

Лабораторна робота № 4

ВИЗНАЧЕННЯ КЛАСІВ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКІВ

Мета роботи – вивчити принципи визначення класів симетрії та навчитись записувати міжнародний символ для класів симетрії.

Основні теоретичні відомості

Площини симетрії, осі симетрії прості та інверсійні, центр симетрії знаходяться в кристалах у різних сполученнях. Число можливих сполучень елементів симетрії в кристалічних многогранниках обмежено через відсутність у кристалах осей симетрії п'ятого, сьомого і більш високих порядків і певного числа способів взаємного розташування елементів симетрії. Якщо у многограннику є єдиний напрямок, що не повторюється, то такий напрямок називається *особливим* або *одиничним*.

Відповідно до числа одиничних напрямків та симетрії всі кристали поділяються на три *категорії*: вищу, середню та нижчу.

До вищої категорії відносять кристали, що не мають одиничних напрямків, а осей порядків вище другого мають декілька.

Середню категорію складають кристали, що мають один одиничний напрямок та декілька осей другого порядку.

До нижчої категорії відносять кристали, що мають декілька одиничних напрямків і не мають осей вище другого порядку.

Три категорії, в свою чергу, поділяються на сім *сингоній*. У сингонію об'єднують кристали, що мають однакову симетрію елементарних комірок та однакову систему координат.

До вищої категорії належить лише одна сингонія – *кубічна*; до середньої три сингонії – *тригональна, тетрагональна та гексагональна*; до нижчої також три – *ромбічна, моноклинна та триклинна*.

Сім сингоній, у свою чергу, поділяються на 32 класи. *Класом симетрії* називається повна сукупність (комбінація) елементів симетрії кристалічного многогранника.

Російський кристалограф А. В. Гадолін теоретичним шляхом вивів всі 32 класи симетрії кристалічних многогранників.

Для виведення класу симетрії зазвичай беруть два або три елементи симетрії (елементи симетрії, що породжують), і знаходять потім (наприклад, розмножуючи пробну грань і проекції) інші (породжені) елементи симетрії.

Повну сукупність елементів симетрії (клас) можна записувати не тільки за допомогою формули елементів симетрії. Широко застосовується *міжнародний символ класу симетрії*. На відміну від формули симетрії міжнародний символ налічує лише три позиції на яких записують лише деякі характерні елементи симетрії, що входять у формулу симетрії, так звані *породжуючі елементи симетрії*. Повна формула симетрії легко може бути виведена з міжнародного символу з урахуванням теорем сполучення елементів симетрії і правил запису міжнародних символів класів симетрії (табл. 3).

Цифри в міжнародному символі класу симетрії позначають порядок осі (осей) симетрії (*1,2,3,4,6*), розташованої (або розташованих) у певному напрямку.

Символ *m* позначає одну (або декілька) площину симетрії.

Символ *n/m* означає вісь *n*-го порядку і площину симетрії *m* (горизонтальну) перпендикулярну до цієї осі.

Таблиця 3 – Правила запису міжнародного символу класу симетрії

Сингонія	Позиція в символі		
	1-а	2-а	3-я
Триклінна	Лише один символ, що відповідає будь-якому напрямку в кристалі		
Моноклінна	Єдина вісь 2 або площина m вздовж осі OY		
Ромбічна	Вісь 2 або площина m вздовж осі OX	Вісь 2 або площина m вздовж осі OY	Вісь 2 або площина m вздовж осі OZ
Тригональна	Головна вісь симетрії	Осі 2 або площина m вздовж осей OX, OY, OU	Діагональні осі 2 або площина m
Гексагональна			
Тетрагональна	Те саме	Осі 2 або площина m вздовж осей OX, OY	
Кубічна	Координатні елементи симетрії	Осі 3	Діагональні елементи симетрії

Особливе значення мають цифри 1 і $\bar{1}$, що позначають відповідні класи симетрії триклінної сингонії. Клас 1 формально позначає наявність осі симетрії першого порядку L_1 , як єдиного елемента симетрії, тобто відсутність площин симетрії, осей симетрії другого, третього, четвертого та шостого порядків, а також центру симетрії.

Клас $\bar{1}$ містить єдиний елемент симетрії – центр симетрії, що формально подається як інверсійна вісь першого порядку.

У класах симетрії нижчої категорії у міжнародний символ переважно записують площини симетрії (за їх відсутності – осі симетрії). Елементів симетрії тут небагато, виняток складає клас mmm , у міжнародному символі якого зазначені три взаємно перпендикулярні площини симетрії (наведене позначення даного класу є скороченим, бо утворюється від повного $2/mmm$, де послідовно зазначені вісь L_2 , горизонтальна площина симетрії, дві вертикальні площини симетрії).

У класах симетрії середньої категорії на першій позиції в міжнародному символі записується вертикальна вісь симетрії вищого порядку ($3; 4; 6; \bar{3}; \bar{4}; \bar{6}$), потім (на другій позиції) – або горизонтальні координатні осі симетрії (наприклад, клас 622), або координатні вертикальні площини симетрії (клас $6mm$). Якщо є горизонтальна площина симетрії, то її записують таким чином – $6/m$. На третій позиції вказуються діагональні елементи симетрії – або горизонтальні осі симетрії другого порядку (клас $\bar{6}m2$) або вертикальні площини симетрії (клас $4/mmm$).

Наприклад, схема формування міжнародного символу класу симетрії $4/mmm$ така:

$$L_4 4L_2 5PC = L_4^B 4L_2^\Gamma 1P^\Gamma 2P^{B, \text{коорд.}} 2P^{B, \text{діагон.}} \cdot C,$$

де L_4^B – вертикальна вісь четвертого порядку – 4 ;

$1P^\Gamma$ – горизонтальна площина симетрії, розташована перпендикулярно до L_4^B – m ;

$2P^{B, \text{коорд.}}$ – дві площини симетрії у координатних напрямках – m ;

$2P^{B, \text{діафон}}$ – дві площини симетрії у діагональних напрямках – m .

