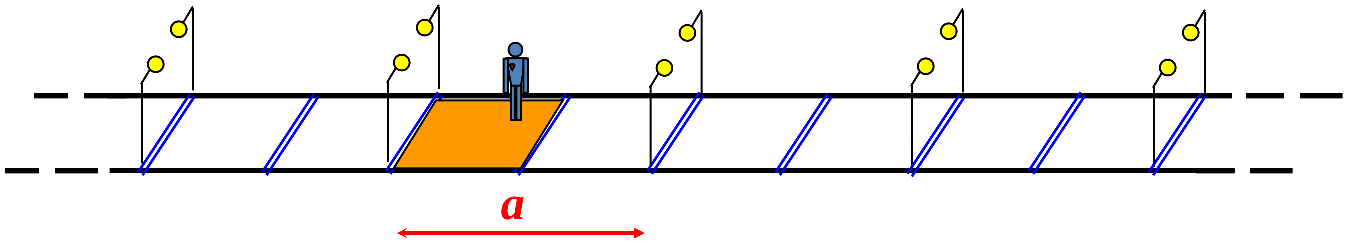
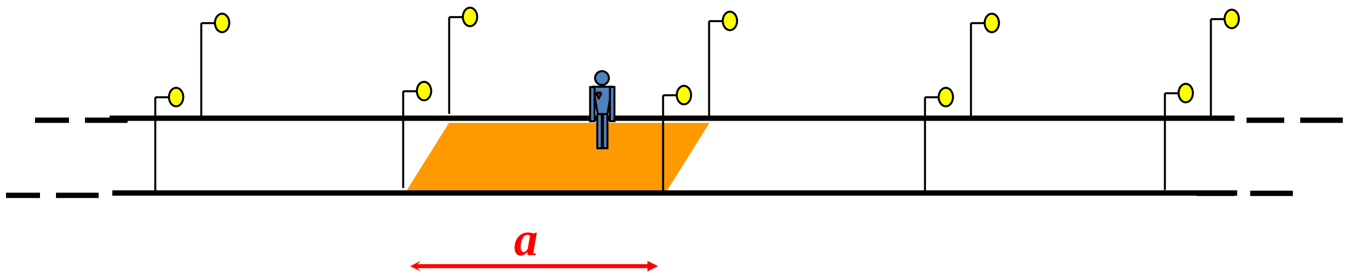
Сингонии, решетки Браве, кристаллографические классы

Кристалл –
это бесконечная периодическая структура,
т.е. «фигура», составленная из атомов

Как любая геометрическая фигура,
кристалл обладает симметрией

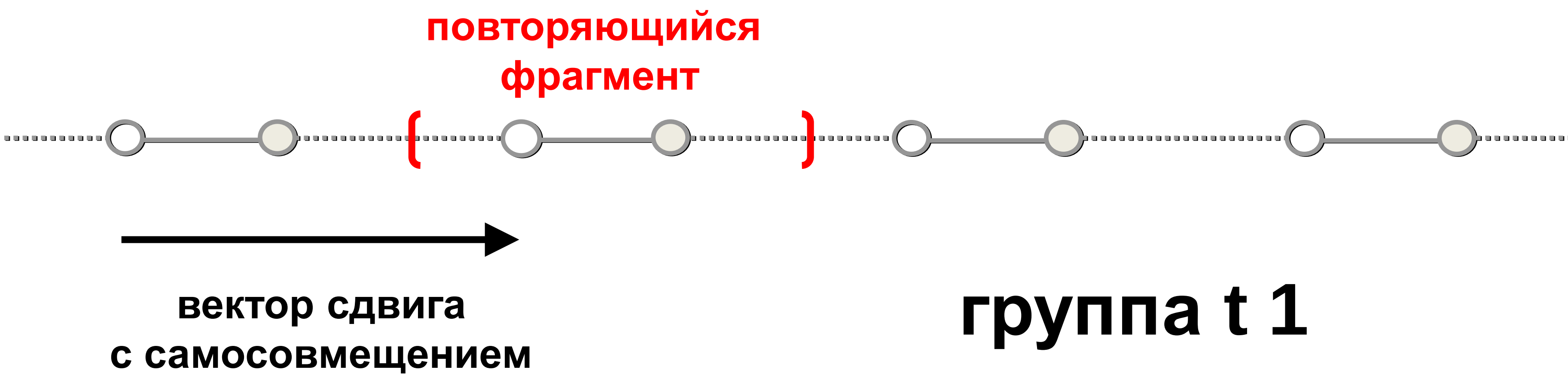
Трансляционная симметрия





Трансляционная симметрия кристалла

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



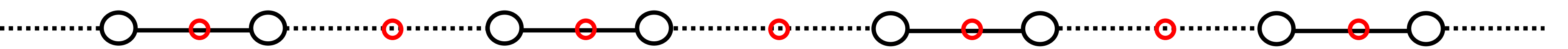
группа t 1

Сдвиг бесконечной периодической фигуры, приводящий к ее самосовмещению, называется ***операцией трансляции***

трансляция = «параллельный перенос»

У любого кристалла всегда есть трансляционная симметрия. Кроме того, кристалл может иметь точечную симметрию

бесконечная цепочка $(N_2)_\infty$



точечная симметрия: центры инверсии

группа t $\bar{1}$

Симметрию конечных фигур задают

точечные группы $\boldsymbol{G_{точ}}$.

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

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

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

$$\boldsymbol{G_{пр} \supset G_{точ}, T(n)},$$

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

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: *кристаллографический класс $G_{крист}$*

Пространственная группа $G_{пр.}$ – совокупность всех операций симметрии идеального кристалла

$$G_{пр} \supset T, G_{точ.},$$

T –подгруппа трансляций,

$G_{точ.}$ –точечная группа симметрии:

$$T = \{ m_j \boldsymbol{a}_i \}$$

n – размерность решетки

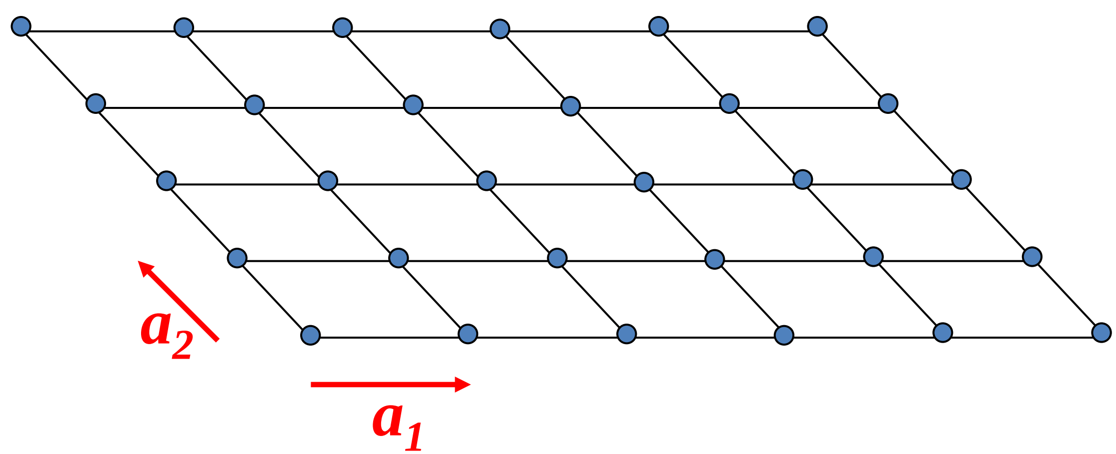
$\boldsymbol{a}_i$ (i = 1,2,…,n) – независимые (базисные) вектора

