

Обозначение плоскости скольжения	Направление трансляции	Величина трансляции
1	2	3
a	$\vec{a}$ (вдоль [100])	$\frac{a}{2}$
b	$\vec{b}$ (вдоль [010])	$\frac{b}{2}$
c	$\vec{c}$ (вдоль [001])	$\frac{c}{2}$
n	Диагональ нецентрированной грани (типа <110>)	$\frac{\bar{a} + \bar{b}}{2}$ , или $\frac{\bar{a} + \bar{c}}{2}$ , или $\frac{\bar{b} + \bar{c}}{2}$
d	Диагональ центрированной грани (типа <110>)	$\frac{\bar{a} + \bar{b}}{4}$ , или $\frac{\bar{a} + \bar{c}}{4}$ , или $\frac{\bar{b} + \bar{c}}{4}$

Винтовая ось — это прямая, поворот вокруг которой на некоторый угол, соответствующий порядку оси, с последующей трансляцией вдоль оси на величину, кратную периоду идентичности  $t$ , совмещает точки тела.

Обозначение винтовой оси в общем виде  $nS$ , где  $n$  характеризует порядок

поворотной оси ( $n = 1, 2, 3, 4, 6$ ), а  $\frac{S}{n}t$  — величину трансляции вдоль оси.

При этом  $S < n$ ,  $S$  — целое число, оно может принимать следующие значения  $S = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ . Итак, для винтовой оси второго порядка

трансляция составляет  $\frac{t}{2}$ , для винтовой оси третьего порядка

наименьший перенос  $\frac{t}{3}$

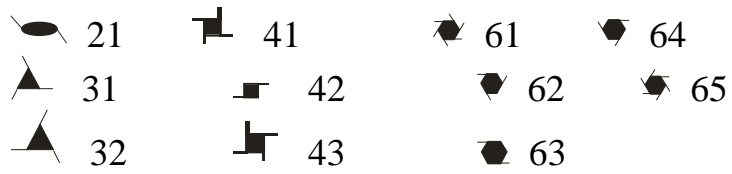
Обозначение винтовой оси второго порядка будет  $21$ . Совмещение частиц произойдет после поворота вокруг оси на  $180^\circ$  с последующей

