

Strukturalne elementy symetrii.
Krystalograficzne grupy przestrzenne.

2 godz.

Cel ćwiczenia: zapoznanie się z działaniem elementów symetrii makroskopowej z wykorzystaniem programu komputerowego KRYS1, przedstawienie projekcji cyklograficznych i stereograficznych wyżej wymienionych elementów.

Pomoce naukowe: program komputerowym KRYS1.

Wstęp teoretyczny.

Elementami symetrii translacyjnej (mikroskopowymi) są osie śrubowe oraz płaszczyzny poślizgu. Przekształcenie symetryczne wykonane za pomocą translacyjnych elementów symetrii nie doprowadza przekształcanej figury do położenia wyjściowego. Translacyjne elementy symetrii są elementami symetrii tzw. figur nieskończonych. Figurami takimi są sieci przestrzenne czy sieci krystaliczne. Translacja jest przekształceniem symetrycznym polegającym na przesuwanie punktu lub zbioru punktów (np. dowolnej figury) o stale ten sam, ściśle określony odcinek t (nazywany odcinkiem translacji), po drogach równoległych do siebie.

Osie śrubowe (symbol n_p)

Osć śrubowa – jest złożonym elementem symetrii utworzonym przez sprzężone działanie n -krotnej osi symetrii i równoległej do niej translacji. Osie śrubowe o tej samej krotności różnią się wielkością translacji motywu, która wynosi:

$p/n t$, gdzie:

p – liczba naturalna mniejsza od n ($p < n$)

n – krotność osi

t – wielkość wektora translacji sieci równoległego do osi symetrii

W strukturach kryształów występuje 11 osi śrubowych: 2_1 (wielkość wektora translacji $1/2t$), 3_1 i 3_2 (wielkość wektora translacji wynosi odpowiednio: $1/3t$ i $2/3t$), 4_1 , 4_2 , 4_3 (wielkość wektora translacji wynosi odpowiednio $1/4t$, $1/2t$, $3/4t$), 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4 , 6_5 (wielkość wektora translacji wynosi odpowiednio $1/6t$, $1/3t$, $1/2t$, $2/3t$, $5/6t$).

Nazwa „osie śrubowe” pochodzi stąd, że pod ich działaniem wszystkie punkty przekształcanej figury przesuwiają się po liniach śrubowych, lewo- lub prawoskrętnych. Osć śrubowa jest prawoskrętna, gdy kierunek prowadzenia linii śrubowej „od dołu do góry” jest przeciwny do kierunku ruchu wskazówek zegara. Osie neutralne nie mają wyróżnionego kierunku skrętu. Osie śrubowe prawoskrętne od lewoskrętnych można rozróżnić na podstawie ich symbolu, gdy:

$p/n = 1/2$ - osć obojętna (nie mają wyróżnionego kierunku skrętu),

$p/n < 1/2$ - osć prawoskrętna (przeciwnie do ruchu wskazówek zegara),

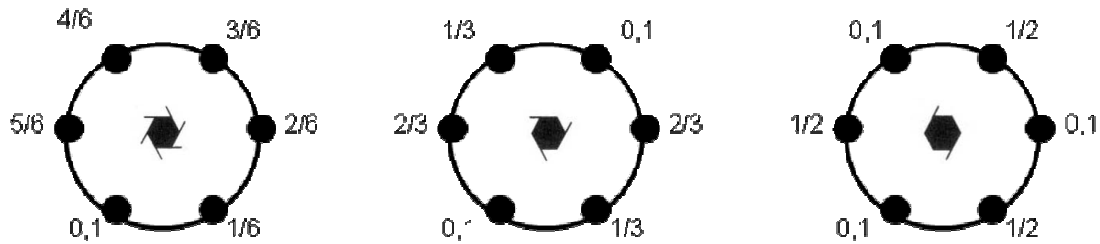
$p/n > 1/2$ - osć lewoskrętna (zgodnie z ruchem wskazówek zegara).

Tablica 1. Symbole międzynarodowe osi występujących w strukturze kryształu

Symbole międzynarodowe	Cyfrowy	2	2 ₁	3	3 ₁	3 ₂
	Graficzny(1)					
	Graficzny(2)					
Symbole międzynarodowe	Cyfrowy	4	4 ₁	4 ₂	4 ₃	
	Graficzny(1)					
Symbole międzynarodowe	Cyfrowy	6	6 ₁	6 ₂	6 ₃	6 ₄
	Graficzny(1)					

(1) – Oś prostopadła do płaszczyzny projekcji

(2) - Oś równoległa do płaszczyzny projekcji



Rys. 1. Rzut ortogonalny osi śrubowych 6_1 , 6_2 i 6_3 na płaszczyznę prostopadłą do osi, współrzędne punktów obrazują odległość punktu od płaszczyzny rysunku, mierzoną w ułamkach stałej sieciowej.

