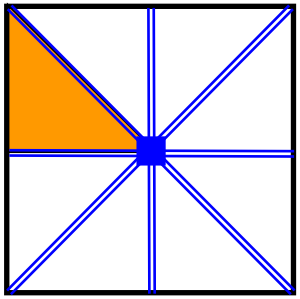
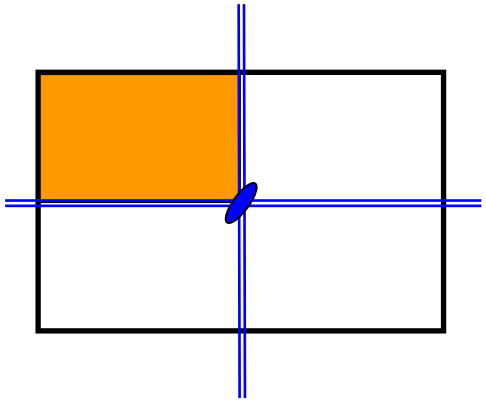
Трансляционная симметрия

Симметрически независимая область фигуры в точечных объектах

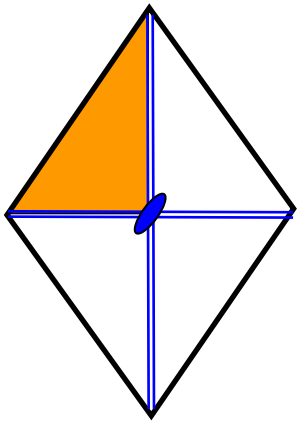


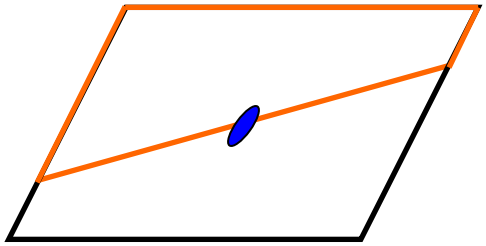
C_{4v}



C_{2v}

C_{2v}





C_2

Симметрию конечных фигур задают

точечные группы $G_{точ}$.

Они состоят из ***закрытых*** операций симметрии

Симметрию бесконечных периодических структур задают ***пространственные группы $G_{пр}$.***

В них входят как закрытые, так и ***открытые*** (с параллельным переносом) операции симметрии:

- **Трансляции**
- Винтовые оси
- Плоскости скольжения

Группа трансляций

- Содержит бесконечное количество векторов трансляций

- Является конечно-порожденной: T = { $m_i \boldsymbol{a_i}$ },
  где m_i – целые числа, $\boldsymbol{a_i}$ (i = 1,2,…,n) – независимые *базисные векторы* группы трансляций; n = ранг группы

$$\vec{t}_m = m\vec{a}$$

$$\vec{t}_{mn} = m\vec{a} + n\vec{b}$$

$$\vec{t}_{mnp} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$$

Совокупность всех операций симметрии трехмерного кристалла называется его *пространственной группой $G_{пр}$*

Совокупность всех трансляций, входящих в пространственную группу трехмерного кристалла, называется его *подгруппой трансляций T*

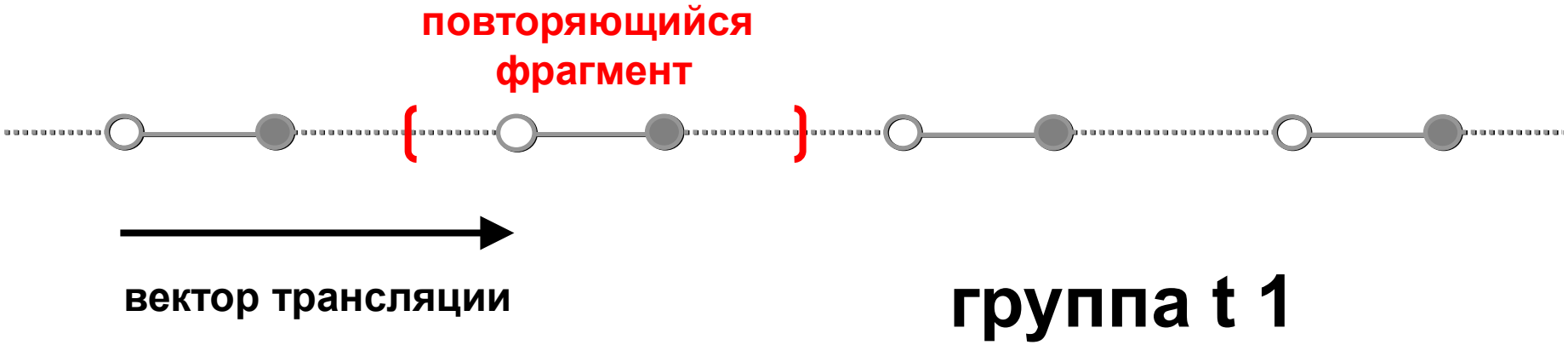
Все закрытые операции симметрии трехмерного кристалла образуют его точечную группу: *$G_{точ}$*

$$G_{пр} \supset G_{точ}, T(n),$$

где T(n) – подгруппа трансляций; n = 1, 2, 3

Трансляционная симметрия кристалла

«Одномерный кристалл»: бесконечная цепочка $(NO)_\infty$



группа t 1

Трансляция – операция симметрии, состоящая в сдвиге бесконечной периодической фигуры на величину вектора t, в результате которой фигура самосовмещается.

