

Są tylko 32 grupy punktowe, które spełniają ten warunek,

Można je pogrupować w 7 typów grup (spośród omówionych 12-tu), które spełniają powyższe własności

$$S_2, C_{2h}, D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h}, O_h$$

nazywają się *holoedrami* (sieci);

z każdym holoedrem związanych jest kilka grup punktowych (z wszystkich 32), podgrup holoedru, np.:

z O_h : $T, T_d, T_h, O, O_h, \{e\}$;

dla każdej z nich można skonstruować grupę wektorową J i sieć Bravais (dla której ta grupa punktowa będzie grupą symetrii sieci)

ale można skonstruować więcej niż jedną J , tzn. różne sieci Bravais

(taki przykład mieliśmy w 2D dla sieci prostokątnej i prostokątnej centrowanej)

def.

zbiór grup wektorowych (sieci Bravais) posiadających tę samą grupę symetrii nazywa się układem krystalograficznym

istnieje 7 układów; ich nazwy (odpowiednio):

- trójskośny T
- jednoskośny M
- rombowy lub ortogonalny O
- romboedryczny lub trygonalny R
- tetragonalny lub kwadratowy Q
- heksagonalny H
- kubiczny lub regularny K

Typy sieci

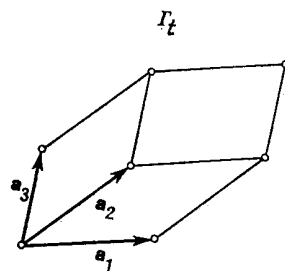
def:

dwie grupy wektorowe należące do jednego układu są tego samego typu jeśli można otrzymać jedną z drugiej za pomocą ciągłego przekształcenia wektorów bazowych

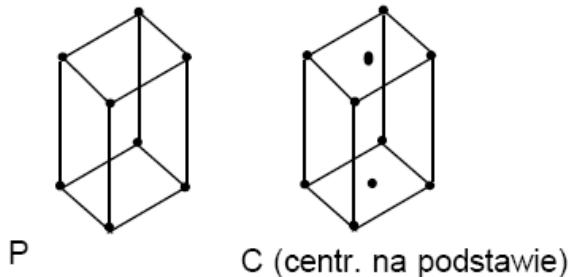
dany układ może zawierać kilka typów sieci (jest 14 różnych typów)

Układy krystalograficzne i sieci Bravais

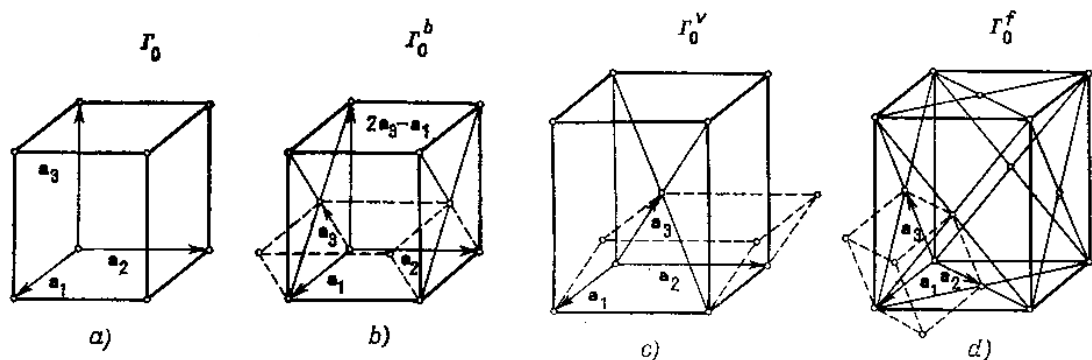
- układ trójskośny , (odp. grupa punktowa S_2 zawiera tylko $\{e, i\}$)
jeden typ – dowolne a_1, a_2, a_3



- układ jednoskośny (max. grupa punktowa – C_{2h})
2 typy: - prosty $a_3 \perp a_1$ i $a_3 \perp a_2$ (a_1 i a_2 w płaszczyźnie);
- z centrowanymi podstawami

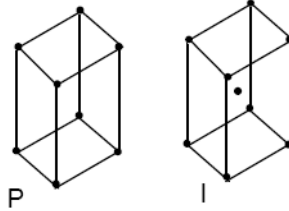


- układ ortogonalny (rombowy), max. grupa punktowa – D_{2h}
4 typy (prosty, centr.podst., obj.cent., pow.cent.)



