

Министерство образования и науки РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Пензенский Государственный Университет»
Факультет приборостроения, информационных технологий и
электроники
Кафедра «Физика»

Курсовая работа по дисциплине:
«Основы кристаллофизики»
на тему: «Операторный метод описания кристаллических структур»

Выполнил: ст. гр. 14ПФ1

Путилин А.И.

Проверила: к.ф.-м.н.

Грозная Е. В.

Принято к защите 11 12 17 А.И. Путилин

Дата, подпись преподавателя

Оценка удов А.И. Путилин

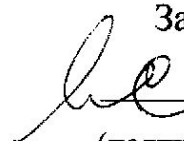
Оценка, подпись преподавателя

Пенза 2017 год

Министерство образования и науки РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Пензенский государственный университет»
Факультет приборостроения, информационных технологий и
электроники
Кафедра «Физика»

«УТВЕРЖДАЮ»

Заведующий кафедрой

 М.Б. Семенов

(подпись, инициалы, фамилия)

«11» декабря 2017г.

ЗАДАНИЕ

по курсовой работе студента

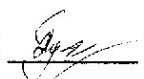
Путилин Алексей Иванович

по дисциплине «Кристаллофизика»

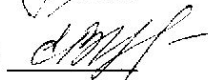
Группа 14ПФ1

1. Тема работы: Операторный метод описания кристаллических структур
2. Руководитель: к.ф.-м.н доцент кафедры Грозная Е. В.
3. Срок сдачи студентом законченной работы 11.12.2017
4. Перечень подлежащих разработке вопросов:
 - Что из себя представляют кристаллы
 - Операторный метод
 - Применение операторного метода

Подпись студента



Подпись преподавателя



СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
Глава 1 Кристаллы и кристаллическое пространство	6
Глава 2 Применение операторного метода в кристаллографии.....	11
2.1 Операторный метод описания симметрии кристаллического пространства	11
2.2 Операции симметрии атомных структур кристаллов. Зеркальные и скользящие отражения.....	15
2.3 Применение операторного метода при умножении операций пространственной симметрии кристаллических структур	23
Заключение	28
Список использованных источников	29

ВВЕДЕНИЕ

Большая часть окружающих нас веществ находится в твердом состоянии. Некоторые твердые тела обладают блеском и поддаются деформации в холодном состоянии — их относят к металлам. Другие представляют собой кристаллы с правильными кристаллическими гранями и четкими плоскостями скалывания, некоторые из них относят к солям, или ионным кристаллам, а некоторые — к ковалентным кристаллам. Ряд других твердых тел мягки и сохраняют многие свойства молекул газа, из которого они сконденсировались, — это молекулярные кристаллы.

Кристаллография — это наука об атомной структуре кристаллов, их симметрии и внешней огранке. Она является одной из классических фундаментальных наук. Природные кристаллы изучали еще философы античного периода истории, и в настоящее время кристаллография продолжает бурно развиваться.

Содержание кристаллографической науки изменялось по мере ее развития и взаимодействия с другими областями человеческого знания. Первоначально кристаллы были объектами исследования минералогии, затем стали предметом изучения физики, математики, химии, биологии.

Выдающийся советский кристаллограф академик Н.В. Белов схематически изображал место кристаллографии среди других наук в центре треугольника, в вершинах которого располагаются минералогия, физика и химия [1].

Традиционная связь кристаллографии с минералогией определяется тем, что подавляющее число минералов и горных пород, из которых сложена земная кора, существует в природе в виде кристаллов.

Взаимосвязь с физикой определяется в первую очередь предметом исследования кристаллографической науки. Кристаллы являются самыми распространенными объектами, которые исследует современная физика

твёрдого тела. Представления об атомной структуре кристаллов лежат в основе методов, которыми оперирует этот обширнейший раздел современной физики [2].

В качестве методов кристаллографической науки можно назвать три: аналитическая геометрия кристаллического пространства, метод теории групп симметрии и метод плотнейших (плотных) упаковок геометрических тел в пространстве. Перечисленные методы в настоящее время являются настолько наглядными и удобными, что успешно применяются к описанию и некристаллических твёрдых тел, таких, как квазикристаллы, фуллерены, аморфные полупроводники и металлы, стекла и многих других.

Достаточно долгое время кристаллография рассматривала кристаллические образцы в виде идеальных кристаллов, отвлекаясь от нарушений периодичности атомного строения. Такая абстракция позволила установить все основные законы, которые управляют кристаллическим состоянием материи. Однако в современных представлениях о кристаллах дефекты занимают такое же важное место, как и трансляционная правильность атомной структуры кристалла. Дефекты, которые признаются неотъемлемой частью устройства кристаллической структуры, определяют многие важные физические свойства (электрические, механические, оптические) и поэтому являются также предметом исследования кристаллографической науки.

Цель курсовой работы: раскрыть особенности применения операторного метода при описании кристаллических структур.

ГЛАВА 1 КРИСТАЛЛЫ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ ПРОСТРАНСТВО

Понятие кристалл используется для обозначения весьма разнообразных объектов реального мира (в том числе драгоценных камней, природных минералов, материалов микроэлектронной техники), абстракций теоретической физики (ионный кристалл, молекулярный кристалл, металлический кристалл), и даже поэтических образов (например, «...и даль свободного романа я сквозь магический кристалл еще не ясно различал»).

Слово «кристалл» происходит от древнегреческого слова κρύος, которым называли лед. В Древнем Риме этим же словом называли также блестящие куски кварца, которые находили в Альпах. Плиний Старший полагал, что эти сверкающие камни представляют собой воду, которая застыла навечно под действием сильнейшего мороза, царящего на вершинах снежных гор. Когда первые естествоиспытатели обнаружили, что раствор соли, испаряясь, оставляет множество сверкающих призм, они их приняли за еще одну форму затвердевшей воды, и назвали ее уже известным словом «кристалл».