трансляцией вдоль направления, параллельного оси, на  $\frac{t}{2}$ . Наименьший

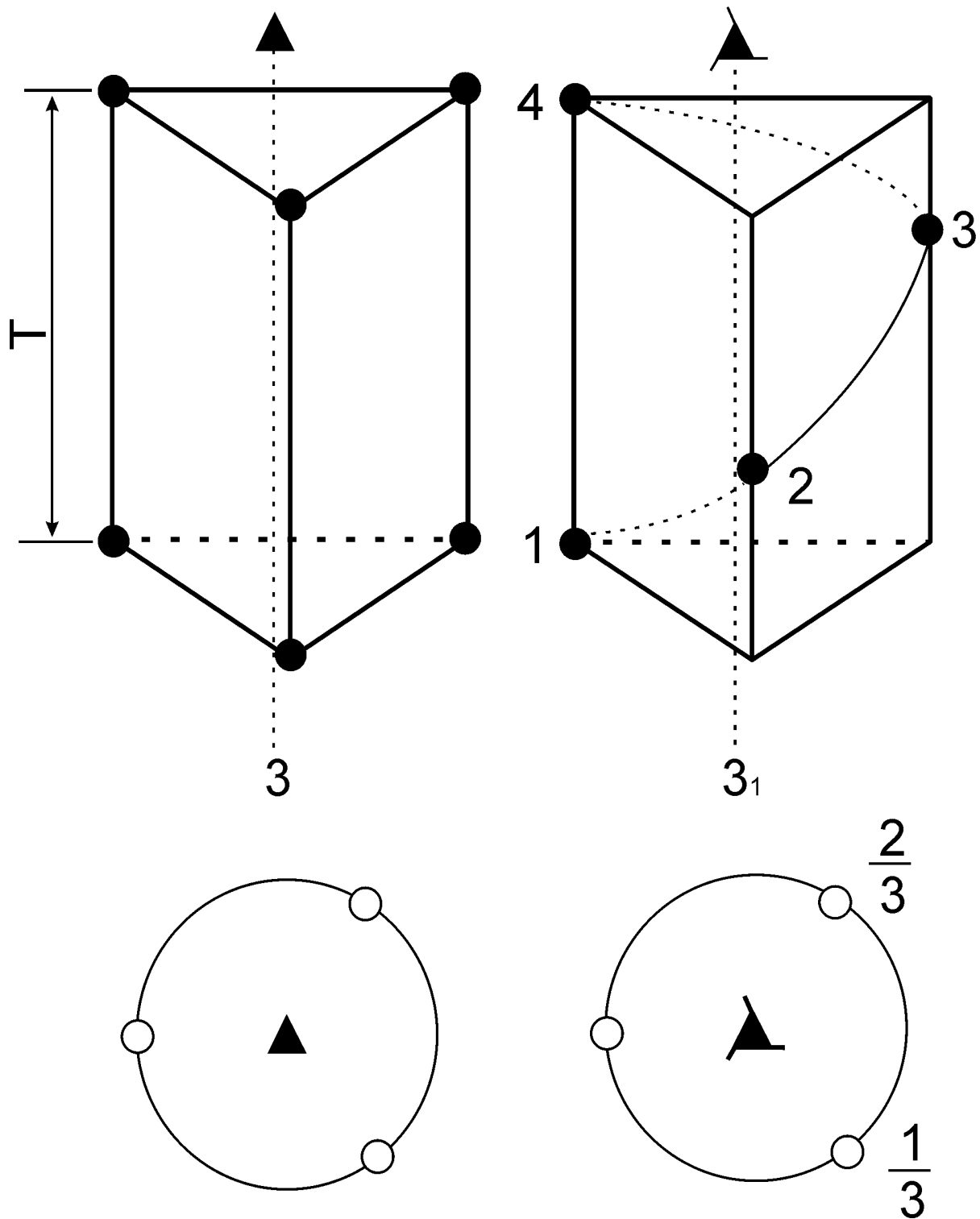
перенос для винтовой оси третьего порядка равен  $\frac{t}{3}$  — ось  $31$ . Однако возможны оси с переносом, кратным наименьшему. Поэтому возможна

винтовая ось  $32$  с трансляцией  $\frac{2}{3}t$ . Оси  $31$  и  $32$  означают поворот вокруг оси на  $120^\circ$  по часовой стрелке с последующим переносом. Эти винтовые оси называются правыми. Если же поворот производить против часовой стрелки, то центовые оси симметрии называются левыми. При этом действие оси  $31$  правой тождественно действию оси  $32$  левой и  $32$  правой —  $31$  левой. Так же могут рассматриваться винтовые оси симметрии четвертого и шестого порядков: оси  $41$  и  $43$  оси  $61$  и  $65$ ,  $62$  и  $64$ . могут

быть правым и левыми. Действие осей 21, 42 и 63 не зависит от выбора направления вращения вокруг оси. Поэтому они являются нейтральными. Условные обозначения винтовых осей симметрии:



На рис. 6.3 показано действие поворотной оси симметрии 3 и винтовой 31.



а

б

Рис. 6.3. Действие поворотной оси 3 (а) и винтовой 3<sub>1</sub> (б)

### 6.3. ОБОЗНАЧЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

Символ пространственной группы содержит полную информацию о симметрии кристаллической структуры. На первом-месте в символе

пространственной группы ставится буква, характеризующая тип решетки Браве, то есть трансляционную симметрию:

$P$  — примитивная,

$C$  — базоцентрированная,

$I$  — объемноцентрированная,

$F$  — гранецентрированная.

В ромбоэдрической сингонии на первом месте ставят букву  $R$ .

Далее следуют одно, два или три числа или буквы, указывающие элементы симметрии в главных направлениях, аналогично тому, как это делается при составлении обозначения класса симметрии.

Если в структуре в каком-нибудь из главных направлений одновременно располагаются и плоскости симметрии и оси симметрии, предпочтение отдается плоскостям симметрии, и в символ пространственной группы записываются плоскости симметрии. При наличии нескольких осей предпочтение отдается простым осям — поворотным и инверсионным, поскольку их симметрия является более высокой, чем симметрия винтовых осей.