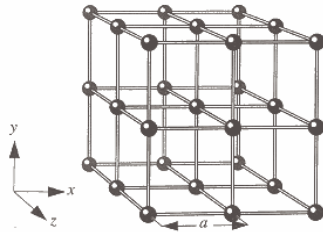
4. układ tetragonalny, max. grupa punktowa – D_{4h}

- 2 typy: - prosty: $a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1$, $|a_1| = |a_2|$
 - objętościowo centrowany
 $a_1 \perp a_2 \perp 2a_3 - a_1 - a_2 \perp a_1$

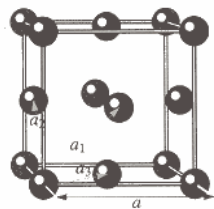


5. układ regularny, max. grupa punktowa – O_h

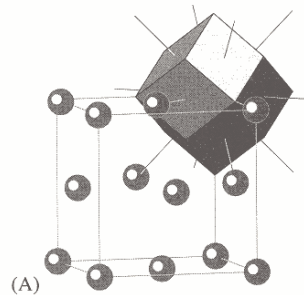
- 3 typy:
 prosty



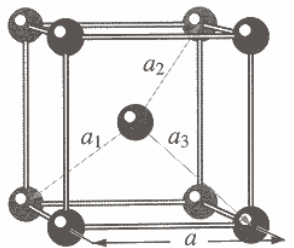
powierzchniowo centrowany fcc



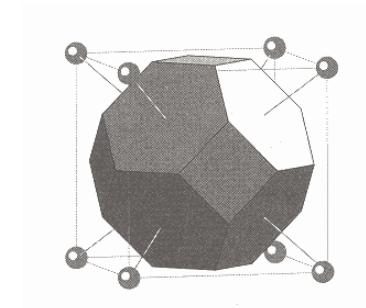
kom. W-S

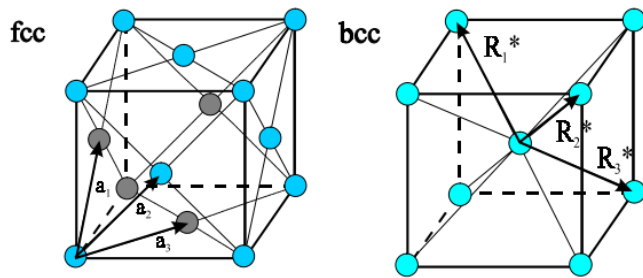


objętościowo centrowany bcc



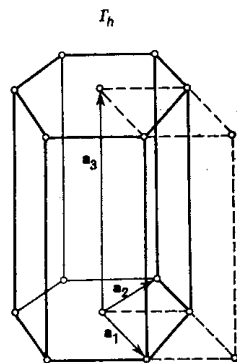
kom W-S





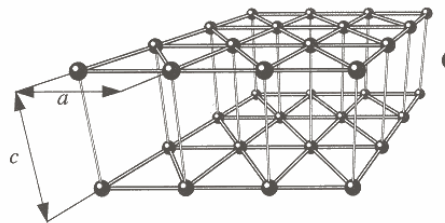
6. układ heksagonalny, max. grupa punktowa – D_{6h}