У класах симетрії вищої категорії в міжнародному символі спочатку записується символ трьох однакових елементів симетрії, що розташовуються в трьох взаємно перпендикулярних (координатних) напрямках – чи осі симетрії ($3L_2, 3L_4, 3L_4$), чи площини симетрії; потім пишеться цифра 3 , яка вказує, що кожний з цих класів симетрії, містить $4L_3$, розташовані як просторові діагоналі в кубі; і, нарешті, вказуються елементи симетрії в діагональному напрямку (якщо вони є, у класі 432 – це шість осей L_2).

Порядок виконання роботи

1) Визначити елементи симетрії кристалічного многогранника, вказати сингонію і категорію до яких він належить.

2) Побудувати стереографічну проекцію елементів симетрії кристалічного многогранника, виділяючи елементи симетрії в координатних напрямках. Проаналізувати кратність того або іншого елемента симетрії, взаємозв'язок між окремими елементами симетрії. Наприклад, при наявності центру симетрії число парних осей симетрії дорівнює числу площин симетрії (площини перпендикулярні осям симетрії парного порядку).

3) У записі міжнародного символу перевагу віддають площинам симетрії. Наприклад, за наявності в координатному напрямку осі симетрії і нормалі до площини симетрії в міжнародному символі указується лише площина симетрії.

4) У класах симетрії кубічної сингонії необхідно фіксувати увагу на різниці між координатними і діагональними елементами симетрії і їх кратності (три для координатних і шість для діагональних).

У кубічних кристалах завжди присутні чотири осі симетрії L_3 , що розташовуються як об'ємні діагоналі в кубі. У кубічних кристалах координатні елементи симетрії повторюються тричі ($3L_4$, $3L_2$, $3P$).

У кубічній сингонії діагональні елементи симетрії повторені шість разів ($6L_2$, $6P$).

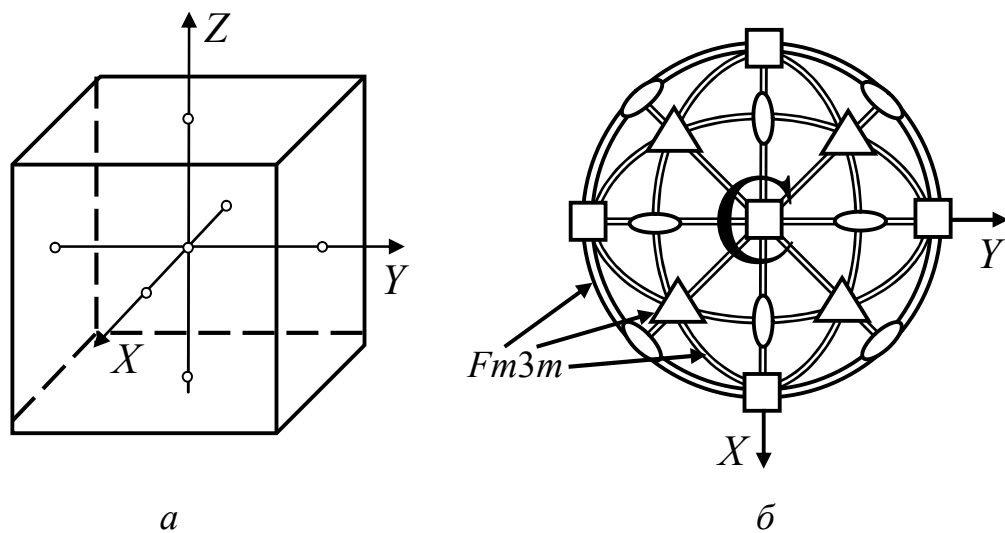
У кубічних кристалах число площин симетрії кратне трьом: а - коли кристал містить тільки координатні площини симетрії (нормалі їх збігаються з координатними напрямками), то їх буде три (наприклад, $m\bar{3}$); б - діагональних площин симетрії в кристалі шість (наприклад, $\bar{4}3m$); в - якщо

кристал містить як координатні, так і діагональні елементи симетрії, загальне число площин симетрії буде дорівнює дев'яти (наприклад, $m\bar{3}m$).

5) На підставі теорем про сполучення елементів симетрії кристалічних многогранників записати міжнародний символ класу кристала.

6) Стрілками вказати місцезнаходження елементів симетрії, які входять до міжнародного символу, на стереографічній проекції (рис. 11 б).

Приклад: На рисунку 11 а представлено кубічний кристал. Формула елементів симетрії для даного кристала має вид: $3L_44L_36L_29PC$.



a – кристал кубічної сингонії; *б* – стереографічна проекція

Рисунок 11 – Зовнішній вигляд кристала кубічної сингонії та його стереографічна проекція

Після зображення стереографічної проекції кристала (рис. 11 б), виділимо координатні і діагональні елементи симетрії: три площини симетрії координатні, позначимо символом m ; чотири осі L_3 – символом 3 ; шість

площин симетрії діагональних – символом m . У результаті одержуємо міжнародний символ класу кристала кубічної сингонії $m\bar{3}m$.

Контрольні питання

- 1) Що називають класом симетрії?
- 2) Що називають сингонією?
- 3) Які елементи симетрії входить у клас симетрії $3m$?
- 4) Чим відрізняються класи симетрії 32 і 23 ; $3m$ і $\bar{3}m$; $\bar{4}2m$ і $43m$; $m\bar{m}2$, $4mm$?