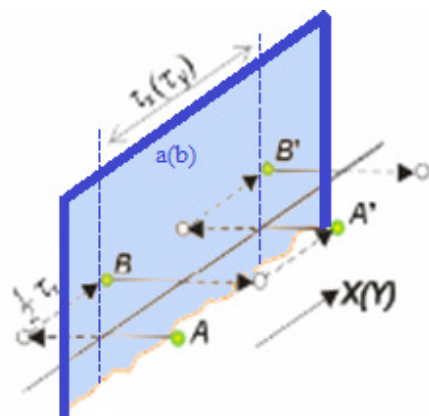
Płaszczyzny poślizgu

Płaszczyzna poślizgu jest złożonym elementem symetrii, utworzonym przez sprzężone działanie płaszczyzny symetrii i równoległej do niej translacji. Rozróżniamy płaszczyzny poślizgu osiowe, diagonalne i diamentowe.

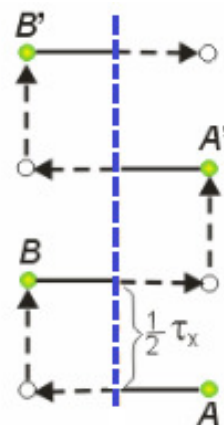
• **Płaszczyzny poślizgu osiowe (symbol a, b, c)**

Działanie płaszczyzny poślizgu osiowej polega na tym, że po wykonaniu odbicia zwierciadlanego figury w płaszczyźnie symetrii figura zostaje przesunięta równoległe do płaszczyzny symetrii o połowę odcinka translacji w kierunku jednej z osi krystalograficznych. Jeżeli przesunięcie wykonywane jest w kierunku osi X, Y lub Z, to płaszczyzna ślizgowa ma odpowiednio symbol a, b lub c.

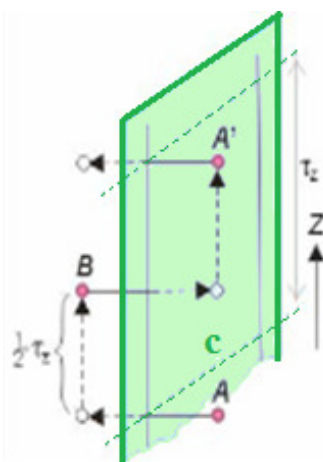
- a – translacja o $\frac{1}{2} a_0$ w kierunku osi X [100]
- b - translacja o $\frac{1}{2} b_0$ w kierunku osi Y [010]
- c - translacja o $\frac{1}{2} c_0$ w kierunku osi Z [001]



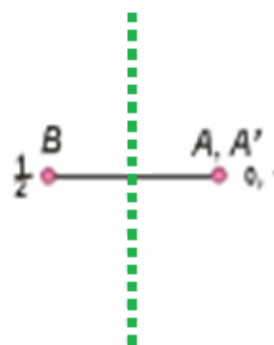
Rys. 2. Schemat działania płaszczyzny poślizgu a (b) przedstawiony w przestrzeni trójwymiarowej.



Rys.3. Schemat działania płaszczyzny poślizgu a w rzucie ortogonalnym na płaszczyznę rysunku.



Rys. 4. Schemat działania płaszczyzny *poślizgu c* przedstawiony w przestrzeni trójwymiarowej.



Rys. 5. Schemat działania płaszczyzny *poślizgu c* w rzucie ortogonalnym na płaszczyznę rysunku.

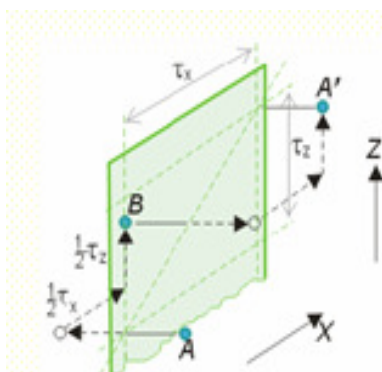
- **Płaszczyzny poślizgu diagonalne (symbol n)**

Działanie płaszczyzny poślizgowej diagonalnej polega na tym, że po wykonaniu odbicia zwierciadlanego figury w płaszczyźnie symetrii zostaje ona przesunięta równolegle do płaszczyzny symetrii o wektor równy sumie dwóch wektorów z następującej trójki: $a_0/2$, $b_0/2$, $c_0/2$.

