Дәріс-9.
Кристалдар құрылымы симметриясының трансляциялық элементтері- шексіз фигуралардың симметриясының элементтері. Симметрияның кеңістіктік топтары (трансляция, жылжымалы шағылу жазықтығы, бұрандалы ось)

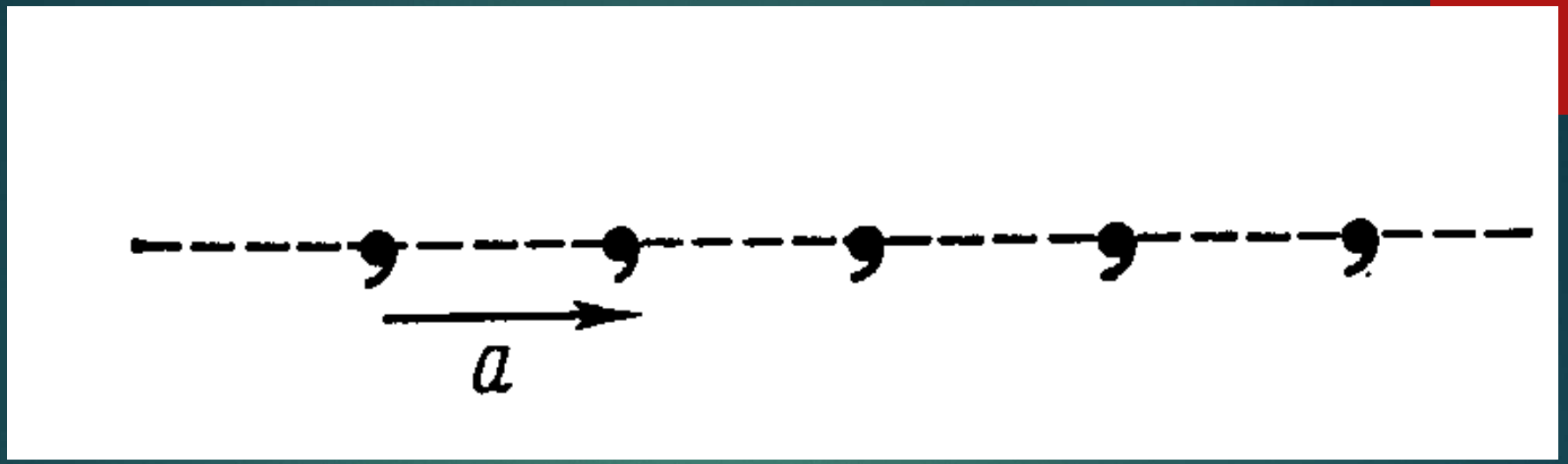
Дәріскер: х.ғ.к., доцент

Кудьярова Ж.Б.

Дәрістің мақсаты: студенттерді симметрияның шексіз құрылымының симметриялық элементтерімен (трансляция, жылжымалы шағылу жазықтығы, бұрандалы ось) таныстыру және симметрияның кеңістік топтарын шығарудағы трансляцияның ролін айқындау.

Дәрісте шексіз құрылым элементтері ретінде трансляция, жылжымалы шағылу жазықтығы, бұрандалы ось, олардың түрлері мен әрекеті қарастырылады.

