6. СИМЕТРИЯ НА КРИСТАЛНИТЕ РЕШЕТКИ – ПРОСТРАНСТВЕНИ ГРУПИ НА СИМЕТРИЯ. ПРОСТИ РЕШЕТКИ НА БРАВЕ. СЛОЖНИ РЕШЕТКИ НА БРАВЕ. ВЛИЯНИЕ НА СИМЕТРИЯТА НА СТРУКТУРНИЯ МОТИВ ВЪРХУ СИМЕТРИЯТА НА КРИСТАЛНИТЕ РЕШЕТКИ. ВИНТОВИ ОСИ И РАВНИНИ НА ХЛЪЗГАНЕ. ИЗОМОРФНИ ПРОСТРАНСТВЕНИ ГРУПИ.

1. Въведение

Пространствена група на симетрия – група от операции на симетрия, включваща и операцията транслация.

2. Прости решетки на Браве (пространствени)

На 7-те кристалографски сингонии се съпоставят 7 прости (P) пространствени решетки – прости решетки на Браве. Техните елементарни клетки притежават симетрията на кристалите от холоедричния клас (най-висшия клас на симетрия) на съответната сингония. Чрез транслация на елементите на симетрия на елементарната клетка се получава разпределението им в цялото пространство и се получават 7 пространствени групи на симетрия на простите решетки на Браве, съответстващи на 7-те кристалографски сингонии.

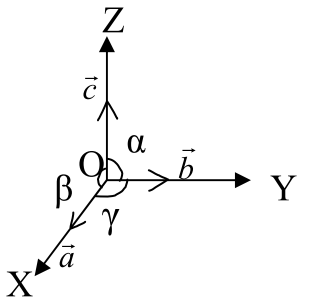
7-те холоедрични класове на симетрия + операцията транслация се превръщат в пространствени групи на симетрия на 7 прости КР на Браве.

Означения на основните параметри за 7-те прости решетки на Браве:

$\vec{a}_i = \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ – дължина на основните вектори

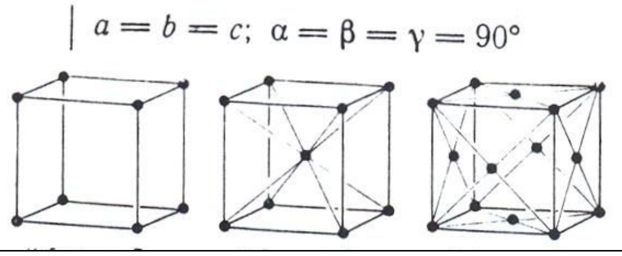
$\alpha_i = \alpha, \beta, \gamma$ – ъгли между основните вектори

Илюстрация на международното правило за означение на ъглите между кристалографските оси:



Фиг. 1. Основни параметри за 7-те прости решетки на Браве и ЕК на 14-те пространствени решетки на Браве:
P – проста, C – базоцентрирана, I – обемноцентрирана, F – стенноцентрирана.

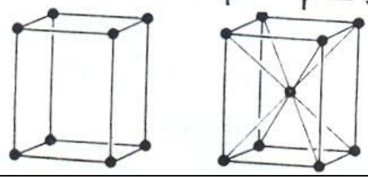
Кубични ЕК на Браве



P I F

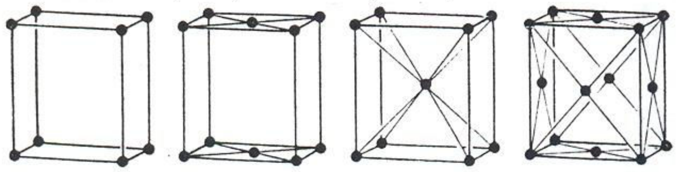
Тригонална ЕК на Браве
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120°, \ \neq 90°$

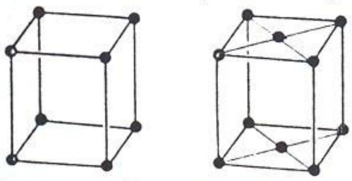
P

Тетрагонални ЕК на Браве
$a = b \neq c; \ \alpha = \beta = \gamma = 90°$

P I

Хексагонална ЕК на Браве
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90°, \ \gamma = 120°$

P

Ромбични ЕК на Браве
$a \neq b \neq c: \ \alpha = \beta = \gamma = 90°$

P C I F

Моноклинни ЕК на Браве
$a \neq b \neq c; \ \alpha = \gamma = 90° \neq \beta$

P C

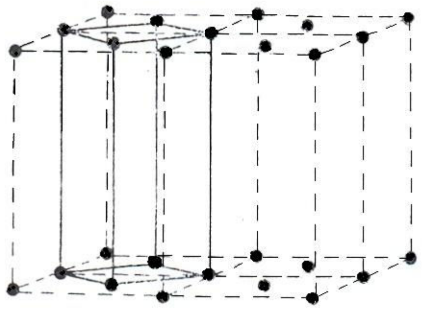
Триклинна ЕК на Браве
$a \neq b \neq c; \ \alpha \neq \beta \neq \gamma$

P

3. Сложни решетки на Браве

Въвеждането на сложни решетки на Браве има смисъл само тогава, когато простата решетка, до която те могат да се сведат, не принадлежи на същата кристалографска сингония.

Всяка от 7-те сложни решетки на Браве може да се сведе до проста решетка от друга сингония. Всички останали C, F, I - ЕК, които не са включени към сложните решетки на Браве могат да се сведат до примитивни (P) ЕК от същата сингония, но с други параметри.