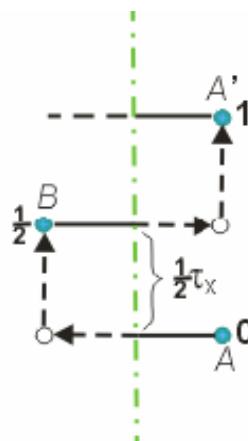
$$m + \frac{1}{2}(a_0 + b_0) = n$$

$$m + \frac{1}{2}(b_0 + c_0) = n$$

$$m + \frac{1}{2}(a_0 + c_0) = n$$



Rys. 6. Schemat działania płaszczyzny *diagonalnej n* przedstawiony w przestrzeni trójwymiarowej.



Rys. 7. Schemat działania płaszczyzny *diagonalnej n* w rzucie ortogonalnym na płaszczyznę rysunku.

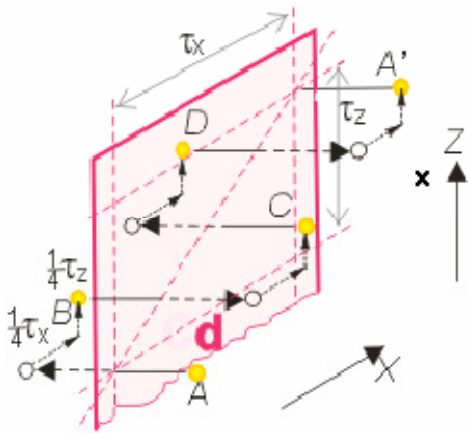
- **Płaszczyzny poślizgu diamentowe (symbol d)**

Działanie płaszczyzny poślizgowej diamentowej polega na tym, że po wykonaniu odbicia zwierciadlanego figury w płaszczyźnie symetrii zostaje ona przesunięta równolegle do płaszczyzny symetrii o wektor równy sumie dwóch wektorów z następującej trójki: $a_0/4$, $b_0/4$, $c_0/4$.