Множество экспериментов, проводимых с использованием природных и искусственно выращенных кристаллических образцов, позволяют сформулировать некоторые общие свойства кристаллов. Прежде всего, кристаллы обладают атомарным строением. Структурными единицами этих тел являются атомы, ионы, молекулы. При этом атомы кристалла находятся друг с другом в химической связи. Кристалл представляет собой одну из форм конденсированного состояния вещества [3].

Следующим важнейшим свойством кристаллов является однородность, которая проявляется в том, что их части, линейные размеры которых много

больше кратчайшего межатомного расстояния (порядка 10^{-10}м) обладают одинаковыми физическими свойствами вне зависимости от того, из какой области тела вырезана эта часть.

Далее, кристаллы отличаются анизотропией — неодинаковостью физических свойств в разных направлениях. Именно анизотропия определяет такие специфические свойства кристаллов, как пьезоэффект, двойное лучепреломление света, явления пиро- и сегнетоэлектричества и многие другие.

Наконец, атомная структура кристаллов обладает трансляционно упорядоченным строением. Это означает, что в кристалле всегда можно выделить некоторый параллелепипед, ребра которого сравнимы с межатомными расстояниями, повторяя который параллельными переносами можно получить всю атомную структуру кристалла в целом. Непосредственным следствием трансляционной упорядоченности атомной структуры, как это будет показано ниже, является то, что кристаллы могут самоограняться в процессе роста, т. е. расти в виде многогранников с плоскими гранями.

Характерным свойством кристаллов является инвариантность (одинаковость) относительно различных преобразований, т. е. симметрия. Симметрия характерна для внешней огранки кристаллических индивидуумов, для физических свойств кристаллов и для их атомных структур.

Таким образом, под идеальным кристаллом мы будем понимать однородную анизотропную симметричную конденсированную среду, обладающую трансляционно упорядоченным атомным строением и способную самоограняться в процессе роста.

Для исследования и описания свойств, присущих всем кристаллам без исключения вне зависимости от химического состава, необходимо построить

абстрактную модель, которая учитывала бы основные геометрические особенности атомного строения кристаллов. Такой моделью, которая будет описана ниже, является кристаллическое пространство.

Как и в любой другой материальной среде, принадлежащей конденсированному состоянию, атомы кристалла находятся в химической связи друг с другом, т. е. взаимодействуют между собой. Характер взаимодействия между двумя любыми атомами описывается функцией потенциальной энергии, имеющей минимум при некотором конечном расстоянии между атомами. Это означает, что расстояния между ближайшими соседями не могут быть меньше или больше некоторой характерной для данной пары атомов величины.

Для описания кристаллического пространства необходимо ввести понятие гомологичных точек. Произвольная точка кристаллического пространства, кроме трех координат, которые задают ее расположение в пространстве, может характеризоваться также некоторым набором скалярных, векторных, и тензорных физических величин. Такими величинами могут быть плотность электрического заряда, вектор электрического поля, тензор упругих напряжений и т. д.

Рассмотрим некоторое изометрическое (т. е. не меняющее скалярного произведения двух любых векторов) преобразование евклидова пространства. Такими преобразованиями в трехмерном евклидовом пространстве являются повороты, отражения, инверсия пространства, параллельный перенос пространства как целого (трансляция) и всевозможные сочетания подобных преобразований. Пусть некоторое множество точек рассматриваемого пространства инвариантно относительно одного из таких преобразований. Иначе говоря, точки пространства, связанные данным преобразованием, являются физически неразличимыми. Такие точки будем называть гомологичными или симметрично эквивалентными.

Определим кристаллическое пространство как континуальную (непрерывную) совокупность точек, имеющую евклидову метрику и обладающих следующими свойствами:

1) Не все точки пространства взаимно гомологичны. Они могут различаться помимо положения в пространстве значениями некоторых физических характеристик.

2) Вокруг любой точки пространства можно описать сферу радиуса r , настолько малого, что внутри этой сферы не найдется ни одной точки гомологичной данной. Шар с радиусом r называется шаром дискретности.

3) Вокруг любой точки пространства можно описать сферу такого радиуса R , что внутри этой сферы найдется хотя бы одна точка гомологичная данной. Шар с радиусом R называется шаром однородности.

4) Для каждой точки существует подмножество гомологичных ей точек, инвариантное относительно параллельных переносов всего пространства как целого на любой вектор вида

$$\vec{r}$$

, где $\vec{a}, \vec{b}$, — три взаимно некомпланарных вектора, характерных для данного кристалла, а u, v, w — произвольные целые числа.

Три первых свойства кристаллического пространства справедливы для всех конденсированных сред, в частности, для аморфных тел и квазикристаллов. Так, первое свойство отражает дискретность микроскопического строения вещества. Второе свойство говорит о том, что эквивалентные точки кристаллического пространства не могут располагаться сколь угодно близко друг к другу. Третье свойство есть отражение того

фундаментального факта, что атомы в конденсированных средах не могут располагаться на сколь угодно больших расстояниях друг от друга.

Свойство 4 можно пояснить следующим образом. Проведем из какой-либо точки кристаллического пространства множество отрезков, соединяющих ее со всеми другими гомологичными точками. Затем сделаем то же самое для всех гомологичных точек кристаллического пространства. Тогда среди множества этих гомологичных точек найдется подмножество точек, для которых построенные системы отрезков могут быть полностью совмещены параллельным переносом.

Свойство 4, таким образом, отражает трансляционную упорядоченность атомной структуры кристаллов, что экспериментально подтверждается, например, дифракцией электромагнитных волн рентгеновского диапазона, электронов и нейтронов на кристаллических структурах [4].

Понятие кристаллического пространства позволяет не только описать основные геометрические свойства кристаллических структур, но и провести полную классификацию кристаллов по их симметрии, по расположению атомов и предсказать особенности физических свойств реальных кристаллов.