m – целые числа

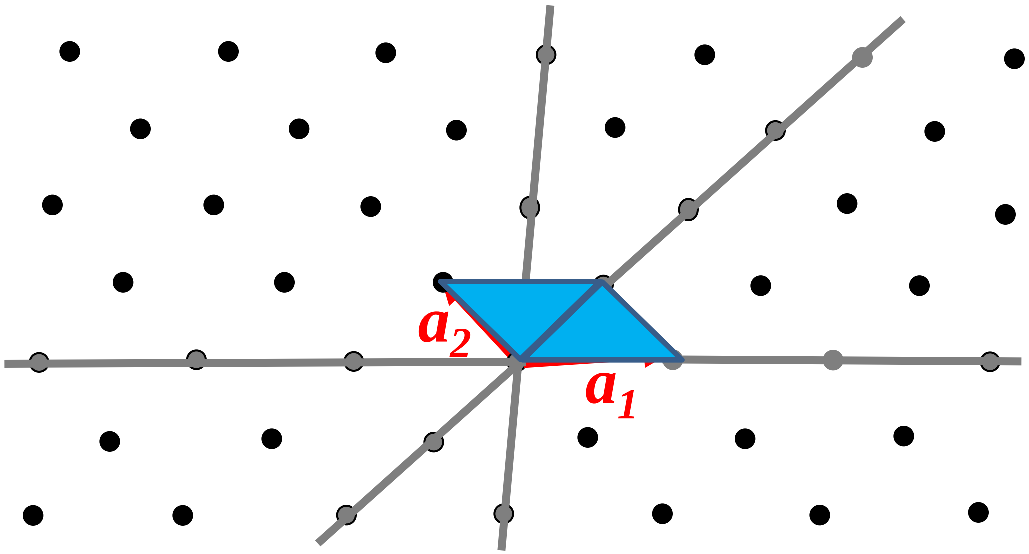
Решетка **– бесконечная правильная система точек, связанных операциями группы трансляций (орбита группы трансляций)**

$$T = \{ m\,\boldsymbol{a}_i,\ p\,\boldsymbol{a}_2 \}$$

$$\mathbf{t}_{mp} = m\,\boldsymbol{a}_1 + p\,\boldsymbol{a}_2$$

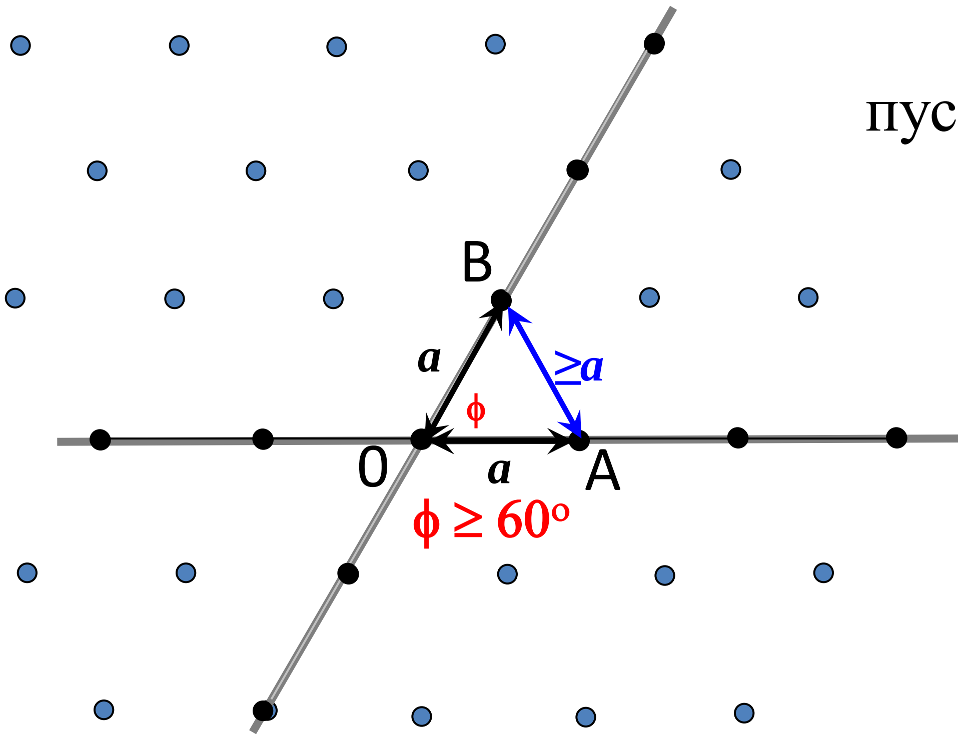


Узловые ряды в 2D-решетке

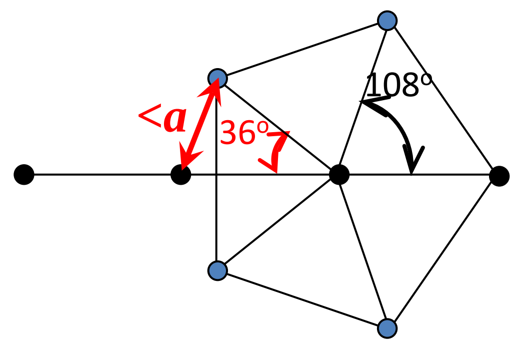


В каждом узле решетки – центр инверсии.
Любая решетка центросимметрична

Закрытые операции симметрии в кристалле



пусть ***a*** – наименьшая трансляция

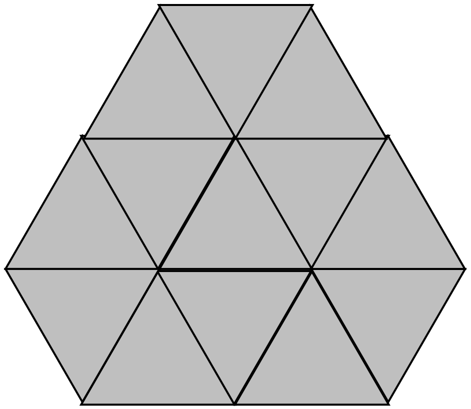


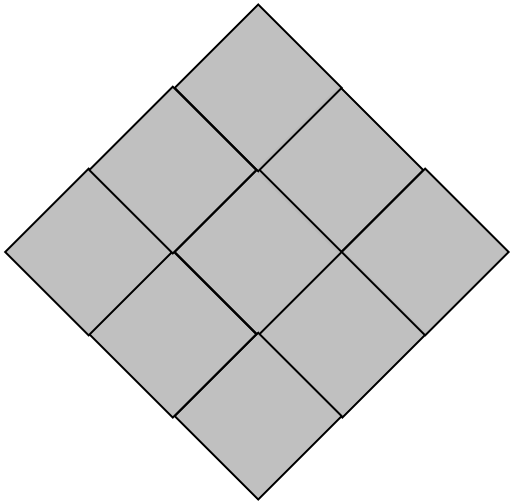
поворотные оси: 2, 3, 4, ~~5,~~ 6

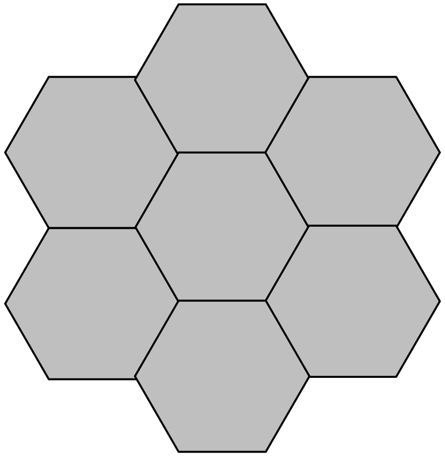
3D: инверсионные оси $\bar{1}$, ($\bar{2}$=)m, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$