У любого кристалла всегда есть трансляционная симметрия. Кроме того, в кристалле можно выделить независимую часть и описать ее точечную симметрию

бесконечная цепочка $(N_2)_\infty$



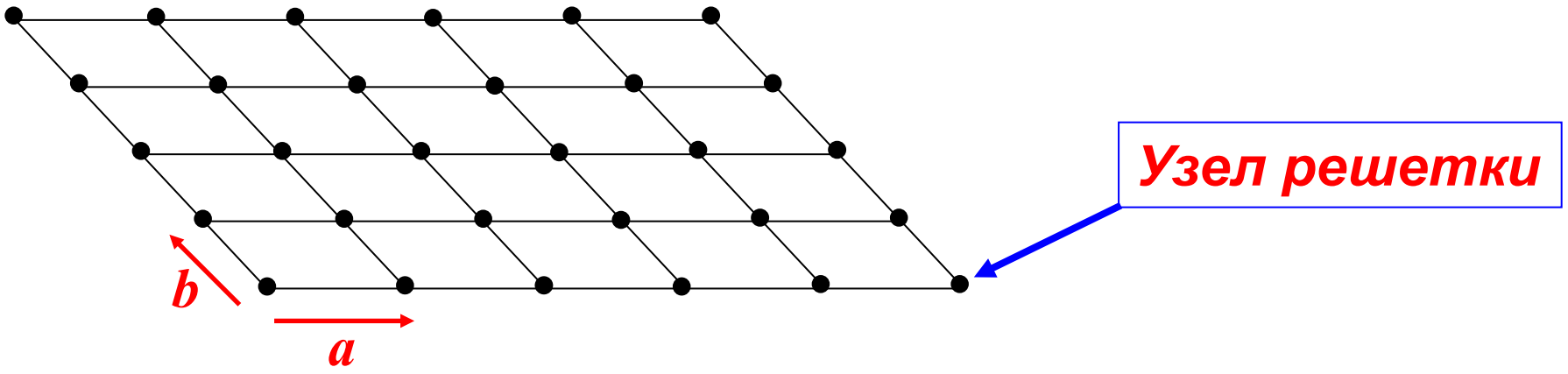
точечная симметрия: центры инверсии

группа t $\bar{1}$

Бесконечная правильная система точек, связанных трансляциями, называется *решеткой*

***Узловая сетка** – геометрический образ двумерной группы трансляций*

$$\vec{t}_{mn} = m\vec{a} + n\vec{b}$$

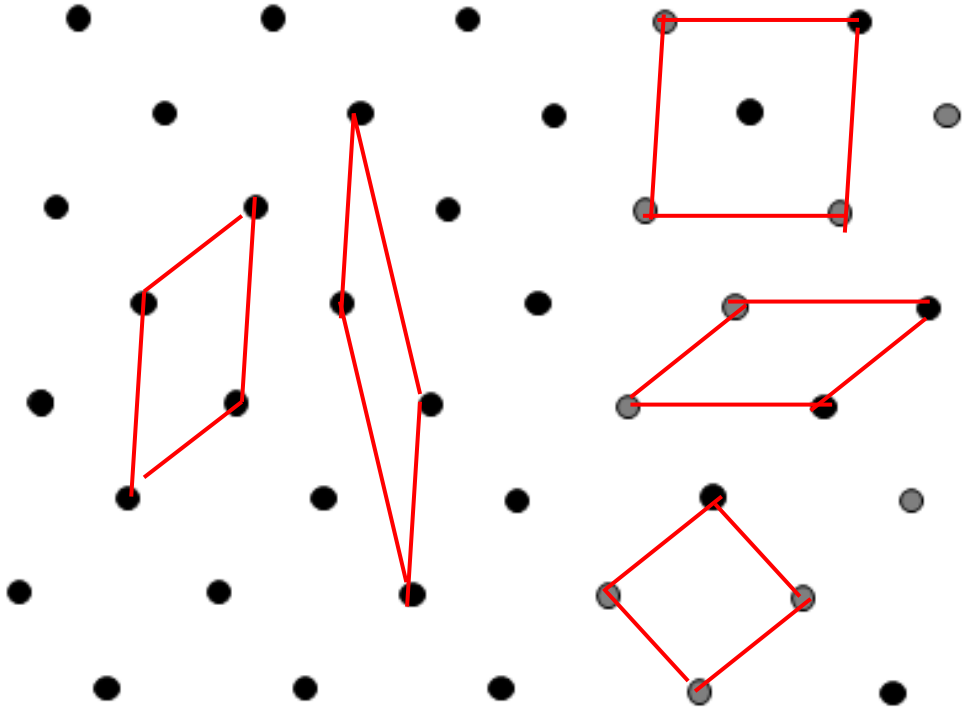


$$\vec{t}_{m} = m\vec{a}$$

***Узловой ряд** (одномерная решетка) - геометрический образ одномерной группы трансляций*

В любой 2D-решетке можно выделить элементарную ячейку (параллелограмм повторяемости), построенную на векторах трансляций.

Элементарные ячейки могут быть примитивными и непримитивными.



2D-решетки: $S = k S_0$

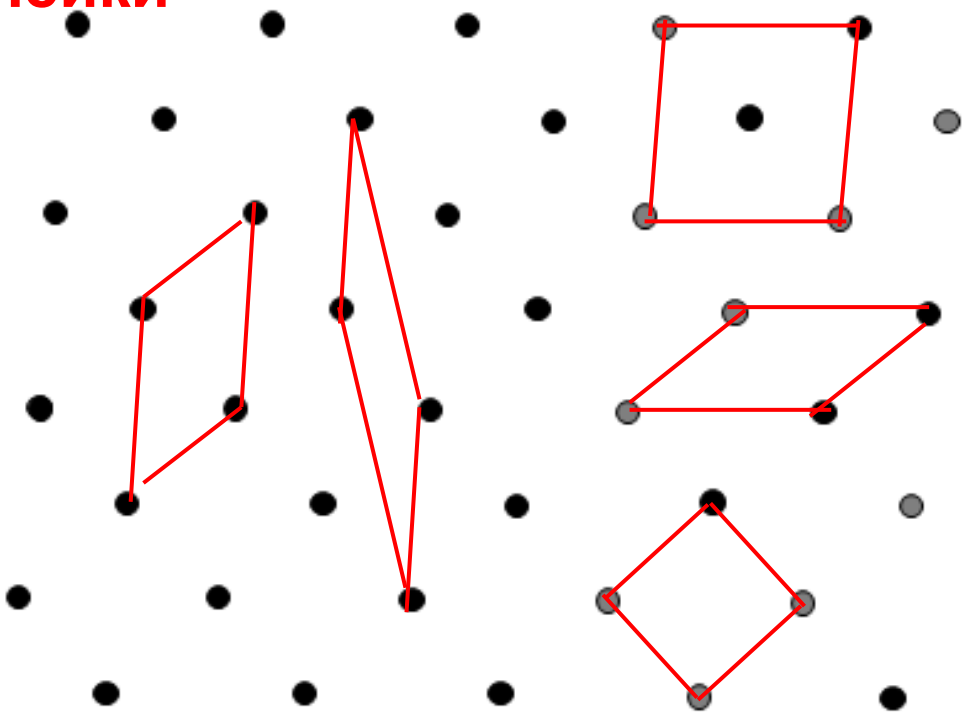
S - площадь паралеллограмма повторяемости,

