ТОЧКОВІ ТА ПРОСТОРОВІ ВИДИ СИМЕТРІЇ

(Цикл лекцій)

ОСНОВНІ ВІДОМОСТІ З ТЕОРІЇ СИМЕТРІЇ

1. Елементи симетрії континуума.

Елементами симетрії називаються допоміжні геометричні образи (точки, прямі, площини), відносно яких правильно повторюються рівні частини геометричних тіл. Наприклад, як видно на рис. 1, площина ділить квадрат на два дзеркально відображених і рівних трикутники.

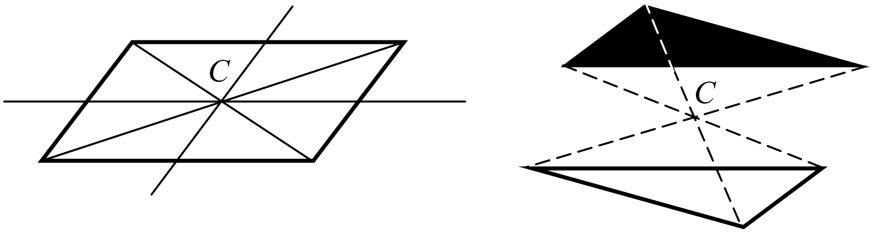
Рис. 1. Одна з площин симетрії квадрата.

Набори елементів симетрії дозволяють класифікувати кристали за їх внутрішньою будовою і розподіляти їх за категоріями, сингоніями та класами симетрії.

У континуумі можливі такі три типи елементів симетрії.

Центр інверсії (симетрії) – особлива точка, яка має таку властивість, що будь-яка проведена через неї пряма «зустрічає» на однакових відстанях від цієї точки еквівалентні точки простору. Позначення: C – формульне (символіка Браве); $\bar{1}$ – інтернаціональне (символіка Германа – Могена).

За наявності центра інверсії, кожній грані (ребру) повинна відповідати рівна і паралельна їй грань (ребро). На рис. 2 наведений приклад фігури, яка має центр інверсії, а також результат дії центра інверсії на довільну фігуру.



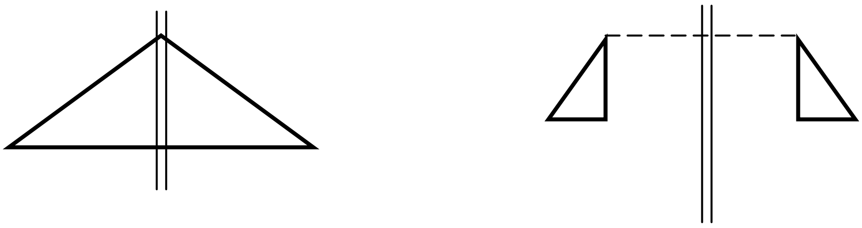
Приклад: наявність C

Приклад: дія C

Рис. 2. Наявність та дія центра інверсії.

Площина симетрії (дзеркального відображення) – площина, яка ділить простір на два рівних півпростори, розташованих як предмет і його дзеркальне відображення. Позначення: P – формульне; m – інтернаціональне.

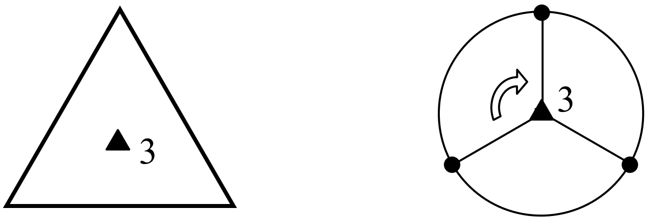
Площини дзеркального відображення завжди проходять через центри граней і ребер. На рис. 3 показаний рівнобічний трикутник, який має площину дзеркального відображення, а також результат дії такої площини на фігуру.


Приклад: наявність *m*

Приклад: дія *m*

Рис. 3. Наявність та дія площини симетрії.

Вісь симетрії – пряма лінія, при повороті навколо якої геометричне тіло суміщається само з собою певне число разів. Позначення: L_n – формульне; *N* (може бути лише 2, 3, 4 або 6) – інтернаціональне. Порядок осі симетрії *n* – це число разів, яке тіло суміщається само з собою при повороті на 360°. Елементарний кут повороту осі λ_n – це мінімальний кут, при повороті на який тіло суміщається само з собою, $\lambda_n = 360^\circ/n$. Приклад фігури з віссю симетрії третього порядку, а також результат її дії показані на рис. 4.


Приклад: наявність 3

Приклад: дія 3

Рис. 4. Наявність та дія осі симетрії третього порядку.

Осі симетрії в континуумі існують двох видів: звичайні та інверсійні. ***Інверсійна вісь симетрії*** – це лінія, при повороті навколо якої на деякий кут і подальшому відображенні відносно центральної точки геометричного тіла, як у центрі інверсії, воно суміщається само з собою. Позначення: L_{in} – формульне; $\overline{N}$ – інтернаціональне.

Не всі інверсійні осі є самостійними елементами симетрії:

- $\overline{1} \equiv C$, інверсійна вісь першого порядку – це центр інверсії;
- $\overline{2} \equiv m$, інверсійна вісь другого порядку діє так само, як і перпендикулярна до неї площина симетрії;
- $\overline{3} \equiv 3 + C$, дія інверсійної осі третього порядку еквівалентна послідовній дії звичайної осі та центра інверсії, належного цій осі;
- $\overline{4} \triangleright 2$, інверсійна вісь четвертого порядку завжди містить вісь другого порядку;
- $\overline{6} \triangleright 3 + m/3$, інверсійна вісь шостого порядку – це вісь симетрії третього порядку і перпендикулярна до неї площина дзеркального відображення.

Зверніть увагу, що знак «$\triangleright$» означає, що дія лівого елемента включає в себе дію правого, але не навпаки.

В середовищах, будову яких можна описати за допомогою просторових (кристалічних) ґраток, можливі лише осі симетрії порядку 2, 3, 4 і 6. Нагадаємо, що за визначенням, кристалічна ґратка повинна складатися з рівних, однаково орієнтованих і суміжних вздовж рівних граней паралелепіпедів. Саме ця умова обмежує кількість можливих осей симетрії. Фізичною причиною відсутності осей симетрії порядків 5 и більше 6 є те, що навіть плоский простір неможливо заповнити суміжними і правильними п’ятикутниками, семикутниками і т.д. без розривів. Це ж справедливо і для тривимірного простору. Якщо б конденсоване середовище складається з геометричних тіл з такими осями, то через наявність порожнин, а, отже, і додаткової поверхні, такий стан не характеризувався б мінімальною енергією.