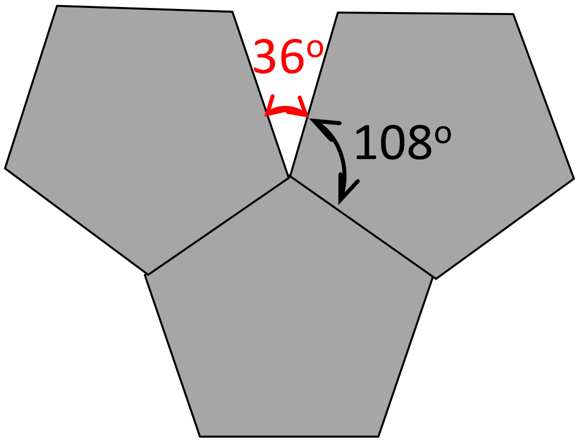
32 кристаллографические точечные группы (кристаллографические классы)

Почему в кристалле не может быть осей 5-го порядка: заполнение плоскости правильными n-угольниками



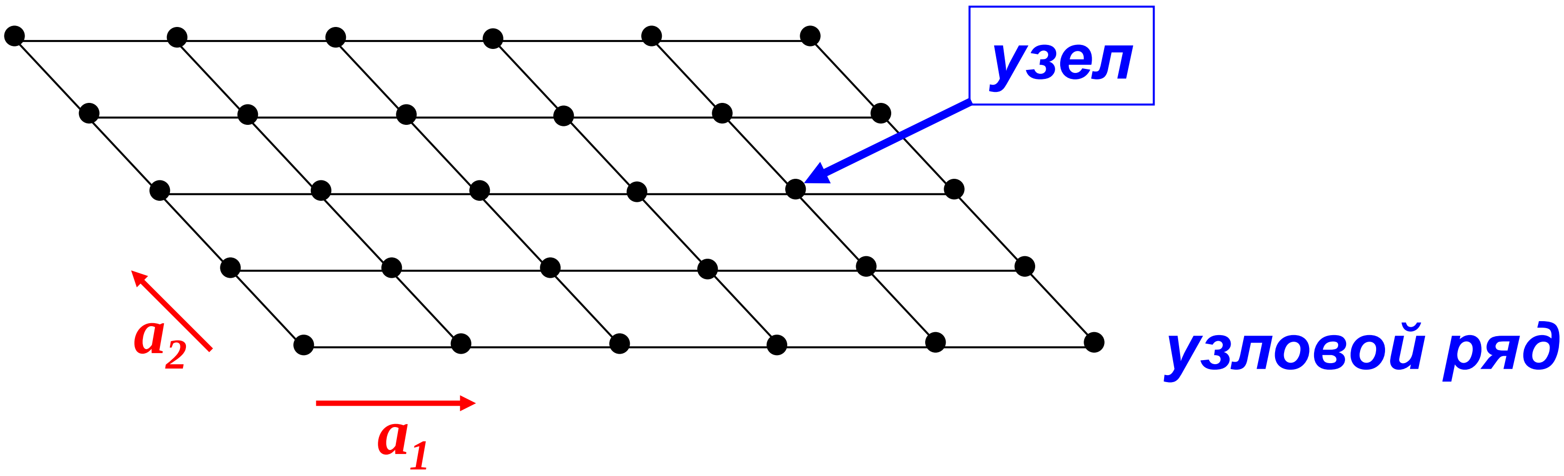






Правильными треугольниками, правильными шестиугольниками и квадратами можно плотно (без щелей) заполнить плоскость. Правильными пятиугольниками плотно заполнить плоскость **нельзя** – поэтому в плоских сетках нет осей 5.

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



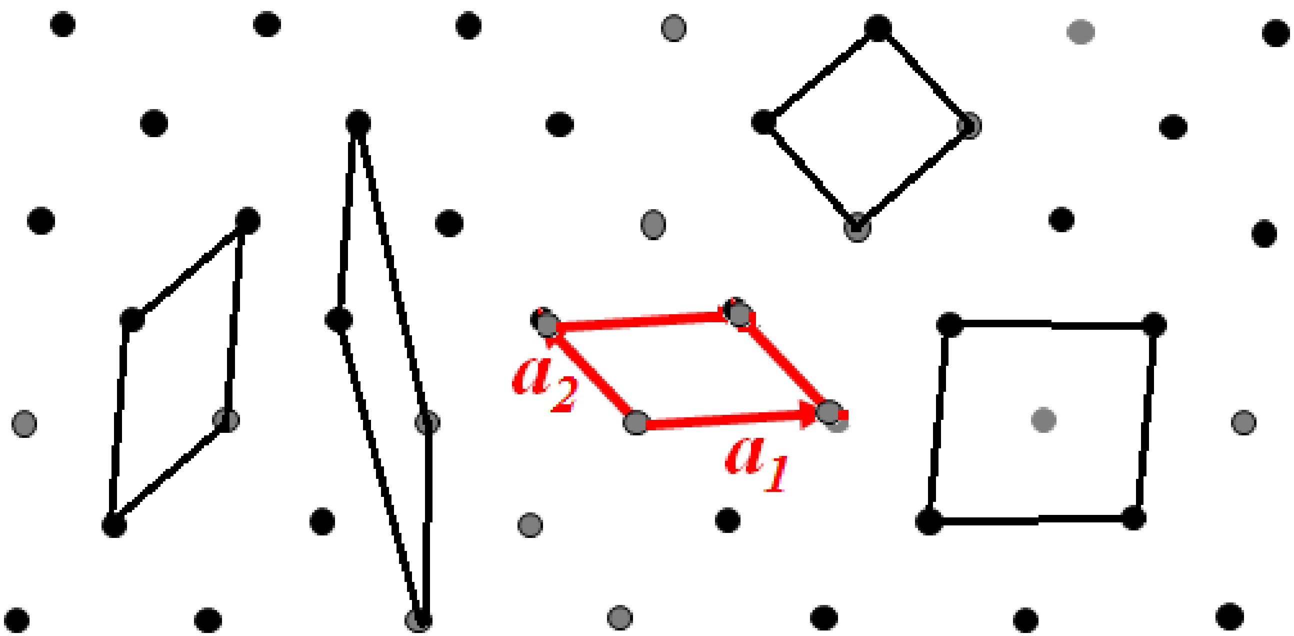
подгруппа трансляций

T={$m_i\boldsymbol{a_i}$}, где m_i – целые числа, $\boldsymbol{a_i}$ (i = 1,2,…,n) – независимые векторы трансляций; n = размерность решетки

Точечная группа узла в решетке называется *голоэдрической группой*.