k- количество узлов, S_0 - площадь примитивного паралеллограмма повторяемости

Правила выбора кристаллографической элементарной ячейки

2D-решетки :
Параллелограмм повторяемости

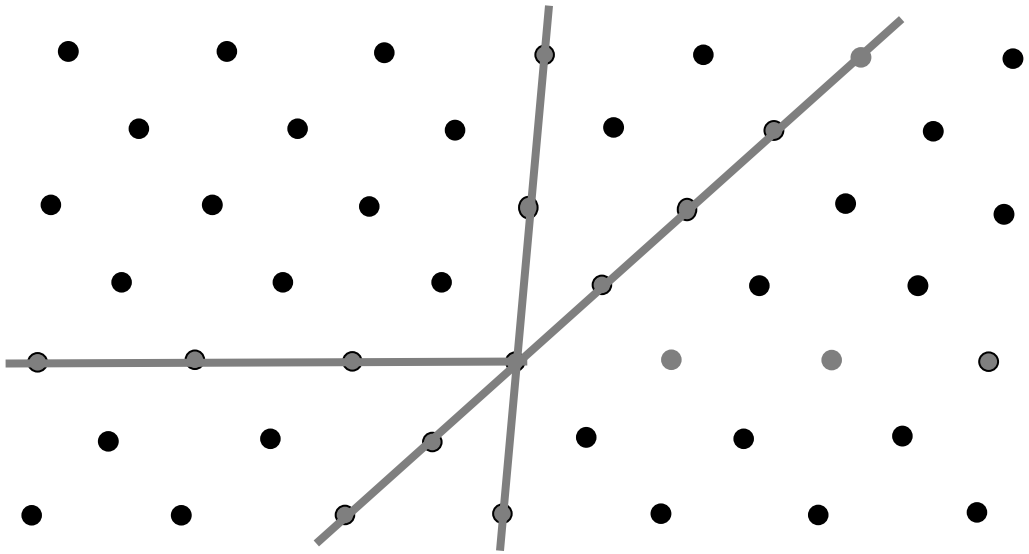
3D-решетки:
Параллелепипед повторяемости



1. **Отражает симметрию решетки**
2. **Имеет максимальное количество прямых углов (в этом случае оси координат будут направлены вдоль поворотных осей или нормалей к плоскостям).**
3. **При выполнении условий 1 и 2 - имеет минимальную площадь - для 2D-решеток (или минимальный объем - для 3D-решеток).**

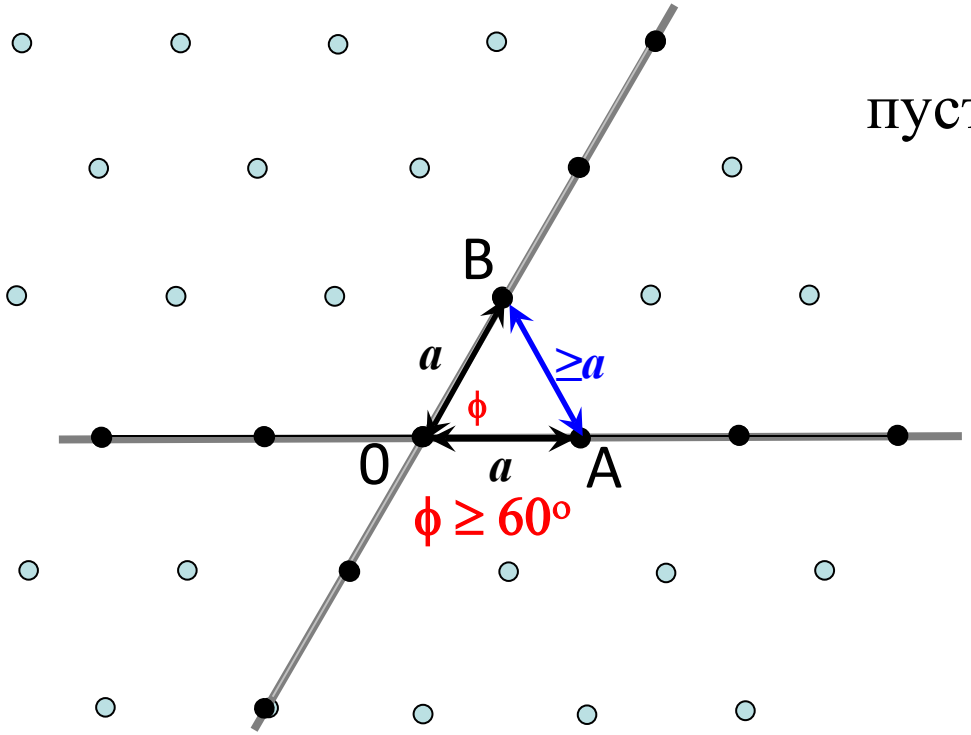
Любая решетка центросимметрична.

Точечная группа, описывающая симметрию узла в решетке называется *голоэдрической группой*.

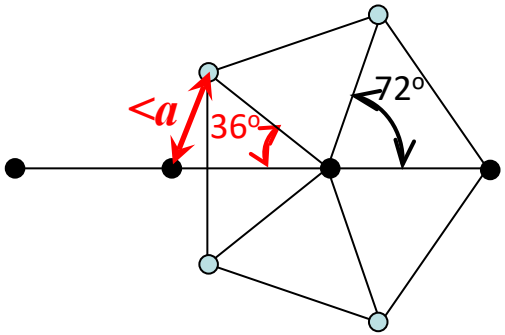


НО: Для двумерного случая центр инверсии вырождается в поворотную ось второго порядка

Какие еще могут быть закрытые операции симметрии в кристалле?