Таким чином, можливими елементами симетрії континуума є:

- $\overline{1}(C)$ – центр інверсії;
- $m(P)$ – площина симетрії (дзеркального відображення);
- $N(L_n)$ – поворотні осі симетрії порядку $n = 2, 3, 4, 6$;
- $\overline{N}(L_{in})$ – інверсійні осі симетрії порядку $n = 4, 6$.

Інших елементів симетрії в суцільному конденсованому середовищі, будова якого описується просторовою ґраткою, не існує.

2. Взаємодія елементів симетрії континуума. Теореми про взаємодію або додавання елементів симетрії континуума.

Елементи симетрії взаємодіють один з одним. Це означає, що послідовна дія двох елементів симетрії стовідсотково веде до виникнення третього. Можливі результати взаємодії описуються п’ятьма теоремами додавання елементів симетрії.

Теорема 1 про перетин двох площин симетрії. Лінія перетину двох площин симетрії завжди є віссю симетрії, дія якої еквівалентна дії цих площин. Елементарний кут повороту осі дорівнює подвоєному куту між площинами.

Обернена теорема. Дія осі симетрії порядку n еквівалентна відображенню в двох площинах симетрії, які перетинаються під кутом $360^\circ/2n$.

Теорема 2 про перетин двох осей (теорема Ейлера). Через точку перетину двох осей симетрії завжди проходить третя вісь симетрії.

Теорема 3 про перетин осі симетрії і площини дзеркального відбиття. Точка перетину площини дзеркального відбиття з перпендикулярною до неї віссю симетрії парного порядку є центром інверсії.

Обернена теорема 1. Через центр інверсії, що лежить на осі симетрії парного порядку, перпендикулярно цій осі проходить площина дзеркального відбиття.

Обернена теорема 2. Через центр інверсії, що лежить на площині дзеркального відбиття, перпендикулярно цій площині проходить вісь симетрії парного порядку.

Теорема 4 (наслідок з теореми про перетин двох осей). Число осей симетрії другого порядку, перпендикулярних осі симетрії вищого порядку, дорівнює порядку цієї осі.

Теорема 5 (наслідок з теореми про перетин двох площин). Число площин симетрії, що перетинаються по осі симетрії, дорівнює порядку цієї осі.

3. Тридцять два точкових види симетрії континуума. Категорії, сингонії та класи симетрії.

В континуумі може бути обмежене число елементів симетрії, отже, обмежене і число їхніх можливих неповторюваних комбінацій – видів симетрії.

Видом симетрії багатогранника або континуума називається повна неповторювана сукупність усіх елементів симетрії, притаманних даному багатограннику.

Тотожним для нього поняттям є ***точковий вид симетрії***. Вид симетрії називається «точковим» тому, що існує одна точка, яка завжди суміщається сама з собою при дії на неї усіх елементів симетрії цього виду. В цій особливій точці перетинаються всі елементи симетрії, що входять до виду.

В континуумі можливі лише 32 точкових види симетрії. Це обмеження обумовлене такими причинами:

- обмеженим числом відображень, необхідних для суміщення двох кристалографічно рівних фігур ***(≤4)***;
- обмеженим числом можливих елементів симетрії ***(8)***;
- властивостями взаємодії елементів симетрії, в результаті якої два елементи приводять до появи третього, що входить до тієї ж обмеженої сукупності з восьми можливих у континуумі.

Тридцять два точкових види діляться на дві частини:

- види симетрії, що мають одиничний напрям;
- види симетрії без одиничного напряму.

Одиничним називається неповторюваний напрям, який розташований відносно всіх елементів симетрії виду так, що завжди суміщається сам з собою.

Усі тридцять два точкових види симетрії можна вивести. Принцип виведення видів симетрії з одиничним напрямом полягає в тому, що до породжувального елемента симетрії додається наступний, таким чином, щоб одиничний напрям при цьому залишався одиничним. За породжувальний елемент симетрії обрана вісь симетрії.

В залежності від елемента симетрії, який додається до породжувального, всі види симетрії діляться на класи:

- *примітивний* – лише вісь симетрії порядку 1, 2, 3, 4 чи 6, яка обов’язково співпадає з одиничним напрямом;
- *центральний* – до породжувальної осі додається центр інверсії;
- … – додається площина дзеркального відображення перпендикулярно до одиничного напряму;
- *планальний* – додається площина дзеркального відображення вздовж одиничного напряму;
- *аксіальний* – додається вісь симетрії другого порядку перпендикулярно до одиничного напряму;
- *планаксіальний* – додається площина дзеркального відображення, що проходить вздовж одиничного напряму та вісь симетрії другого порядку перпендикулярно до одиничного напряму, або ж додається центр інверсії та вісь симетрії другого порядку перпендикулярно до одиничного напряму, або ж додається центр інверсії та площина дзеркального відображення вздовж одиничного напряму;
- *інверсійно-примітивний* – містить лише породжувальні інверсійні вісі симетрії порядку 1, 2, 3, 4 чи 6;
- *інверсійно-планальний* – до породжувальної інверсійної осі додається площина дзеркального відображення вздовж одиничного напряму.

Зверніть увагу, що третій клас не має назви. Уводити його немає сенсу, тому що вісь симетрії парного порядку і перпендикулярна до неї площина неминучо породжують центр інверсії, що приводить до уже розглянутого центрального класу. Для непарних осей утворюються комбінації, подібні до присутніх у планальному й інверсійно-примітивному класах. Види симетрії без одиничних напрямів визначаються умовами існування декількох осей симетрії вищого порядку. Існує правило, що в середовищі, будова якого описується за допомогою просторової ґратки, може існувати обмежене число перетинних осей симетрії вищого порядку. Згідно з цим правилами, якщо за примітивний клас обрати сполучення осей 3+2 (23), то описаним раніше чином можна отримати ще п’ять видів симетрії без одиничних напрямів.

Усі 32 види симетрії континуума зведені у табл. 1 і 2.

Таблиця 1

Види симетрії кристалів без одиничних напрямів

Примітивний	Центральний $+\overline{C}$	Планальний $+P$	Аксіальний $+L_2$	Планаксіальний $+L_2/m$
23	$m3$	$\overline{4}3m$	432	$m3m$

Загалом можливі 27+5=32 види симетрії континуума на основі просторової ґратки.

