, $\{110\}$, $\{100\}$ для кубического кристалла.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Таблица П1

Простые формы, их характерные признаки, число граней

<table>
<tr><th colspan="2">Название</th><th rowspan="2">Число граней</th><th rowspan="2" colspan="2">Характерные признаки</th></tr>
<tr><th>по номенклатуре Фёдоровского института</th><th>по Гроту</th></tr>
<tr><td colspan="5">ФОРМЫ НИЗШЕЙ И СРЕДНЕЙ КАТЕГОРИЙ</td></tr>
<tr><td>Моноэдр</td><td>Педион</td><td>1</td><td colspan="2">Одна Грань</td></tr>
<tr><td colspan="2">Пинакоид</td><td>2</td><td colspan="2">Две параллельные грани</td></tr>
<tr><td>Диэдр сфеноидаль-ный
доматический</td><td>Сфеноид
Дома</td><td>2</td><td colspan="2">Две непараллельные грани</td></tr>
<tr><td colspan="2">Пирамиды:
ромбическая
тригональная
дитригональная
тетрагональная
дитетрагональная
гексагональная
дигексагональная</td><td>
4
3
6
4
8
6
12</td><td colspan="2">Грани пересекают главную ось в одной точке</td></tr>
<tr><td colspan="2">Дипирамиды:
ромбическая
тригональная
дитригональная
тетрагональная
дитетрагональная
гексагональная
дигексагональная</td><td>
8
6
12
8
16
12
24</td><td colspan="2">Грани пересекают главную ось в двух точках. Нижние грани расположены точно под верхними</td></tr>
<tr><td colspan="2">Призмы:
ромбическая
тригональная
дитригональная
тетрагональная
дитетрагональная
гексагональная
дигексагональная</td><td>
4
3
6
4
8
6
12</td><td colspan="2">Грани параллельны главной оси. Одновременно видно не более двух граней.</td></tr>
<tr><td>Ромбический тетраэдр</td><td>Ромбический дисфеноид</td><td>4</td><td>Грани непараллельны. Одновременно видно не болеетрёх граней</td><td rowspan="6">Грани пере-секают главную ось в двух точках</td></tr>
<tr><td>Тетрагональный тетраэдр</td><td>Тетрагональный дисфе-ноид</td><td>4</td><td>Нижняя грань расположена симметрична между двумя верхними.</td></tr>
<tr><td>Тригональный ска-леноэдр</td><td>Дитригональный скаленоэдр</td><td>12</td><td rowspan="2">Нижняя пара граней расположена симметрично между двумя парами верхних граней.</td></tr>
<tr><td colspan="2">Тетрагональный скаленоэдр</td><td>8</td></tr>
<tr><td colspan="2">Трапецоэдры:
тригональный
тетрагональный
гексагональный</td><td>
6
8
12</td><td>Нижняя грань расположена несимметрично относительно двух верхних.</td></tr>
<tr><td colspan="2">Ромбоэдр</td><td>6</td><td>Нижняя грань расположена симметрично относительно двух верхних</td></tr>
</table>

Название		Число граней	Характерные признаки	
по номенклатуре Фёдоровского института	по Гроту			
ФОРМЫ ВЫСШЕЙ КАТЕГОРИИ				
Тетраэдр		4		
Куб	Гексаэдр	6		
Октаэдр		8		
Ромбододекаедр	Ромбический додекаэдр	12	Грани попарнроно параллельны	Есть перпендикулярные грани
Пентагондодекаэдр	Пентагональный додекаэдр			Нет перпндикулярных граней
Тригонтритетраэдр	Тристетраэдр		Грани непараллельны	Грани расположены между осями $2, 3$
Тетрагонтритетраэдр	Дельтонддодекаэдр			Грани расположены между осями 3
Пентагонтритетраэдр	Тетраэдрический пентагондодекаэдр			Каждая грань различно наклонена ко всем осям 2
Дидодэкаэдр	Дидодэкаэдр	24		
Гексатетраэдр	Гексатетраэдр			У многограннаика нет осей 4 (есть m)
Пентагонтриоктаэдр	Пентагоникоситетраэдр			У многограннаика есть оси 4 (нет m)
Тетрагексаэдр	Тетрагисгексаэдр			Грани параллельны осям 4 или $\bar{4}$
Тригонтриоктаэдр	Трисоктаэдр		Грани попарно параллельны	Грани расположены между осями 3 и 2 (или 3 и 4)
Тетрагонтриоктаэдр	Икоситетраэдр			Грани расположены между осями 3 и 4 (или 3 и 2)
Гексоктаэдр, сорокавосьмигранник	Гексакисоктаэдр	48		

