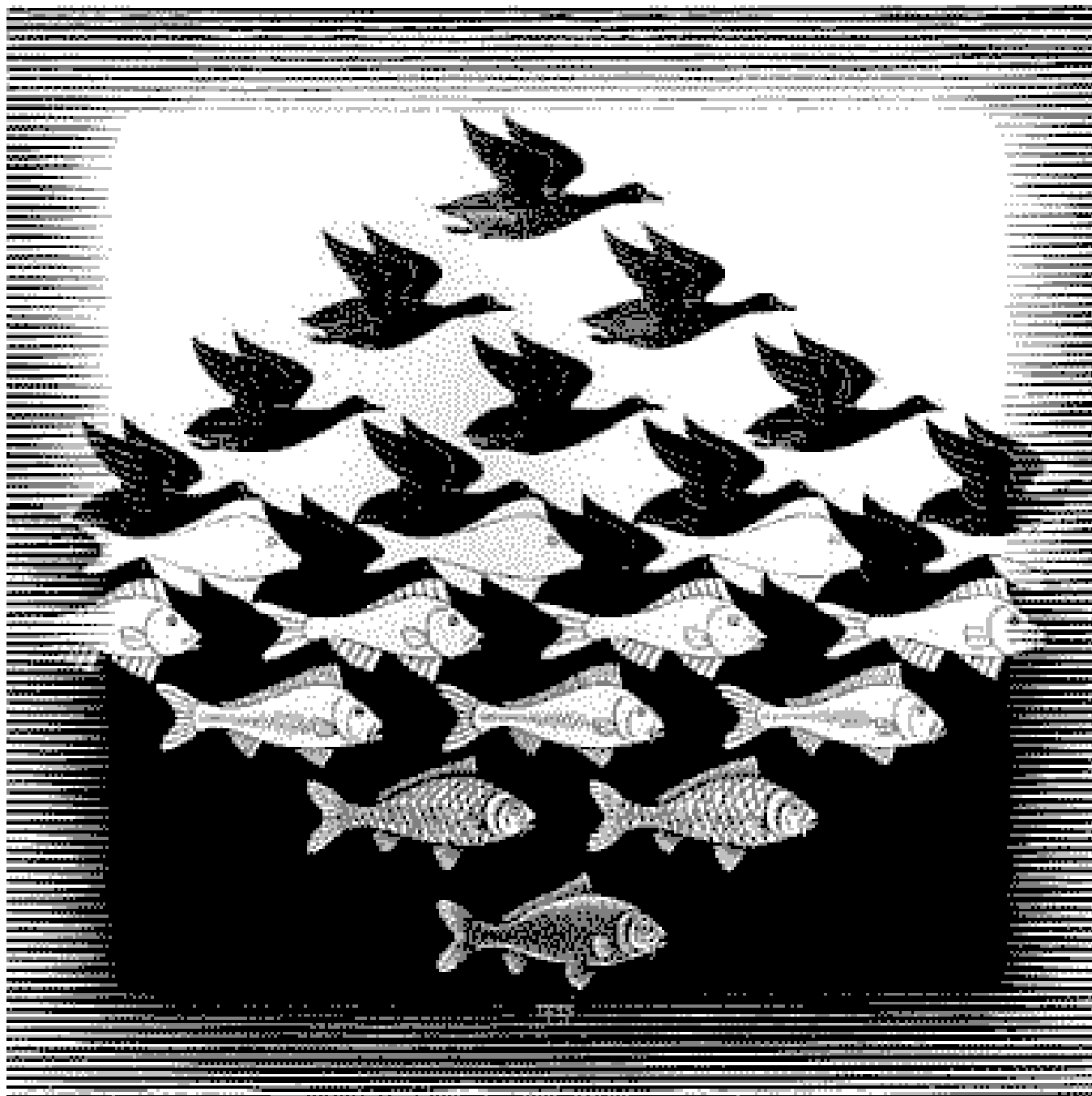


# **Строение кристаллических веществ и материалов**

## **лекция №6**

**Сингонии, решетки Браве,  
кристаллографические классы**

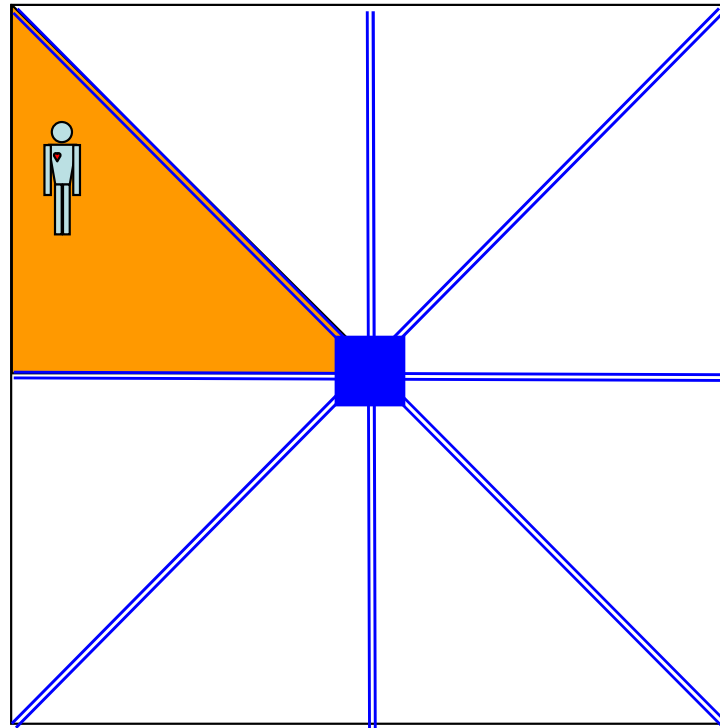


М.Эшер, «Воды и небеса», 1938 г.