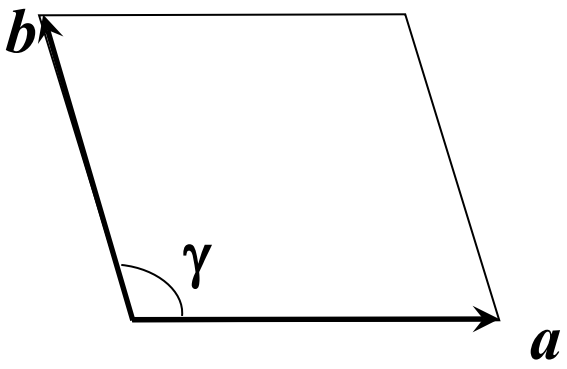
пусть ***a*** – наименьшая трансляция



поворотные оси: 2, 3, 4, ~~5~~, 6

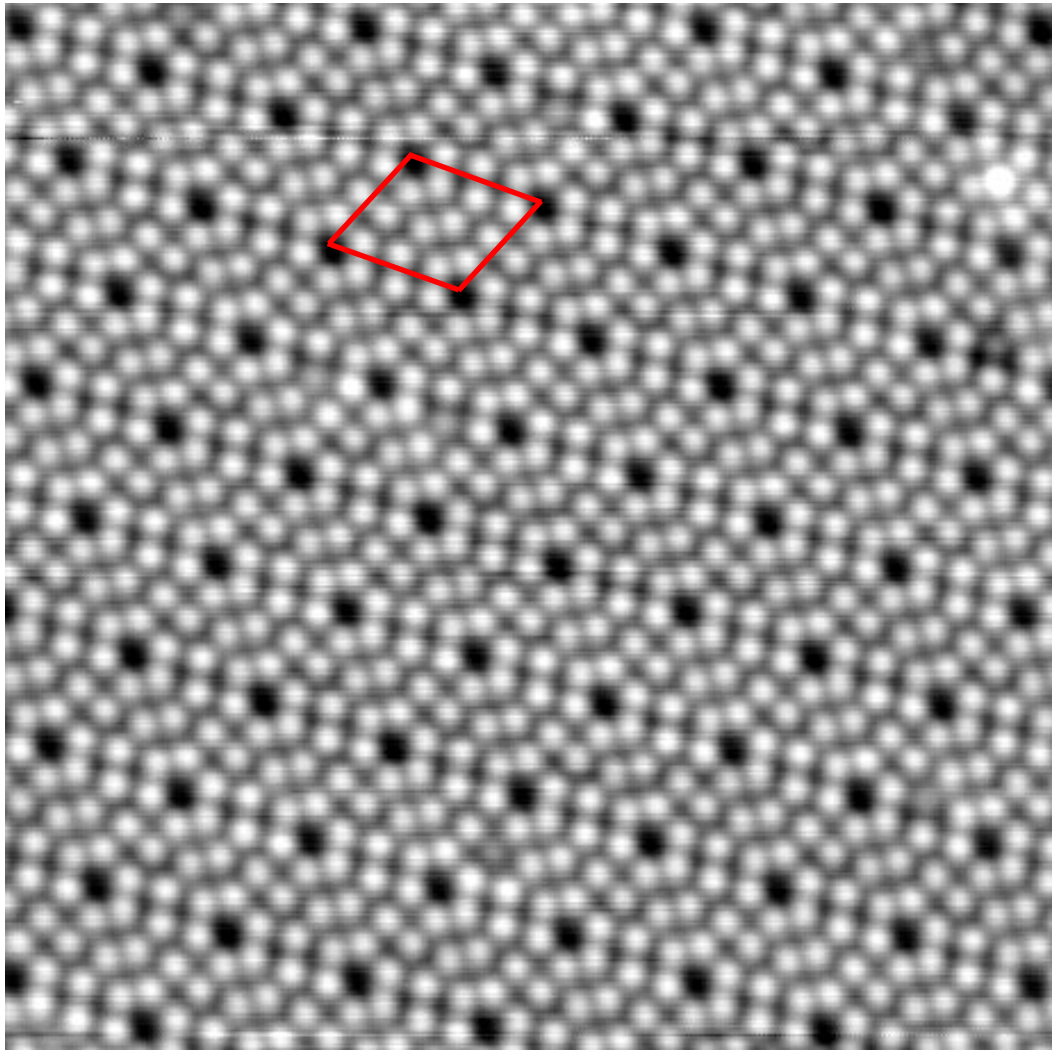
3D: инверсионные оси $\bar{1}$, ($\bar{2}$=)m, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$

Элементарная ячейка двумерного кристалла

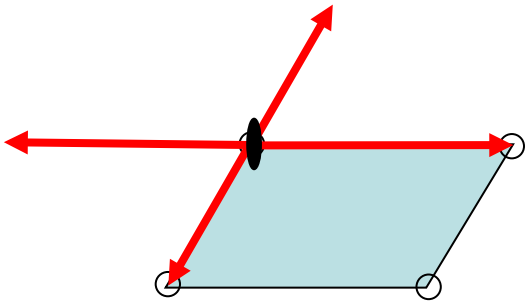


Длины векторов a,b,
угол γ

Реконструкция поверхности монокристалла кремния (STM)