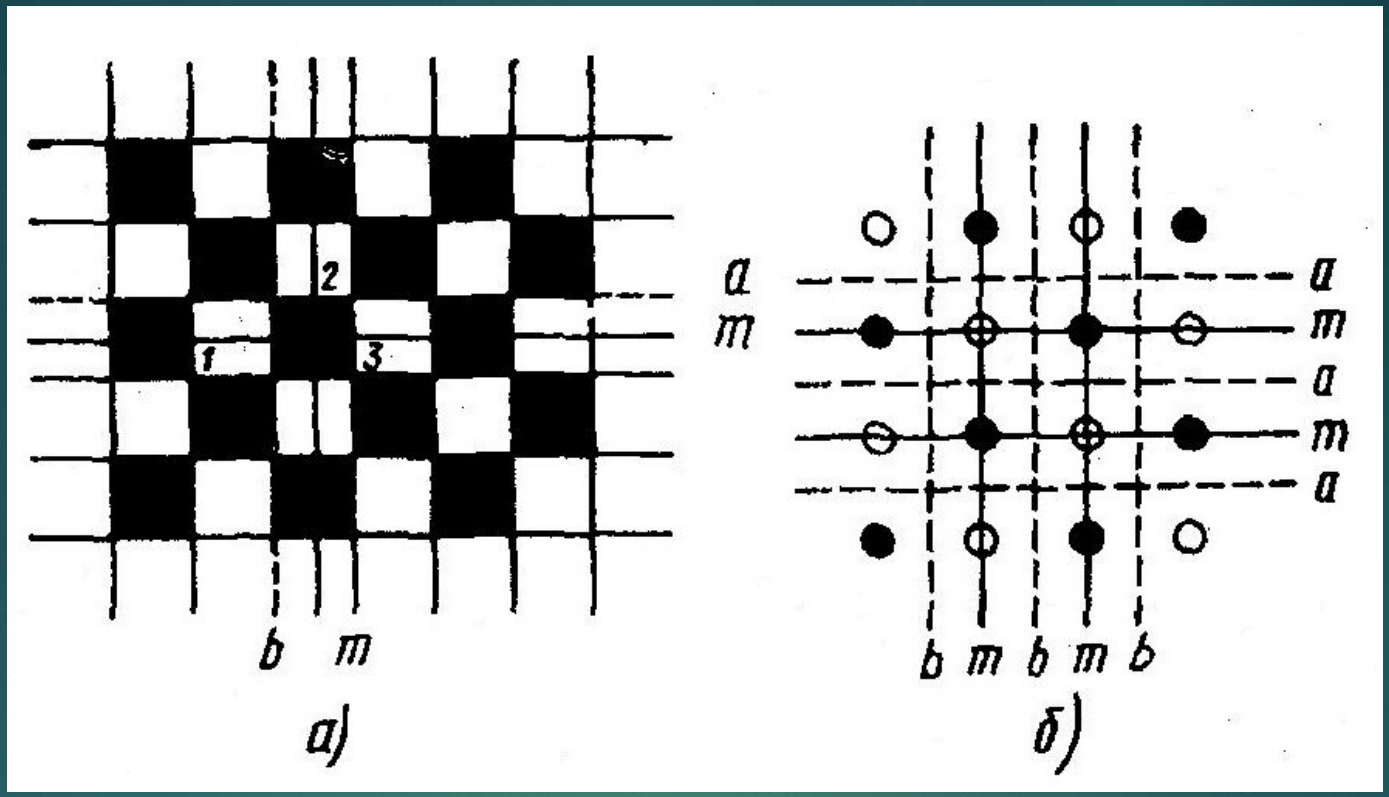
- Кристалдық құрылымның негізгі қасиеті және оның кеңістік торын сипаттайтын – шексіз қайталаным: яғни тордың кез келген екі түйінін трансляция көмегімен бір-бірімен біріктірілуі.
- Көпқырлылардағыдай, құрылымдарда симметрия жазықтығы, қарапайым және 1, 2, 3, 4 және 6-шы ретті инверсиялық өстер болады. Бірақ бұдан басқа тек кристалдық құрылымдарда мүмкін болатын симметрия элементтері бар. Олар шексіз қайталанатын, өзара симметриялы түрлендірулермен байланысты қатарлар, торшалар, бөлшектерден тұратын торлар ретінде қарастырылады. Шексіз фигураларға тән негізгі симметрия элементі трансляция болып табылады (1сурет), яғни шексіз қайталанатын белгілі бір ара қашықтыққа параллель тасымалдау. Оны трансляция периоды деп атайды.



- Сурет 1 - а трансляциялы симметриялы шексіз қатар

- Трансляцияның симметрия жазықтықтарымен және өстерімен бірігуі симметрияның тағы екі жаңа элементін береді – ***сырғымалы кескіндеу жазықтығы және винтті симметрия өсі.***
- Сырғымалы кескіндеу жазықтығы дегеніміз бірге әрекет ететін симметрия жазықтығы және оған параллель трансляция жиынтығы. Бұл кезде тасымалдау трансляция периодының жартысына тең шамаға орындалады.