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

**Как любая геометрическая фигура,  
кристалл обладает симметрией**

# Распространенное определение симметрии:

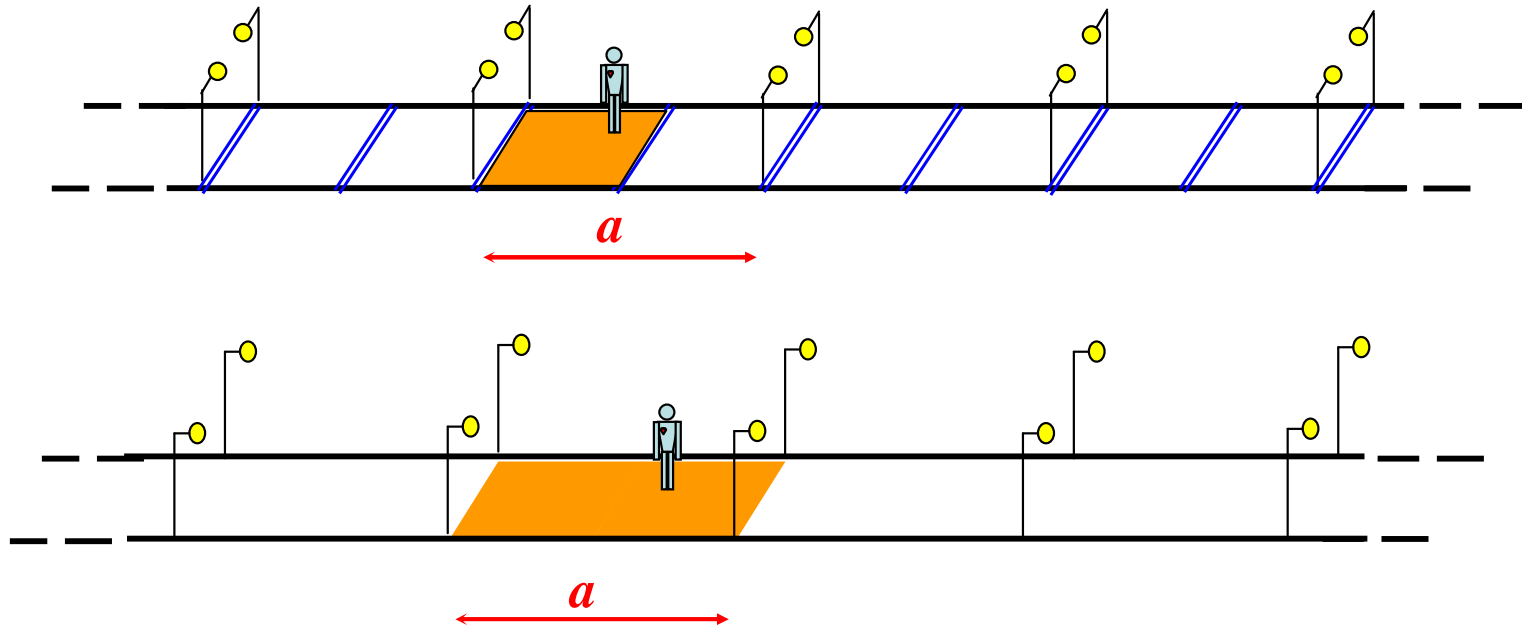


**Набор объектов (фигура, молекула и т.д.) обладает симметрией, если хотя бы некоторые его составные части *неразличимы***

симметрически эквивалентные части фигуры без внешних «привязок»  
(например, без наблюдателя симметрии 1)

**НЕРАЗЛИЧИМЫ**

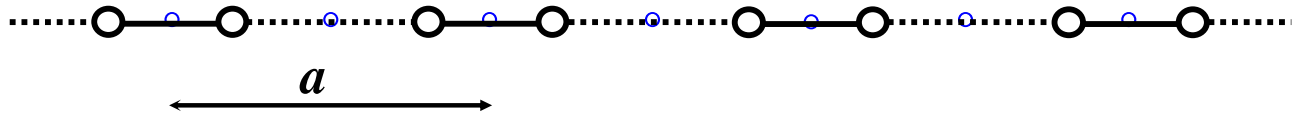
# Трансляционная симметрия



«наблюдатель на бесконечном шоссе»:  
цветом выделены симметрически независимые области



цепь  $(N_2)_\infty$

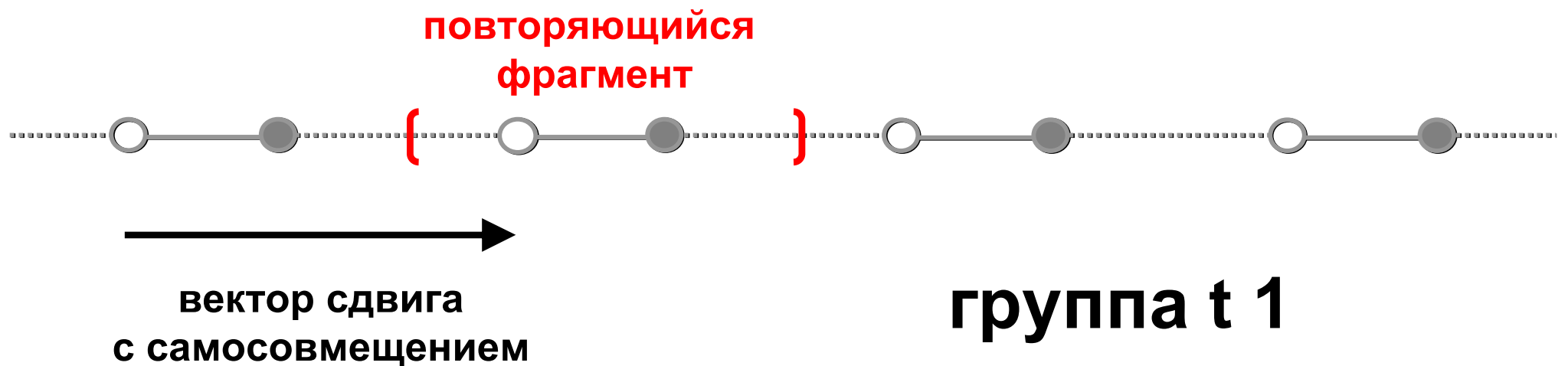


цепь  $(NO)_\infty$



# Трансляционная симметрия кристалла

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



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

**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  $G_{точ}$***

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

Симметрию бесконечных периодических структур

задают ***пространственные группы  $G_{пр}$***

В них входят как закрытые, так и ***открытые***  
(трансляционные) операции симметрии

$$G_{пр} \supset G_{точ}, T(n),$$

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

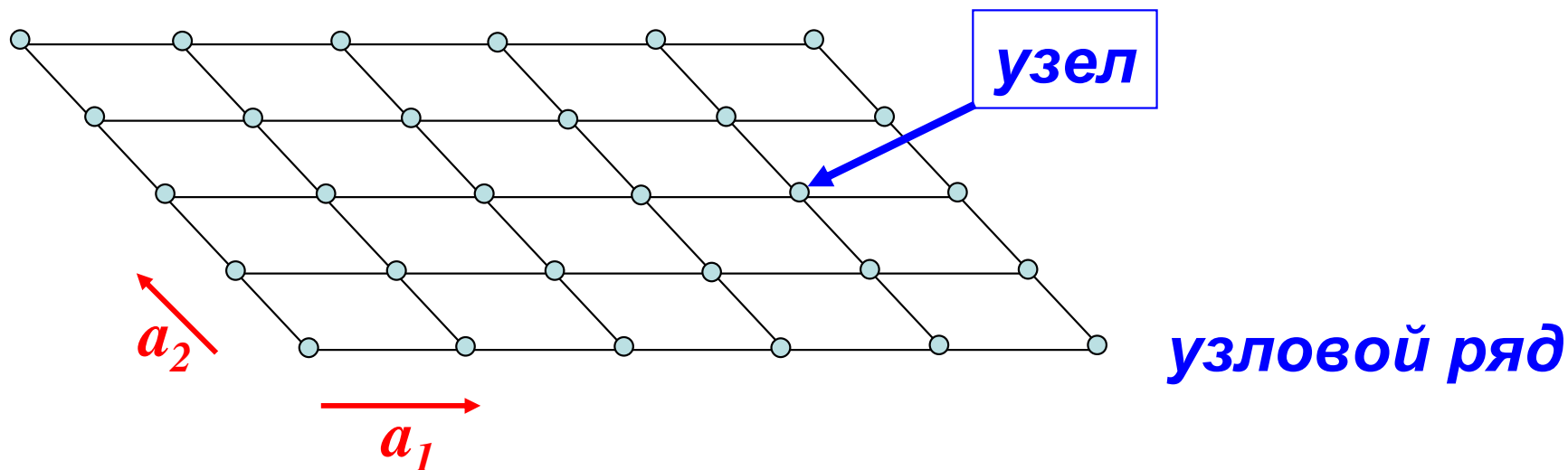


Совокупность всех операций симметрии  
трехмерного кристалла называется его  
*пространственной группой  $G_{пр}$*