Имея символ пространственной группы, легко можно определить тип решетки Браве, сингонию ячейки, элементы симметрии в главных направлениях. Так, пространственная группа  $P4_2 / mnm$  характеризует примитивную ячейку Браве в тетрагональной сингонии (винтовая ось четвертого порядка  $4_2$  определяет тетрагональную сингонию). В главных направлениях расположены следующие элементы симметрии. С направлением  $[001]$  — оси  $Z$  совпадает винтовая ось  $4_2$ , которая перпендикулярна симметрии  $m$ . В направлениях  $[100]$  и  $[010]$  (оси  $X$  и  $Y$ ) расположена плоскость скользящего отражения типа  $n$ , в направлении  $[110]$  проходит плоскость симметрии  $m$ .

#### 6.4. ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ

**Задача.** У модели кристаллической структуры железа:

- 1) найти элементы симметрии ;
- 2) выделить элементы симметрии в главных направлениях;
- 3) записать символ пространственной группы симметрии.

**Решение.**

1) Элементарная ячейка железа (рис. 6.4) представляет собой объемноцентрированный куб, то есть ячейка Браве *I* типа. В ней имеются характерные для куба элементы симметрии, описываемые формулой симметрии  $4L_33L_46L_29PC$ , а также трансляции  $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ ,  $\frac{\bar{a}+\bar{b}+\bar{c}}{2}$  плоскости скользящего отражения и винтовые оси.

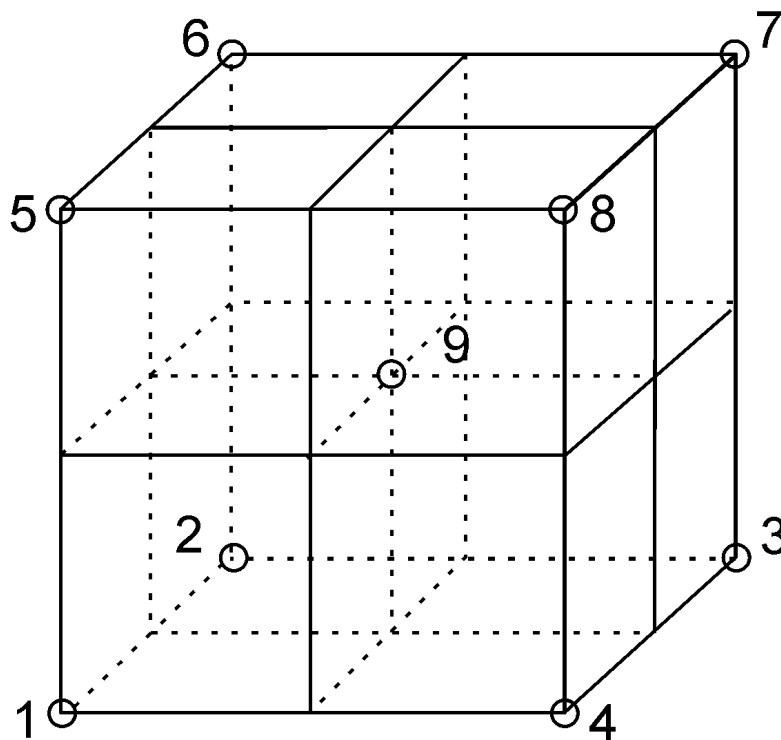


Рис. 6.4. Схема элементарной ячейки железа

На рис. 6.5 показана одна из плоскостей скользящего отражения типа *n*. Действительно, после отражения атома 4 относительно данной плоскости с последующей трансляцией вдоль направления диагонали грани на величину, равную ее половине, мы попадем в центр ячейки (атом 9). На рис. 6.6 изображена плоскость типа *C*. Отразив относительно нее атом 6 и перенеся его параллельно оси 2 на величину, равную половине периода идентичности *C*, мы совместим его с атомом 9. На рис. 6.7 представлена проекция структуры железа на грань (001), указано расстояние всех

атомов ячейки от плоскости проекций в осевых единицах и штрихами изображены плоскости скользящего отражения  $n$  и  $s$ , перпендикулярные этой грани.

В структуре железа имеются также плоскости скольжения типа  $a$  и  $b$ , в чем нетрудно убедиться, взяв проекцию ячейки на грани  $(100)$  и  $(010)$ .