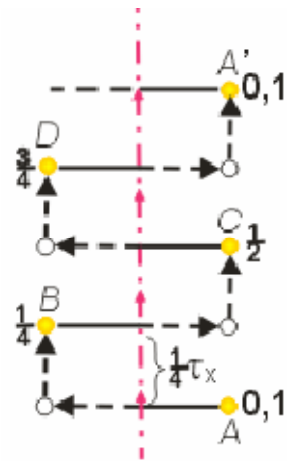
$$m + 1/4(a_0 + b_0) = d$$

$$m + 1/4(b_0 + c_0) = d$$

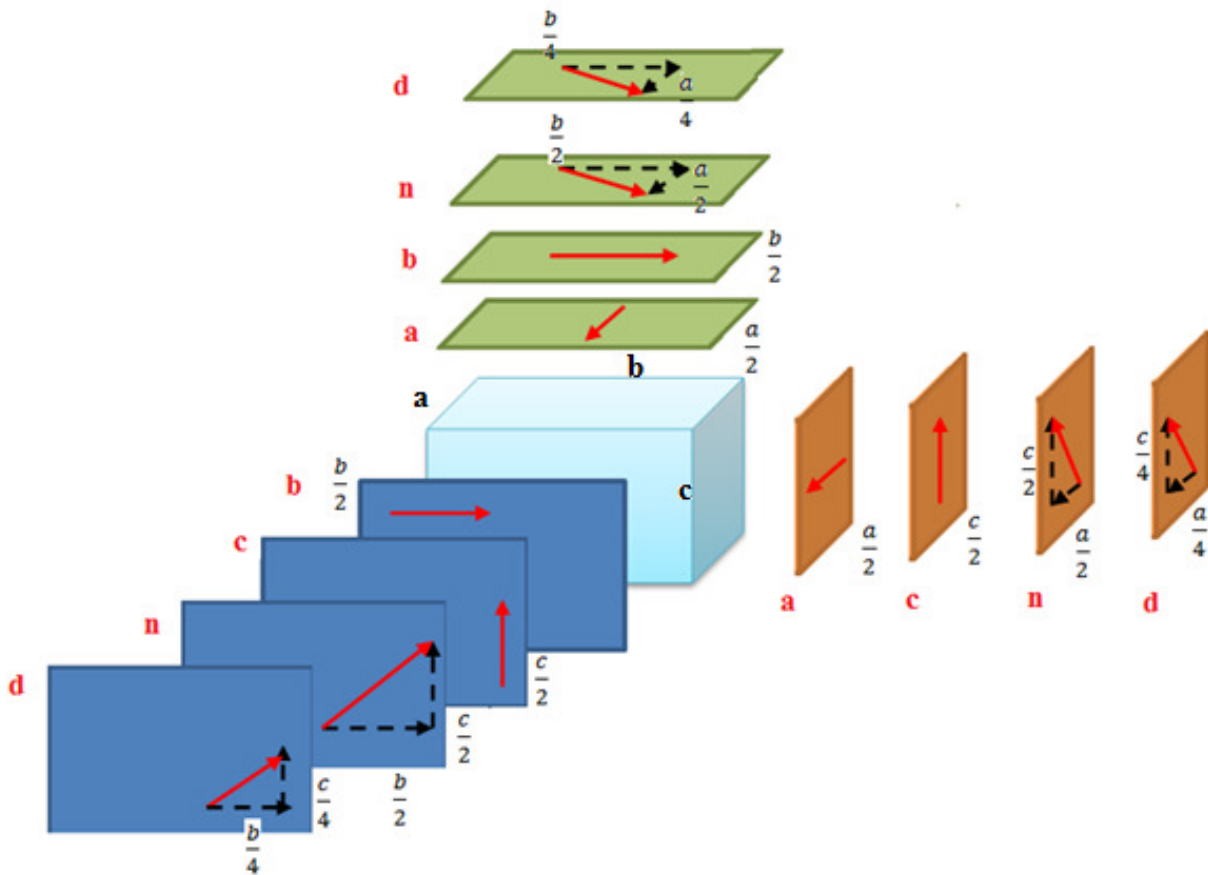
$$m + 1/4(a_0 + c_0) = d$$



Rys.8. Schemat działania płaszczyzny *diamantowej d* przedstawiony w przestrzeni trójwymiarowej.



Rys.9. Schemat działania płaszczyzny *diamantowej d* w rzucie ortogonalnym na płaszczyznę rysunku.



Rys. 10. Płaszczyzny poślizgu – możliwe orientacje

Tablica 2. Płaszczyzny symetrii ich symbole literowe i graficzne.

Płaszczyzna	Symbole międzynarodowe		Wektor translacji	
	literowe	graficzne		
		Płaszczyzna prostopadła do płaszczyzny projekcji Płaszczyzna równoległa do płaszczyzny projekcji		
Płaszczyzna symetrii	m			–
Osiowe płaszczyzny ślizgu	a			$\frac{1}{2} a_0$ wzdłuż [100]
	b			$\frac{1}{2} b_0$ wzdłuż [010]
	c		–	$\frac{1}{2} c_0$ wzdłuż [001]
Diagonalne płaszczyzny ślizgu	n			$\frac{a_0+b_0}{2}$ lub $\frac{b_0+c_0}{2}$ lub $\frac{c_0+a_0}{2}$
Diamantowe płaszczyzny ślizgu	d			$\frac{a_0+b_0}{4}$ lub $\frac{b_0+c_0}{4}$ lub $\frac{c_0+a_0}{4}$

Elementy symetrii strukturalnej w rachunku macierzowym.

Do opisu elementów symetrii mikroskopowej stosuje się macierze czterowymiarowe, które zawierają macierz symetrii punktowej S oraz wektor translacji t_R .

W celu utworzenia czterowymiarowych macierzy opisujących działanie osi śrubowych należy określić trójwymiarową macierz symetrii charakterystyczną dla danej krotności osi (generator) oraz ustalić odpowiednią dla tej osi wielkość wektora translacji t_R .

$$\tilde{S} = \begin{bmatrix} S & t_R \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Przykład:

Utworzyć czterowymiarową macierz symetrii opisującą działanie osi śrubowej 4_3 , równoległej do kierunku osi Z [001].