ЗАДАЧА 3

Ознакомиться с простыми формами кристаллов.

Простые формы и их комбинации

Внешний вид кристалла – форма многогранника – зависит от внутренней структуры минерала, т.е. от сингонии, в которой кристаллизуется минерал. В основе учения о кристаллографических формах лежит понятие **«простая форма».**

Простой формой называется совокупность одинаковых граней, связанных элементами симметрии. Грани такой простой формы должны быть одинаковы по своим очертаниям и величине, а также по своим физическим и химическим свойствам. Примерами простых форм служат куб, октаэдр, ромбоэдр и другие.

Общее число простых форм ограничено и равно 47. Разнообразие геометрических форм, которое присуще природным многогранникам, объясняется комбинацией множества простых форм в них. Среди простых форм есть **открытые** и **закрытые.**

Открытая простая форма не образует замкнутой в пространстве фигуры. Она участвует только в комбинации с другими простыми формами. К открытым формам относятся: моноэдр, диэдр, пинакоид, призма, пирамида.

Замкнутая простая форма образуется замыкающимися в пространстве тождественными гранями (гексаэдр, октаэдр).

При определении кристаллов или моделей необходимо помнить:

- открытые простые формы преобладают в низшей и средней категориях;
- в высшей категории не могут находиться простые формы низшей и средней категорий.

Простые формы сингоний низшей категории

В низшей категории встречаются 7 простых форм (рис. 14):

1 - моноэдр - одногранник – простая форма, состоящая из одной единственной грани;

2 - пинакоид – две взаимно параллельные грани;

3 - диэдр - простая форма, состоящая из двух непересекающихся граней;

4 - ромбическая призма - простая форма, состоящая из четырех граней, в которой грани попарно параллельны (поперечное сечение - ромб); Призма всегда находится в комбинации с пинакоидом.

5 - ромбическая пирамида – простая форма, состоящая из четырех граней, пересекающихся в одной точке (основание пирамиды – ромб, **пирамида** всегда находится в комбинации с **моноэдром**);