В структуре железа легко найти винтовые оси  $4_2$  и  $2_1$ . На рис. 6.8. изображены оси  $4_2$  и  $2_1$ , параллельные координатной оси. На рис. 6.9 показана проекция структуры на плоскость грани  $(001)$ . Нетрудно убедиться, что указанные направления действительно являются винтовыми осями  $4_2$  и  $2_1$ . Повернув атом 4 (рис. 6.8) на  $180^\circ$  вокруг оси  $2_1$  и смещая его параллельно оси  $Z$  на величину  $\frac{c}{2}$ , попадем на место атома 9. Аналогичным образом, произведя поворот атома 1 вокруг оси  $4_2$  на угол  $90^\circ$  с последующей трансляцией на  $\frac{c}{2}$ , попадем на место атома 9. В структуре железа имеются также оси  $4_2$  и  $2_1$ , расположенные параллельно координатным осям  $X$  и  $Y$ .

2) Найдем элементы симметрии в главных направлениях  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  (рис. 6.10). Вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$  проходят поворотные оси четвертого порядка  $4$ , которым перпендикулярны плоскости симметрии. Последние вносятся в символ пространственной группы на втором месте. Вдоль направлений  $\langle 111 \rangle$  проходят поворотные оси третьего порядка  $3$ , которые запишутся на третьем месте в символе пространственной группы. Вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  проходят поворотные оси второго порядка, им перпендикулярны плоскости симметрии  $m$  и плоскости скольжения типа  $a$ ,  $b$ ,  $s$ . В символ пространственной группы на третьем месте запишутся только плоскости  $m$  поскольку из всех элементов симметрии отдается предпочтение плоскостям симметрии.

3) Символ пространственной группы железа  $Im\bar{3}m$ .