Все кристаллографические точечные группы – это голоэдрические группы и их подгруппы

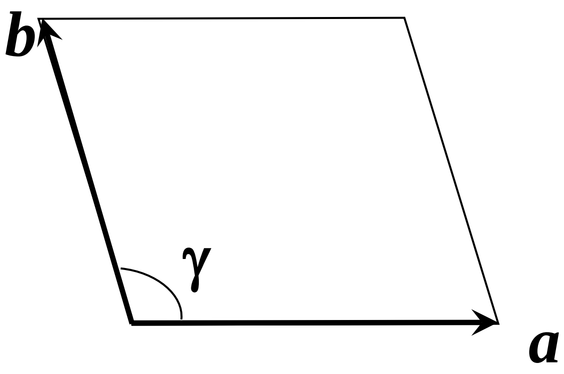
Выбор элементарной ячейки в решетке



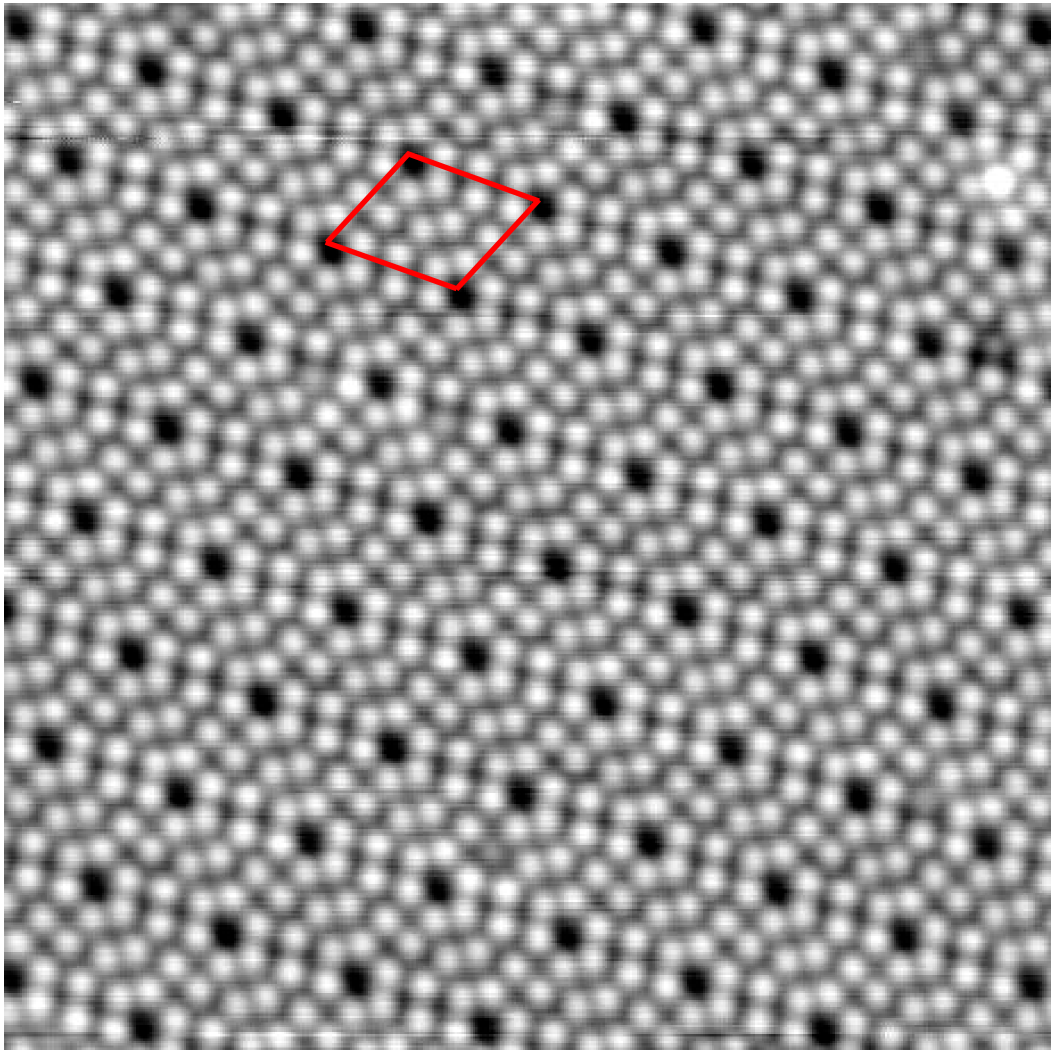
2D решетки: $S = k\ S_0$

S - площадь паралеллограмма повторяемости,
k- количество узлов, S_0 - площадь примитивного паралеллограмма повторяемости

Элементарная ячейка двумерного кристалла



Реконструкция поверхности монокристалла кремния (STM)



2D : 4 сингонии, 5 типов решеток Браве

сингония	голоэдрич. группа	подгруппы	центрировка решетки
	(кристаллографические классы)		
косоугольная	2	1	p
прямоугольная	mm2	m	p, c
тетрагональная	4mm	4	p
гексагональная	6mm	6, 3m, 3	p

Голоэдрическая группа – точечная группа симметрии узла решетки

Сингония – совокупность решеток с одинаковой голоэдрической группой

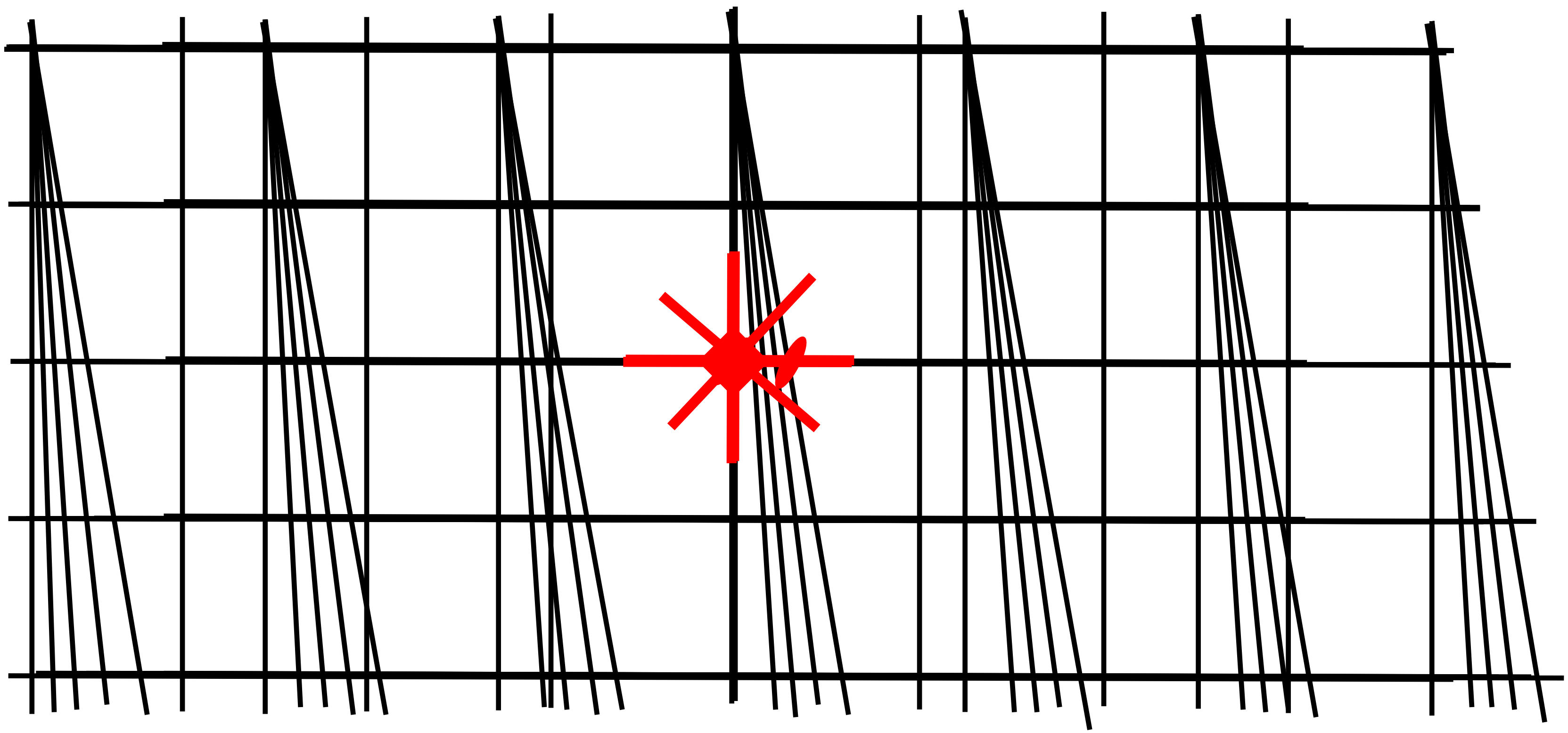
Тип решетки Браве определяется набором трансляций (сингонией и центровкой)