Czterowymiarowa macierz symetrii tej osi zawiera generator symetrii osi $4_{[001]}$ oraz wektor translacji $t_R = [0 \ 0 \ \frac{3}{4}]$. Dla osi symetrii 4 równoległej do osi Z [001] macierz symetrii (generator) ma postać:

$$4_{[001]}: \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Biorą pod uwagę wektor translacji $t_R = [0 \ 0 \ 3/4]$, czterowymiarowa macierz symetrii dla osi śrubowej $4_{3[001]}$ ma postać:

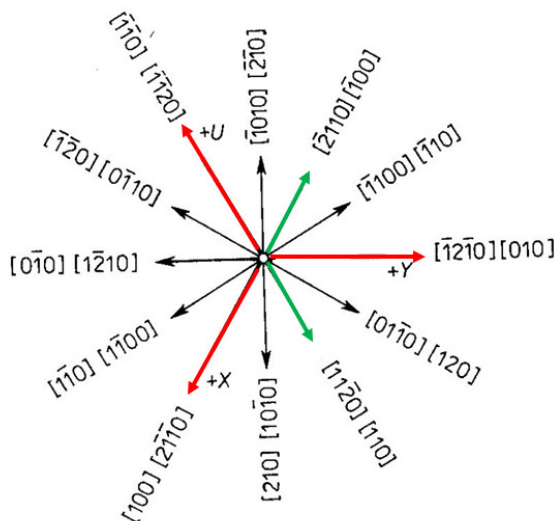
$$4_{3[001]} = \begin{bmatrix} 4_{[001]} & t_R \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 3/4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Tablica 3. Przykładowe macierze symetrii dla osi śrubowych

Oś śrubowa	Macierz symetrii (Generator)
$2_{1[010]}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$3_{2[001]}$	$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2/3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$6_{1[001]}$	$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Przykład:

Korzystając z rachunku macierzowego podaj współrzędne punktów symetrycznie równoważnych generowanych przez oś śrubową 6_5 równoległą do kierunku $[001]$.



Rys. 11. Kierunki w układzie heksagonalnym

$$6_{5[001]}: \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 5/6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x-y \\ x \\ 5/6+z \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 5/6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x-y \\ x \\ 5/6+z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y \\ x-y \\ 10/6+z \\ 1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} -y \\ x-y \\ 2/3+z \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 5/6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -y \\ x-y \\ 10/6+z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ 15/6+z \\ 1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ 1/2+z \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 5/6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ 15/6+z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y-x \\ -x \\ 20/6+z \\ 1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} y-x \\ -x \\ 1/3+z \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 5/6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y-x \\ -x \\ 20/6+z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y-x \\ 25/6+z \\ 1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} y \\ y-x \\ 1/6+z \\ 1 \end{bmatrix}$$

Współrzędne punktów symetrycznie równoważnych:

$6_5: xyz \rightarrow x-y, x, 5/6+z \rightarrow -y, x-y, 2/3+z \rightarrow -x, -y, 1/2+z \rightarrow y-x, -x, 1/3+z \rightarrow y, y-x, 1/6+z$

W celu utworzenia czterowymiarowych macierzy opisujących działanie płaszczyzn poślizgu należy określić trójwymiarową macierz symetrii punktowej dla płaszczyzny symetrii m oraz ustalić odpowiedni dla tej płaszczyzny wektor translacji t_R .

Przykład:

Utworzyć czterowymiarową macierz symetrii opisującą działanie płaszczyzny poślizgu osiowej $b_{(100)}$. Trójwymiarową macierz symetrii reprezentuje macierz, w której płaszczyzna symetrii m jest prostopadła do kierunku $[100]$.

$$m_{(100)}: \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Płaszczyznę osiową b charakteryzuje wektor translacji $t_R = 1/2$ w kierunku osi Y $[010]$. Macierz reprezentująca tę płaszczyznę ma postać:

$$b_{(001)} = \begin{bmatrix} m_{(100)} & t_R \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Tablica 4. Przykładowe macierze symetrii dla płaszczyzn poślizgu

Płaszczyzna poślizgu	Macierz symetrii (Generator)
$c_{(100)}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$n_{(010)}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$d_{(001)}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1/4 \\ 0 & 1 & 0 & 1/4 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Krystalograficzne grupy przestrzenne

W ujęciu makroskopowym symetria zewnętrznych postaci kryształów jest opisana za pomocą 10 elementów symetrii makroskopowej i 22 dozwolonych kombinacji - czyli 32 grupami punktowymi.

W wyniku kombinacji 32 grup punktowych z 14 typami sieci przestrzennych Bravais'go powstają tzw. proste grupy przestrzenne.