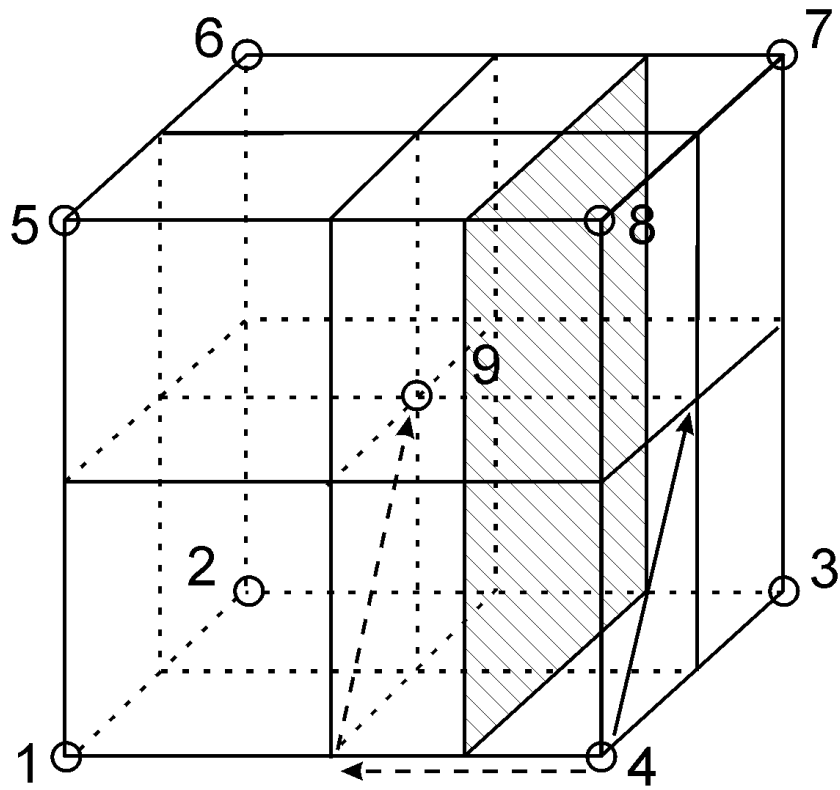


Рис. 6.5. Плоскость скользящего отражения типа  $n$  в решетке железа

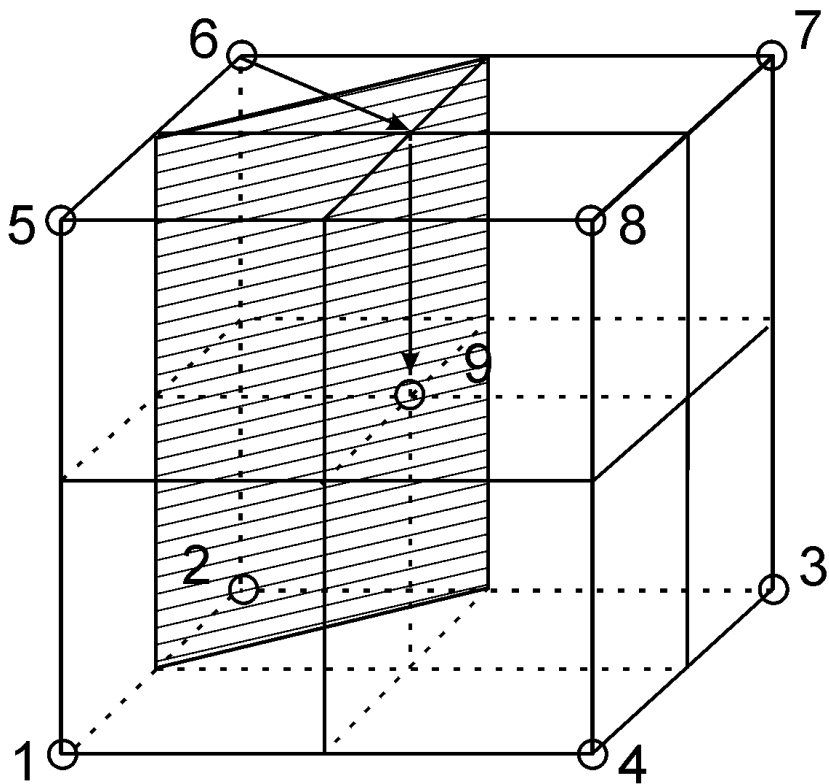


Рис. 6.6. Плоскость скользящего отражения типа  $C$  в решетке железа

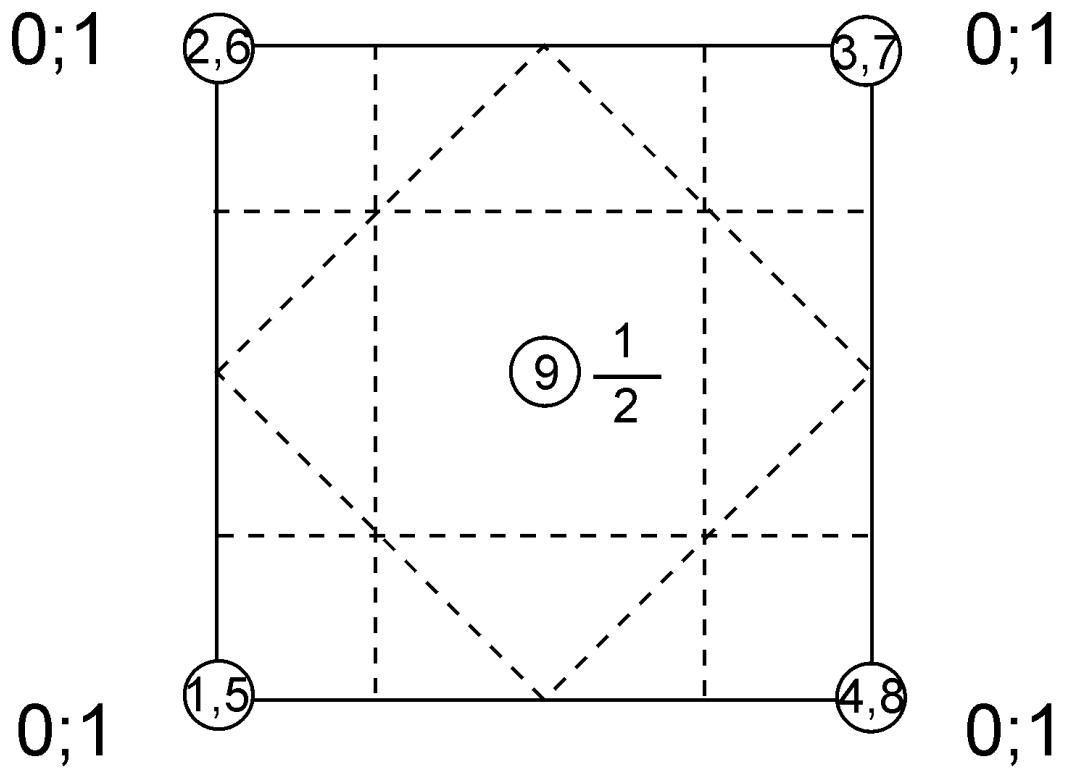


Рис. 6.7. Плоскость скользящего отражения типа  $C$  в решетке железа (проекция)