При этом все реальные тела, называемые кристаллами, можно рассматривать как конечные макроскопические фрагменты теоретического кристаллического пространства.

ГЛАВА 2 ПРИМЕНЕНИЕ ОПЕРАТОРНОГО МЕТОДА В КРИСТАЛЛОГРАФИИ

2.1 Операторный метод описания симметрии кристаллического пространства

Полный набор операций симметрии кристаллического пространства содержит операции точечной симметрии, операции трансляционной симметрии и их комбинации. При комбинации точечных операций симметрии и трансляций возникают новые операции симметрии, в общем случае не оставляющие неподвижными ни одной точки кристаллического пространства.

Известно, что любую изометрическую операцию преобразования пространства можно представить в виде совокупности изометрического точечного преобразования и параллельного переноса.

Введем множество операторов вида $\{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\}$, которые действуют на множестве радиус-векторов точек кристаллического пространства по правилу

$$\{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\}\mathbf{r}_i = \varphi\mathbf{r}_i + \mathbf{t}(\varphi). \quad (1)$$

Здесь φ — оператор, который описывает изометрическую точечную операцию, $\mathbf{t}(\varphi)$ — оператор параллельного переноса, который комбинируется с точечной операцией.

Будем говорить, что оператор или соответствующее изометрическое преобразование (1) состоит из обобщенного поворота (сюда, помимо

собственно поворотов, включаются отражения, инверсии и всевозможные их комбинации) и трансляционной компоненты $\mathbf{t}(\mathbf{O})$.

Нетрудно видеть, что действие этого оператора моделирует любую изометрическую операцию. Если в пространстве введена кристаллографическая система координат, то операция может быть представлена матрицей, а вектор $\mathbf{t}(\mathbf{O})$ задан своими компонентами. Иначе говоря, данный оператор будет представлен совокупностью квадратной матрицы и вектор-столбца. На языке введенных операторов точечным операциям симметрии будут соответствовать операторы вида $\mathbf{t}(\mathbf{O})$, а переносам $\mathbf{t}$ — операторы $\mathbf{t}(\mathbf{e})$, где $\mathbf{e}$ — тождественное преобразование.

Определим закон умножения введенных операторов. Подействуем на точку с радиус-вектором $\mathbf{r}$ последовательно двумя операторами и :

$$\begin{aligned} \{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\} * \{\psi|\mathbf{t}(\psi)\}\mathbf{r} &= \{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\} * (\psi\mathbf{r} + \mathbf{t}(\psi)) = \\ &= \varphi * \psi\mathbf{r} + \varphi\mathbf{t}(\psi) + \mathbf{t}(\varphi). \end{aligned} \quad (2)$$

Результирующее выражение представляет собой радиус-вектор точки, который получился из исходного $\mathbf{r}$ точечным преобразованием (двумя последовательными обобщенными поворотами и $\mathbf{t}$) и сложением с вектором переноса состоящим из двух слагаемых. Таким образом, последовательное действие двух операторов типа (1) на точку пространства может быть заменено действием одного оператора вида $\{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\}$, который можно считать произведением указанных операторов. Формально можно записать:

$$\{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\} * \{\psi|\mathbf{t}(\psi)\} = \{\varphi * \psi|\varphi\mathbf{t}(\psi) + \mathbf{t}(\varphi)\}. \quad (3)$$

Теперь найдем вид оператора, обратного заданному. Согласно определению, произведение взаимно обратных операторов должно

дать единичный оператор, т.е.

$$\{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\} * \{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\}^{-1} = \{e|0\}. \quad (4)$$

Нетрудно непосредственно убедиться, что таким обратным оператором по отношению к данному является следующий оператор:

$$\{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\}^{-1} = \{\varphi^{-1}|- \varphi^{-1}\mathbf{t}(\varphi)\}. \quad (5)$$

Параллельный перенос обратного оператора получается из исходного переноса воздействием обобщенного поворота с последующим изменением направления вектора на противоположное.

Умножение операторов в общем случае некоммутативно. Однако существует подмножество операторов, в котором все они взаимно коммутируют. Такими операторами являются операторы вида $\{e|\mathbf{t}\}$, описывающие «чистые» переносы. Действительно,

$$\begin{aligned} \{e|\mathbf{t}_1(\varphi)\} * \{e|\mathbf{t}_2(\varphi)\} &= \{e|\mathbf{t}_2(\varphi)\} * \{e|\mathbf{t}_1(\varphi)\} = \\ &= \{e|\mathbf{t}_1(\varphi) + \mathbf{t}_2(\varphi)\}, \end{aligned} \quad (6)$$

т. е. произведение операторов «чистых» переносов представляет собой сумму переносов и всегда коммутативно.

Из перечисленных свойств операторов следует

Теорема 1. Множество всех операторов вида образует группу относительно операции умножения

$$\{\varphi|\mathbf{t}(\varphi)\} * \{\psi|\mathbf{t}(\psi)\} = \{\varphi * \psi|\varphi\mathbf{t}(\psi) + \mathbf{t}(\varphi)\}.$$

Доказательство.

Замкнутость группового множества относительно операции умножения непосредственно следует из определения операции умножения, так как при любых φ и ψ произведение операторов снова является оператором того же вида.

Выполнение закона ассоциативности проверяется непосредственно при умножении трех разных операторов. Единичным оператором является оператор E и, наконец, каждому оператору A - соответствует обратный A^{-1} .

Итак, мы получили, что множество всех возможных операторов типа образует группу, которой изоморфна группа всех движений трехмерного евклидова пространства. Рассмотрим некоторые ее подгруппы. Множество всех операторов вида $A = R + \tau$ представляет собой группу, изоморфную группе всех изометрических преобразований сферы в себя. Ее подгруппами являются точечные, в частности, кристаллографические группы симметрии, икосаэдрические группы, предельные группы Кюри.