W ujęciu mikroskopowym symetria wewnętrzna kryształów jest opisywana w oparciu o elementy symetrii makroskopowej i elementy symetrii translacyjnej. Połączenie elementów symetrii punktowej 32 klas krystalograficznych z translacją generuje 230 grupy przestrzenne.

Każda grupa przestrzenna, posiada swój międzynarodowy symbol, w którym na początku umieszczona jest litera odpowiadająca sieci Bravais'go. Kolejność zapisu elementów symetrii w symbolach grup przestrzennych jest podawana według tych samych zasad, jak dla grup punktowych. Najczęściej stosuje się symbole skrócone, zawierające wystarczające informacje o symetrii grupy przestrzennej, potrzebne do wygenerowania wszystkich elementów symetrii danej grupy przestrzennej. Na podstawie symboli grup przestrzennych możemy wyznaczyć symetrię grupy punktowej przez odrzucenie typu sieci Bravais'a i zamianę wszystkich elementów translacyjnych na odpowiadające im elementy punktowe.

Grupy przestrzenne zostały zebrane i opisane w Międzynarodowych Tablicach Krystalograficznych (*International Tables for Crystallography*)

Tablica 5. Symbole międzynarodowe 230 grup przestrzennych.

1*	$P1$	47*	$Pmmm$	93	$P4_222$	139	$I4/mmm$	185	$P6_3cm$
2*	$P\bar{1}$	48	$Pnnn$	94	$P4_22_12$	140	$I4/mcm$	186	$P6_3mc$
3*	$P2$	49	$Pccm$	95	$P4_322$	141	$I4_1/amd$	187*	$P6m2$
4	$P2_1$	50	$Pban$	96	$P4_32_12$	142	$I4_1/acd$	188	$P6c2$
5	$C2$	51	$Pmma$	97	$I422$	143*	$P3$	189	$P62m$
6*	Pm	52	$Pnna$	98	$I4_122$	144	$P3_1$	190	$P62c$
7	Pc	53	$Pmna$	99*	$P4mm$	145	$P3_2$	191*	$P6/mmm$
8	Cm	54	$Pcca$	100	$P4bm$	146	$R3$	192	$P6/mcc$
9	Cc	55	$Pbam$	101	$P4_2cm$	147	$P\bar{3}$	193	$P6_3/mcm$
10*	$P2/m$	56	$Pccn$	102	$P4_2nm$	148	$R\bar{3}$	194	$P6_3/mmc$
11	$P2_1/m$	57	$Pbcm$	103	$P4cc$	149*	$P312$	195*	$P23$
12	$C2/m$	58	$Pnrm$	104	$P4nc$	150	$P321$	196	$F23$
13	$P2/c$	59	$Pmrm$	105	$P4_2mc$	151	$P3_112$	197	$I23$
14	$P2_1/c$	60	$Pbcn$	106	$P4_2bc$	152	$P3_121$	198	$P2_13$
15	$C2/c$	61	$Pbca$	107	$I4mm$	153	$P3_212$	199	$I2_13$