jeden typ – prosty



wektory bazowe

$(a, 0, 0)$, $(a/2, a\sqrt{3}/2, 0)$, $(0, 0, c)$

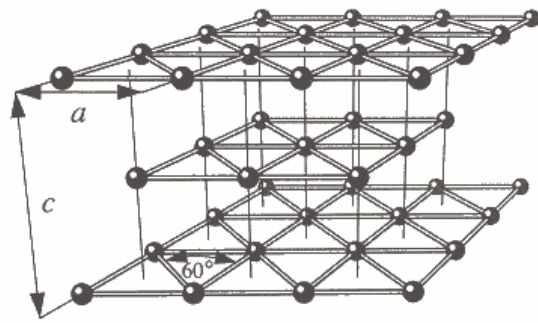


7. układ romboedryczny, max. grupa punktowa – D_{3d}

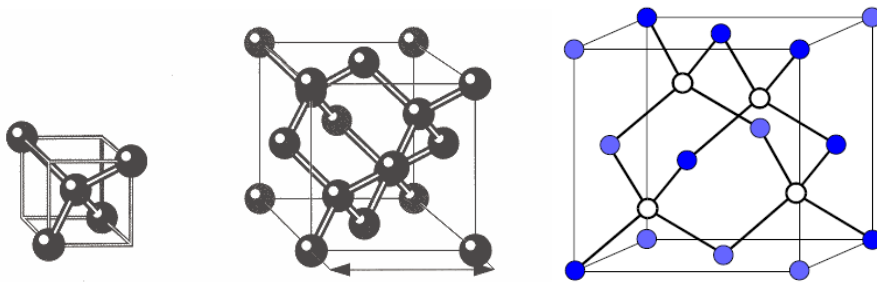
1 typ prosty (podobnie do trójskośnego, ale długości wektorów bazowych równe)

Wybrane sieci z bazą

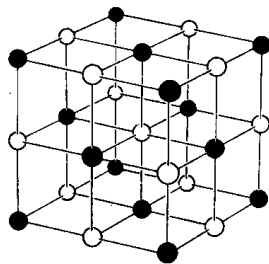
- sieć heksagonalna gęsto upakowana, hcp (dwie przenikające się sieci heksagonalne)



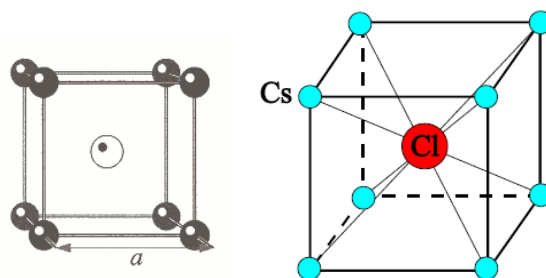
- sieć diamentu (lub blendy cynkowej - siarczku cynku - ZnS)