Если τ — произвольная точечная операция, то множество всех операторов вида $\{E|\tau\}$ изоморфно группе всех параллельных переносов евклидова пространства. Ее подгруппами являются группы трансляций решетки кристаллического пространства. Наконец, подгруппы операторов $\{C_n|\tau\}$, где C_n и τ — операции симметрии кристаллов (обобщенные кристаллографические повороты и трансляции), называют пространственными группами и описывают симметрию атомных структур кристаллов [4].

2.2 Операции симметрии атомных структур кристаллов. Зеркальные и скользящие отражения

Свойства введенных операторов позволяют перечислить и дать геометрическую интерпретацию всем возможным операциям симметрии кристаллического пространства.

Рассмотрим операции, представляющие собой сочетания отражения в плоскости и переноса, параллельного этой плоскости. Введем кристаллографическую систему координат, причем предположим для определенности, что плоскость, в которой происходит отражение, располагается перпендикулярно оси Z , а параллельный перенос $\mathbf{t}_x(m_z)$ осуществляется параллельно оси X . Эта операция описывается оператором $\{m_z | \mathbf{t}_x(m_z)\}$. Умножим этот оператор на себя:

$$\{m_z | \mathbf{t}_x(m_z)\} * \{m_z | \mathbf{t}_x(m_z)\} = \{m_z * m_z | m_z \mathbf{t}_x(m_z) + \mathbf{t}_x(m_z)\}. \quad (7)$$

Действие операции отражения m_z на вектор переноса $\mathbf{t}_x(m_z)$, параллельный этой плоскости, преобразует вектор $\mathbf{t}_x(m_z)$ в себя. Действительно,

$$m_z \mathbf{t}_x(m_z) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} t(m_z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t(m_z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Учитывая, что , получаем

$$\{m_z | \mathbf{t}_x(m_z)\} * \{m_z | \mathbf{t}_x(m_z)\} = \{e | 2 \cdot \mathbf{t}_x(m_z)\}. \quad (9)$$

Оператор описывает «чистый» перенос на удвоенный вектор $t_x(m_z)$ в направлении, параллельном оси X. Параллельно плоскости симметрии в кристаллическом пространстве всегда располагается узловая сетка. Следовательно, этот вектор переноса должен быть кратен некоторой трансляции решетки, параллельной плоскости отражения, в данном случае, элементарной трансляции a . Таким образом, вектор переноса $t_x(m_z)$ может принимать лишь значения, удовлетворяющие следующему условию:

$$2 \cdot t_x(m_z) = 0, a, 2a, 3a, \dots$$

или

(10)

$$t_x(m_z) = 0, \frac{a}{2}, a, \frac{3a}{2}, \dots$$

Значение $t_x(m_z) = 0$ соответствует оператору $\{m_z|0\}$, который описывает точечную операцию — отражение в зеркальной плоскости симметрии, перпендикулярной оси Z. Если $t_x(m_z) = \frac{a}{2}$, то мы получим операцию $\left\{m_z \left| \frac{a}{2} \right. \right\}$, которая представляет собой сочетание отражения в плоскости m_z и переноса на половину трансляции a [7].

Полученная операция называется операцией скользящего отражения, а плоскость, относительно которой происходит отражение, называется плоскостью скользящего отражения или просто скользящей плоскостью (рис. 1).

С плоскостью скользящего отражения как с элементом симметрии ассоциирована циклическая группа. Она порождена элементом $\left\{m_z \left| \frac{a}{2} \right. \right\}$ и содержит всевозможные его степени. Нетрудно видеть, что его четные

степени представляют собой чистые трансляции $a, 2a, \dots$, а нечетные степени — скользящие отражения с трансляционной компонентой $a/2, 3a/2, \dots$. Отсюда следует, что циклическая группа, соответствующая плоскости скользящего отражения, имеет бесконечный порядок. Плоскость скользящего Отражения можно считать за элемент симметрии, отвечающий бесконечной циклической группе, порожденной скользящим отражением. Однако в отличие от элементов симметрии, отвечающих точечным операциям симметрии, его нельзя представить состоящим из точек, неподвижных относительно связанных с данным элементом симметрических преобразований.

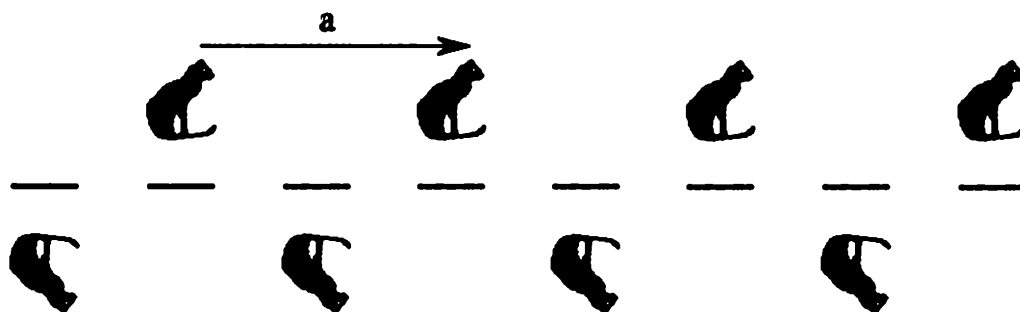


Рисунок 1 – Плоскость скользящего отражения

Очевидно, что аналогичный результат получится при любой другой ориентации вектора переноса $t(m)$, если он остается параллельным плоскости отражения. При этом вектор $t(m)$ всегда должен быть равен половине одной из трансляций решетки: или половине одной из элементарных трансляций a, b, c , или половине трансляции — диагонали грани или телесной диагонали элементарной ячейки, или половине одной из центрирующих трансляций. При данном выборе системы координат плоскости скользящего отражения обозначаются символами a, b и c в зависимости от направления вектора переноса по осям a, b и c соответственно [10].