- Сырғымалы кескіндеу жазықтығының әрекетін шахмат тақтайшасы өрнегінің мысалында қарастырайық (сурет 2а), 1 ақ текшені өзіне ұқсас 2 ақ текшемен біріктіру үшін 1 текшені оның үстінде орналасқан қара текшенің орнына көшіріледі және содан кейін ғана сызба жазықтығына перпендикуляр b жазықтығында кескінделеді немесе керісінше, алдымен b жазықтығында кескіндеп, содан соң b/2-ге көшіріледі. Мұндай b/2-ге бірлескен тасымалдауда және b жазықтығында кескіндеуде тек 1 текше ғана 2 текшемен бірігіп қоймай, 2-текше де 3-ші текшенің орнын басады және бүкіл шексіз тартылған шахматты өрнек өзімен өзі бірлеседі. Сырғымалы компоненті a/2 болатын сырғымалы кескіндеудің ұқсас жазықтықтары a сызығының бойымен өтеді. m сызығының бойымен әдеттегі симметрия жазықтықтары өтеді: шахматты өрнек бүтіндей өзімен өзі жазықтықтарды қосымша трансляциясыз кескіндеу кезінде бірлеседі. a,b,m жазықтықтарының саны шексіз (егер шахмат өрнегін шексіз деп санағанда).