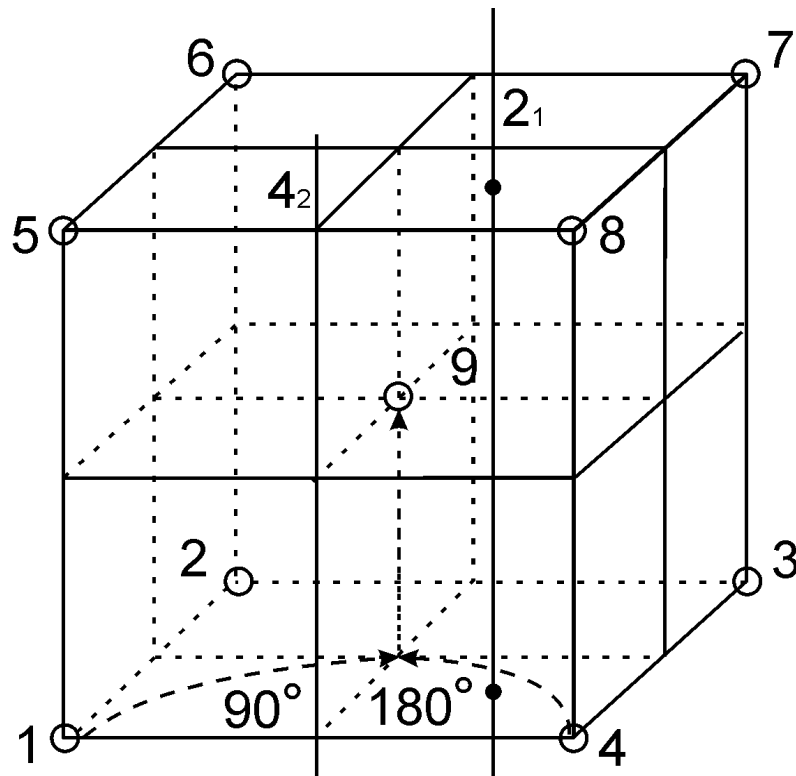


Рис. 6.8. Винтовые оси  $2_1$  и  $4_2$  в решетке железа



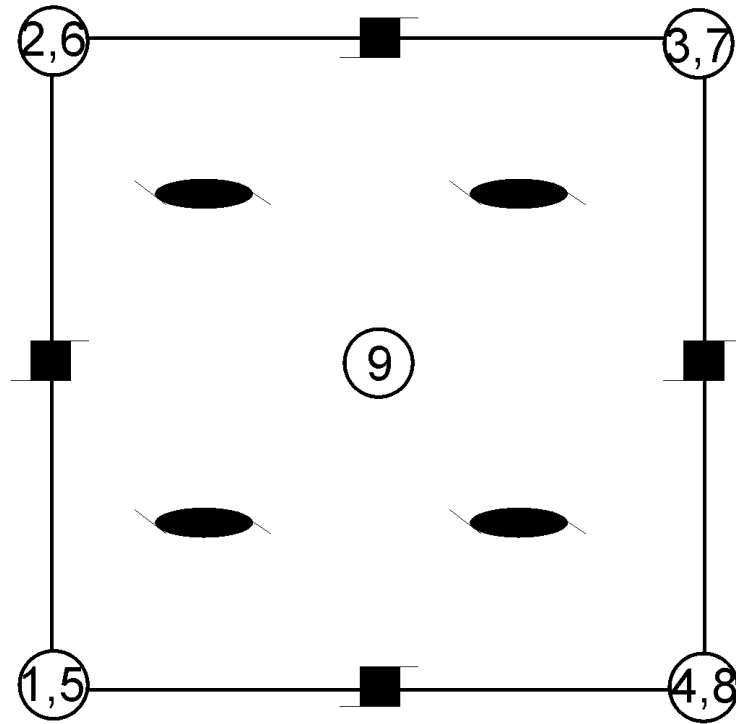


Рис. 6.9. Расположение винтовых осей в решетке железа (проекция)