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  $G_{крст}$*

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



**подгруппа трансляций**

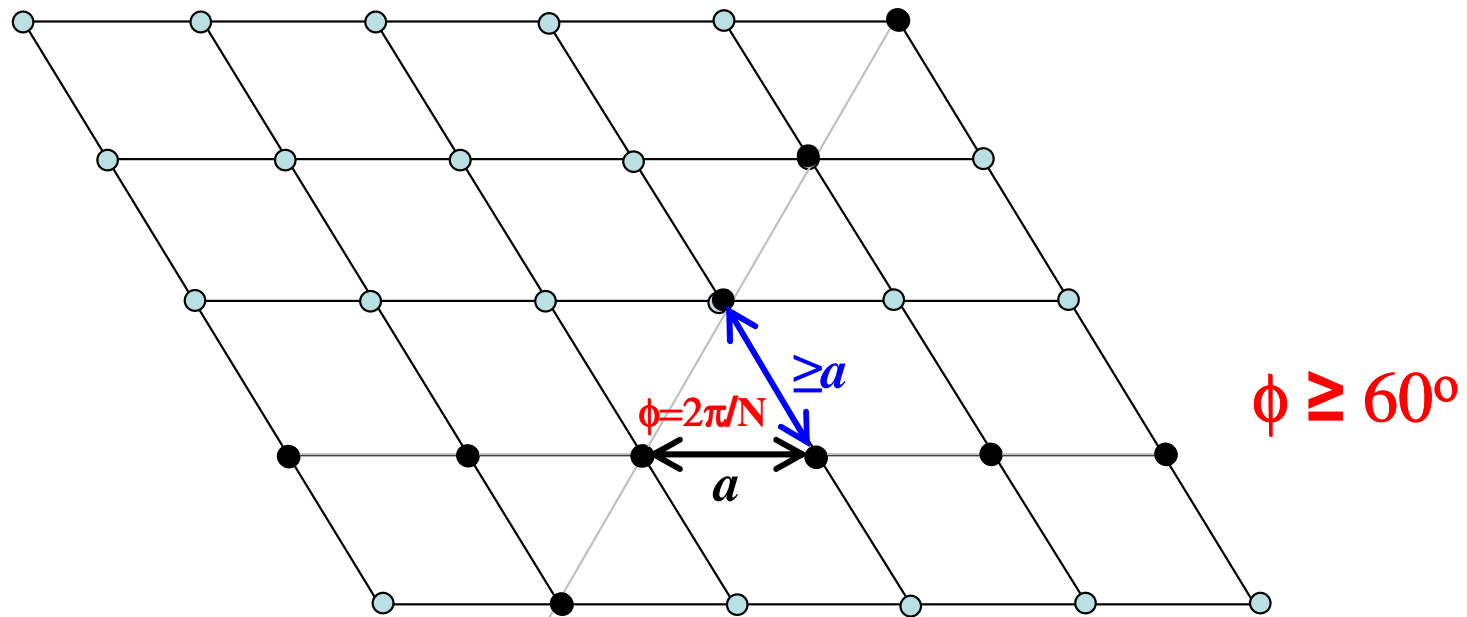
$T = \{m_i \mathbf{a}_i\}$ , где  $m_i$  – целые числа,  $\mathbf{a}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) – независимые векторы трансляций;  $n$  = размерность решетки

Точечная группа узла в решетке называется

***голоэдрической группой.***

Все кристаллографические точечные группы – это голоэдрические группы и их подгруппы

# Закрытые операции симметрии в кристалле



поворотные оси: 2, 3, 4, ~~5~~, 6

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

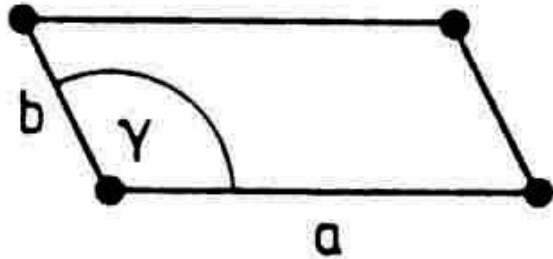
32 кристаллографические точечные группы  
(кристаллографические классы)

Все решетки одной голоэдрической группы –  
**СИНГОНИЯ**

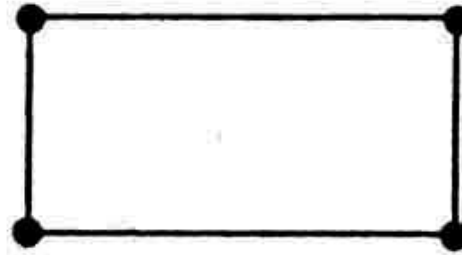
Все решетки одной сингонии,  
связанные непрерывными деформациями –  
**тип Браве**

«Безразмерная» решетка данного типа Браве –  
**решетка Браве**

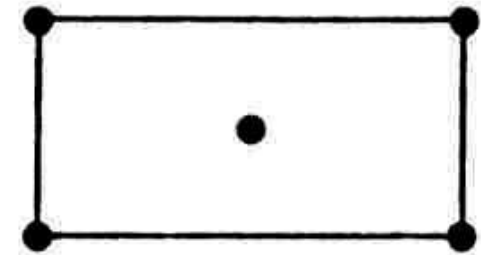
# Плоские решетки Браве



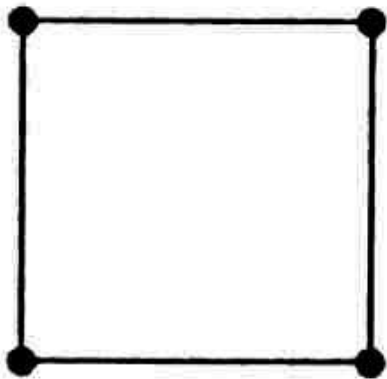
oblique **косоугольная**  
 $a \neq b, \gamma \neq 90^\circ$