Розподіл на категорії відбувається наступним чином. Якщо немає осей симетрії порядку вище 2, і є декілька одиничних напрямів, то вид симетрії відноситься до *нижчої категорії*. За наявності одного одиничного напряму, який суміщається з єдиною віссю порядку вище 2, отримаємо види симетрії

Таблиця 2

Види симетрії кристалів з одиничними напрямами

Примі-тивний $L_n + 0$	Централь-ний $L_n + \overline{C}$	Планаль-ний $L_n + P$	Аксі-альний $L_n + L_2$	Планаксі-альний $L_n + \frac{L_2}{m}$	Інверсійно-примітивний $L_i + 0$	Інверсійно-планальний $L_{in} + m$
№1 1	№2 $1+\bar{1}=\bar{1}$	№3 $1+m=m$	№4 $1+2=2$	№5 $1+2/m=2/m$	(№2)	(№4), (№14) (№21)
№4 2	№5 $2+\bar{1}=2/m$	№6 $2+m=mm2$	№7 $2+2=222$	№8 $2+2/m=mmm$	(№3)	(№6)
№9 3	№10 $3+\bar{1}=\bar{3}$	№11 $3+m=3m$	№12 $3+2=32$	№13 $3+2/m=\bar{3}m$	(№10)	(№13)
№14 4	№15 $4+\bar{1}=4/m$	№16 $4+m=4mm$	№17 $4+2=422$	№18 $4+2/m=4/mmm$	№19 $\bar{4}$	№20 $\bar{4}+m=\bar{4}2m$
№21 6	№22 $6+\bar{1}=6/m$	№23 $6+m=6mm$	№24 $6+2=622$	№25 $6+2/m=6/mmm$	№26 $\bar{6}$	№27 $\bar{6}+m=\bar{6}2m$

середньої категорії. До *вищої категорії* відносяться види симетрії без одиничних напрямів з декількома осями порядку вище 2.

Розподіл точкових видів симетрії за сингоніями подано у табл. 3.

Таблиця 3

Розподіл видів симетрії за категоріями, сингоніями і класами

Класи		**Примітивний**	**Центральний**	**Планальний**	**Аксіальний**	**Планаксіальний**	**Інвер.-прим.**	**Інвер.-план.**
Категорії	*Сингонії*							
Нижча	**Триклинна**	**Немає осей і площин, усі напрями одиничні**						
	Моноклінна	Не більше однієї осі 2 або *m*, безліч одиничних напрямів						
	Ромбічна	Декілька осей 2, три одиничних напрями, які співпадають з осями 2						
Середня	**Тригональна**	Одна вісь 3 і один одиничний напрям, який співпадає з нею						
	Тетрагональна	Одна вісь 4 і один одиничний напрям, який співпадає з нею						
	Гексагональна	Одна вісь 6 і один одиничний напрям, який співпадає з нею						
Вища	**Кубічна**	Завжди чотири осі 3, одиничних напрямів немає						

4. Кристалографічні системи координат, правила установлення, міжнародні символи точкових видів симетрії.

У загальному випадку система координат, «прив'язана» до просторової ґратки, не повинна бути ізотропною й ортогональною, тобто декартовою. При описі кристалічної ґратки буває зручніше користуватися нерівномірною і косокутною системою координат. Вид просторової ґратки визначається направленістю хімічного зв'язку (кутом між вузловими рядами ґратки) та розміром атомів чи молекул (відстанню між вузлами в ряді). Тому, якщо завжди користуватися декартовою системою координат, то втрачається подібність симетричної будови кристалів різних речовин, які утворюють схожі типи кристалічних ґраток. При знаходженні координат вузлів не виходили б порівняно прості цілі числа, що зробило б неможливим виділення схожих кристалічних структур.

Кожній сингонії відповідає своя система координат, яка задається за допомогою кутів між координатними осями α, β, γ, та елементарних відрізків вздовж осей a, b, c. При цьому осі обираються не довільно, а у відповідності до правил установки, які описані у табл. 4. Єдино можливою стандартна установка може бути лише в кубічній сингонії, у решті сингоній число можливих установок збільшується зі зниженням симетрії. Така неоднозначність усувається за допомогою правил установки (стандартних установок), які наведені у табл. 4.

Таблиця 4

Правила установки кристалів різних сингоній

Триклинна	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$, $a \neq b \neq c$	Вздовж дійсних чи можливих ребер кристала
Моноклінна	$\beta \neq \alpha = \gamma = 90°$, $a \neq b \neq c$	Вісь Y співпадає з віссю 2 або $\perp$ площині m
Ромбічна	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$, $a \neq b \neq c$	Усі осі співпадають з осями 2, або Z співпадає з віссю 2, а X і $Y \perp$ площинам m
Тригональна	$\alpha = \beta = 90° \neq$ $\gamma = 120°$, $a = b \neq c$	Вісь Z співпадає з віссю 3, осі X та Y співпадають з осями 2 або $\perp$ площинам m
Тетрагональна	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$, $a = b \neq c$	Вісь Z співпадає з віссю 4, осі X та Y співпадають з осями 2 або $\perp$ площинам m
Гексагональна	$\alpha = \beta = 90° \neq$ $\gamma = 120°$, $a = b \neq c$	Вісь Z співпадає з віссю 6, осі X та Y співпадають з осями 2 або $\perp$ площинам m
Кубічна	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$, $a = b = c$	Усі осі співпадають з осями 4, або осі 2 паралельні ребрам куба

Якщо задані правила установки, кожний з 32 точкових видів симетрії може бути записаний у вигляді символу чи формули симетрії. Формула симетрії за символікою Браве складається з послідовно записаних елементів симетрії даного об’єкта, наприклад, формула $3L_4 4L_3 6L_2 9PC$ містить усі елементи симетрії куба.

Міжнародні, інтернаціональні або символи Германа – Могена видів симетрії більш компактні при написанні, але для їхнього повного розшифрування необхідно використовувати теореми про взаємодію елементів симетрії та правила установки у кожній сингонії. Формула симетрії куба має вигляд $m3m$. У міжнародному символі пишуться не всі, а лише породжувальні елементи симетрії (див. табл. 5).