Если вектор $t(\mathbf{0})$ равен половине одной из диагональных трансляций, то плоскость скользящего отражения называется клиноплоскостью и обозначается буквой p . Если же вектор $t(\mathbf{0})$ равен половине центрирующей трансляции (четверти диагональной трансляции), то такая плоскость скользящего отражения называется алмазной плоскостью и обозначается буквой d . Название связано с тем, что такие плоскости характерны для симметрии атомной структуры кристалла алмаза.

Ориентация скользящей плоскости описывается положением вектора ее нормали по отношению к осям кристаллографической системы координат.

Так, например, символ $a(y)$ или a_y обозначает плоскость скользящего отражения, расположенную перпендикулярно оси Y кристаллографической системы координат с трансляционной компонентой, направленной вдоль оси X , т. е. $t(\mathbf{0}) = \mathbf{a}/2$. Символ $n(y)$ или n_y обозначает клиноплоскость, расположенную перпендикулярно оси Y со скольжением вдоль диагональной трансляции. В данном случае трансляционная компонента

плоскости равна $\frac{\mathbf{a} + \mathbf{c}}{2}$.

Рассмотрим теперь операцию, представляющую собой сочетание отражения в плоскости и переноса на вектор, перпендикулярный плоскости отражения. Пусть, например, эта плоскость в кристаллографической системе координат располагается перпендикулярно оси X , и вектор переноса параллелен оси X . В операторном виде это преобразование можно записать как $\{m_x | t_x(m_x)\}$. Умножим этот оператор на себя. Так как вектор $t_x(m_x)$ перпендикулярен плоскости отражения m_x , то операция $m_x t_x(m_x)$ дает

антипараллельный вектор — $t_x(m_x)$. В результате перемножения получим:

$$\{m_X | t_x(m_X)\} * \{m_X | t_x(m_X)\} = \{e|0\}. \quad (11)$$

Это равенство показывает, что операция $\{m_X | t_x(m_X)\}$ с вектором переноса $t_x(m_X)$, перпендикулярным плоскости отражения, порождает циклическую группу 2-го порядка и представляет собой операцию отражения в плоскости симметрии. При этом наличие трансляционной компоненты в операции может приводить к тому, что плоскость отражения не проходит через начало кристаллографической системы координат, как это было в точечной кристаллографии. Найдем положение этой плоскости [9].

Элемент симметрии, отвечающий конечной циклической группе, порожденной точечной операцией симметрии, может быть представлен в виде множества точек, неподвижных относительно данной операции. В данном случае геометрическое место таких точек с координатами

можно найти из следующей системы уравнений:

$$\begin{cases} -x_m + t_x(m_X) = x_m \\ y_m = y_m \\ z_m = z_m. \end{cases} \quad (12)$$

Данная система имеет бесчисленное множество решений, которые можно записать в виде

$$x_m = \frac{t_x(m_X)}{2}, \quad y_m, z_m — \text{произвольные числа.}$$

Таким образом, мы получили, что операция, представляющая собой сочетание отражения и переноса на вектор, перпендикулярный к плоскости отражения, эквивалентна отражению в зеркальной плоскости

симметрии, расположенной от начала координат на расстоянии, равном половине вектора переноса (рис. 2).

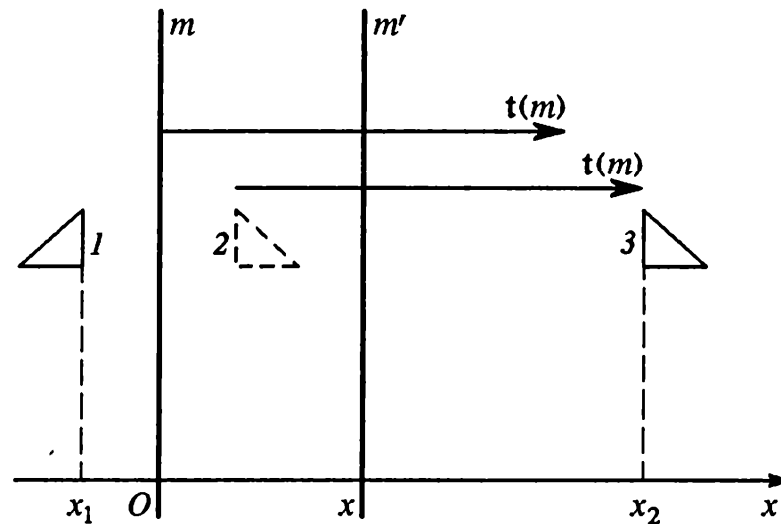


Рисунок 2 – Сочетание отражения в плоскости m и переноса на вектор $t(m)$, перпендикулярного этой плоскости отражения: Геометрическая фигура 1 с координатой x_1 отражается в плоскости симметрии m в положение 2 и смещается переносом $t(m)$ в положение 3 с координатой x_2 . Видно, что данное сочетание операций эквивалентно отражению в плоскости m' , параллельной m и лежащей на половине вектора переноса $t(m)$

Пусть теперь с отражением комбинируется перенос на вектор $\vec{t}$, который расположен некоторым произвольным образом по отношению к плоскости отражения. Мы можем представить его в виде суммы двух векторов — параллельного и перпендикулярного плоскости отражения. Тогда параллельная компонента в сочетании с отражением описывает операцию скользящего отражения, а перпендикулярная компонента свидетельствует о том, что плоскость отражения смещена на половину компоненты вектора $\vec{t}$, перпендикулярной к данной плоскости.

Теорема 2. Перенос на вектор $\mathbf{t}$ пространства как целого может быть представлен в виде последовательного отражения в двух параллельных плоскостях, перпендикулярных вектору переноса и расположенных на расстоянии $\frac{t}{2}$ друг от друга, где t — модуль вектора $\mathbf{t}$.

Доказательство.