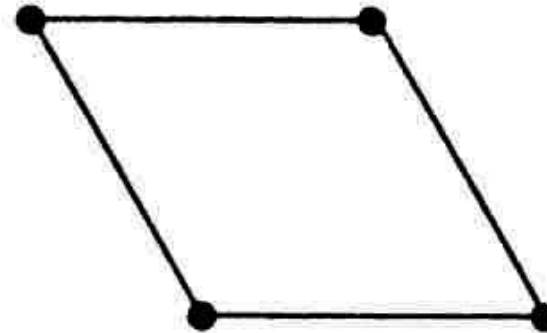
p rectangular **прямоугольная**  
 $a \neq b, \gamma = 90^\circ$



c rectangular  
 $a \neq b, \gamma = 90^\circ$

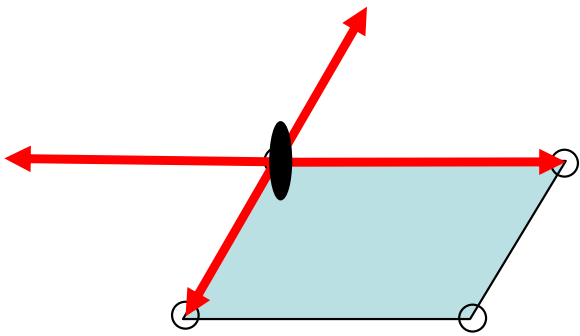


square **квадратная**  
 $a = b, \gamma = 90^\circ$

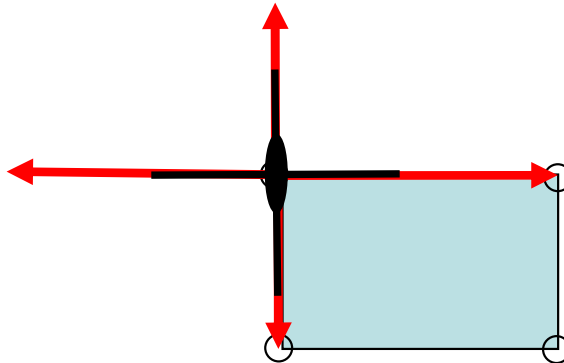


hexagonal **гексагональная**  
 $a = b, \gamma = 120^\circ$

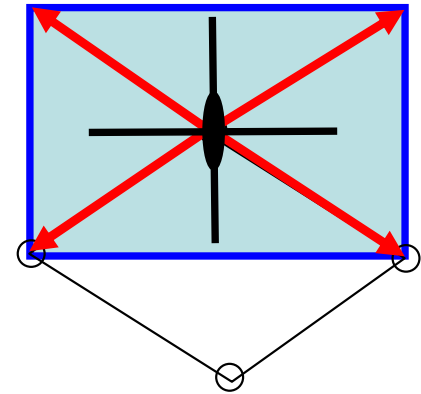
# 2D-решетки и сингонии



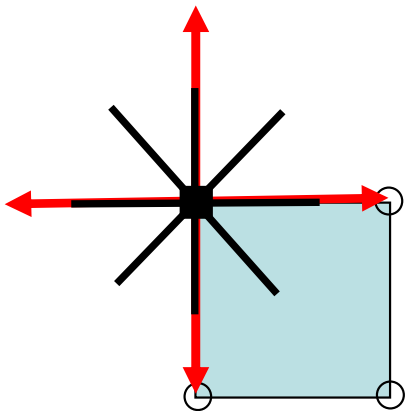
косоугольная  $p2$   
 $a, b, \gamma$  – любые



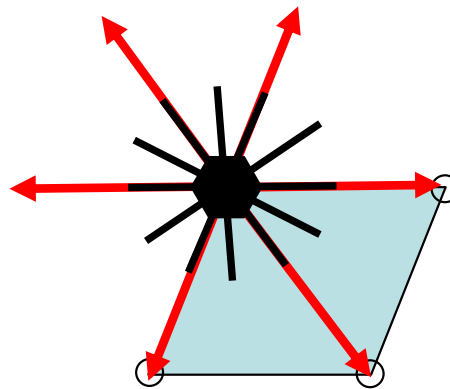
прямоугольная  $pmm2$   
 $a \neq b$  – любые,  $\gamma = 90^\circ$



$a' = a - b, b' = a + b, \gamma = 90^\circ$   
прямоугольная  $cmm2$   
 $a = b, \gamma$  – любой



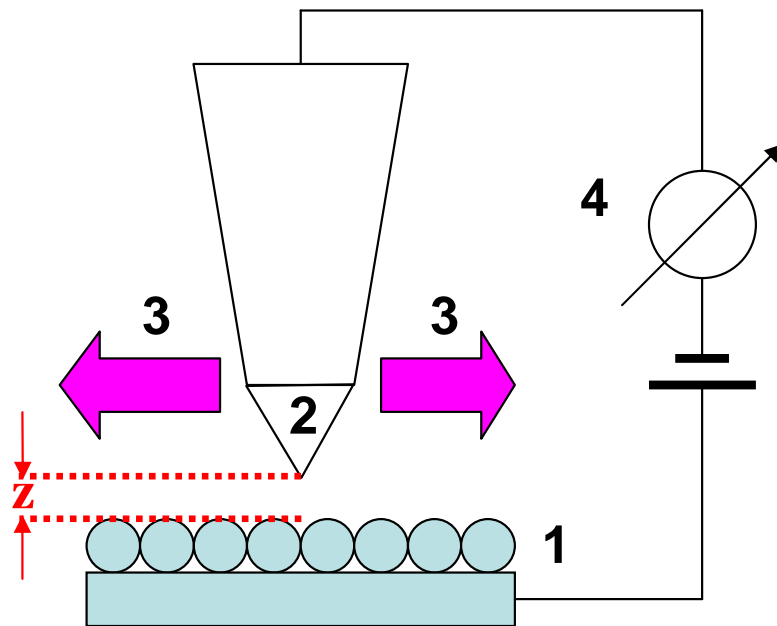
тетрагональная  
 $p4mm$   
 $a = b, \gamma = 90^\circ$



