2. Операции и елементи на симетрия при кристалите

1. Въведение: Основните операции на симетрия при крайните тела (кристали) са въртене около ос на даден ъгъл и огледално отражение от дадена равнина.

Точкова група (клас) на симетрия – *съвкупност от операциите на симетрия за даден кристал.*

Операциите на симетрия се представят като операции на преобразуване на координатните системи: $X_1X_2X_3 \rightarrow X_1'X_2'X_3'$

На всяка симетрична операция се съпоставя матрица от направляващи косинуси:

$$C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix}, \qquad c_{12} = \cos(X_1', X_2) = \cos\varphi \tag{1}$$

$\boxed{\angle\varphi > 0}$ при наблюдение от положителния край на осите към началото на координатната система (КС), завъртането на старата ос към новата става против часовата стрелка. Всеки оператор на симетрия има матрично представяне.

2. Въртене и оси на симетрия

Ос на симетрия (елемент на симетрия) - ако при завъртане на кристал около даден ъгъл $\angle\varphi$, той съвпада сам със себе си, оста се нарича ос от n-ти порядък.

$\boxed{n = \frac{2\pi}{\varphi}}$ - порядък или кратност на въртене

Въртене – операция на симетрия на завъртане около ос от n-ти порядък на $\angle\varphi$.

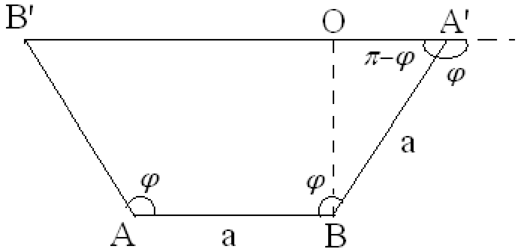
В резултат на тази операция всяка точка с радиус вектор $\vec{r}(r_1r_2r_3)$ се превръща в точка с радиус вектор $\vec{r}'(r_1'r_2'r_3')$:

$$\vec{r}' = \hat{C}(\varphi)\vec{r}$$

В матричен вид: $r' = Cr$, C - матрица (1)

Въртенето на тялото на $\angle\varphi$ е еквивалентно на завъртане на координатната система на $\angle(-\varphi)$.

Теорема: Ос на симетрия от 5-ти порядък не е възможна.



Преполагаме, че през съседните възли А и В минават оси на симетрия от n-ти порядък перепендикулярни на чертежа.

Завъртаме около ос А : B→B′ ; и около ос B: A→A′

$$\Delta OA'B : \frac{OA'}{a} = \cos(\pi - \varphi) = -\cos\varphi \to OA' = -a\cos\varphi = -AB\cos\varphi$$

$$A'B' = AB + 2OA' = AB - 2AB\cos\varphi = AB(1 - 2\cos\varphi)$$

Получаваме, че новото разстояние е : $\boxed{A'B' = AB(1 - 2\cos\varphi)}$

Новото разстояние $A'B'$ трябва да е цяло кратно число на периода на идентичност (транслационния период за дадено направление – разстоянието между най-близките възли върху дадена възлова права), т.е

$(1 - 2\cos\varphi)$= цяло число

Изпълнено за :

$\cos\varphi = 0, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1, +1$, т.е $\varphi = 90^\circ, 60^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 360^\circ$, $n = \frac{2\pi}{\varphi} = 4, \quad 6, \quad 3, \quad 2, \quad 1$

Означения:

а) оси на симетрия

- международни (на Херман-Моген) - **n**
- по Шенфлис - $\mathbf{C_n}$ (за n=1, 2, 3, 4 и 6);

б) оператор на въртене $\hat{C}(\varphi)$ или $\hat{C}_n$: $\vec{r}' = \hat{C}(\varphi)\vec{r}$

3. Отражение и равнина на симетрия

Равнина на симетрия (елемент на симетрия)– ако при отражение на всички точки на тялото от една равнина, то съвпада само със себе си, то тази равнина е равнина на симетрия

Отражение - операция на симетрия на отражение от равнина на симетрия.

Означения:

а) равнина на симетрия

- международни **m**
- по Шенфлис $\mathbf{C_s}$ (s – surface)

б) оператор на отражение: $\hat{\sigma}$

Матрица на оператора на отражение: от равнината X_1X_2

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

4. Огледално въртене и огледални оси на симетрия

Огледално въртене – последователно завъртане на точките на тялото около постоянна ос на симетрия и отразяването им от равнината на симетрия, перпендикулярна на оста.

Оператор на огледално въртене: $\hat{S}_n = \hat{C}_n.\hat{\sigma}_h = \hat{\sigma}_h.\hat{C}_n$

Индекса *h* означава, че равнината на отражение е перепендикулярна на n-кратната ос на въртене.

Огледална ос на въртене (елемент на симетрия) – Ос на симетрия около която се осъществява огледално въртене.