Рассмотрим последовательное отражение в параллельных плоскостях m_1 и m_2 , расположенных на расстоянии $\frac{t}{2}$ друг от друга. Введем систему координат, начало которой находится на плоскости m_1 , а ось X направлена перпендикулярно плоскостям. Тогда последовательное отражение в плоскостях можно записать в виде

$$\{m_X | \mathbf{t}\} * \{m_X | 0\} = \{m_X * m_X | \mathbf{t}\} = \{e | \mathbf{t}\}. \quad (13)$$

Нетрудно получить, что если изменить порядок умножения операторов, то получим сдвиг пространства в обратную сторону, т. е.

$$\{m_X | 0\} * \{m_X | \mathbf{t}\} = \{m_X * m_X | -\mathbf{t}\} = \{e | -\mathbf{t}\}. \quad (14)$$

Теорема доказана.

Итак, мы установили, что атомные структуры кристаллов могут быть инвариантны относительно зеркальных плоскостей и плоскостей скользящего отражения с вектором переноса, параллельным плоскости отражения и равным половине какой-либо трансляции, параллельной плоскости. Графические обозначения различных плоскостей симметрии приведены на рис.3.

Если вектор переноса скользящей плоскости параллелен плоскости чертежа, то скользящая плоскость изображается штриховой линией. Если же вектор переноса скользящей плоскости перпендикулярен

плоскости чертежа, то скользящая плоскость изображается пунктирной линией. При промежуточных ориентациях вектора переноса скользящая плоскость изображается штрихпунктирной линией. Эти обозначения не привязаны к какой-либо системе координат, а отражают лишь тип плоскости (зеркальная, скользящая) и ориентацию плоскости и вектора трансляционной компоненты по отношению к чертежу [6].

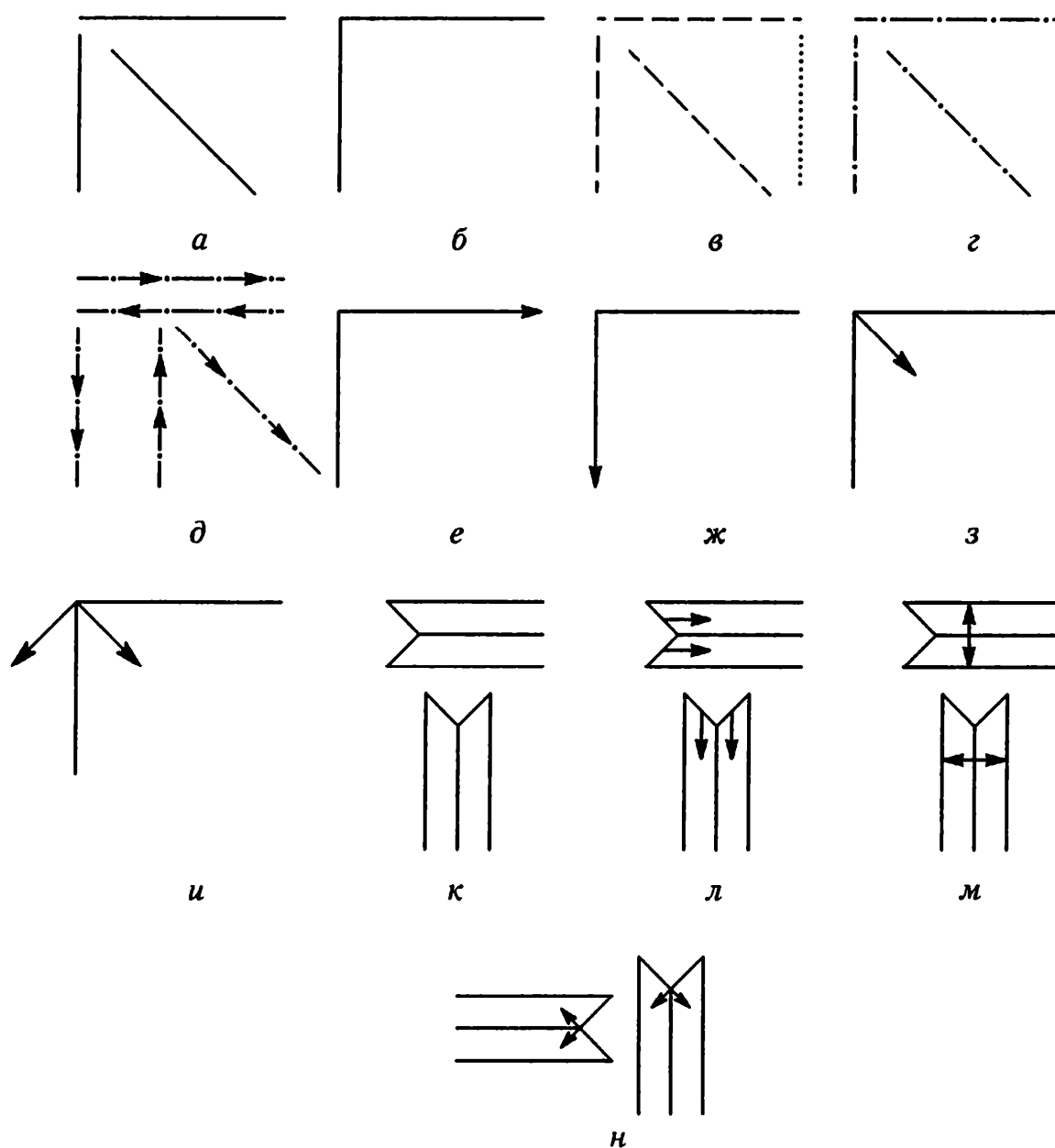


Рисунок 3 – Графические обозначения зеркальных и скользящих плоскостей симметрии: *а*, *б* — зеркальные плоскости симметрии,