гексагональная  
 $p6mm$   
 $a = b, \gamma = 120^\circ$

4 сингонии  
5 решеток Браве

# Исследования атомной структуры поверхности: сканирующая туннельная микроскопия (СТМ)

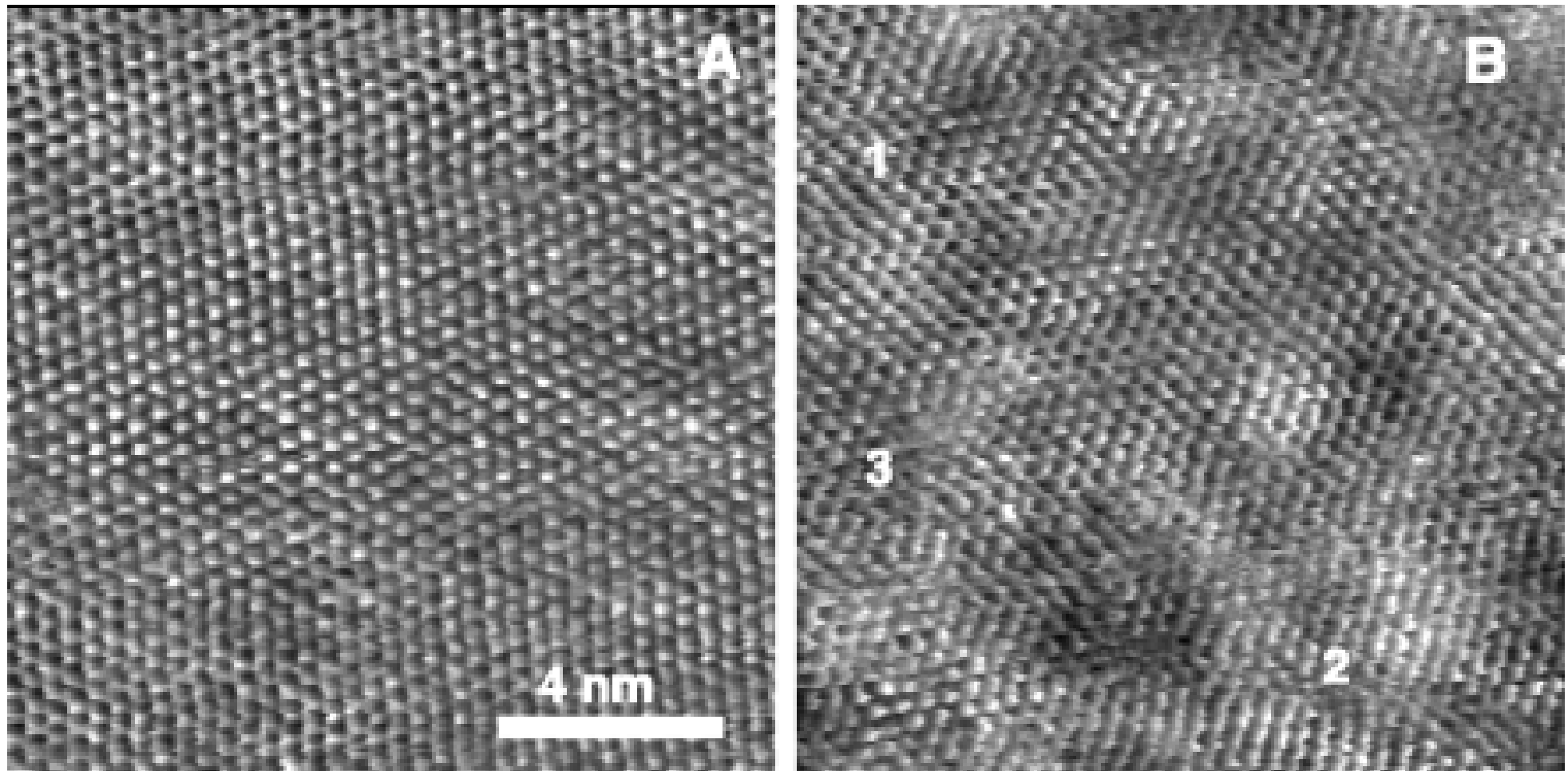


- 1: поверхность образца**
- 2: зонд**
- 3: пьезоэлементы**
- 4: наноамперметр**

туннельный ток:  $I \sim e^{-kz}$

G.Binnig, H.Rohrer et al., *Phys. Rev. Lett.* 1983, 50, 120-123

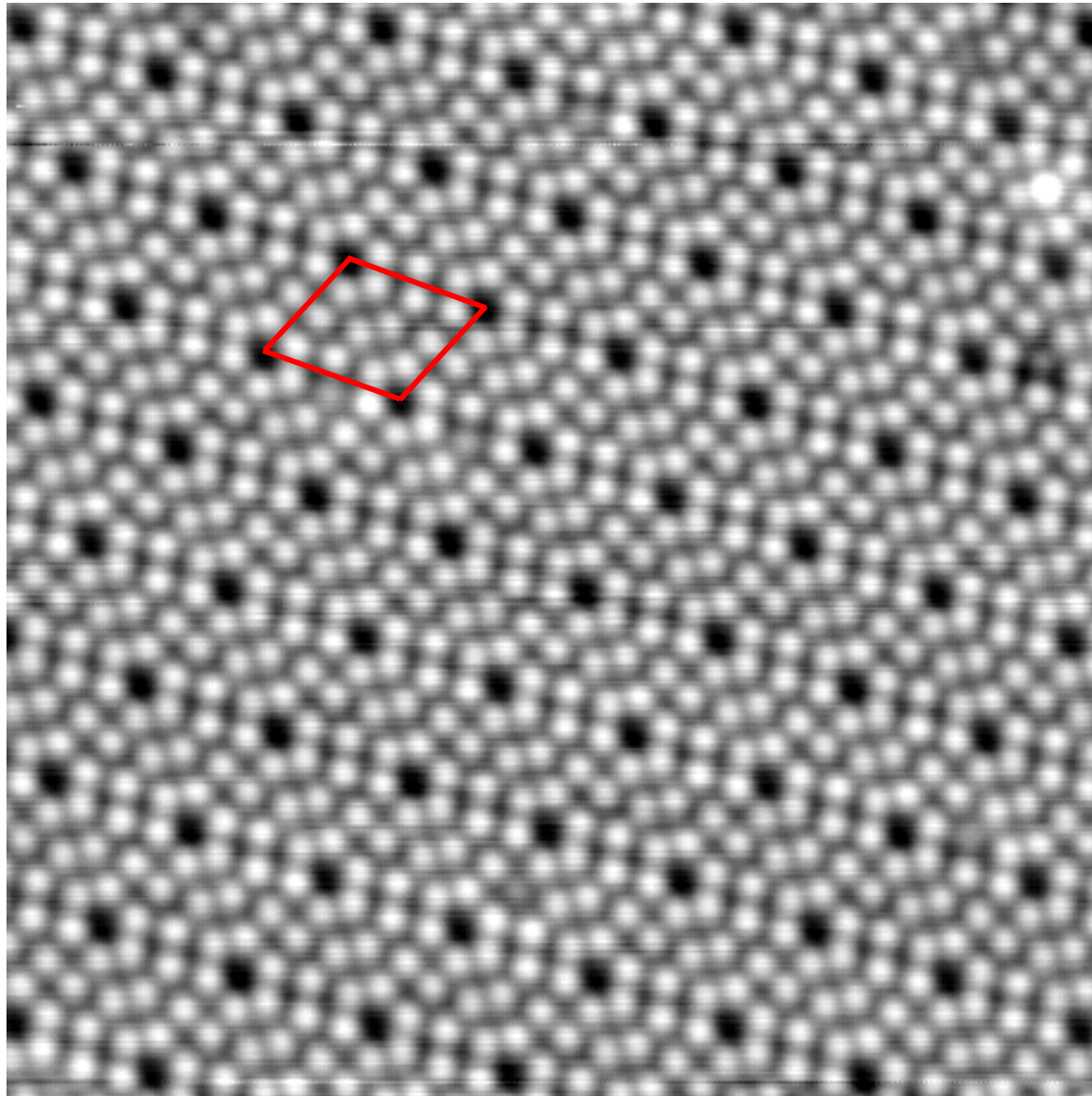
# Пленка $\text{CdL}_2$ на поверхности кремния