Таблиця 5

Правила запису міжнародного символу точкового виду симетрії

Категорії	***Сингонії***	**1а позиція**	**2-я позиція**	**3-я позиція**
Нижча	*Триклинна*	Лише один символ, що відповідає будь-якому напряму в кристалі		
	Моноклінна	Єдина вісь 2 або площина m вздовж осі Y.		
	Ромбічна	Вісь 2 вздовж осі X, чи площина m, перпендикулярна до неї	Вісь 2 вздовж осі Y, чи площина m, перпендикулярна до неї	Вісь 2 вздовж осі Z, чи площина m, перпендикулярна до неї
Середня	*Тригональна*	Головна вісь симетрії вздовж осі Z	Елементи $2(m)$ вздовж осей X та Y	Діагональні елементи $2(m)$
	Тетрагональна			
	Гексагональна			
Вища	*Кубічна*	Координатні елементи симетрії	Осі 3, розташовані вздовж просторової діагоналі куба	Діагональні елементи симетрії

Для описання точкових видів використовують також сферичні проекції елементів симетрії. При написанні символу симетрії за проекціями елементів симетрії додержуються таких правил:

- виділяють мінімальний сферичний трикутник, повторюванням якого можна отримати весь точковий вид; проекція однієї з сторін цього трикутника повинна співпадати з віссю координат OX, а одна з вершин повинна лежати в центрі кола проекцій і співпадати з проекцією осі OZ;
- у міжнародному символі точкового виду вказуються елементи симетрії розташовані у вершинах цього трикутника: на першому місці знаходиться елемент, що лежить в центрі кола проекцій, а далі за порядком старшинства осі; площини симетрії, перпендикулярні осям, вказуються у символі замість осі у короткому записі або через дріб у повному записі.

- наприклад, для куба – короткий запис виглядає як *m3m*, перевагу надано площинам, або повний – $\frac{4}{m}3\frac{2}{m}$, площини, перпендикулярні осям, вказані через дріб.

5. **Прості форми кристалів.**

Кожному виду симетрії відповідає один чи декілька багатогранників, які містять усі елементи симетрії що входять до цього виду. Вони утворюють, так звані, прості форми, які можна побудувати, подіявши на довільну грань усіма елементами симетрії, що входять до виду.

Простою формою кристала називається сукупність граней, які отримують з однієї за допомогою перетворень симетрії, що входять до точкового виду. Усі грані простої форми кристалографічно рівні. Одному точковому виду симетрії може відповідати декілька простих форм. Наприклад, куб і октаедр (восьмигранник, який складається з однакових граней у формі рівнобічного трикутника) є простими формами виду *m3m*.

З іншого боку, одна й та сама проста форма може належати до різних видів симетрії. Куб, наприклад, є простою формою усіх класів симетрії кубічної сингонії.

Вид простої форми та число її граней залежать від розташування породжувальної грані відносно елементів симетрії. Існують прості форми двох видів.

Загальна проста форма виходить, якщо вихідна грань знаходиться у довільному положенні відносно елементів симетрії, тобто поза елементами симетрії або не утворює з однотипними елементами симетрії однакових кутів.

Часткова проста форма виходить, якщо вихідна грань розташовується перпендикулярно чи паралельно осям або площинам симетрії, а також коли ця грань перетинає елементи симетрії під однаковими кутами. В октаедрі, наприклад, грань перетинає усі осі симетрії четвертого порядку під кутом 45°.

В кожному точковому виді симетрії можлива одна загальна і декілька часткових простих форм. Число граней загальної простої форми називається *кратністю точкового виду*, а число граней часткової простої форми – *кратністю його підвиду*. Кратність точкового виду визначається числом граней, які можна отримати, подіявши на одну грань усіма елементами симетрії, що входять до найбільш високосиметричного класу даної сингонії. Усі інші класи цієї сингонії є підвидами найбільш високосиметричного. Їх кратності і визначають часткові прості форми найбільш високосиметричного класу.

Крім того, прості форми бувають *відкритими* і *закритими*. Перші зустрічаються в сингоніях нижчої категорії, а другі – у середній і вищій категоріях. Закриті форми повністю охоплюють простір, тому кристали з такою формою можуть існувати. Відкриті форми, навпаки, не замикають повністю частину простору, і тому під час кристалізації можуть виникати лише у комбінаціях з іншими простими формами.

6. Елементи симетрії дисконтинуума.

Елементи симетрії дисконтинуума включають в себе всі елементи симетрії континуума. Але, на відміну від суцільного середовища, у цій системі з'являється новий елемент симетрії – трансляція.

Трансляцією називається елемент симетрії, дія якого полягає в тому, що в результаті переносу вздовж певного напрямку на певну характерну лише для даного дисконтинуума відстань нескінченна просторова ґратка суміщається сама з собою.

Осьовими трансляціями називаються переноси вздовж осей кристалографічних систем координат: $\vec{a}$ – вздовж *OX*, $\vec{b}$ – вздовж *OY* і $\vec{c}$ – вздовж *OZ*.

У просторовій ґратці існує нескінченна множина напрямків, при переносі вздовж яких нескінченна ґратка суміщається сама з собою. Довжина переносу вздовж кожного напрямку, як правило, неоднакова. Але для того, щоб з одного вузла за допомогою нескінченного числа переносів отримати нескінченну просторову ґратку, немає необхідності задавати трансляції вздовж усіх напрямків. Достатньо задати систему трансляцій.

Системою трансляцій називається мінімальна сукупність трансляцій, за допомогою яких можна отримати всі вузли просторової ґратки, яка відповідає даному дисконтинуума.

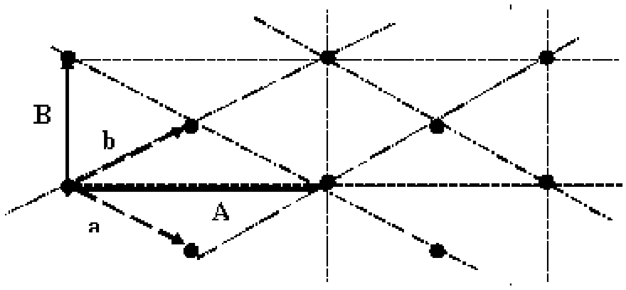


Рис. 5. Системи трансляцій.