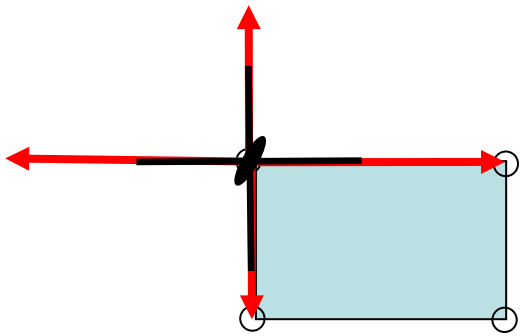


2D-решетки и сингонии



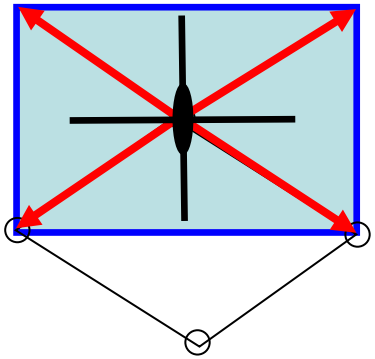
косоугольная ***p2***

a, b, γ – любые



прямоугольная ***pmm2***

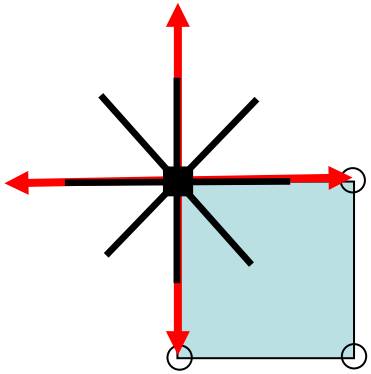
a≠b – любые, γ=90°



a'=a−b, b'=a+b, γ =90°

прямоугольная ***cmm2***

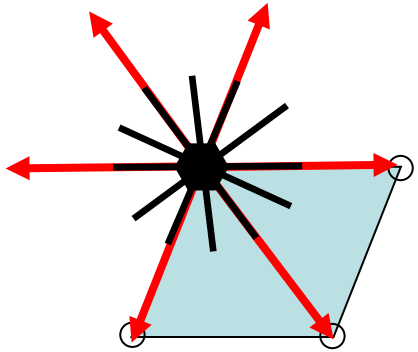
a=b, γ – любой



тетрагональная

p4mm

a=b, γ =90°



гексагональная

p6mm

a=b, γ =120°

4 сингонии

5 решеток Браве

Каждая голоэдрическая группа задает кристаллографическую координатную систему. Все решетки одной голоэдрической группы образуют

сингонию.

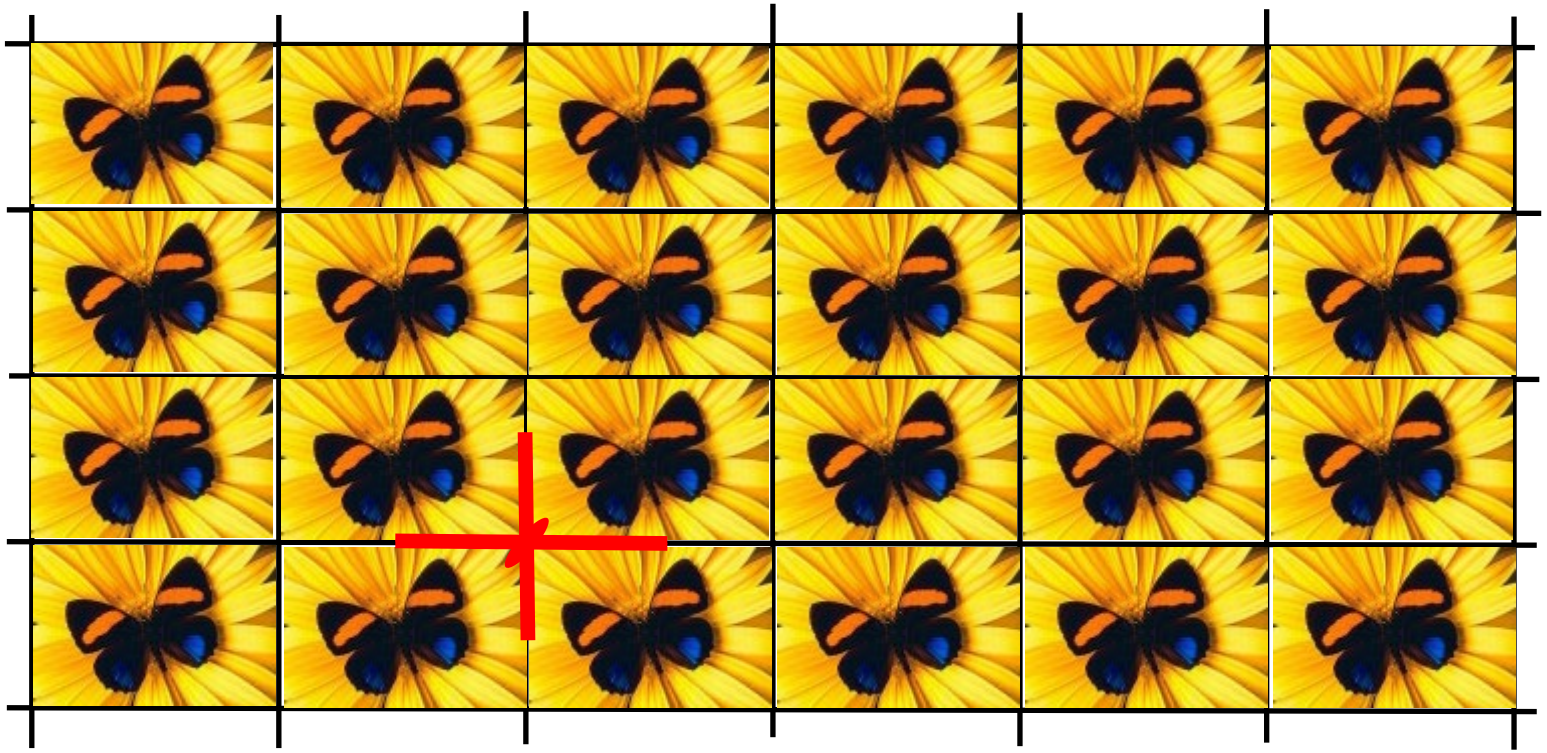
Все решетки одной сингонии, связанные непрерывными деформациями, относятся к одному **типу Браве.**

Тип решетки Браве задается симметрией узла решетки (сингонией) и набором трансляций (типом центрировки решетки).

2D : 4 сингонии, 5 решеток Браве

сингония	голоэдрич. группа	подгруппы	типы решетки
косоугольная	2	1	p
прямоугольная	mm2	m	p, c
тетрагональная	4mm	4	p
гексагональная	6mm	6, 3m, 3	p

Симметрия решетки ≠ симметрии кристалла!