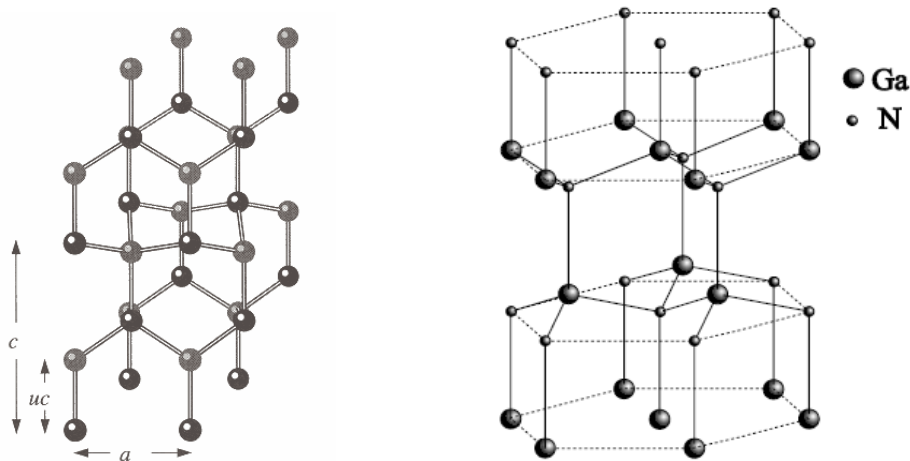
- struktura chlorku sodu



- struktura chlorku cezu

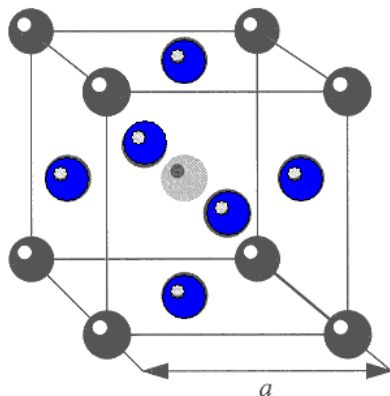


- struktura wurcytu (*wurtzite*)
np. ZnO, dwie przenikające się sieci hcp



każdy atom ma 4-ech innych sąsiadów

- struktura perowskitu, np. CaTiO_3



Ca – sieć egularna
 O - położenia fcc
 Ti - położenie centralne

W sieciach złożonych (z bazą) – sieć Bravais nie definiuje wszystkich punktów równoważnych kryształu i symetria sieci krystalicznej może być niższa niż symetria sieci Bravais

np. nie wszystkie sieci krystaliczne zawierają inwersję

def.

Kierunki równoważne w kryształach

takie, wzdłuż których wszystkie własności fizyczne kryształu są jednakowe,

np. zawierają jednakowe sekwencje punktów równoważnych

przekształcenia r grupy punktowej sieci Bravais, G , muszą przenosić kierunki w kryształ w równoważne sobie ale mogą nie przenosić punktów w punkty równoważne

zatem,

dla sieci złożonych, do pełnej identyfikacji symetrii kryształu, trzeba do grupy punktowej dodać pewną nietrywialną (ułamkową = niesieciową) translację o wektor

$$t_\alpha$$

(w ogólności różne dla różnych elementów grupy punktowej)

np. dla fcc bez bazy – istnieje punkt, w którym przecinają się wszystkie osie i płaszczyzny;

ale dla fcc z bazą dwuatomową (diament) taka sytuacja nie zachodzi,

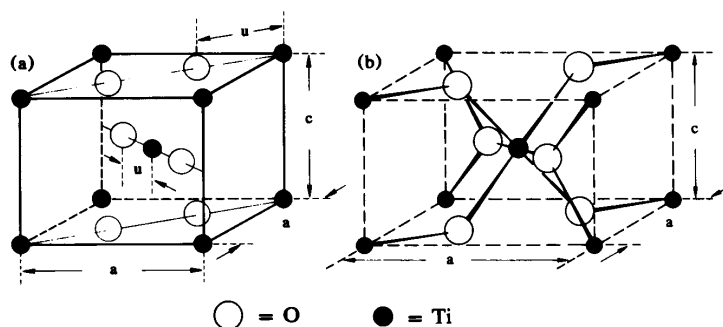
tzn., żeby przekształcenie przenosiło nie tylko kierunki w równoważne, ale też wszystkie punkty w równoważne może być potrzebne istnienie w grupie symetrii kryształu, G , przekształceń

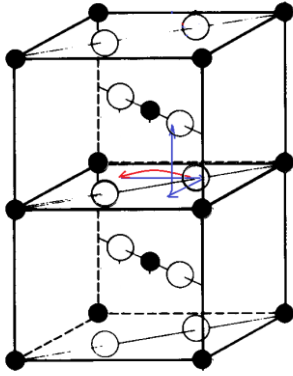
$$g = t_\alpha r$$

(osie śrubowe, płaszczyzny poślizgu)

np. dla TiO_2 (dwutlenek tytanu), sieć Bravais jest regularna objętościowo centrowana; dla takiej sieci istnieje w grupie punktowej operacja C_4 , ale $r=C_4$ (w z) nie przeprowadza kryształu w siebie;

dla $t_\alpha = (1/2, -1/2, 1/2)$, $t_\alpha r$ przeprowadza punkty w równoważne



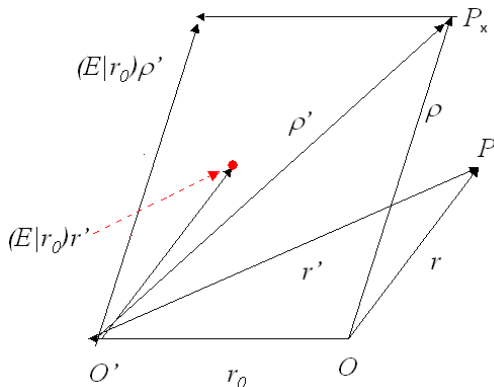


podobnie dla dowolnego atomu Ti

postać wektorów translacji nietrywialnych (nieprymitywnych) zależy od punktu O grupy punktowej (od wyboru układu współrzędnych)