Мінімальне число трансляцій залежить від вибору осей кристалографічної системи координат. Наведену на рис. 5 систему точок можна отримати з одного вузла двома шляхами:

- вибрати дві найкоротших відстані $\vec{a}$ та $\vec{b}$, і вони складуть систему трансляцій, але при цьому вибрана система координат буде непрямокутною;
- вибрати ортогональну систему координат з осьовими трансляціями $A=\vec{a}+\vec{b}$ і $B=\vec{a}-\vec{b}$, але для побудови всієї ґратки потрібно вводити додаткову трансляцію $\left(\vec{A}+\vec{B}\right)\big/2$, яка дорівнює трансляції $\bar{b}$, і тоді мінімально необхідна система трансляцій буде складатися з трьох трансляцій.

В кристалах може бути обмежене число систем трансляцій:

- примітивна: $\left(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}\right)$ – позначається **P**;
- базоцентровані: $\left(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{b}+\vec{c}}{2}\right)$ – **A**, $\left(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{a}+\vec{c}}{2}\right)$ – **B**, $\left(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}\right)$ – **C**;
- об'ємноцентрована $\left(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{a}+\vec{b}+\vec{c}}{2}\right)$ – **I**;
- гранецентрована $\left(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}, \frac{\vec{b}+\vec{c}}{2}, \frac{\vec{a}+\vec{c}}{2}\right)$ – **F**.

Якщо *однократно* застосувати до одного вузла всю систему трансляцій і з'єднати усі утворені вузли, то вийде певний паралелепіпед – елементарна комірка, яка має свій базис.

Базисом елементарної комірки називається мінімально необхідне число вузлів, з яких за допомогою *лише трьох осьових трансляцій* $\left(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}\right)$ можна побудувати всю просторову ґратку дисконтинуума.

Число можливих у кристалічних ґратках базисів, так само, як і число систем трансляцій обмежене:

- P:[[000]] – примітивний;
- C:[[000]];[[1/2 1/2 0]], B:[[000]];[[1/2 0 1/2]], A:[[000]];[[0 1/2 1/2]] – базоцентровані;
- I:[[000]];[[1/2 1/2 1/2]] – об'ємноцентрований;
- F:[[000]];[[1/2 1/2 0]];[[1/2 0 1/2]];[[0 1/2 1/2]]– гранецентрований.

Поняття базису елементарної комірки і системи трансляцій дуже близькі, але вони не співпадають. Близькість полягає в тому, що і те, й інше задає просторову ґратку. Основна відміна полягає у такому:

- якщо задана система трансляцій, то просторова ґратка будується лише з одного, так званого нульового вузла [[000]] за допомогою усіх трансляцій, які входять у систему;
- якщо заданий базис, то просторова ґратка будується з усіх вузлів базису, тобто з певної елементарної комірки, але за допомогою тільки осьових трансляцій.

Якщо узяти базис і однократно подіяти на всі його вузли осьовими трансляціями, то у загальному випадку виходить паралелепіпед зі сторонами, які дорівнюють трьом осьовим трансляціям. У кристалічних ґратках число таких паралелепіпедів обмежене. Можливі лише 14 видів, які отримали назву комірок Браве. Справа в тому, що за міркуваннями можливої симетрії не в кожній з 7 сингоній можливі усі системи трансляцій або усі базиси. Розподіл 14 типів комірок Браве за сингоніями наведений у табл. 6.

Таблиця 6

Розподіл 14 типів комірок Браве за сингоніями

Сингонія	**Можливі типи комірок Браве**	**Кристалографічні системи координат**
Триклинна	P	$\alpha \neq \beta \neq \gamma, a \neq b \neq c$
Моноклінна	P, C	$\beta \neq \alpha = \gamma = 90°,$ $a \neq b \neq c$
Ромбічна	P, C, I, F	$\alpha = \beta = \gamma = 90°,$ $a \neq b \neq c$
Тригональна (ромбоедрична)	R	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°,$ $a = b = c$
Тетрагональна	P, I	$\alpha = \beta = \gamma = 90°,$ $a = b \neq c$
Гексагональна	P	$\alpha = \beta = 90° \neq$ $\gamma = 120°, a = b \neq c$
Кубічна	P, I, F	$\alpha = \beta = \gamma = 90°,$ $a = b = c$

Як уже було відмічено, всі елементи симетрії континуума входять до набору елементів симетрії дисконтинуума. Трансляція $\vec{t}$ також є елементом симетрії, оскільки геометричне перетворення переносу приводить до суміщення, але вже не замкнених геометричних тіл, а нескінченних просторових ґраток. Взаємодія трансляції з елементами симетрії континуума приводить до появи додаткових елементів симетрії: *площин ковзного відбиття* $(\vec{t} + m)$ та *гвинтових осей симетрії* $(\vec{t} + L_n)$.

Площиною ковзного відбиття називається елемент симетрії, дія якого полягає у дзеркальному відображенні відносно площини з подальшим зсувом вздовж неї на певну характерну відстань, після чого нескінченна система точок суміщається сама з собою.

Площини ковзного відбиття розділяються за величиною і напрямком зсуву на:

- звичайні:
  - *a* – зсув на $a/2$ вздовж площин, перпендикулярних осям *OY*, *OZ*;
  - *b* – зсув на $b/2$ вздовж площин, перпендикулярних осям *OX*, *OZ*;
  - *c* – зсув на $c/2$ вздовж площин, перпендикулярних осям *OX*, *OY*;

- діагональні *n*, зі зсувом вздовж $\frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}$ або $\frac{\vec{b}+\vec{c}}{2}$, або $\frac{\vec{a}+\vec{c}}{2}$;
- діагональні *d*, зі зсувом вздовж $\frac{\vec{a}+\vec{b}}{4}$, або $\frac{\vec{b}+\vec{c}}{4}$, або $\frac{\vec{a}+\vec{c}}{4}$.

Дія площини ковзного відбиття типу a показана на рис. 6. Пунктиром позначені проміжні стадії симетричного перетворення.

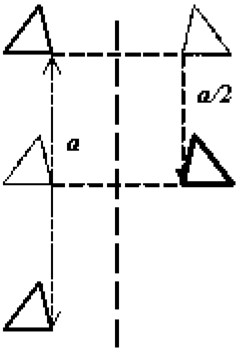


Рис. 6. Дія площини ковзного відбиття типу a.

Зверніть увагу, що подвійна дія площини ковзного відбиття на відміну від звичайної площини симетрії приводить не до повернення фігури у вихідний стан, а зсовує її вздовж площини на цілу трансляцію $\vec{t} = \vec{a}$.