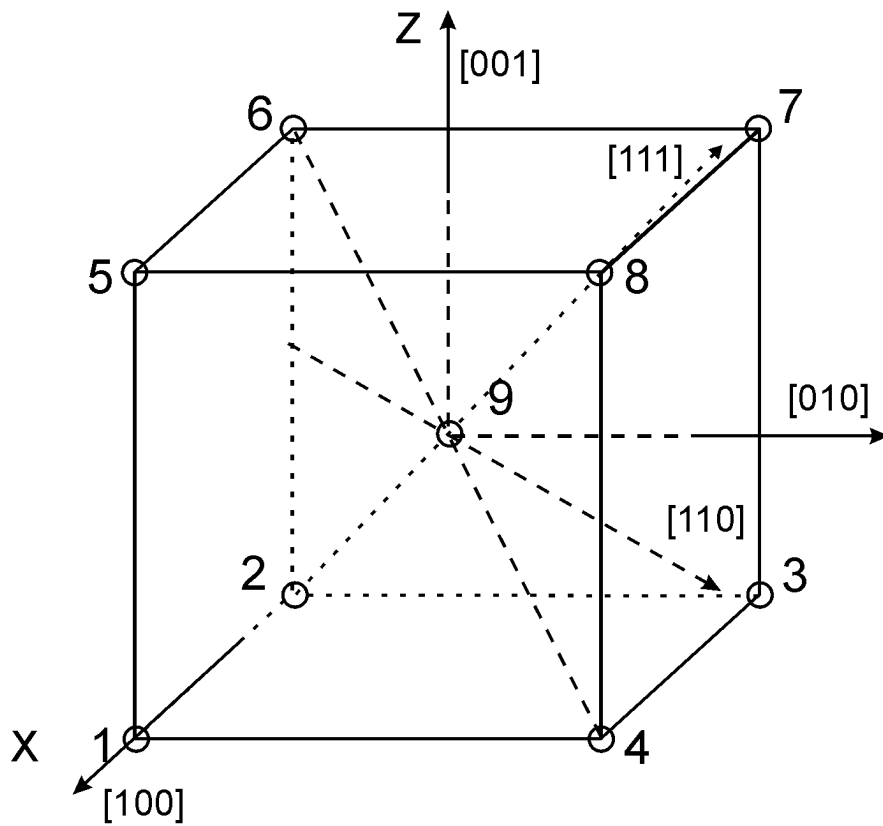


Рис. 6.10. Главные направления для кубической решетки железа

## 6.5. ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

1. Определить элементы симметрии дисконтинуума.
2. Проанализировать символ заданной пространственной группы.
3. Определить тип ячейки Браве.
4. Указать сингонию.
5. Определить элементы симметрии в главных направлениях.

Символы пространственных групп для самостоятельной работы приведены в табл. 6.2.

Таблица 6.2

### Варианты заданий для самостоятельной работы

1	2	3	4	5	6	7
$P2_1$	$Pm3m$	$C2/m$	$Pna2_1$	$P6_3/m$	$Ia3d$	$P2_1/m$
8	9	10	11	12	13	14
$Pnma$	$P6_3mc$	$P4_2/mmc$	$P2_12_12_1$	$F\bar{4}3m$	$Fd3m$	$Ia3$
15	16	17	18	19	20	21
$P\bar{6}m2$	$I4/mcm$	$I4_1/a$	$I\bar{4}2d$	$P2_1/c$	$Pa3$	$Pca2_1$
22	23	24	25			
$P6_3/mmc$	$I4_1/amd$	$F222$	$Ibca$			

## 6.6. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие элементы симметрии характерны в дискретной кристаллической среде ?
2. Что такое плоскость скользящего отражения ?
3. Какого типа бывают плоскости скользящего отражения ? Чем они отличаются друг от друга?
4. Что такое винтовая ось ? Как обозначаются винтовые оси?
5. Что характеризует пространственная группа ?