Все решетки одной голоэдрической группы –
сингония

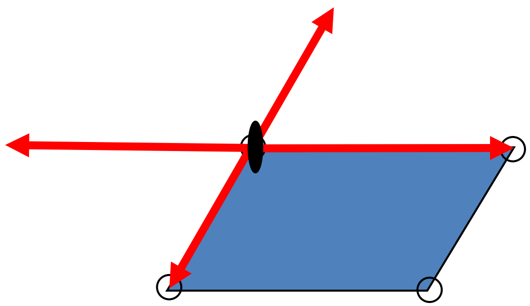
Все решетки одной сингонии,
связанные непрерывными деформациями –
тип Браве

«Безразмерная» решетка данного типа Браве –
решетка Браве

Деформация плоской сетки: новые элементы симметрии

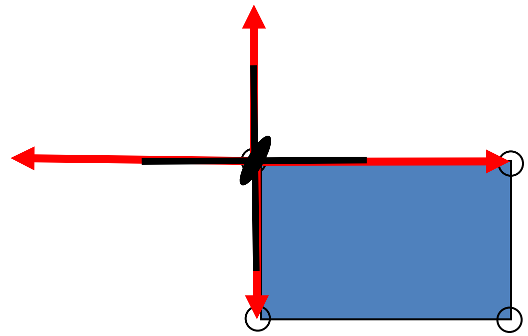


Элементарные ячейки в 2D-решетках



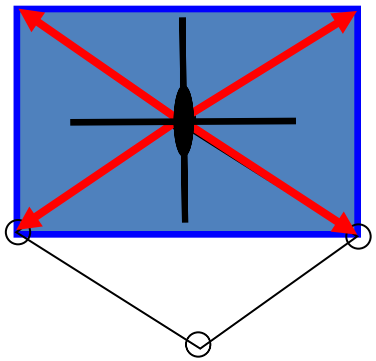
косоугольная ***p2***

a, b, γ – любые



прямоугольная ***pmm2***

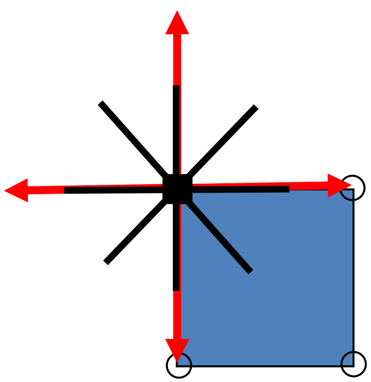
a≠b – любые, $\gamma = 90^o$



a'=a−b, b'=a+b, γ =90^o

прямоугольная ***cmm2***