D.Y.Takamoto et al., *Science*, 2001, **293**, 1292-1295



# Данные СТМ: реконструкция поверхности монокристалла кремния



# Зондовая наномодификации поверхности



## 2D : 4 сингонии, 5 решеток Браве

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

СИНГОНИЯ	голоэдрич. подгруппы группа	типы решетки	
косоугольная	2	1	p
прямоугольная	$mm2$	$m$	p, c
тетрагональная	$4mm$	4	p
гексагональная	$6mm$	6, $3m$ , 3	p

# Сингонии и решетки Браве в трехмерном случае

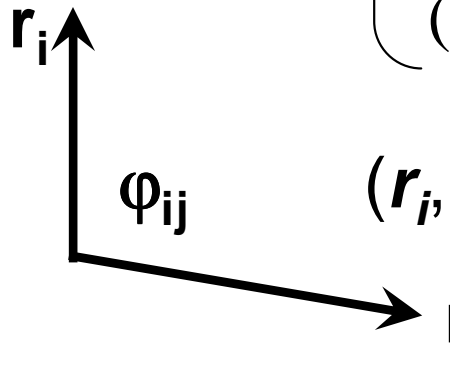
Сингония	голоэдр. группа	подгруппы	параметры ячейки	решетки Браве
		кристаллографические классы		
триклинная	$\bar{1}$	1	a, b, c, $\alpha, \beta, \gamma$ – произвольные	P
моноклинная	$2/m$	2, m	a, b, c – любые, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	P, C (A)
орторомбическая	$mmm$	mm2, 222	a, b, c – любые $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, A (B, C), I, F
тетрагональная	$4/mmm$	4, $\bar{4}$ , $4/m$ , $4mm$ , 422, $\bar{4}2m$	a = b $\neq$ c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I
тригональная	$\bar{3}m$	3, $\bar{3}$ , 3m, 32	a = b = c, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	P («гексагон. R»)
гексагональная	$6/mmm$	6, $\bar{6}$ , $6/m$ , $6mm$ , 622, $\bar{6}m2$	a = b $\neq$ c $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	P
кубическая	$m\bar{3}m$	23, m $\bar{3}$ , $\bar{4}3m$ , 432	a = b = c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I, F

# Объем элементарной ячейки

$$V = (\det \mathbf{G})^{1/2}, \quad \text{где}$$

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

матрица Грама  
(«метрический тензор»),



$(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = (\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) = r_i r_j \cos \varphi_{ij}$  скалярные произведения

если  $\mathbf{r}_1 = x_1 \mathbf{a} + y_1 \mathbf{b} + z_1 \mathbf{c}$   
 $\mathbf{r}_2 = x_2 \mathbf{a} + y_2 \mathbf{b} + z_2 \mathbf{c}$ ,

ТО

$$(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 = (x_1 \ y_1 \ z_1) \begin{pmatrix} aa & ab & ac \\ ba & bb & bc \\ ca & cb & cc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \mathbf{X}_1^\dagger \mathbf{G} \mathbf{X}_2$$

# 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)

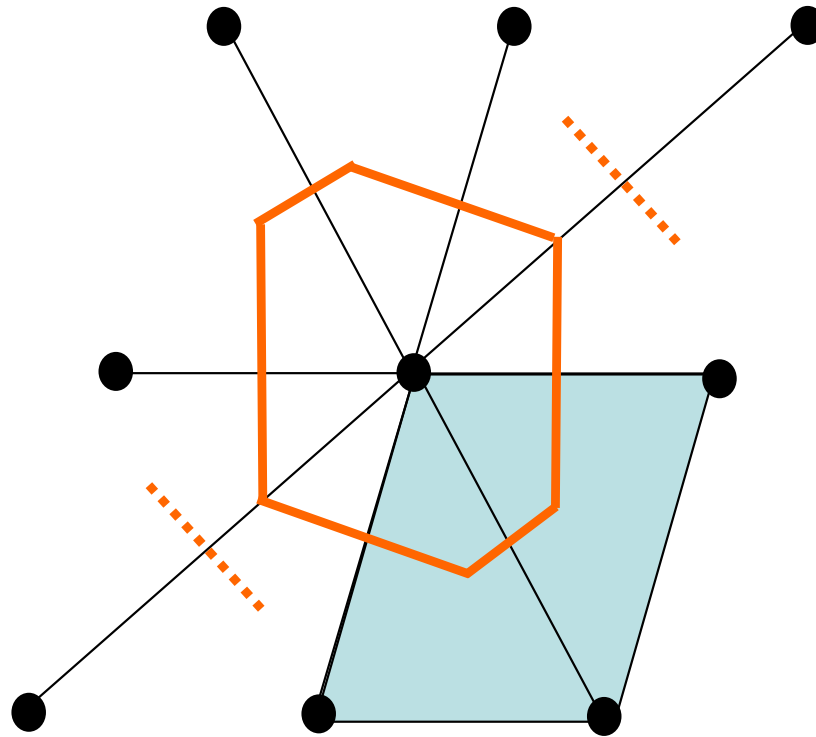
# Дополнительные сведения сверх программы (их нет в билетах)

1. Полиэдры Вороного-Дирихле в кристаллах
2. Еще один тип симметрии:  
масштабная инвариантность

Другой выбор элементарной ячейки

ближайшая окрестность узла решетки:

**область Дирихле**





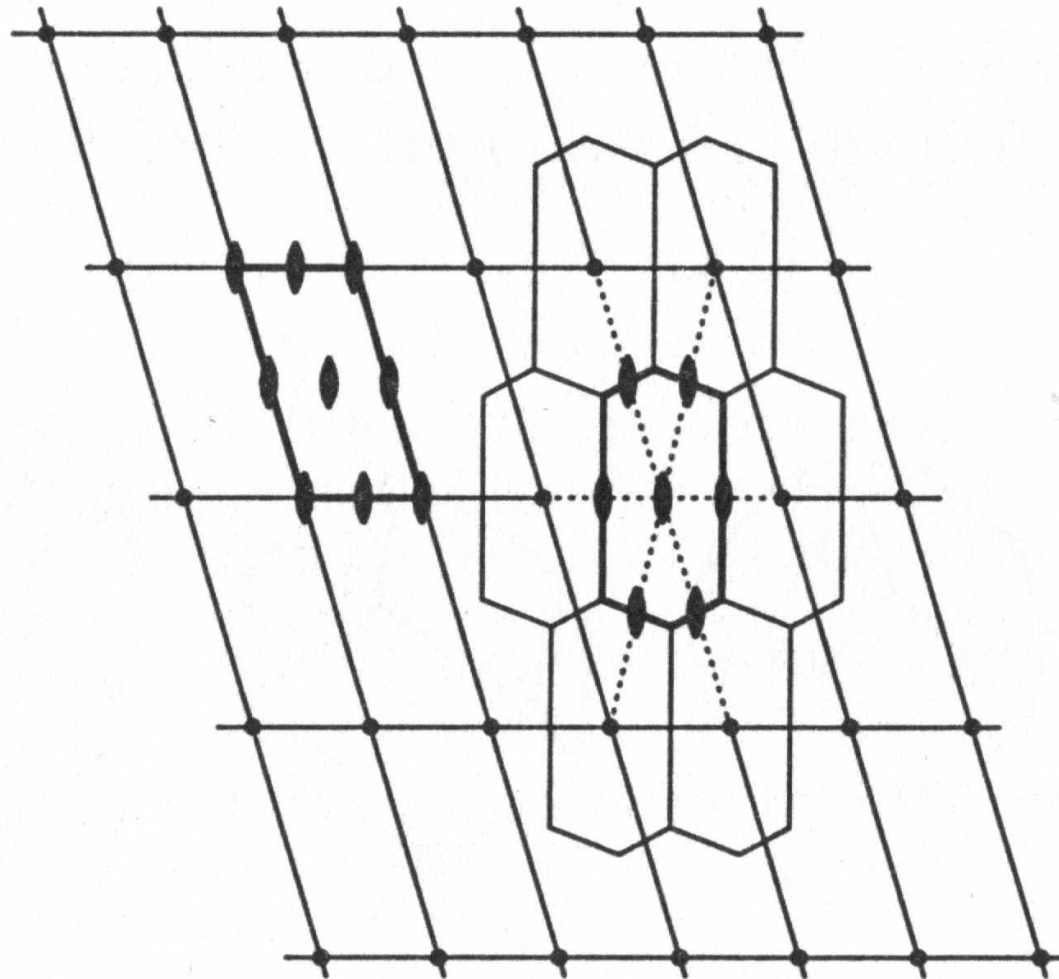


Рис. 2.9. Параллелограмм повторяемости и область Дирихле косоугольной решетки

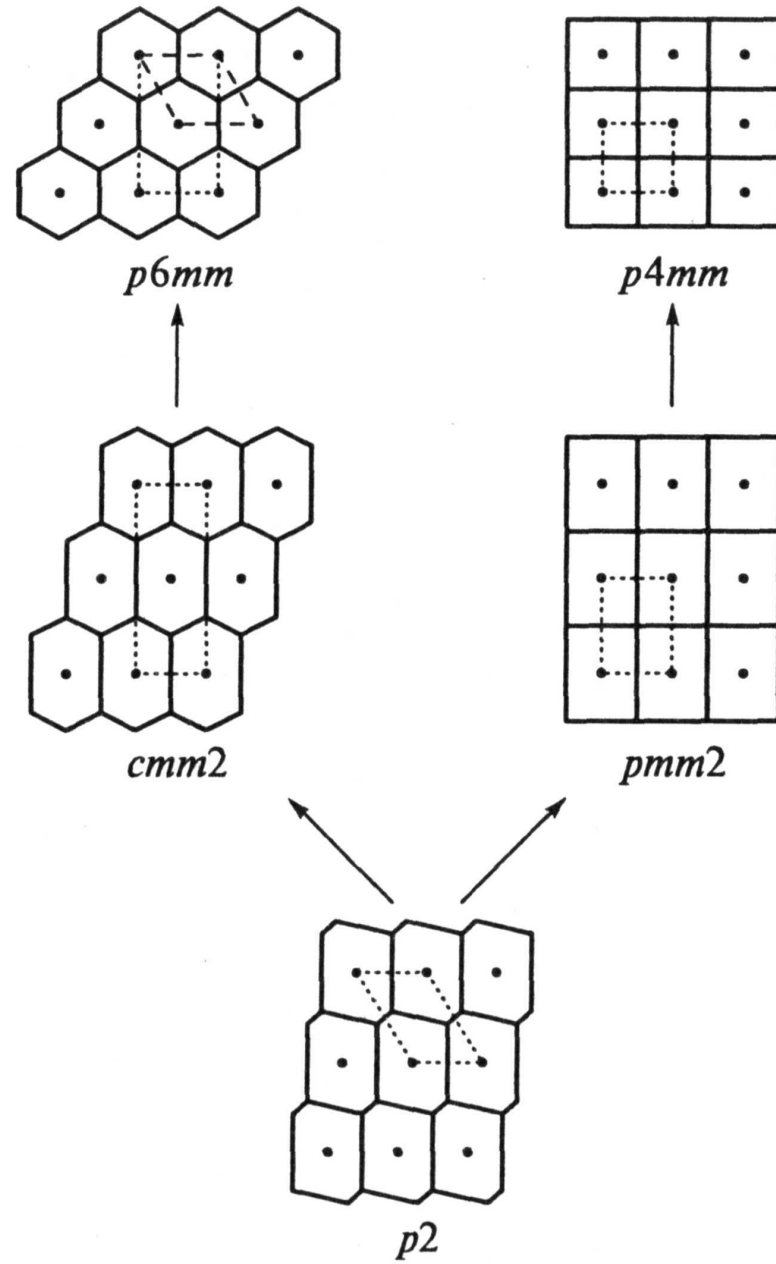


Рис. 2.10. Схема вывода пяти плоских решеток Браве деформациями примитивной косоугольной решетки