Огледалната ос на симетрия е нов самостоятелен елемент на симетрия само в случай, че n е четно число.

При n нечетно число – една ос на симетрия и независима от нея перпендикулярна на оста равнина на симетрия.

Биполярна ос: Ос на симетрия свързана с перпендикулярна равнина на симетрия.

Свързва две съответни точки на два еднакви ограничителни елемента на кристала: два върха, среди на два еднакви ръба.

Полярна ос: Ос на симетрия не свързана с перпендикулярна на нея равнина на симетрия.

Свързва точки от два различни ограничителни елемента на кристала: връх-среда на ръб.

Означения:

а) огледални оси на симетрия

- по Шенфлис - $\mathbf{S_n}$ (за n=1, 2, 3, 4 и 6);

б) оператор на огледално въртене $\hat{S}_n = \hat{C}_n.\hat{\sigma}_h = \hat{\sigma}_h.\hat{C}_n$

5. Инверсия, център на симетрия и инверсионни оси

Инверсия спрямо даден център на инверсия – операция на симетрия, която преобразува радиус вектора на всяка точка спрямо центъра на инверсията $\vec{r}\,' = -\vec{r}$.

Центърът на симетрия (елемент на симетрия) съвпада с центъра на инверсия. Това е началото на КС.

Означения:

а) център на симетрия

- международни - $\bar{1}$
- по Шенфлис - C_i

б) оператор на инверсия: $\hat{\bar{1}}, \hat{C}_i$

Матрица на оператор на инверсия: $\bar{1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\vec{r}\,' = \bar{1}\vec{r} = -\vec{r}$

Инверсионно въртене – последователно завъртане на точките на тялото около постоянна ос на симетрия и инверсия спрямо точка от тази ос, при което кристала съвпада сам със себе си.

Инверсионна ос (елемент на симетрия) – Ос на симетрия около която се осъществява инверсионно въртене.

Означения:

а) инверсионни оси на симетрия

- международни - $\overline{n}$
- по Шенфлис - C_{ni}

б) оператор на инверсионно въртене: $\hat{\overline{n}}, \hat{C}_{ni}$

6. Връзка между огледална и инверсионна ос

Може да се покаже, че всяка операция на огледално въртене е еквивалентна на съответно произведение от операции на въртене и инверсия, спрямо точка, в която оста пресича равнината на отражение.

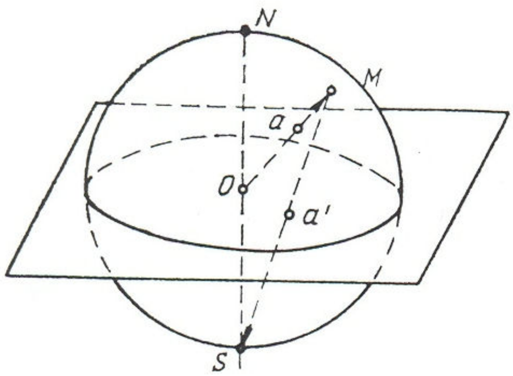
Всяка огледална ос на симетрия може да се замени със съответната инверсионна ос и обратно.

Поради еквивалентността на двете оси в международните означения се използват само инверсионните (инверсните) оси.

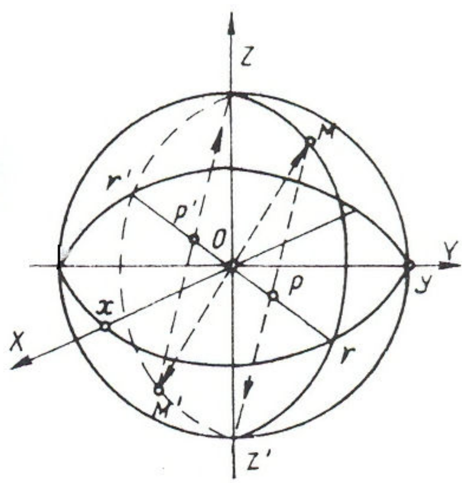
7. Изобразяване на елементите на симетрия на кристали чрез стереографска проекция

Елементите на симетрия на кристалите се изобразяват със стереографска проекция (нагледно), която съпоставя на различните направления в пространството - точка в една равнина.

Принципът е показан на фиг.1



Фиг.1. Намиране на стереографската проекция на точка.



Фиг.2. Намиране на стереографската проекция на дадено направление в пространството и на равнина.