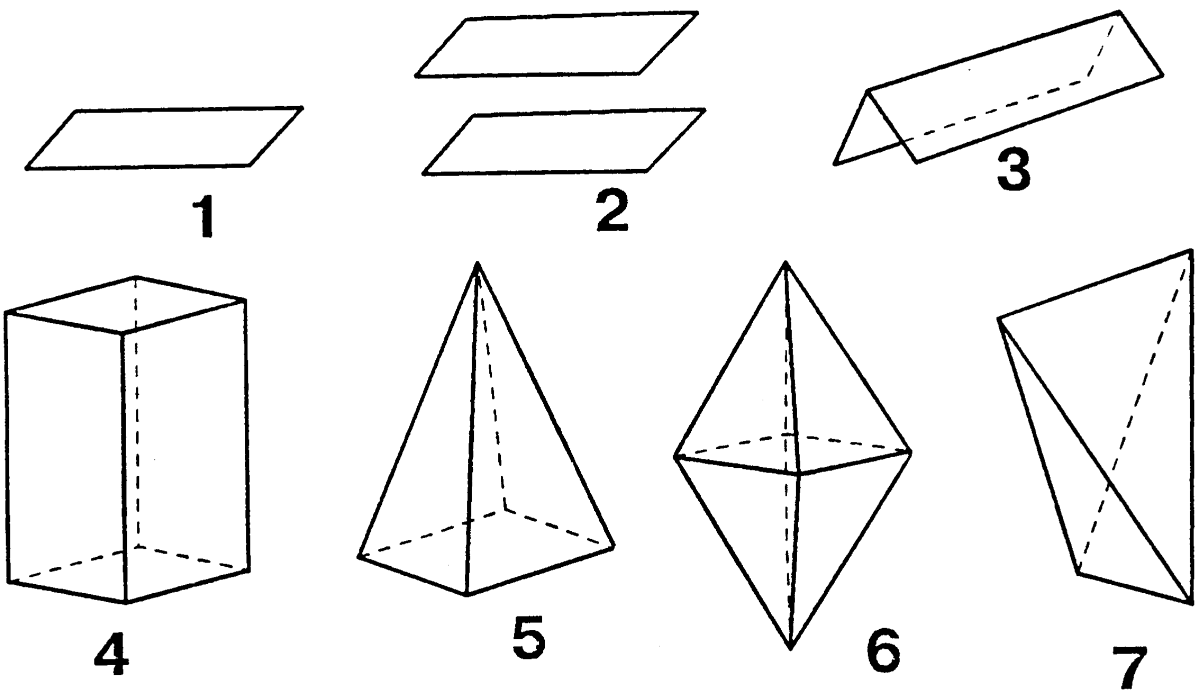


Рис.14. Простые формы низшей категории сингонии: 1 - моноэдр; 2 - пинакоид; 3 - диэдр; 4 - ромбическая призма; 5 - ромбическая пирамида; 6 - ромбическая дипирамида; 7 - ромбический тетраэдр

6 - ромбическая дипирамида – («двойная пирамида) - закрытая простая форма, образованная двумя пирамидами, как бы сложенными своими основаниями;

7- ромбический тетраэдр - закрытая простая форма, образованная четырьмя треугольниками.

Простые формы сингоний средней категории

В средней категории встречаются 25 **простых** форм (рис. 15):