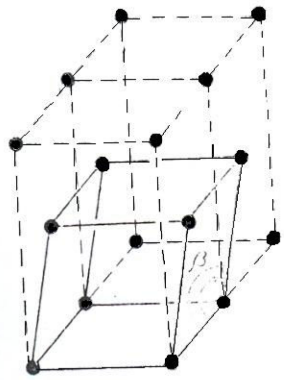
Фиг. 2. Свеждане на С тетрагонална ПР до проста ПР.

Базоцентрираната (С) тетрагонална пространствена решетка се свежда до проста (Р) тетрагонална ПР, чиято ЕК е с два пъти по-малък обем. Основните вектори са:

$$\angle\left(\vec{a}_1^{'}, \vec{a}_1\right) = 45°, \quad \angle\left(\vec{a}_2^{'}, \vec{a}_2\right) = 45°;$$

$$\vec{a}_3^{'} = \vec{a}_3, \quad a_2^{'} = \frac{a_2}{\sqrt{2}}, \quad a_1^{'} = \frac{a_1}{\sqrt{2}};$$

$$V^{'} = \frac{V}{2} = \frac{a_1 . a_2 . a_3}{2}$$



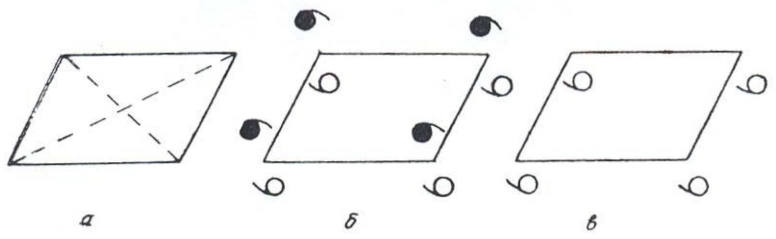
Фиг. 3. Свеждане на С ромбична ПР до проста ПР.

Базоцентрираната (С) ромбична пространствена решетка може да се сведе до проста (Р) моноклинна пространствена решетка $\Rightarrow$ трябва да се въведе С – ромбична пространствена решетка .

1948г. Браве доказва целесъобразното съществуване на 7 сложни решетки. Техните ЕК притежават симетрията на ЕК на простите решетки от съответната сингония. Чрез транслация на елементите на симетрията обаче се образуват 7 нови пространствени групи на сложните решетки на Браве, които притежават симетрията на кристалите от холоедричните класове на съответната сингония (съответстват на съответните холоедрични класове), както и 7-те прости решетки на Браве.

4. Влияние на симетрията на структурния мотив върху симетрията на кристалната решетка

От всички точкови групи в дадена кристалографска сингония, холоедричната група е с най-висша симетрия. Симетрията на кристалите от нехолоедричните групи е понижена. Обяснява се с липса на някои елементи на симетрия, характерни за ЕК на Браве в групата от структурни единици (структурен мотив) на КР.



Фиг. 4. Равнинна решетка на Браве.

Равнинна решетка на Браве с център на симетрия $\overline{1}$ - Фиг. 4а). Ако структурният мотив има също център център на симетрия, чрез транслация в пространството се получава пространствена група на симетрия $P\overline{1}$ - Фиг. 4б). Ако структурният мотив няма център на симетрия чрез транслация се получава пространствена група – P1 Фиг. 4в). ЕК в този случай не притежава център на симетрия, а само ос на симетрия от първи порядък.

5. Нови операции и елементи на симетрия при кристалните решетки

Наличието на структурни мотиви в кристалните решетки води до появата на две нови операции на симетрия и съответните им елементи на симетрия.

5.1. Винтови оси.

При комбинираната операция винтово въртене, всяка точка се завърта на ъгъл $2\pi / n$ и след това се премества успоредно на оста на въртене (дробна транслация, успоредна на оста *n*) на разстояние p / n от периода на идентичност ($a = \tau$) на тази ос, p е цяло число по-малко от *n*.

Означение: n_p – 3_1, 3_2.

5.2. Равнини на хлъзгане.

Комбинирана операция на отражение от дадена равнина и дробна транслация, успоредно на тази равнина.

Транслацията τ е по направление на векторите a_i или $(a_i + a_j)$, като i =1,2,3; $j \neq i$.

Равнината на хлъзгане се бележи с: (*a, b, c*), *n* или *d*.

$$a : \tau = \frac{1}{2} x, \quad b : \tau = \frac{1}{2} y, \quad c : \tau = \frac{1}{2} z,$$

$$n : \tau = \frac{1}{2}\left(a_i + a_j\right), \quad d : \tau = \frac{1}{4}\left(a_i + a_j\right)$$

6. Изоморфни пространствени групи.

Съчетаването на обикновените с транслационните елементи на симетрия става по различен начин. На всяка от 32-те точкови групи на симетрия съответстват няколко различни пространствени групи на симетрия, наречени изоморфни. През 1900г. Фьодоров доказва за пръв път възможността за съществуването на 230 пространствени групи на симетрия при кристалните решетки.

За моноклинната сингония двете ЕК на Браве P и C могат да се комбинират с всяка от трите точкови групи 2; *m* и 2/*m* и да дадат съответно пространствени групи:

P2	P*m*	P2/*m*	C2 ≡ $C2_1$	C*m*	C2/*m* ≡ $C2_1/m$
$P2_1$	P*b*	P2/*b*		C*b*	C2/*b* ≡ $C2_1/b$
		$P2_1/m$			
		$P2_1/b$			

Идентичните (червените) групи са изключват. Следователно остават 13 нееквивалентни моноклинни пространствени групи.

На всяка точкова група от моноклинната сингония съответстват няколко пространствени групи, наречени изоморфни:

Точкова група	Пространствени групи
2	P2, P2_1, C2
m	P*m*, C*m*, P*b*, C*b*
2/*m*	P2/*m*, P2_1/*m*, P2/*b*, P2_1/*b*, C2/*m*, C2/*b*