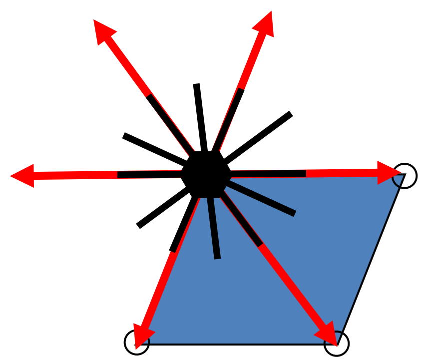
a=b, γ – любой



тетрагональная

p4mm

a=b, γ =90^o



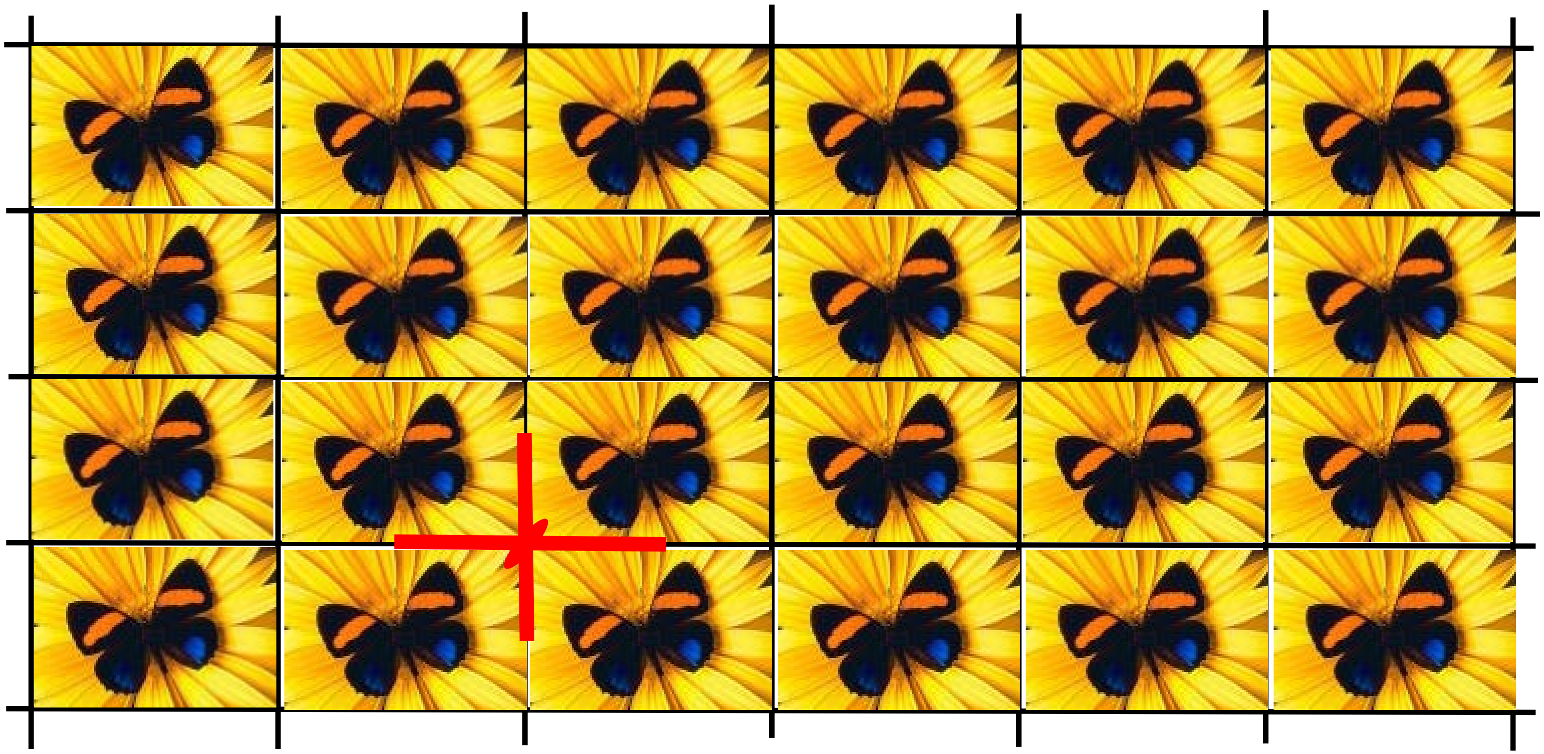
гексагональная

p6mm

a=b, γ =120^o

Дополнительные узлы возможны только в прямоугольных сетках

При заселении решетки реальными объектами симметрия узла решетки может понизиться



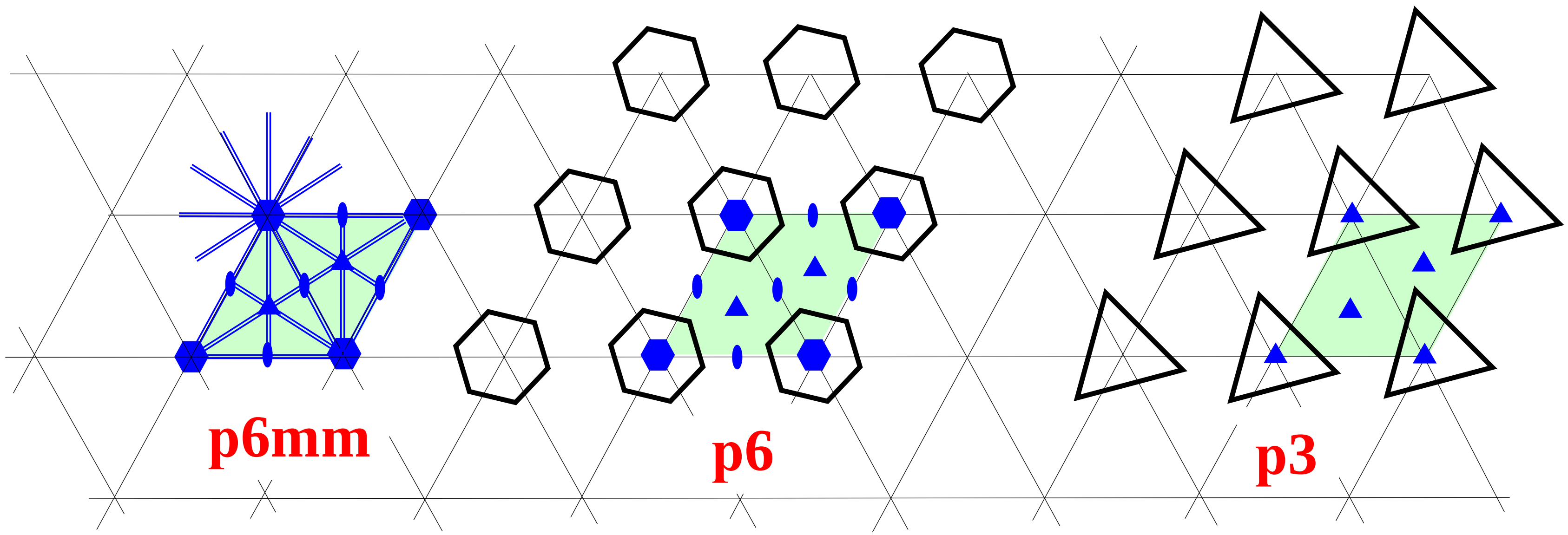
элементы симметрии узла решетки

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

плоская группа модельного «кристалла» **p1**

Кристаллографические группы
описывают симметрию узла решетки в реальной кристаллической структуре