16*	$P222$	62	$Pnma$	108	$I4cm$	154	$P3_221$	200*	$Pm\bar{3}$
17	$P222_1$	63	$Cmcm$	109	$I4_1md$	155	$R32$	201	$Pn\bar{3}$
18	$P2,2,2$	64	$Cmca$	110	$I4_1cd$	156*	$P3m1$	202	$Fm\bar{3}$
19	$P2_12_12_1$	65	$Cmmm$	111*	$P\bar{4}2m$	157	$P31m$	203	$Fd\bar{3}$
20	$C222_1$	66	$Cccm$	112	$P\bar{4}2c$	158	$P3c1$	204	$Im\bar{3}$
21	$C222$	67	$Cmma$	113	$P\bar{4}2_1m$	159	$P31c$	205	$Pa\bar{3}$
22	$F222$	68	$Ccca$	114	$P\bar{4}2_1c$	160	$R3m$	206	$Ia\bar{3}$
23	$I222$	69	$Fmmm$	115	$P\bar{4}m2$	161	$R3c$	207*	$P432$
24	$I2_12_12_1$	70	$Fddd$	116	$P\bar{4}c2$	162*	$P\bar{3}1m$	208	$P4_232$
25*	$Pmm2$	71	$Immm$	117	$P\bar{4}b2$	163	$P\bar{3}1c$	209	$F432$
26	$Pmc2_1$	72	$Ibam$	118	$P\bar{4}n2$	164	$P\bar{3}m1$	210	$F4_132$
27	$Pcc2$	73	$Ibca$	119	$P\bar{4}m2$	165	$P\bar{3}c1$	211	$I432$
28	$Pma2$	74	$Imma$	120	$I\bar{4}c2$	166	$R\bar{3}m$	212	$P4_332$
29	$Pca2_1$	75*	$P4$	121	$I\bar{4}2m$	167	$R\bar{3}$	213	$P4_132$
30	$Pnc2$	76	$P4_1$	122	$I\bar{4}2d$	168*	$P6$	214	$I4_132$
31	$Pmn2_1$	77	$P4_2$	123*	$P4/mmm$	169	$P6_1$	215*	$P\bar{4}3m$
32	$Pba2$	78	$P4_32d$	124	$P4/mcc$	170	$P6_5$	216	$F\bar{4}3m$
33	$Pna2_1$	79	$I4$	125	$P4/nbm$	171	$P6_2$	217	$I\bar{4}3m$
34	$Pnn2$	80	$I4_1$	126	$P4/nnc$	172	$P6_4$	218	$P\bar{4}3n$
35	$Cmm2$	81*	$P\bar{4}$	127	$P4/mbm$	173	$P6_3$	219	$F\bar{4}3c$
36	$Cmc2_1$	82	$I\bar{4}$	128	$P4/mnc$	174*	$P\bar{6}$	220	$I\bar{4}3d$
37	$Ccc2$	83*	$P4/m$	129	$P4/nmm$	175*	$P6/m$	221*	$Pm\bar{3}m$
38	$Amm2$	84	$P4_2/m$	130	$P4/ncc$	176	$P6_3/m$	222	$Pn3n$
39	$Abm2$	85	$P4/n$	131	$P4_2/mmc$	177*	$P622$	223	$Pm\bar{3}n$
40	$Ama2$	86	$P4_2/n$	132	$P4_2/mcm$	178	$P6_122$	224	$Pn\bar{3}m$
41	$Aba2$	87	$I4/m$	133	$P4_2/nbc$	179	$P6_522$	225	$Fm\bar{3}m$
42	$Fmm2$	88	$I4/a$	134	$P4_2/nrm$	180	$P6_222$	226	$Fm\bar{3}c$
43	$Fdd2$	89*	$P422$	135	$P4_2/mbc$	181	$P6_422$	227	$Fd\bar{3}m$
44	$Imm2$	90	$P42_12$	136	$P4_2/mrm$	182	$P6_322$	228	$Fd\bar{3}c$
45	$Iba2$	91	$P4_122$	137	$P4_2/nmc$	183*	$P6mm$	229	$Im\bar{3}m$
46	$Ima2$	92	$P4_12_12$	138	$P4_2/nrm$	184	$P6cc$	230	$Ia\bar{3}d$