Позначення площин симетрії залежать від положення і величини зсуву. На рис. 7 наведені прийняті позначення.

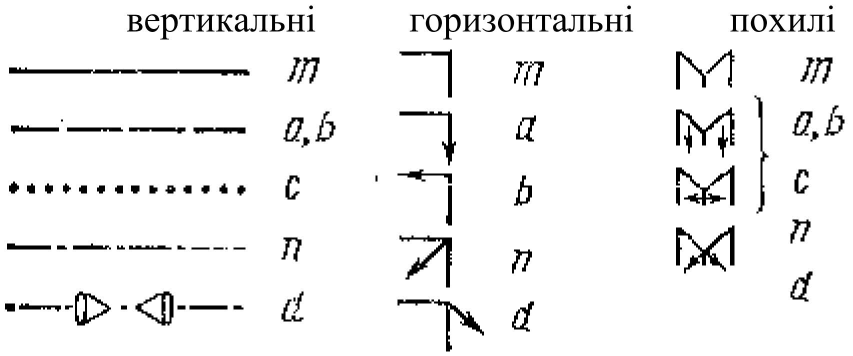


Рис. 7. Прийняті позначення площин симетрії.

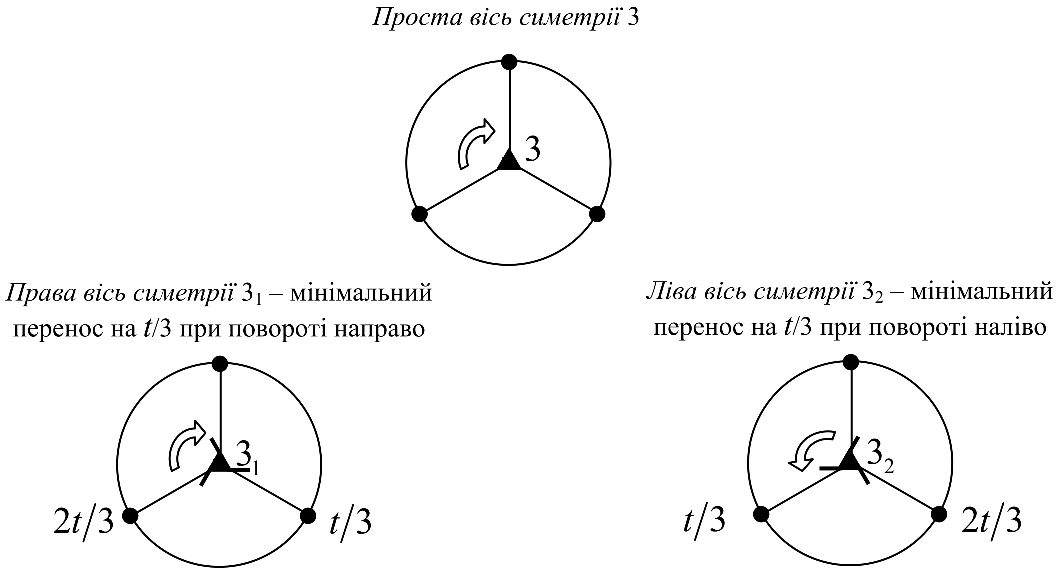
Гвинтовою віссю називається елемент симетрії, дія якого полягає у повороті навколо осі на певний кут з подальшим зсувом вздовж неї на частину трансляції, кратну порядку осі, після чого нескінченна система точок суміщається сама з собою.

Можливий порядок осей такий самий, як і в континуумі. Позначення гвинтових осей існують лише в інтернаціональній символіці: N_n, де: N – порядок осі; n – число часток t/N, на яке відбувається зсув після повороту на елементарний кут осі.

Усі гвинтові осі діляться на:

- нейтральні, коли $N/n = 2$, – це $2_1, 4_2$ і 6_3;
- ліві, коли $N/n < 2$, – це 3_2, 4_3, 6_4 і 6_5;
- праві, коли $N/n > 2$, – це 3_1, 4_1, 6_1 і 6_2.

Позначення та дію гвинтових осей розглянемо на прикладі ряду осей третього порядку. Правила позначення гвинтових осей симетрії наведені на рис. 8.



Проста вісь симетрії 3

Права вісь симетрії 3_1 – мінімальний перенос на $t/3$ при повороті направо

Ліва вісь симетрії 3_2 – мінімальний перенос на $t/3$ при повороті наліво

Рис. 8. Дія та правила позначення гвинтових осей симетрії (на прикладі осей третього порядку).

7. Додавання елементів симетрії дисконтинуума.

Так само, як і у випадку елементів симетрії точкових видів, взаємодія двох елементів симетрії нескінчених фігур приводить до виникнення третього елемента. Результат цієї взаємодії визначають такі теореми.

Теорема 1 про послідовне відбиття в двох паралельних площинах. Послідовне відбиття у двох паралельних площинах симетрії рівносильне трансляції з параметром, що дорівнює подвоєній відстані між площинами.

Обернена теорема. Будь-яку трансляцію можна замінити двома послідовними відображеннями у паралельних площинах симетрії, віддалених одна від одної на відстань, що дорівнює половині параметра трансляції.

Доведення обох теорем ілюструється рис. 9.

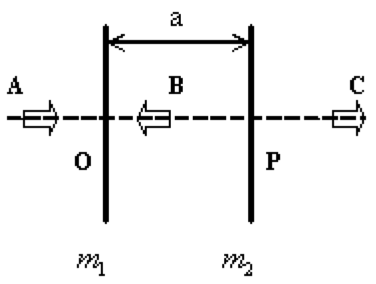


Рис. 9. До доведення теореми 1.

Дійсно, відстань $AC = 2a$. Це випливає з властивості площини дзеркального відображення, оскільки $AO = OB$ і $BP = PC$, тому $AC = AO + OB + BP + PC = 2a = t$.

Теорема 2 про площину симетрії і перпендикулярну до неї трансляцію. Сума площини симетрії і перпендикулярної до неї трансляції є така ж площина симетрії, паралельна вихідній і віддалена від неї на половину трансляції.

Ця теорема доводиться на основі першої. Згідно з першою теоремою, трансляцію $\vec{t}$ можна замінити відображенням у двох паралельних площинах, які віддалені одна від одної на відстань *t/2*. За одну з площин можна вибрати задану в умові теореми площину m_1. Тоді, $m_1 + t = m_1 + (m_1 + m_2) = m_2$, оскільки $m_1 + m_1 = 1$. Це означає, що подвійне відображення в одній і тій самій площині не змінює положення точки чи фігури, тобто діє як вісь симетрії першого порядку. Зверніть увагу, що у кристалографії два протилежних дії дають не нульовий, а одиничний результат.