Пример: объекты с осями 3 и 6 порядка в гексагональной сетке



$$6mm \supset 6, 3m, 3$$

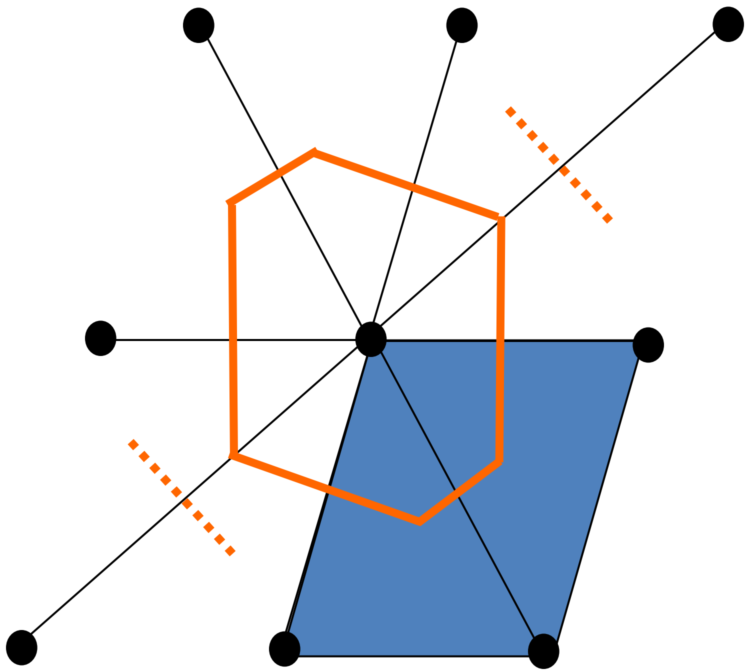
2D : 4 сингонии, 5 решеток Браве

поворотные «оси» (1), 2, 3, 4, 6; «плоскости» m:
10 кристаллографических классов

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

Другой выбор элементарной ячейки

ближайшая окрестность узла решетки:
область Дирихле



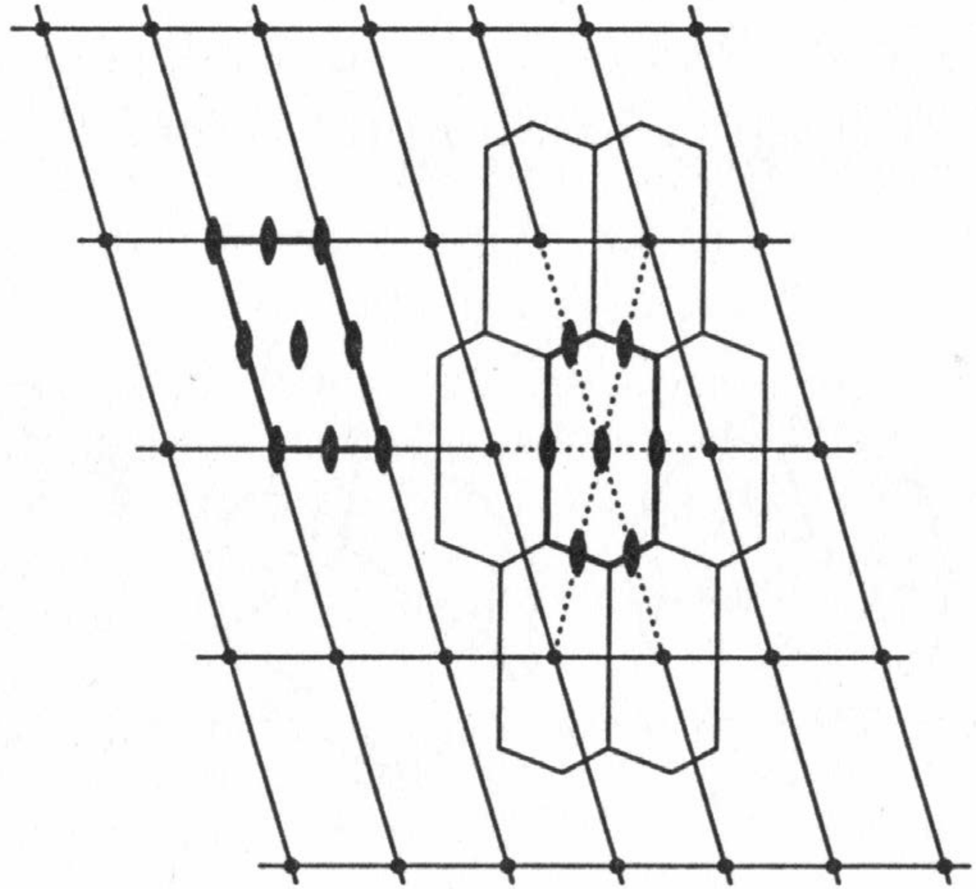


Рис. 2.9. Параллелограмм повторяемости и область Дирихле косоугольной решетки

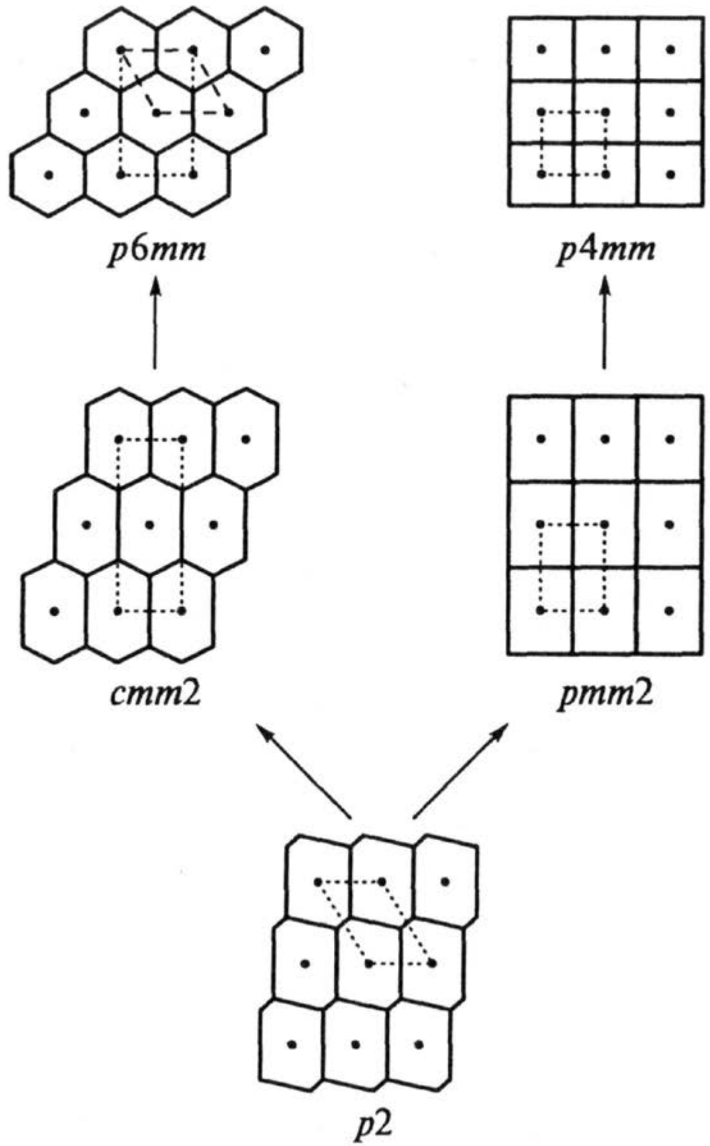
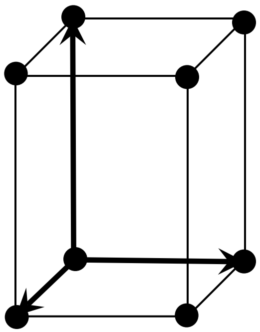


Рис. 2.10. Схема вывода пяти плоских решеток Браве деформациями примитивной косоугольной решетки

Примитивные и непримитивные элементарные ячейки в трехмерных решетках

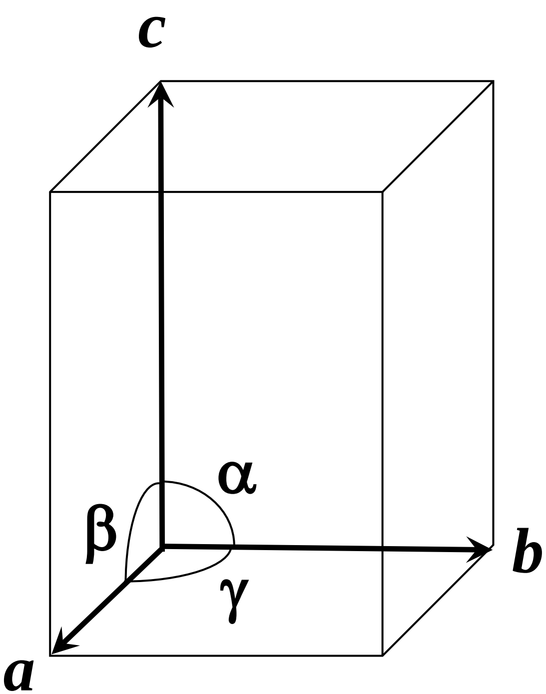
3D решетки: $V = k\,V_0$

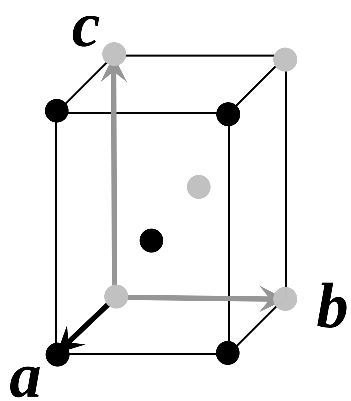
V – объем параллелепипеда повторяемости, k- количество узлов, V_0 - объем примитивного параллелепипеда повторяемости (объем одного узла)