Стереографската проекция съпоставя:

$\vec{OM} \to$ т. P; $\vec{OM'} \to$ т. p′; равнина $(\vec{OZ}, \vec{Or}) \to$ права rr'

$\vec{OX} \to$т.X; $\vec{OY} \to$т. Y; OZ и $OZ' \to$т.O

Построяване на стереографска проекция на кристал:

1. Кристалът се включва в сфера с определен $\vec{r}$.
2. Елементите на симетрия се продължават до пресичане с тази сфера и се наричат сферичните проекции.
3. Сферичната проекция се свързва с южния S или северния N полюс и се намират стереографските проекции

Стереографската проекция съпоставя:

Ос на симетрия $\to$ точка

Равнина на симетрия:

Препендикулярна равнина на проекция $\to$ права линия

Под ъгъл спряма равнината на проекция $\to$ дъга от окръжност

Изобразяване на оси на симетрия

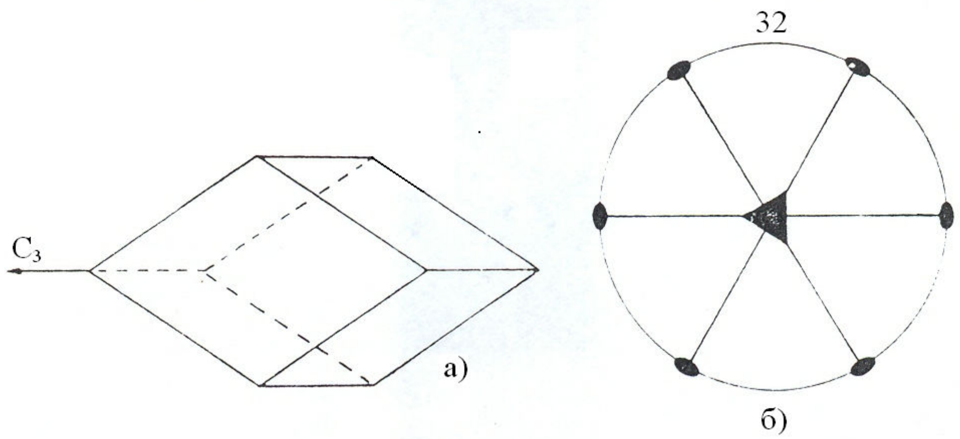
Стереографски проекции на α и β кварца

При T≈ 573°C преход $\alpha \to \beta$

α кварц (32):

тригонална симетрия;

ос 3, три оси 2

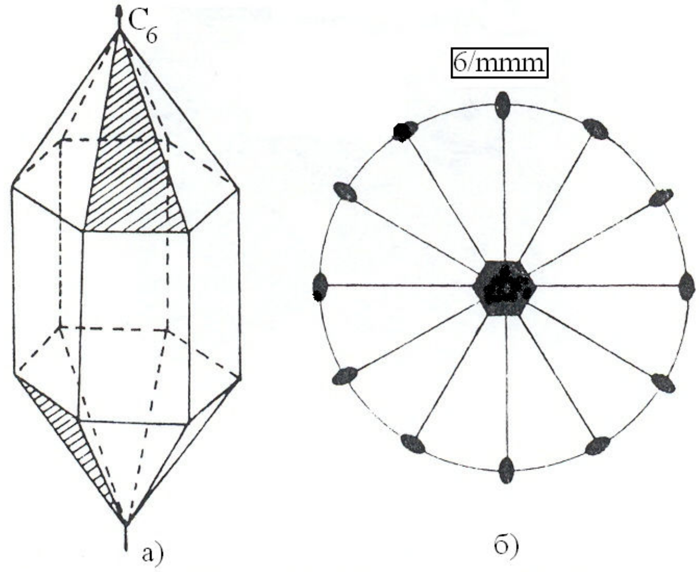


Фиг. 3. а) – структура на α кварца; б) - стереографска проекция на елементите на симетрия на правилния ромбоедър.

β кварц (6/mmm):

хексагонална симетрия;

инверсна ос $\overline{6}$; шест оси 2; една равнина на симетрия през оси 2, перпендикулярни на $\overline{6}$; n равнини, минаващи през $\overline{6}$ и 2



Фиг. 4. а) – структура на β кварца; б) - стереографска проекция на елементите на симетрия на хексагонална бипирамида.

При прехода от по-висок клас на симетрия (β-кварц) 6/mmm към по-нисък (α-кварц) 32, т.е. хексагонална бипирамида $\rightarrow$ правилен ромбоедър, се намалява степента на симетрия.

α и β кварца имат различни свойства, в частност пиезоелектрични.

ОБОБЩЕНИЕ

Международно означение на елемента на симетрия	Означение по Шенфлис на елемента на симетрия	Оператор на операцията на симетрия	Операция на симетрия
n	C_n	$\hat{C}(\varphi)$, $\hat{C}_n$	Въртене
m	C_s	$\hat{\sigma}$	Отражение
$\bar{1}$	C_i	$\hat{C}_i$	Инверсия
	S_n	$\hat{S}_n\left(\hat{C}_n.\hat{\sigma}_h\right)$	Огледално въртене
$\bar{n}$	C_{ni}	$\hat{C}_{n_i}(\hat{C}_n.\hat{C}_i)$	Инверсионно въртене