Доведена теорема справедлива і для будь-якої площини ковзного відбиття.

Теорема 3 про площину симетрії і похилу до неї трансляцію. Сума площини дзеркального відбиття і похилої до неї трансляції є площина ковзного відбиття, паралельна вихідній і віддалена від неї на половину перпендикулярної складової трансляції, з величиною ковзання, що дорівнює вертикальній складовій трансляції.

Іншими словами, якщо трансляція діє під кутом α до площини симетрії, то породжувана площина знаходиться від породжувальної на відстані, що дорівнює $t\sin\alpha/2$. Величина ковзання вздовж нової площини дорівнює $t\cos\alpha$.

Для пояснення цієї теореми звернемося до рис. 10.

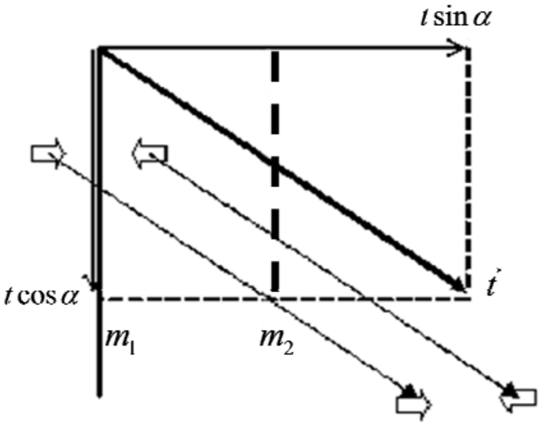


Рис. 10. Ілюстрація до теореми 3.

Після побудов, пов'язаних з дією площини m_1 і трансляції $\vec{t}$ видно, що знову отримані фігури пов'язані певною площиною m_2. Тип породжуваної площини m_2 залежить від типа породжувальної площини і від набора осьових трансляцій.

Теорема 4 про відображення в двох перетинних площинах симетрії. Відбиття у двох перетинних площинах симетрії можна замінити обертанням навколо осі, що збігається з лінією їх перетину, і елементарним кутом повороту, який дорівнює подвоєному куту між площинами. Причому, якщо серед породжувальних є площини ковзного відбиття, то породжена вісь може бути гвинтовою.

Розглянемо два приклади: 1) площина дзеркального відображення m і площина ковзного відбиття c, які перетинаються під кутом 45°.

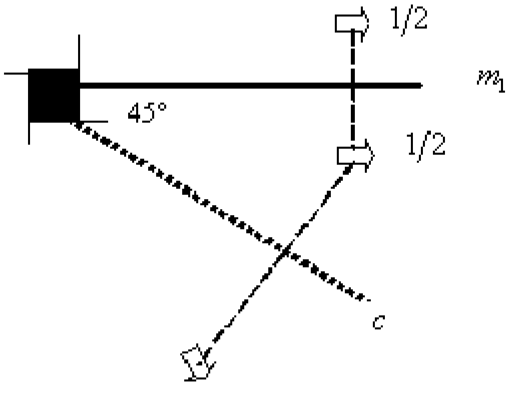


Рис. 11. Ілюстрація до теореми 4.

Після послідовного відображення у площинах m і c фігура у вигляді стрілки переходить у положення, яке пов'язано з вихідним положенням гвинтовою віссю симетрії. Тому лінія перетину цих площин є правою гвинтовою віссю четвертого порядку.

2) площини ковзного відбиття c_1 і c_2, які перетинаються під кутом 90°.

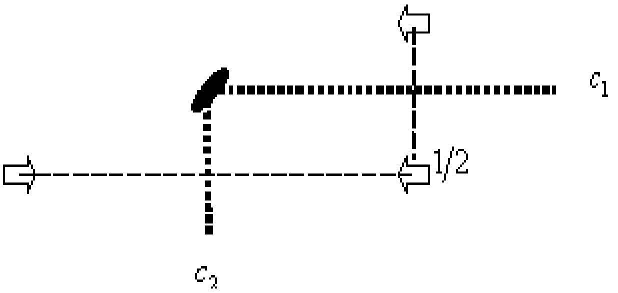


Рис. 12. Ілюстрація до теореми 4.

Лінія перетину цих площин виявляється звичайною віссю симетрії другого порядку.

Обернена теорема. Просту чи гвинтову вісь симетрії завжди можна замінити двома площинами дзеркального чи ковзного відбиття, які перетинаються під кутом, що дорівнює половині елементарного кута повороту осі.

Теорема 5 про вісь симетрії і перпендикулярну до неї трансляцію. Сума осі симетрії і перпендикулярної до неї трансляції є така ж вісь симетрії, паралельна вихідній і віддалена від неї на відстань, що дорівнює $t/2\sin(\alpha_N/2)$ в напрямку, що становить з трансляцією кут $90° - \alpha_N/2$, де α_N – елементарний кут повороту осі симетрії.

Розглянемо приклад осі симетрії 2 і перпендикулярної до неї трансляції.

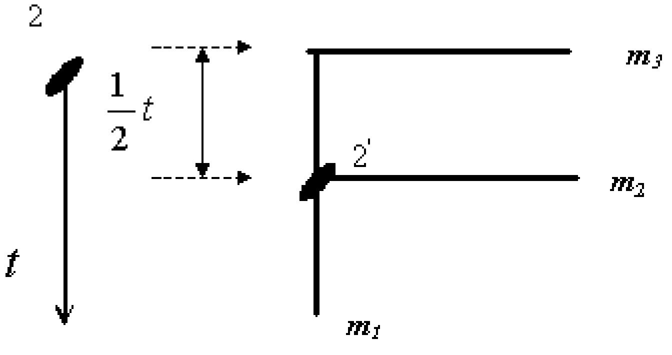


Рис. 13. Ілюстрація до теореми 5.

За теоремою 4 вісь симетрії можна замінити двома перетинними площинами: $2 = m_1 + m_2$.

За теоремою 1а трансляцію можна замінити двома паралельними плоскостями: $t = m_2 + m_3$.