Wykonanie ćwiczenia:

Część I. Zapoznanie się z działaniem elementów symetrii mikroskopowej z wykorzystaniem programu komputerowego KRYSI

- 1.1. Nacisnąć ikonę z napisem KRYSI.
- 1.2. Wybrać opcję **Symetria** i dalej podopcję **Prezentacja elementów symetrii**.
- 1.3. Korzystając z programu komputerowego zapoznać się z przekształceniem motywu względem elementów symetrii mikroskopowej: płaszczyzn ślizgowych a , b , c , n i d oraz osi śrubowych 2_1 , 3_1 , 3_2 , 4_1 , 4_2 , 4_3 , 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4 , 6_5 .
- 1.4. Obserwować przekształcanie motywu dla poszczególnych elementów symetrii.

Część II. Tworzenie czterowymiarowych macierzy opisujących strukturalne elementy symetrii.

- 2.1. Utworzyć macierz symetrii opisującą osie śrubowe: 3_1 i 6_2 .
- 2.2. Utworzyć macierz symetrii opisującą płaszczyzny ślizgowe: $a_{(001)}$ i $n_{(001)}$.

Problemy i zadania

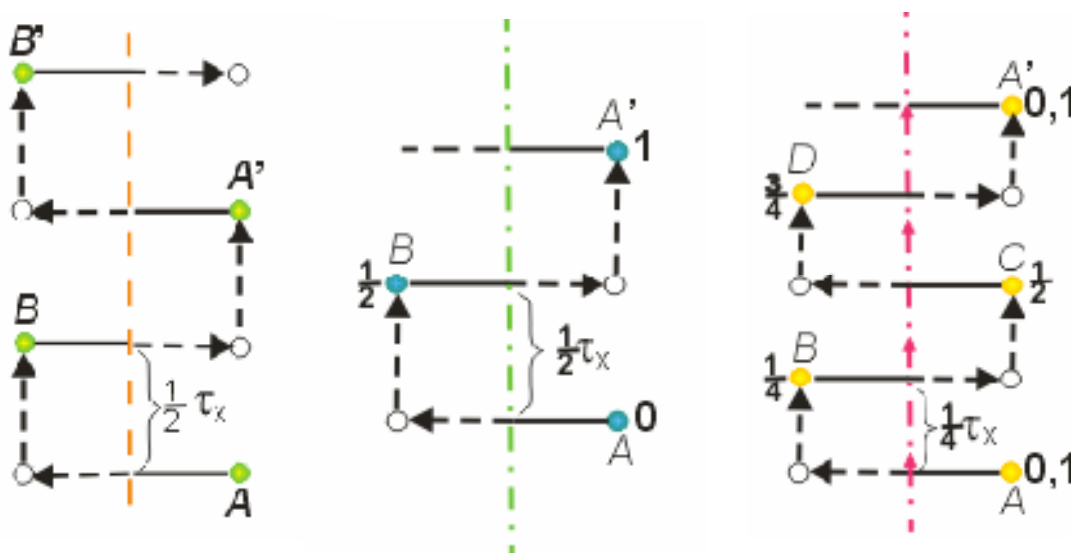
Zadanie 1

Podanym płaszczyznom ślizgowym przyporządkuj właściwy wektor translacji.

- | | |
|--------------------|------------------------------|
| A. płaszczyzna a | 1. $\frac{1}{2}(a_0 + b_0)$ |
| B. płaszczyzna b | 2. $\frac{1}{2} b_0$ |
| C. płaszczyzna n | 3. $\frac{1}{2} a_0$ |
| D. płaszczyzna d | 4. $\frac{1}{4} (a_0 + b_0)$ |

Zadanie 2

Na poniższych rysunkach przedstawiono schematy działania wybranych płaszczyzn ślizgowych. Określ jakie to płaszczyzny.



Zadanie 3

Korzystając z rachunku macierzowego podaj współrzędne punktów symetrycznie równoważnych generowanych przez osie śrubowe 3_1 , 4_3 , 6_2 równoległe do kierunku $[001]$.

Zadanie 4

Korzystając z rachunku macierzowego podaj współrzędne punktów symetrycznie równoważnych generowanych przez płaszczyznę poślizgu $c_{(010)}$.

Zadanie 5

Jakie nowe elementy symetrii generują osie 2_1 , 3_2 , 4_1 , 4_3 , 6 , 6_2 i 6_3 powielone translacyjnie w grupach przestrzennych: $P2_1$, $P3_2$, $P4_1$, $P4_3$, $P6$, $P6_2$ i $P6_3$.

Zadanie 6

Wymień proste grupy przestrzenne układu regularnego, tetragonalnego i trygonalnego.

Zadanie 7

Dla każdej z poniżej podanych grup przestrzennych podaj układ krystalograficzny i grupę punktową:

$C2/c$; $P3m1$; Cc ; $I4_1cd$; $Ia3d$; $Cmca$; $P3_112$; $Im\bar{3}$

Zadanie 8

Podaj, co oznaczają poszczególne pozycje w poniższych symbolach grup przestrzennych (z uwzględnieniem liczby i rozmieszczenia w przestrzeni poszczególnych elementów symetrii):

$Pmc2_1$; $P2_1/m2/m2/a$; $Ccc2$; $P4_322$; $P4_2/n$; $P2_1/c$; $P4_222$; $P6/m2/m2/m$; $P23$

Literatura

1. Z.Trzaska-Durski, H.Trzaska-Durska, "Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej", PWN Warszawa 1994.
2. Z. Trzaska-Durski i H. Trzaska-Durska „Podstawy krystalografii”, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2003.
3. Z.Bojarski, M.Gigla, K.Stróż, M.Surowiec, „Materiały do nauki krystalografii – podręcznik wspomagany komputerowo” PWN Warszawa 1996.
4. Z. Kosturkiewicz, „Metody krystalografii”, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2004.
5. Z.Bojarski, M.Gigla, K.Stróż, M.Surowiec, „Krystalografia”, PWN, Warszawa 2007.
6. M. Van Meerssche i J. Feneau-Dupont, „Krystalografia i chemia strukturalna“, PWN, Warszawa 1984.