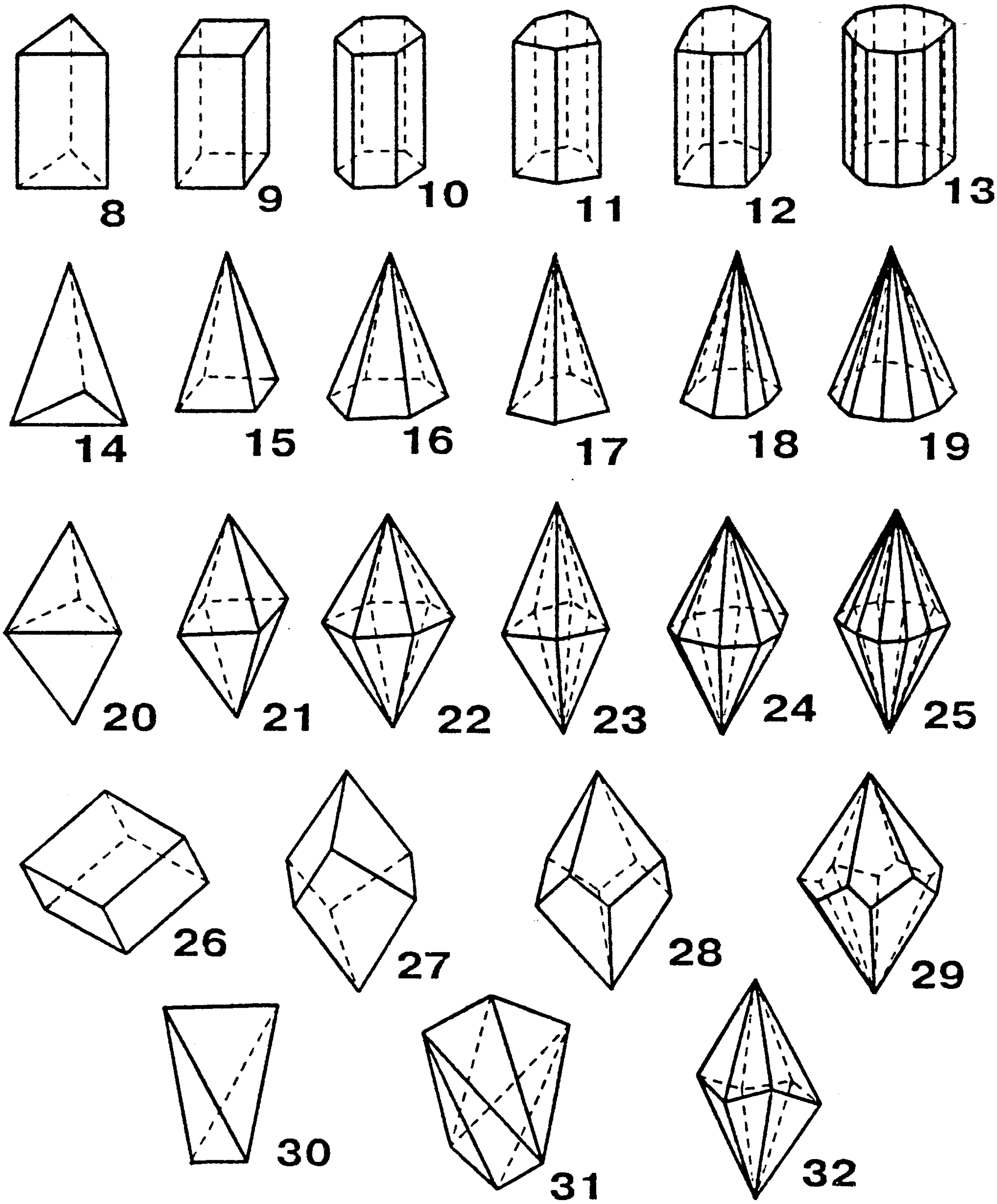


Рис.15. Простые формы средней категории сингонии: 8-13 - призмы (8 - тригональная; 9 - тетрагональная; 10 - гексагональная; 11 - дитригональная; 12 - дитетрагональная; 13 - дигексагональная); 14-19 - пирамиды (14 - тригональная; 15 - тетрагональная; 16 - гексагональная; 17 - дитригональная; 18 - дитетрагональная; 19 - дигексагональная); 20 - 25 - дипирамиды (20 - тригональная; 21 - тетрагональная; 22 - гексагональная; 23 - дитригональная; 24 - дитетрагональная; 25 - дигексагональная); 26 - ромбоэдр; 27 - тригональный трапецоэдр; 28 - тетрагональный трапецоэдр; 29 - гексагональный трапецоэдр; 30 - тетрагональный тетраэдр; 31 - тетрагональный скаленоэдр; 32 -тригональный скаленоэдр

8 - тригональная призма – простая форма, состоящая из трёх граней, параллельных L_3, имеющая в сечении треугольник;

9 - тетрагональная призма - многогранник, состоящий из четырех граней, параллельных L_4, образующий в сечении квадрат;

10 - гексагональная призма – простая форма, состоящая из шести граней, параллельных L_4, образующая в сечении шестиугольник;

11, 12, 13 –призмы, состоящие из удвоенного числа граней по сравнению с предыдущими формами;

14 - тригональная пирамида - многогранник, состоящий из трех граней, пересекающихся на L_3, имеющий в основании правильный треугольник;

15 - тетрагональная пирамида - фигура, состоящая из четырех граней, пересекающихся на L_4, образующая в основании правильный четырехугольник;

16 - гексагональная пирамида - многогранник, состоящий из шести граней, пересекающихся на L_6, имеющий в основании правильный шестиугольник;

17, 18, 19 – пирамиды, состоящие из удвоенного числа граней по сравнению с предыдущими простыми формами;