расположенные перпендикулярно (а) и параллельно (б) плоскости чертежа; $в, г$ — скользящие плоскости типа $а, в, п$, перпендикулярные плоскости чертежа; $д$ — алмазные плоскости, перпендикулярные плоскости чертежа; $е, ж, з$ — плоскости $а, в, п$, параллельные плоскости чертежа; стрелки показывают направление вектора скольжения; $и$ — алмазные плоскости, параллельные плоскости чертежа; $к, л, м$ — плоскости $п, а, в, с, п$, расположенные наклонно к плоскости чертежа; $н$ — алмазные плоскости, наклонные к плоскости чертежа

2.3 Применение операторного метода при умножении операций пространственной симметрии кристаллических структур

Операторный метод дает возможность перемножить любые операции симметрии и дать кристаллографическую интерпретацию получившимся операторам. В принципе этого вполне достаточно для работы с пространственными группами симметрии кристаллов. Однако можно сформулировать несколько достаточно общих теорем умножения операций пространственной симметрии, аналогично тому, как это было сделано для точечных операций.

Выше мы видели, что умножение операторов, описывающих операции пространственной симметрии, вообще говоря, некоммукативно. Поэтому мы должны строго придерживаться определенного порядка записи операторов при умножении операций симметрии. Напомним, что запись означает, что мы вначале применяем оператор, а затем на результат действуем оператором.

Пусть имеются отражения в двух пересекающихся плоскостях симметрии $\{m_1|t_1\}$ и $\{m_2|t_2\}$. Обозначим проекцию вектора $t_1 + t_2$ на линию пересечения плоскостей через t_3 . Построим вектор $m_1 t_2$ действием на вектор t_2 операцией отражения в плоскости m_1 .

Построим вектор $m_1 + t_1$ и спроецируем его на плоскость, перпендикулярную линии пересечения плоскостей. Обозначим эту проекцию через $(m_1 t_2 + t_1)_\perp$ (рисунок 4).

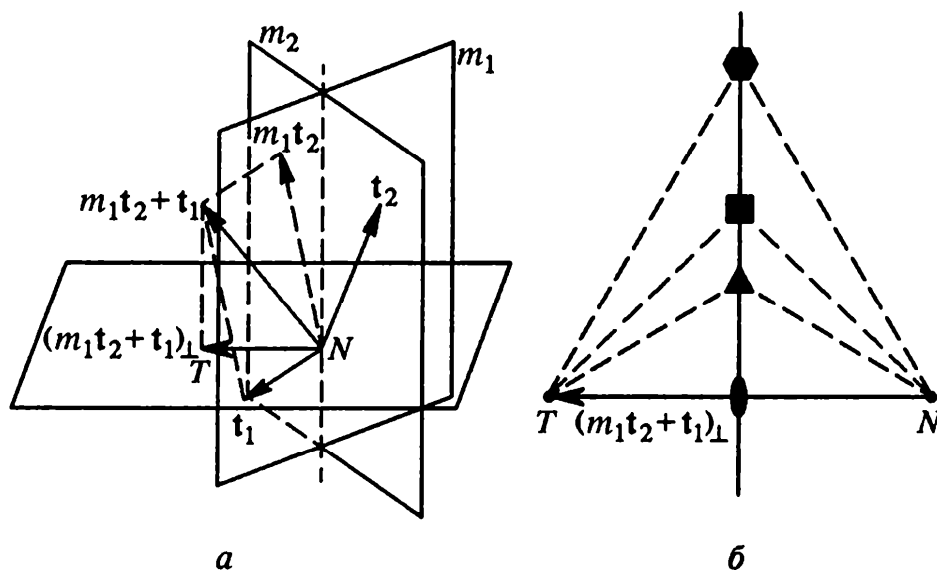


Рисунок 4 – Взаимное расположение векторов t_1 , t_2 , $m_1 t_2$, $m_1 t_2 + t_1$ и $(m_1 t_2 + t_1)_\perp$ при умножении отражений в двух пересекающихся плоскостях скользящего отражения (а); NTN' — треугольники, построенные на векторе $(m_1 t_2 + t_1)_\perp$ как на основании (б)

Можно доказать теорему, аналогичную mmN -теореме точечной кристаллографии:

Теорема 3. Последовательные отражения $\{m_2\{t_2\}$ и $\{m_1\{t_1\}$ в плоскостях симметрии, пересекающихся под углом α , эквивалентны повороту вокруг оси симметрии с элементарным углом поворота 2α и с винтовой компонентой. Ось располагается параллельно линии пересечения плоскостей и проходит через вершину N' треугольника NTN' с основанием

Доказательство.

Выберем начало координат в точке N , расположенной на линии пересечения плоскостей симметрии. Запишем операторы отражения в плоскостях и найдем их произведение:

$$\{m_1|t_1\} * \{m_2|t_2\} = \{m_1 * m_2|m_1t_2 + t_1\} = \{N(2\alpha)|m_1t_2 + t_1\}. \quad (15)$$

где N — поворот вокруг оси симметрии с элементарным углом 2α .

Представим вектор $m_1t_2 + t_1$ в виде суммы двух векторов — параллельного и перпендикулярного линии пересечения плоскостей симметрии. Тогда можно записать

$$\{N(2\alpha)|m_1t_2 + t_1\} = \{N(2\alpha)|(m_1t_2 + t_1)_\perp + (m_1t_2 + t_1)_\parallel\}. \quad (16)$$

Проекции векторов t_2 и m_1t_2 на плоскость m_1 равны, следовательно, равны и их проекции на линию пересечения плоскостей m_1 и m_2 (рис. 4).

Из этого следует, что $(m_1t_2 + t_1)_\parallel = (t_2 + t_1)_\parallel$

Таким образом, получаем:

$$\{N(2\alpha)|m_1t_2 + t_1\} = \{N(2\alpha)|(m_1t_2 + t_1)_\perp + (t_2 + t_1)_\parallel\}. \quad (17)$$

Вектор, параллельный оси поворота $N(2\alpha)$, делает ось винтовой, а компонента означает, что ось смещена относительно выбранного начала координат в направлении, образующем с вектором угол α , на величину t . т. е. в вершину N' треугольника NTN' .