В результаті отримуємо новий перетин, який можна представити як вісь. Оскільки кути перетину однією площиною двох інших паралельних площин однакові, то знов отримана вісь того ж порядку, що і породжувальна:

$m_1 + m_2 = 2'$. Ця вісь лежить вздовж напрямку, що становить з трансляцією кут $90° - 180°/2 = 0°$ на відстані $\frac{t}{2\sin 180°/2} = \frac{t}{2}$.

8. Просторові види симетрії.

Взаємодія 32 наборів елементів симетрії точкових видів зі жмутками трансляцій, які визначаються 14 типами комірок Браве, дає різноманітну кількість просторових видів симетрії, число яких все ж обмежене і дорівнює 230.

Просторовим видом симетрії називається повна сукупність елементів симетрії, можливих у певній нескінченній, правильній і періодичній системі точок, яка задовольняє вимоги до просторової ґратки. Нагадаємо ці вимоги:

- простір заповнюється рівними, однаково орієнтованими і суміжними вздовж рівних граней паралелепіпедами.
- простір повинен заповнюватися цими паралелепіпедами без проміжків.

Точкові і просторові види тісно пов’язані між собою. Цей зв’язок проявляється у тому, що:

- за просторовим видом завжди можна встановити відповідний йому точковий вид. Для цього потрібно забрати усі трансляції, і замінити площини ковзного відбиття та гвинтові осі на звичайні площини і осі;
- один точковий вид розщеплюється на декілька просторових видів, при додаванні до елементів симетрії точкового виду жмутків трансляцій, які визначаються можливими у даній сингонії типами комірок Браве.

Просторовий вид симетрії визначається двома складовими: набором елементів симетрії та числом симетрично еквівалентних позицій – ***правильною системою точок***.

Символ просторового виду записується з урахуванням правил розташування елементів, які для кожної сингонії свої. Цей символ складається з чотирьох позицій. Не всі позиції є обов’язковими. Схема розташування елементів у символі наведена на рис. 14.

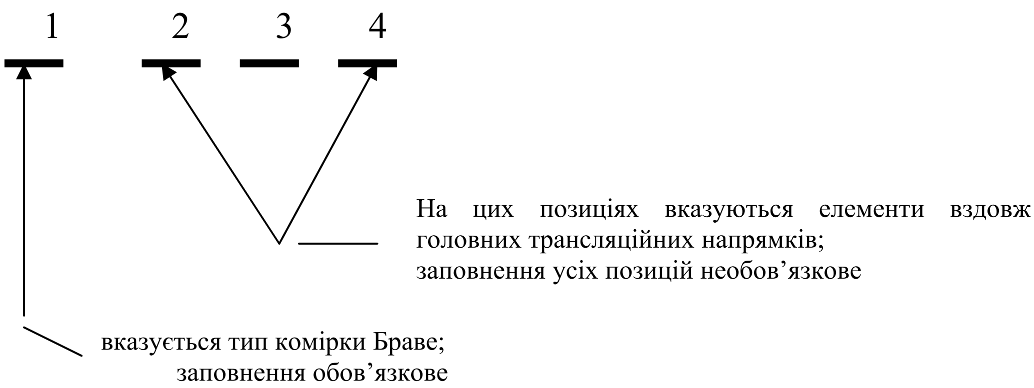


Рис. 14. Схема розташування елементів у символі просторового виду.

У кожній сингонії є свої головні трансляційні напрямки. Вибір головних трансляційних напрямків для кожної сингонії здійснюється згідно з табл. 7.

Таблиця 7

Вибір головних трансляційних напрямків

Сингонія	**Головні трансляційні напрямки**
Триклинна	немає
Моноклінна	[010] – *b*
Ромбічна	[001] – *c*; [010] – *b*; [100] – *a*;
Тригональна	[001] – *c*; [010] – *b*; $[1\bar{1}0]$ – *(a-b)*
Тетрагональна	[001] – *c*; [010] – *b*; $[1\bar{1}0]$ – *(a-b)*
Гексагональна	[001] – *c*; [010] – *b*; $[1\bar{1}0]$ – *(a-b)*
Кубічна	[001] – *c*; [111] – *a*+*b*+*c*; $[1\bar{1}0]$ – *(a-b)*

9. Правильні системи точок.

Правильною системою точок називається сукупність точок, які отримуються в результаті дії усіх елементів симетрії просторового виду на одну довільну точку.

Кратністю правильної системи точок називається число точок, які входять у систему. Кратність залежить від розташування породжувальної точки. Можливі два положення точок:

- поза елементами симетрії – *система точок загального положення* (у кожному просторовому виді можлива лише одна така система точок);
- на елементах симетрії – *система точок часткового положення* (у кожному просторовому виді можливі декілька таких систем точок).

Положення точки визначає число її ступенів свободи. Число ступенів свободи – це число координат точки, які можна змінювати без якісної зміни положення точки.

Точка поза елементами симетрії має три ступені свободи, оскільки можна змінити три координати x, y, z, при цьому точка знову буде лежати поза елементами симетрії.

Точка на площині має два ступені свободи. У неї один ступінь, якщо вона на осі симетрії, і нуль степенів свободи, якщо вона знаходиться в точці перетину осі симетрії та площини симетрії.

Правильна система точок характеризує просторове розташування структурних одиниць кристала (центрів мас атомів чи молекул), які можливі у відповідному просторовому виді симетрії. Знання правильних систем точок дозволяє визначити число атомів різного сорту, яке можна розмістити всередині елементарної комірки. Атоми різного сорту не можуть розташовуватися в точках однієї правильної системи тому, що вони пов'язані між собою симетричними перетвореннями.

Припустимо, що якому-небудь просторовому виду симетрії відповідає три правильні системи точок: одна загального положення і дві – часткового. Тоді хімічні сполуки, що складаються з чотирьох різних елементів, не можуть кристалізуватися у ґратку, яку описує цей просторовий вид. Кристали речовин, які складаються з одного, двох чи трьох елементів, можуть мати таку симетрію. При цьому у трьохелементних кристалах існує лише одна можливість розташування атомів у ґратці. У двоелементних таких можливостей три, в точках правильних систем загального положення і однієї з двох систем часткового положення, або лише в точках двох систем часткового положення. И, нарешті, для елементарних кристалів розглядуваного просторового виду існує лише три види можливих кристалічних ґраток, кожна з яких відповідає одній з трьох правильних систем точок.

Правильні системи точок співвідносяться з просторовими видами симетрії так само, як прості форми з точковими видами симетрії.