20 - тригональная дипирамида;

21 – тетрагональная дипирамида;

22 - гексагональная дипирамида;

23, 24, 25 - дипирамиды с удвоенным числом граней;

26 - ромбоэдр – простая форма, состоящая из шести граней в виде ромба;

27, 28, 29 - трапецоэдры – многогранники, похожие на дипирамиды, но отличающиеся от них тем, что нижняя их половина смещена по отношению к симметричной верхней;

30 - тетрагональный тетраэдр - фигура, образованная четырьмя равнобедренными треугольниками;

31 - тетрагональный скаленоэдр – простая форма, образованная путем удвоения граней тетраэдра;

32 - дитригональный скаленоэдр - многогранник, образованный путем удвоения граней ромбоэдра.

Простые формы сингоний высшей категории

Высшая категория представлена одной сингонией - **кубической.** В кубической сингонии встречаются 15 **простых** форм

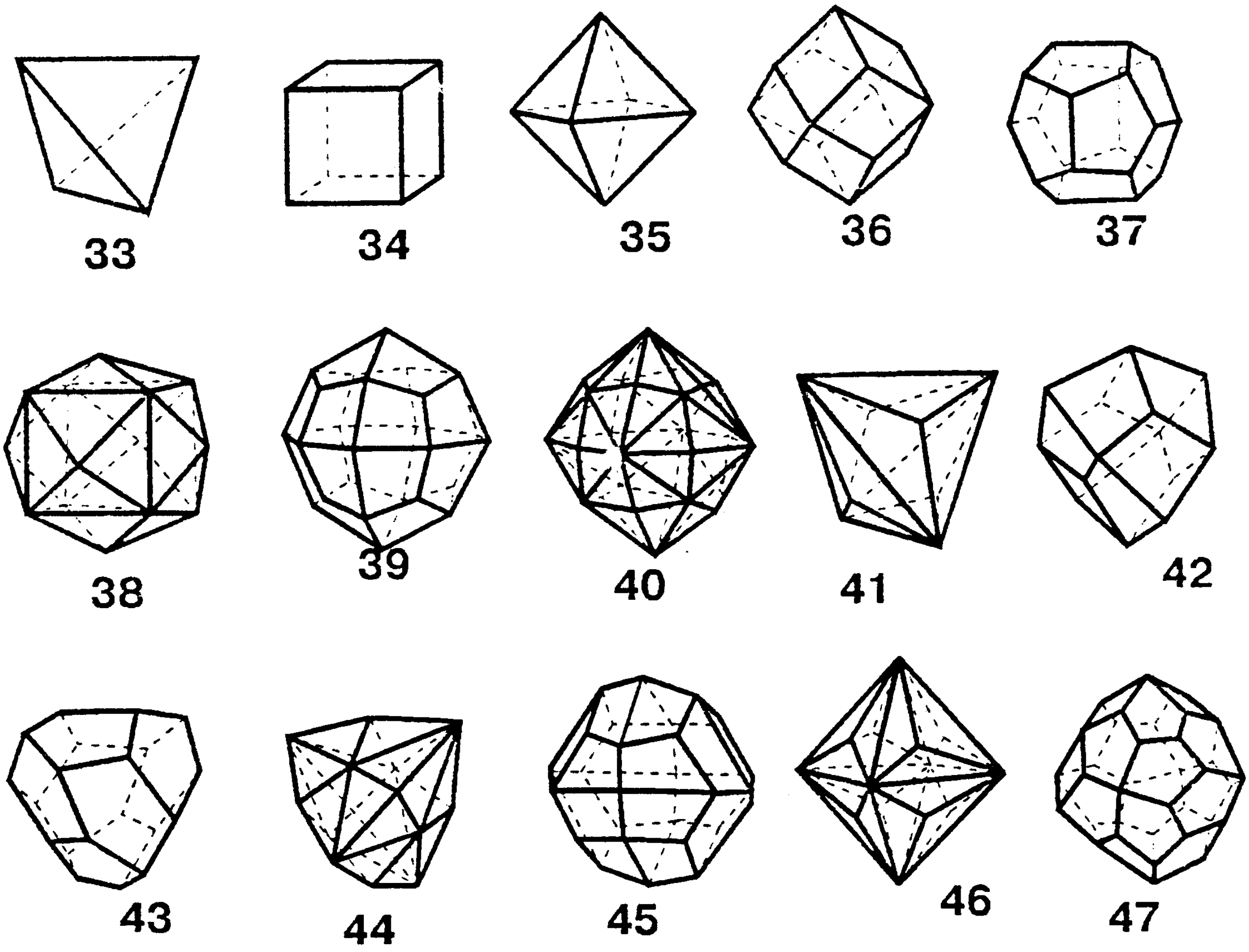


Рис. 16. Простые формы кубической сингонии: 33 - тетраэдр; 34 - гексаэдр; 35 - октаэдр; 36 - ромбододекаэдр; 37 - пентагон-додекаэдр; 38 - тетрагексаэдр; 39 - тетрагон-триоктаэдр; 40 - гексаоктаэдр; 41 - тригон-тритетраэдр; 42 - тетрагон-тритетраэдр; 43 - пентагон-тритетраэдр; 44 - гексатетраэдр; 45 - дидодекаэдр; 46 - тригон-триоктаэдр; 47 - пентагон-триоктаэдр

33 - **кубический тетраэдр** – простая форма, состоящая из четырех правильных треугольников;

34 - гексаэдр (куб) – простая форма, образованная шестью гранями в виде одинаковых квадратов;

35 - **октаэдр** - простая форма, образованная восемью правильными треугольниками;

36 - **ромбододекаэдр** – простая форма, состоящая из двенадцати граней в виде одинаковых ромбов;

37- пентагон-додекаэдр - простая форма, представляющая собой двенадцатигранник с гранями в виде пятиугольников;

38 - тетрагексаэдр – простая форма, состоящая из двадцатичетырехгранника с гранями в виде равнобедренных треугольников:

39 – **тетрагон-триоктаэдр** - простая форма, представляющая собой утроенный восьмиугольник с гранями в виде четырехугольников;

40 - гексаоктаэдр – сорокавосьмигранник с граями в виде разносторонних треугольников;

41 - **тригон-тритетраэдр** - многогранник в виде утроенного тетраэдра с гранями в виде треугольника;

42 - **тетрагон-тритетраэдр** - многогранник, представляющий собой утроенный тетраэдр с гранями в виде четырехугольника;

43 - **пентагон- тритетраэдр** - простая форма, представляющая собой утроенный тетраэдр с гранями в виде пятиугольника

44 - **гексатетраэдр** - двадцатичетырехгранник с граями в виде равносторонних треугольников;

45 - **дидодекаэдр** - двадцатичетырехгранник с гранями в виде одинаковых четырехугольников;

46 - тригон-триоктаэдр - многогранник, представляющий собой утроенный октаэдр с гранями в виде равнобедренных треугольников:

47 - **пентагон-триоктаэдр -** простая форма в виде утроенного октаэдра с пятиугольными гранями.

<u>При определении простых форм необходимо помнить следующее:</u>

1. Ни одна из простых форм низшей и средней категории в кубической сингонии не встречается! Все простые формы здесь закрытые.
2. В основу номенклатуры простых форм кубической сингонии положены форма граней ромбододекаэдра - 12 ромбов, пентагондодекаэдра - 12 пятиугольных граней и т.д. и их число: тетраэдр - 4 грани, гексаэдр – б граней, октаэдр - 8 граней и т.д.

Комбинации кристаллов

Реальные кристаллы чаще всего встречаются в природе в виде **комбинаций. Комбинацией называется сочетание двух или нескольких простых** форм. Количество простых форм в комбинации равно числу видов граней в кристалле.

Пример комбинации простых форм у кристаллов циркона и апатита приведены на рис. 17,18.