Теорема доказана.

Рассмотрим частный случай данной теоремы. Пусть две плоскости симметрии пересекаются под углом 90° . Тогда $2\alpha = 180^\circ$, и в результате умножения появится поворотная или винтовая ось 2-го порядка. Найдем, например, произведение отражений в плоскостях скользящего отражения, которые в кристаллографической системе координат имеют символы $b(x)$ и $c(y)$ (рис. 5).

Выберем начало кристаллографической системы координат в точке пересечения плоскостей симметрии $b(x)$ и $c(y)$. Тогда перемножаемые операции в операторном виде можно записать как

$$b(x) = \left\{ m_x \left| \frac{b}{2} \right. \right\} \quad \text{и} \quad c(y) = \left\{ m_y \left| \frac{c}{2} \right. \right\}, \quad (18)$$

а их произведение

$$b(x) * c(y) = \left\{ m_x * m_y \left| m_x \frac{c}{2} + \frac{b}{2} \right. \right\} = \left\{ 2_z \left| \frac{c}{2} + \frac{b}{2} \right. \right\}. \quad (19)$$

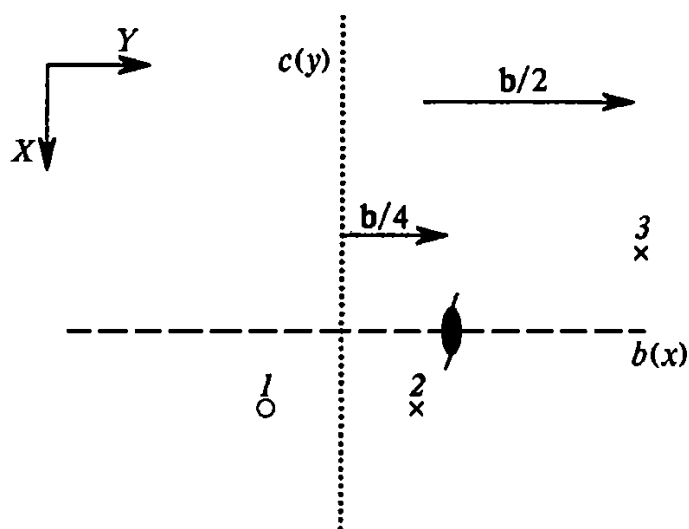


Рисунок 5 – Произведение отражений в плоскостях $c(y)$ и $b(x)$ эквивалентно повороту вокруг винтовой оси 2-го порядка $2_1(z)$, смещенной относительно линии пересечения плоскостей на $b/4$: Цифрами 1, 2, 3 обозначены точки, связанные последовательно выполненными операциями $c(y)$ и $b(x)$

Полученная операция симметрии представляет собой винтовой поворот вокруг оси 2-го порядка, параллельной оси Z и смещенной относительно линии пересечения плоскостей (относительно начала координат) на вектор $\frac{b}{4}$.

Действие этих операций на точки кристаллического пространства можно проследить по рис. 5. Точка 1 скользящим отражением $c(y)$ преобразуется в точку 2, которая, в свою очередь, скользящим отражением $b(x)$ преобразуется в точку 3. С другой стороны, точка 3 может быть получена непосредственно из точки 1 преобразованием винтового поворота 2-го порядка вокруг оси, смещенной относительно линии пересечения плоскостей на вектор $\frac{b}{4}$ [11].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Кристаллы являются физическими телами, которые можно рассматривать в двух аспектах. Если нас интересуют макроскопические физические параметры, такие, как теплопроводность, упругость, двупреломление и т. п., то кристалл целесообразно характеризовать как непрерывную среду. Во всех подобных случаях мы работаем с размерами, на много порядков превышающими межатомные расстояния. Если же мы с помощью рассеяния рентгеновских лучей находим место расположения атомов в элементарной ячейке, то кристалл описывается как дискретная атомарная структура.

Симметрия является важнейшим свойством кристаллов, как непрерывных сред, так и атомных структур. Симметрия кристаллов может служить основой для геометрической классификации и описания кристаллических атомных структур и кристаллических сред. Конкретный вид симметрии кристалла определяет спектр его физических свойств. Классификация кристаллов, анализ их свойств во многом базируется на различии типов симметрии. Симметрия характерна не только для кристаллов, но и для всевозможных некристаллических твердых тел и является важнейшим свойством самых разнообразных физических систем.

В данной работе рассмотрены применение операторного метода при изучении пространственной симметрии кристаллических структур.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Белов Н. В. Очерки по структурной кристаллографии и федоровским группам симметрии.—М.: Наука, 2006. 279 с.
2. Вайнштейн Б.К, Фридкин В.М., Инденбом В. Л. Современная кристаллография. Т. 2.—М.: Наука, 2009. 355 с.
3. Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография. Т. 1.—М.: Наука, 2009. 383 с.
4. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П. Теория симметрии кристаллов— М.: ГЕОС, 2010. 394с.
5. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г. Кристаллография.—М.: Изд-во Моск. ун-та, 2012. 288с.
6. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. Геометрическая микрокристаллография.—М.: Изд-во Моск. ун-та, 2006. 241с.
7. Колли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах.—М.: Мир, 2004. 496 с.
8. Костов И. Кристаллография.—М.: Мир, 2005. 528с.
9. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография.—М.: Высшая школа, 2002. 356 с.
10. Розенфельд Б.А., Сергеева Н.Д. Стереографическая проекция.—М.: Наука, 2010. 133 с.
11. Чупрунов Е.В., Хохзлов Е.В., Фадеев М.А. Основы кристаллографии: Учебник для вузов.—М.: Издательство Физико-математической литературы, 2014.—500 с.