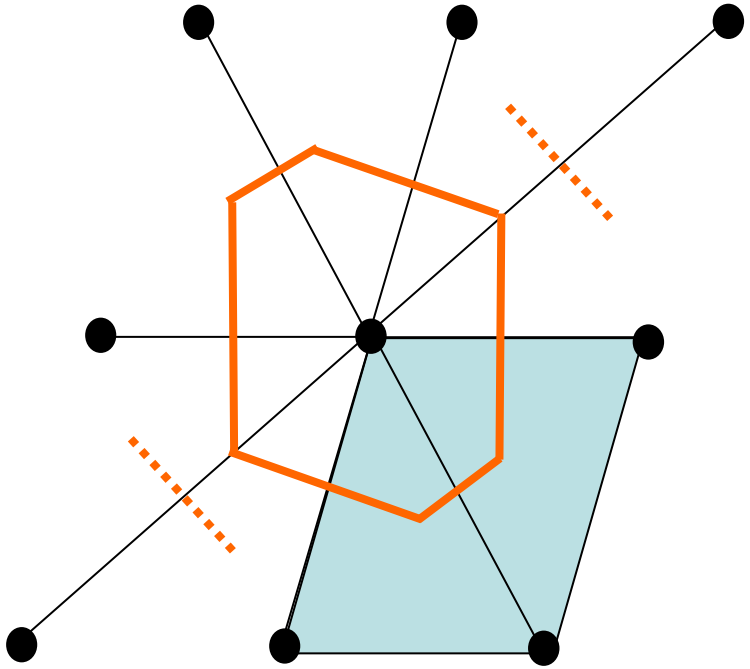
элементы симметрии узла решетки

плоская (2D) группа прямоугольной решетки: **pmm2**

плоская группа модельного «кристалла» **p1**

Другой выбор элементарной ячейки

ближайшая окрестность узла решетки:
область Дирихле



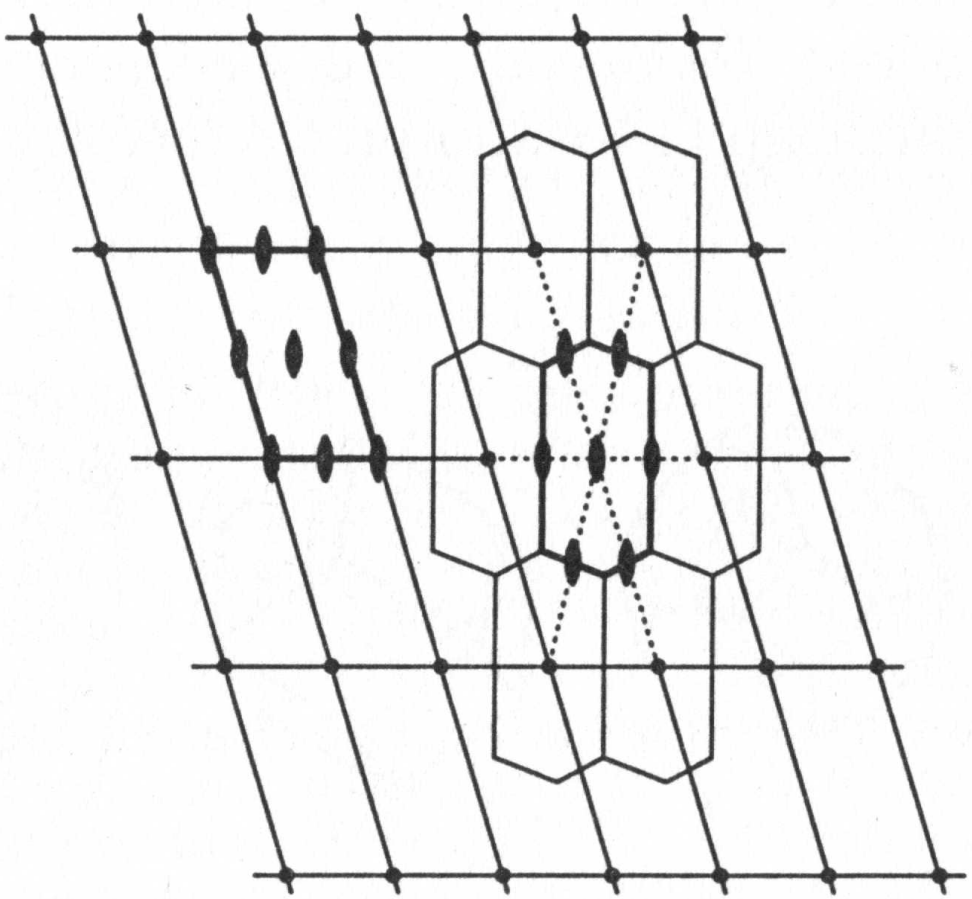
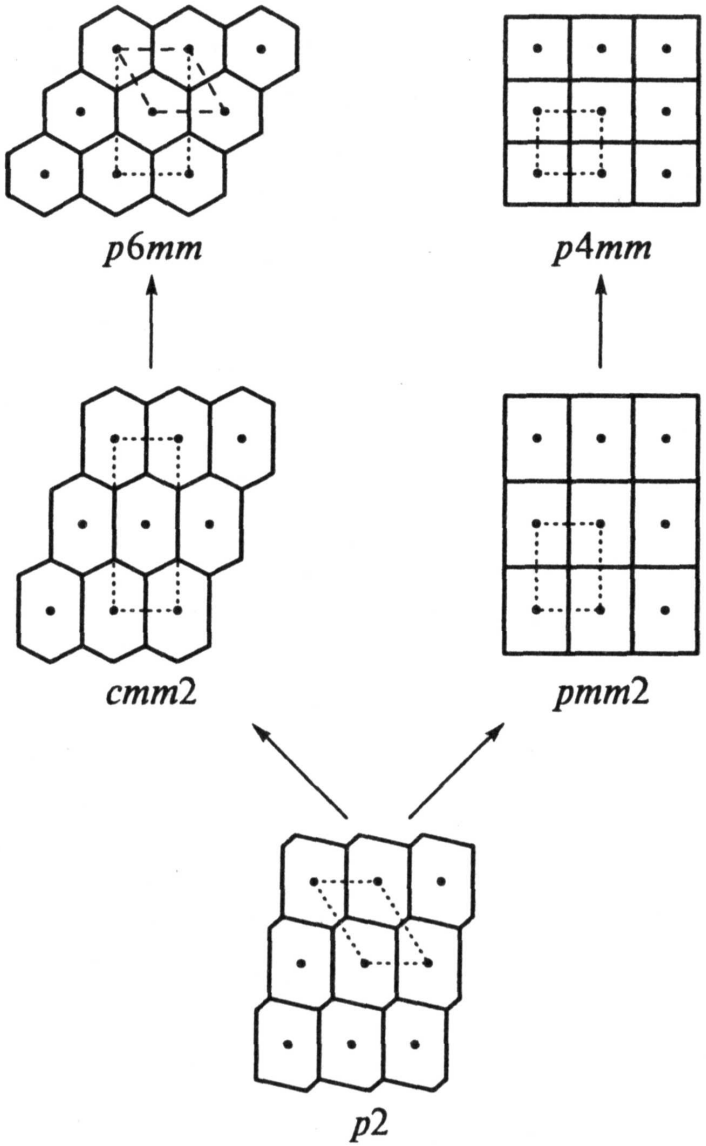


Рис. 2.9. Параллелограмм повторяемости и область Дирихле косоугольной решетки


p6mm
p4mm
cmm2
pmm2
p2

Трехмерные решетки

- Все свойства двумерных сеток сохраняются для трехмерного случая
- Только в прямоугольных сетках могут быть дополнительные узлы в центре грани.