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

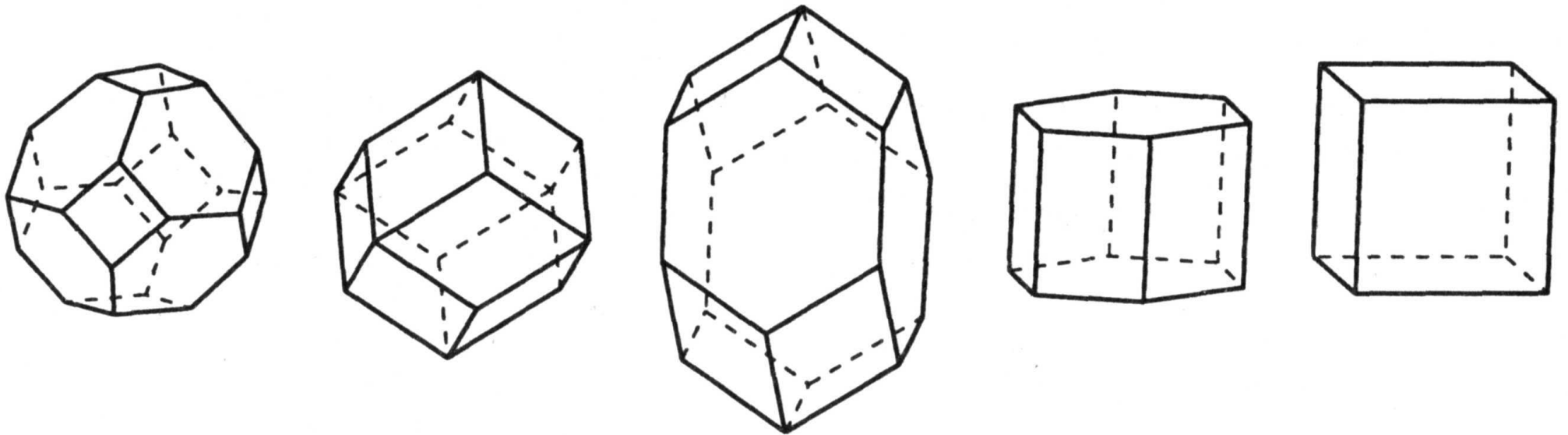


Рис. 2.11. Пять метрически неэквивалентных параллелоэдров Федорова

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

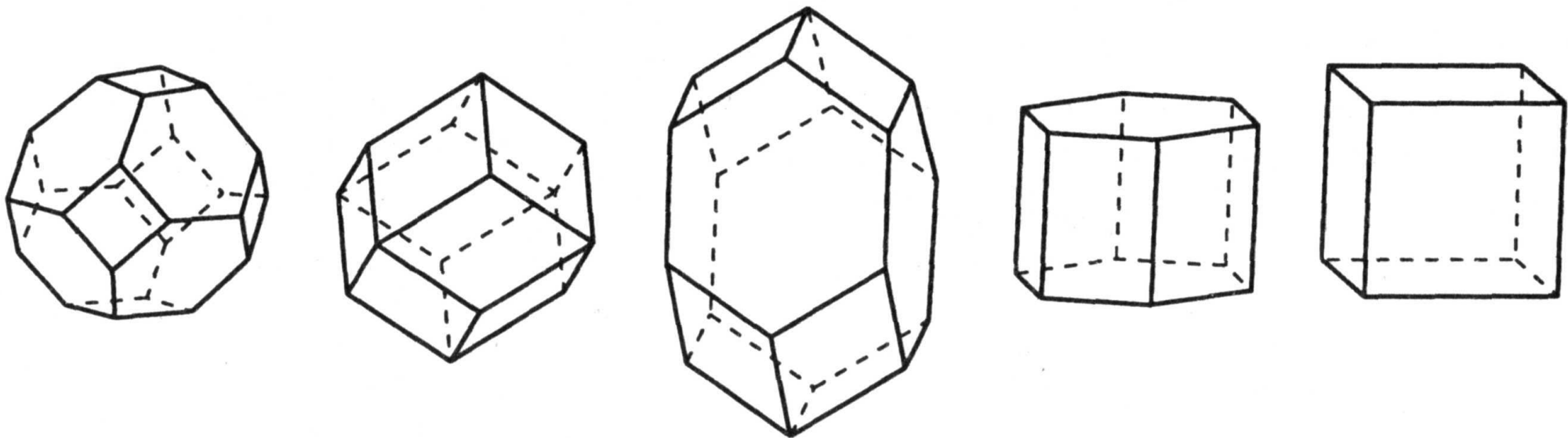


Рис. 2.11. Пять метрически неэквивалентных параллелоэдров Федорова

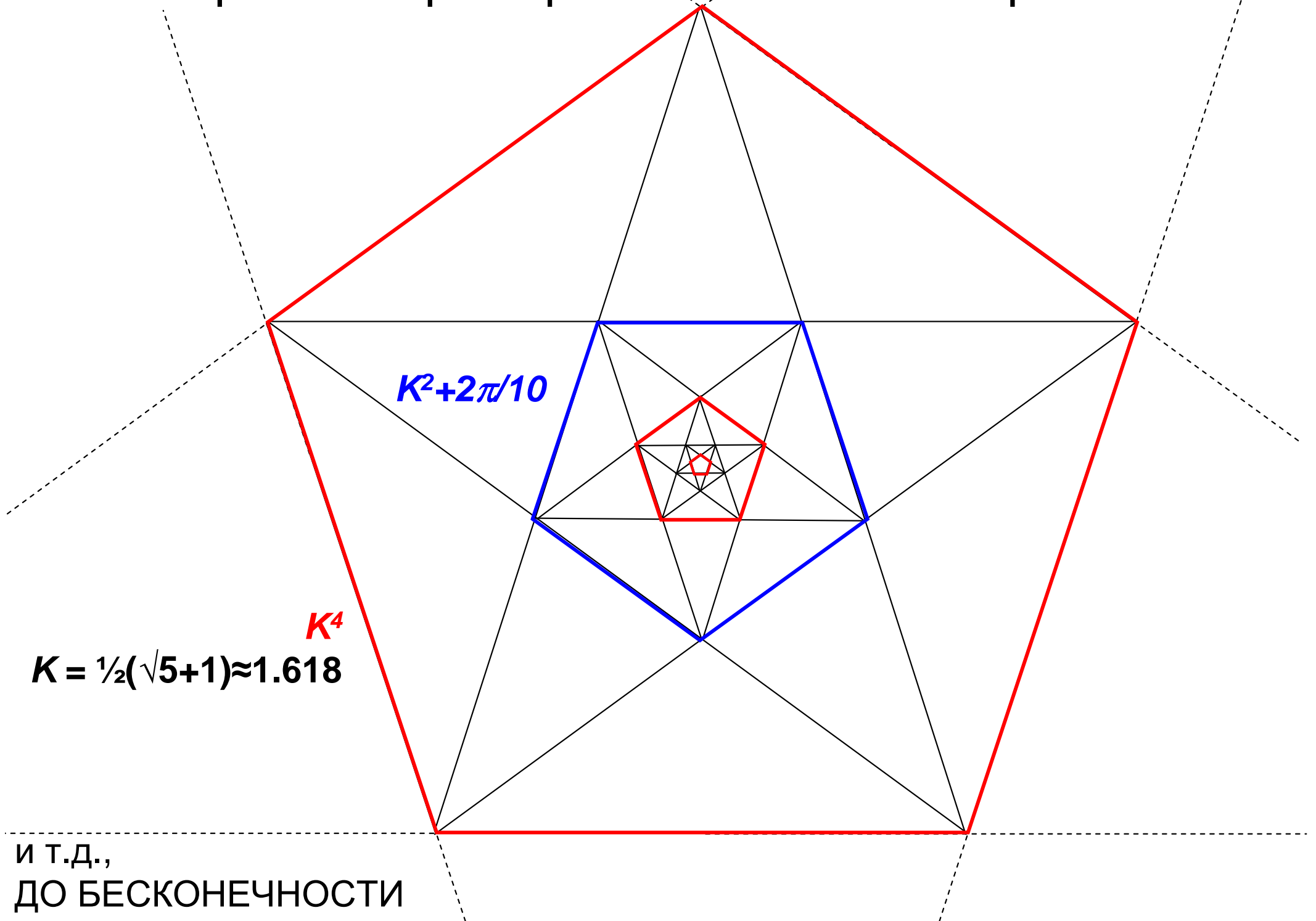
**Математика    Область Дирихле**

**3D-кристаллография    Полиэдр Вороного**

**ФТТ (пространство координат)    Ячейка Вигнера-Зейца**

**ФТТ (пространство импульсов)    Зона Бриллюэна**

# Пентаграмма: пример масштабной инвариантности



$K^2+2\pi/10$

$K^4$

$K = \frac{1}{2}(\sqrt{5}+1) \approx 1.618$

и т.д.,  
ДО БЕСКОНЕЧНОСТИ

В физических системах с масштабной инвариантностью (например, в окрестностях точки фазового перехода) можно ввести специальную **группу перенормировок**, или **ренормгруппу**. Такие группы используют в расчетах критических параметров перехода

Пример: изменение теплоемкости при плавлении метанола ( $-98^{\circ}\text{C}$ )