wektor t_α podaje położenie każdego elementu „obrotowego” w komórce elementarnej

Zobaczmy, jak zmiana początku układu współrzędnych (czyli punktu stałego) wpływa na postać operacji grupy przestrzennej, czyli zapytajmy jaka operacja odpowiada operacji $g = (R|a)$ gdy początek układu współrzędnych przenieśliśmy z O do O' :



pewne przekształcenie $(R|a)_O$ przenosi P do P_x (pocz. ukł. w O)
 P - wskazywany jest przez r , czyli r przenosi w ρ

Jak zapisać tę samą operację w układzie z początkiem w O' ?
 Czyli jak zapisać operację, która r' przenosi w ρ' ?

Działając na r translacją $(E|r_0)$ otrzymujemy punkt, który względem O' ma współrzędne $(E|r_0)r'$.

Dokonując operacji $(R|a)$, ale zdefiniowanej przez punkt O'

$$(R|a)_{O'} (E|r_0)r' = (E|r_0)\rho'$$

korzystając ze znanego nam ogólnego wzoru

$$(r_1 | \mathbf{a}_1)(r_2 | \mathbf{a}_2) = (r_1 r_2 | \mathbf{a}_1 + r_1 \mathbf{a}_2)$$

pamiętając, że $r_0^{-1} = -r_0$, dostajemy,:

$$\rho' = (E | r_0)^{-1} (R | a)_{O'} (E | r_0) r' = (R | a + Rr_0 - r_0)_{O'} r'$$

zatem jeśli przeniesiemy środek współrzędnych (punkt O do O')

to operacji $(R | a)_O$ odpowiada $(R | a + Rr_0 - r_0)_{O'}$

można pokazać, że tak zdefiniowane operacje zachowują składanie grupowe;

rzeczywiście,

jeśli podstawimy np. $R=E$ to widać, że sieć nowej grupy

przestrzennej jest taka sama, bo a to dowolny wektor tej sieci;

NATOMIAST -

translacje nieprymitywne, zawarte w grupie przestrzennej, mogą ulegać zmianie przy przenoszeniu $O \rightarrow O'$;

w grupie zawierającej translacje nietrywialne, ogólny element ma

postać: $(R | t_\alpha + t_n)_O$

po przesunięciu $O \rightarrow O'$, w nowej grupie

$$(R | t_\alpha + t_n + Rr_0 - r_0)_{O'} = (R | t'_\alpha + t_n)_{O'}$$

gdzie $t'_\alpha = t_\alpha + Rr_0 - r_0$

Może się zdarzyć, że odpowiedni wybór O' da $t'_\alpha = 0$ dla każdego elementu obrotowego R .

Taką grupę nazywamy **symorficzną**

- przykład: płaska sieć kwadratowa ze specyficzną bazą dwuatomową (dwa takie same atomy w bazie) ...ćwiczenia...

...

dla sieci NaCl grupa jest symorficzna, choć jest to sieć fcc z bazą dwuatomową,

dla sieci diamentu grupa jest niesymorficzna (też fcc z bazą dwuatomową)

dla sieci TiO_2 grupa jest niesymorficzna

Dla sieci krystalicznych mogą zaistnieć następujące przypadki:

- każde przekształcenie r z G przenosi zarówno punkty jak i kierunki w równoważne
- r przenosi kierunki w równoważne, ale nie wszystkie punkty
- nie wszystkie kierunki przechodzą w równoważne przy przekształceniu r

podgrupa F grupy G będąca grupą symetrii kierunków w kryształach nazywa się *klasą krystalograficzną*

są 32 klasy - tzn. tyle ile jest podgrup w siedmiu grupach symetrii sieci Bravais