примитивная (P)

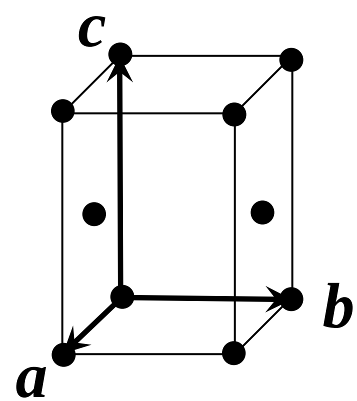
k=1





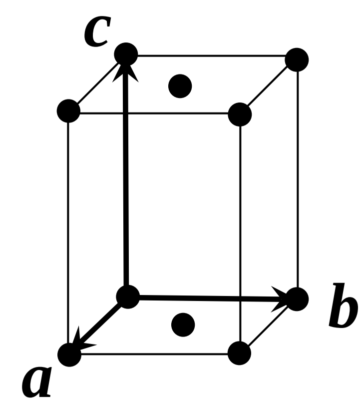
бокоцентрированная

A **k=2**



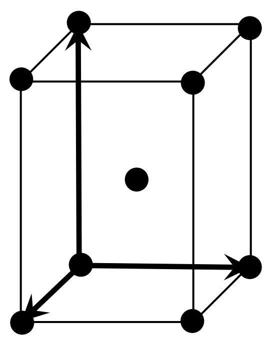
бокоцентрированная

B **k=2**



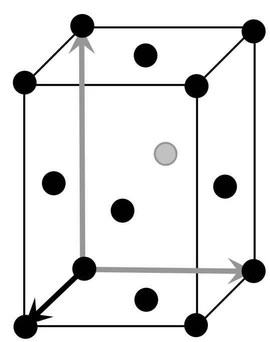
бокоцентрированная (базоцентрированная)

C **k=2**



k=2

Объемноцентрированная (I)



гранецентрированная (F) **k=4**

Сингонии и группы
в n-мерных пространствах

(International Tables, 5th Ed, 2002, v. **A**, p. 720)

изме-рений	сингоний	решеток Браве	кристаллографических групп точечных	кристаллографических групп пространственных (из них симморфных)
2	4	5	10	17 (13)
3	7	14	32	230 / 219 (73)
4	23	64	227	4894 / 4783 (780)
5	32	189	955	222018 (6073)
6	91	841	7104	28 927 922 (85311)

Сингонии и решетки Браве в трехмерном случае

кристаллографические классы

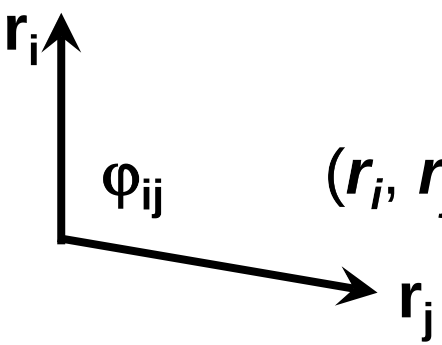
Сингония	голоэдр. группа	подгруппы	параметры ячейки	решетки Браве
триклинная	$\bar{1}$	1	a,b,c,α,β,γ– произвольные	**P**
моноклинная	2/m	2, m	a,b,c – любые, $\alpha=\gamma=90^0$; $\beta \neq 90^0$	**P, C (A)**
орторомби-ческая	mmm	mm2, 222	a,b,c – любые $\alpha=\beta=\gamma=90^o$	**P, A (B,C), I, F**
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** (или «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**

Объем элементарной ячейки

$$\mathbf{V = (det\ G)^{1/2}}$$

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

матрица Грама («метрический тензор»),



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

скалярное произведение векторов

Сингонии и решетки Браве в трехмерном случае

кристаллографические классы

Сингония	голоэдр. группа	подгруппы	параметры ячейки	решетки Браве
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)**
орторомбическая	mmm	**mm2, 222**	a,b,c – любые $\alpha=\beta=\gamma=90^o$	**P, A (B,C), I, F**
тетрагональная	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**»)
гексагональная	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**

3D: 7 сингоний, 14 решеток Браве
32 кристаллографических класса

поворотные оси (1), 2, 3, 4, 6

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

1						$\bar{1}$
2		m				2/m
		mm2	222			mmm
3		3m	32		$\bar{3}$	$\bar{3}$m
4	$\bar{4}$	4mm	422	$\bar{4}$2m	4/m	4/mmm
6	$\bar{6}$	6mm	622	$\bar{6}$m2	6/m	6/mmm
23			432	$\bar{4}$3m	m $\bar{3}$	m $\bar{3}$ m

нецентросимметричные

11 классов Лауэ (центросимметричные)

Многогранники, заполняющие пространство (3D-ячейки): *полиэдры Вороного*

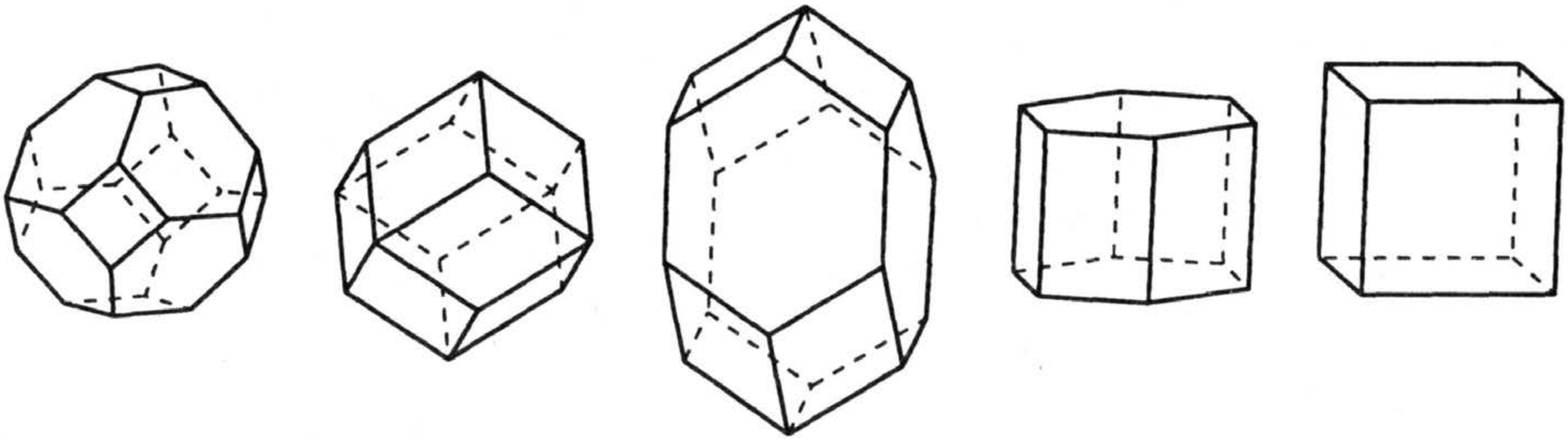


Рис. 2.11. Пять метрически неэквивалентных параллелоэдров Федорова

с учетом симметрии в 3D-кристаллах – 24 различных полиэдра Вороного