Голоэдрические группы в 3D-решетках:

1) центросимметричны;

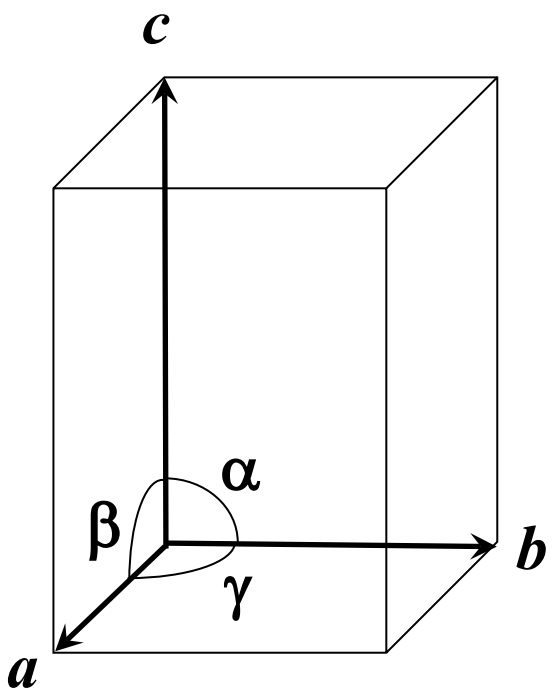
2) содержат оси 2, 3, 4 и 6 порядков

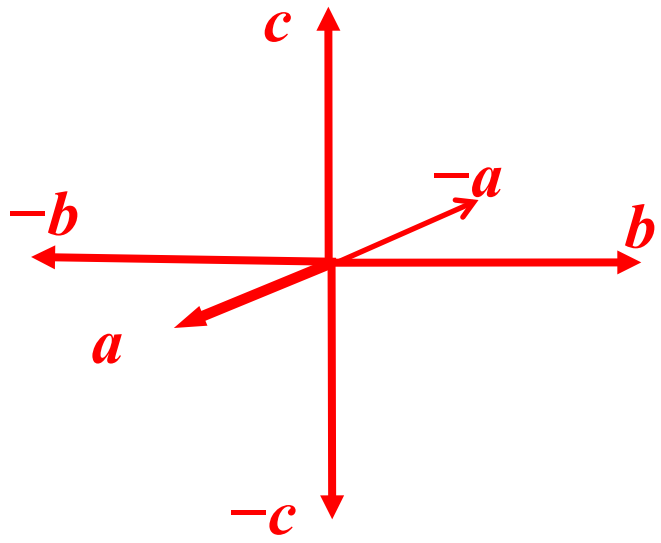
3) Если порядок оси n > 3, то через ось будут проходить также вертикальные плоскости

$\bar{1}$, 2/m, mmm, 3m, 4/mmm, 6/mmm, m $\bar{3}$ m

3D-решетки Браве

Элементарная ячейка

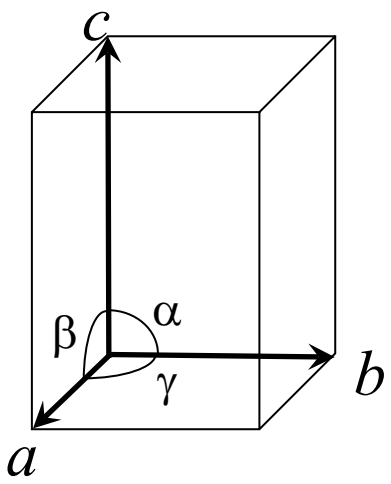




Координатный крест

a, b, c, α, β, γ

Выбор элементарной ячейки (3D)



1. Координатные трансляции должны совпадать с осями максимального порядка (*репер Браве*)
2. Минимальный объем $V_{яч}$ (для P – решеток)
3. a≤b≤c – кратчайшие некомпланарные трансляции (для P-решеток) или их линейные комбинации
4. $\alpha, \beta, \gamma \geq 90_o$, если нет условий по симметрии
5. «Правая связка» векторов a, b и c $\rightarrow V_{яч}>0$

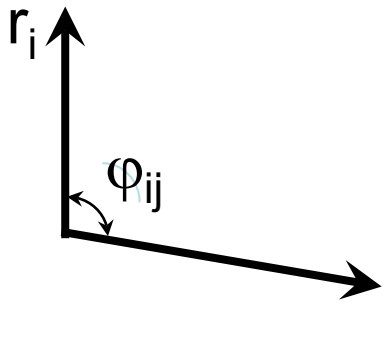
Объем элементарной ячейки

$V_{яч} = (\det G)^{1/2}$, где

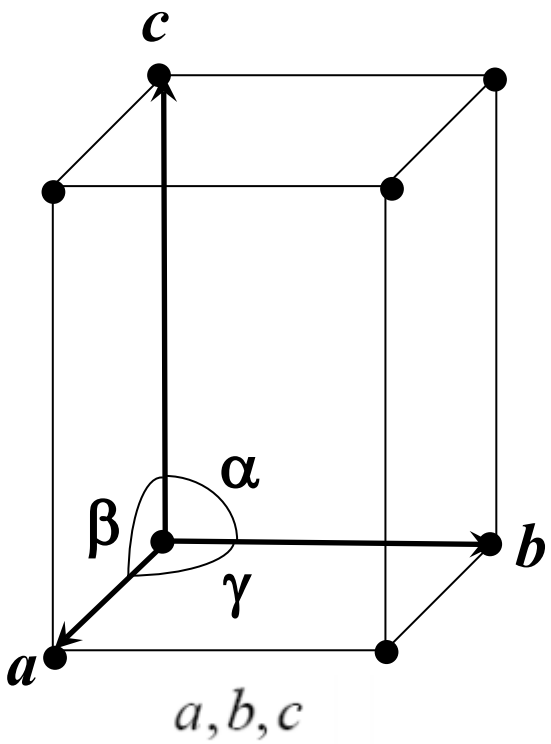
$$G = \begin{pmatrix} (a, a) & (a, b) & (a, c) \\ (b, a) & (b, b) & (b, c) \\ (c, a) & (c, b) & (c, c) \end{pmatrix}$$