При определении комбинации необходимо мысленно продолжить до взаимного пересечения все грани одной исследуемой простой формы, не обращая внимания на грани других форм, входящих в комбинацию. При этом необходимо учитывать следующее:

1. Все грани одной простой формы и в комбинации одинаковы по очертаниям и размерам.

2. В комбинации может присутствовать несколько простых форм одного названия (например, два пинакоида, два диэдра).

3. В комбинации очертания граней одной простой формы, как правило, искажены за счет развития граней других простых форм.

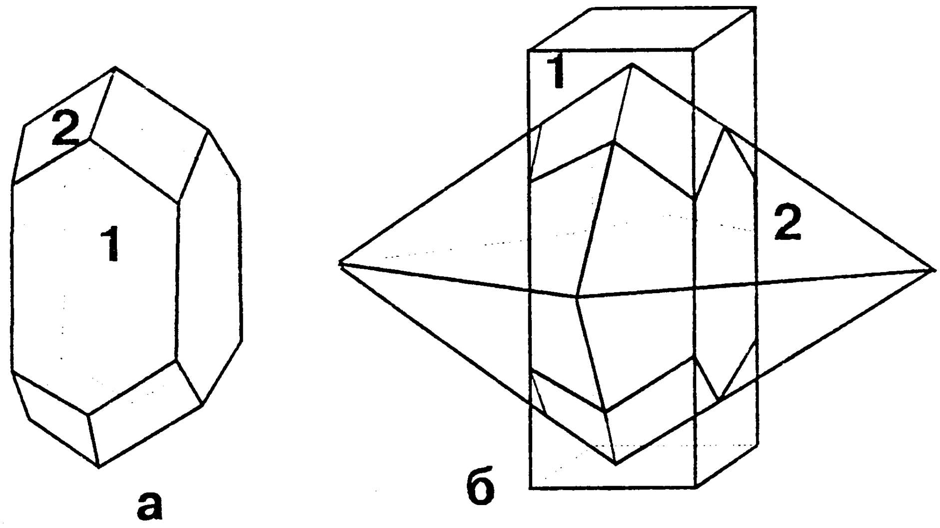


Рис.17. Реальный многогранник (а), представляющий собой комбинацию тетрагональной призмы (1) и тетрагональной дипирамиды (2) и пример его зарисовки (б)

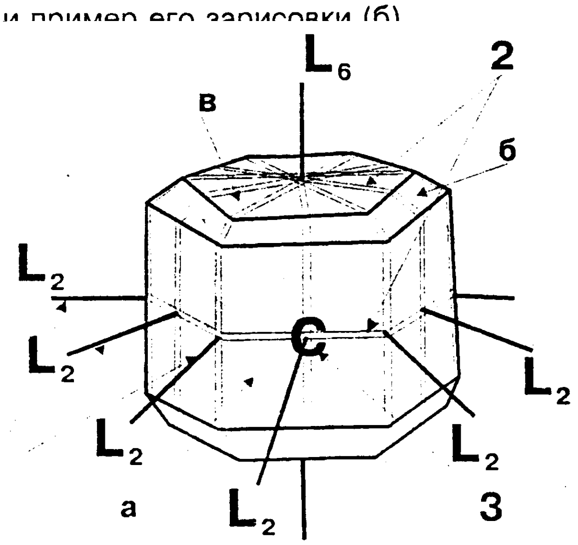


Рис.18. Пример зарисовки модели кристалла апатита: 1 - оси симметрии; 2 - плоскости симметрии; **С** - центр симметрии; а,б,в - простые формы (а - гексагональная призма; б - гексагональная дипирамида; в - пинакоид)

Литература

1. М.П. Шаскольская. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984, 372 с.
2. И. Костов. Кристаллография. М.: Мир, 1965, 528 с.
3. Г. Шульце. Металлофизика. М.: Мир, 1971, 503 с.
4. Ч. Киттель. Введение в физику твёрдого тела. М.: Наука, 1978, 792 с.