матрица Грама

$(r_i, r_j) = (r_j, r_i) = r_i r_j \cos \varphi_{ij}$ скалярные произведения

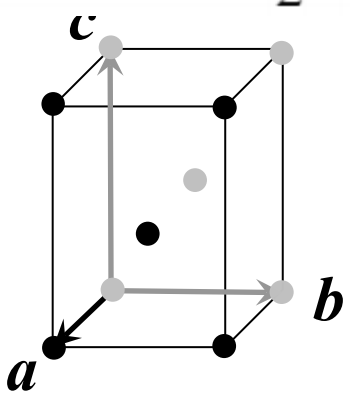


Центрирующие трансляции в трехмерных решетках



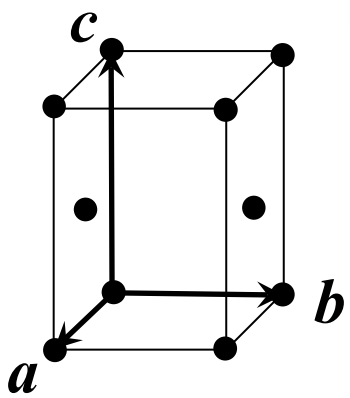
a, b, c

примитивная (P)



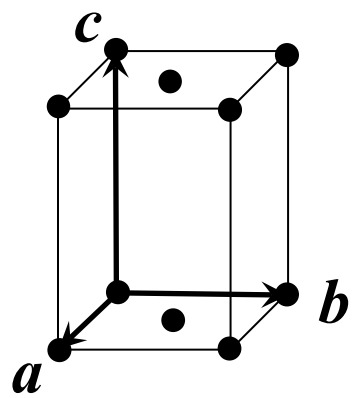
$a, b, c, \frac{b+c}{2}$

бокоцентрированная A



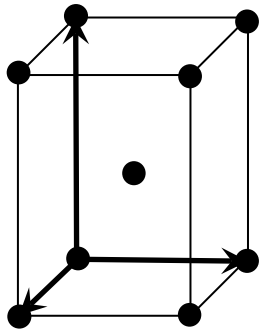
$a, b, c, \frac{a+c}{2}$

бокоцентрированная B



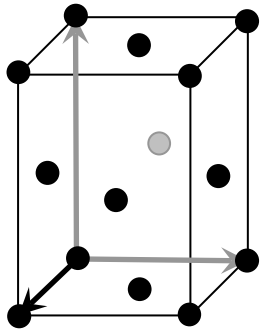
$a, b, c, \frac{a+b}{2}$

бокоцентрированная (базоцентрированная) C



$a, b, c, \frac{a+b+c}{2}$

Объемноцентрированная (I)



$a, b, c, \frac{b+c}{2}, \frac{c+a}{2}, \frac{a+b}{2}$

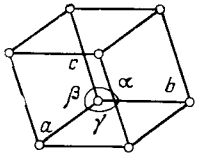
гранецентрированная (F)

Решетки Браве в трехмерном случае

Сингония	голоэдр. группа	подгруппы	параметры ячейки	решетки Браве
	кристаллографические классы			
триклинная	$\bar{1}$	1	a,b,c,α,β,γ– произвольные	P
моноклинная	2/m	2, m	a,b,c – любые, $\alpha=\gamma=90^0$; $\beta \neq 90^0$	P, C (A)
орторомби-ческая	mmm	mm2, 222	a,b,c – любые $\alpha=\beta=\gamma=90^o$	P, A (B,C), I, F
тетрагональ-ная	4/mmm	4, $\bar{4}$, 4/m, 4mm, 422, $\bar{4}$2m	a=b≠c $\alpha=\beta=\gamma=90^o$	P, I
тригональная	$\bar{3}$m	3, $\bar{3}$, 3m, 32	a=b=c, $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^o$	P («гексагон. R»)
гексагональ-ная	6/mmm	6, $\bar{6}$, 6/m, 6mm 622, $\bar{6}$m2	a=b≠c $\alpha=\beta=90^o$, $\gamma=120^o$	P
кубическая	m $\bar{3}$ m	23, m $\bar{3}$, $\bar{4}$3m, 432	a=b=c $\alpha=\beta=\gamma=90^o$	P, I, F

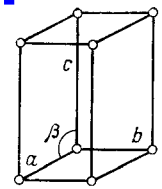
14 ТИПОВ ТРЕХМЕРНЫХ РЕШЕТОК БРАВЕ

$\bar{1}$

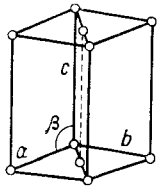


P

2/m

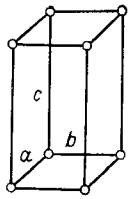


P

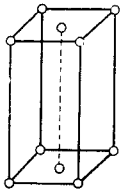


A (B, C)

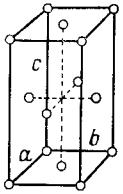
mmm



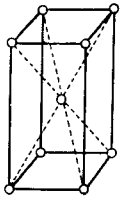
P



A (B, C)

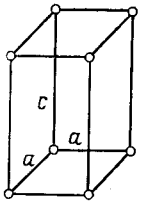


F

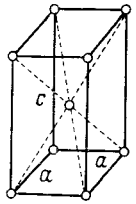


I

4/mmm

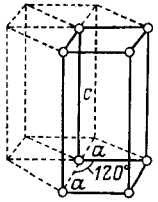


P



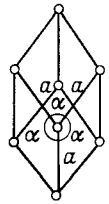
I

6/mmm



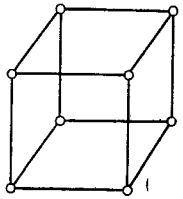
P

-3m

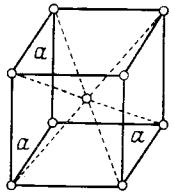


P (R)

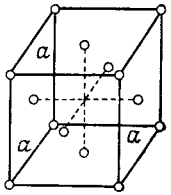
m-3m



P



I



F