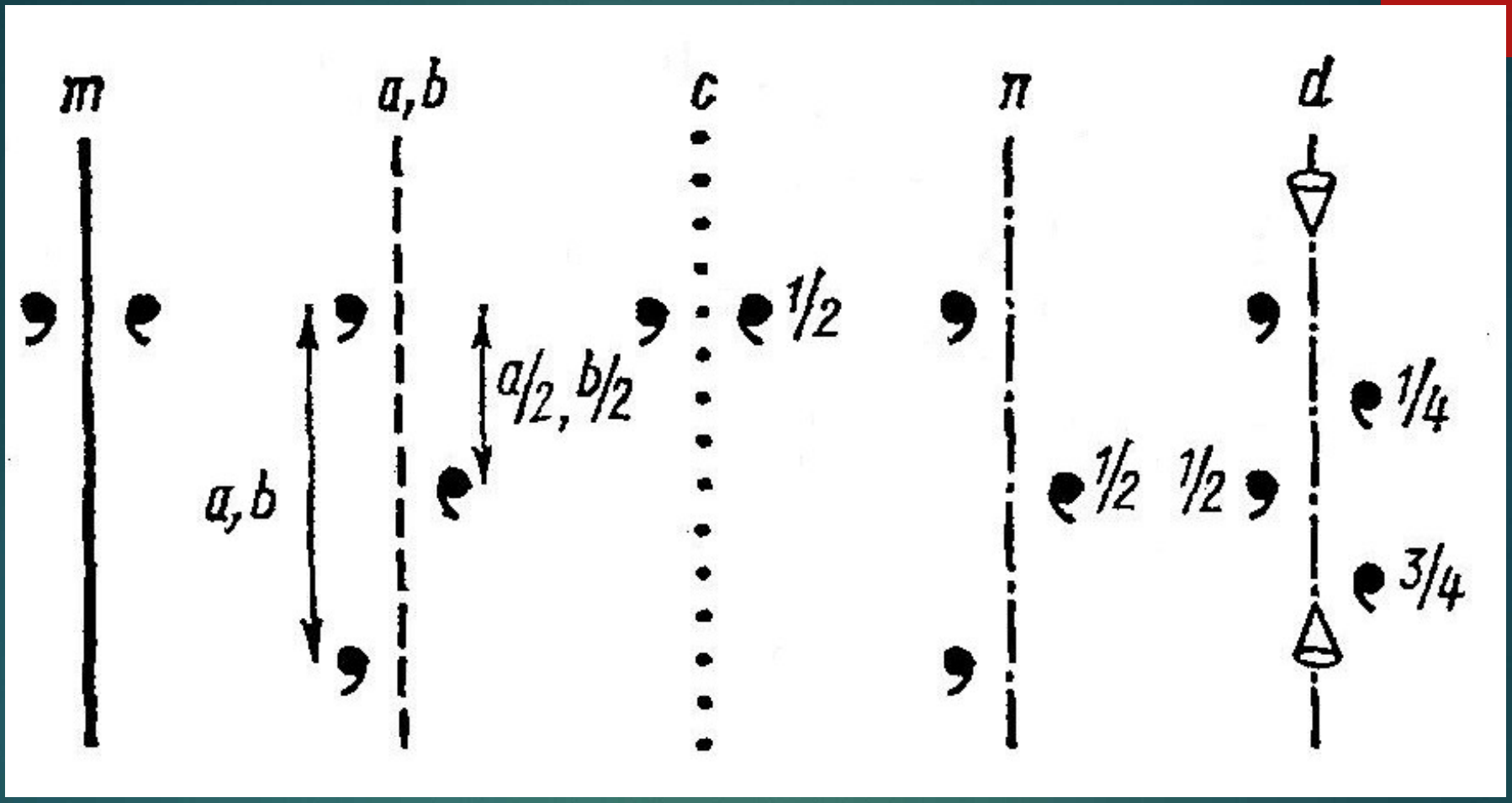


Сурет 2 – m симметрия жазықтығы және
a, b сырғымалы кескіндеу жазықтықтары

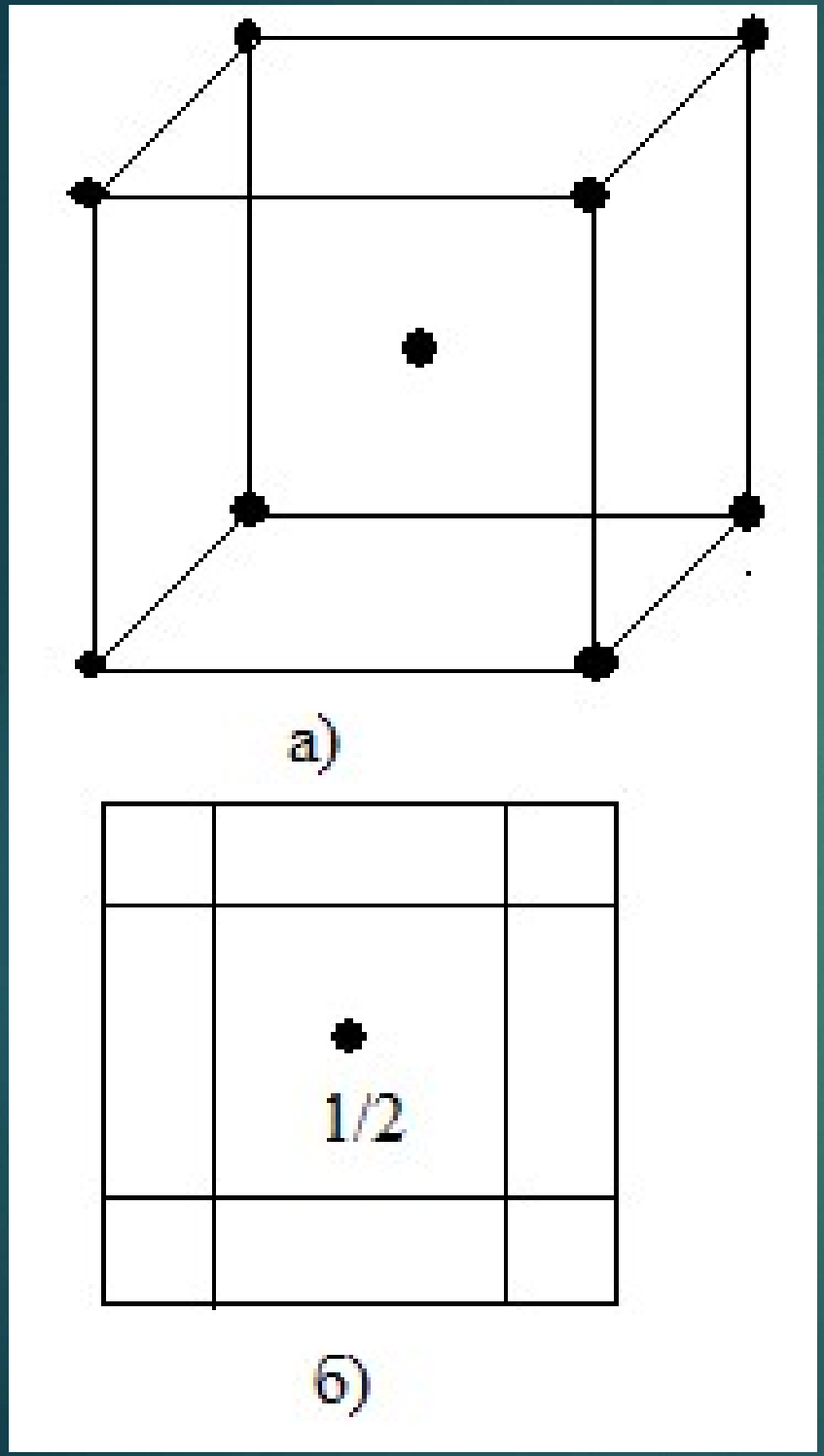
а – шахматты тақта өрнегінде;

б - NaCl құрылымының жазық торшасы

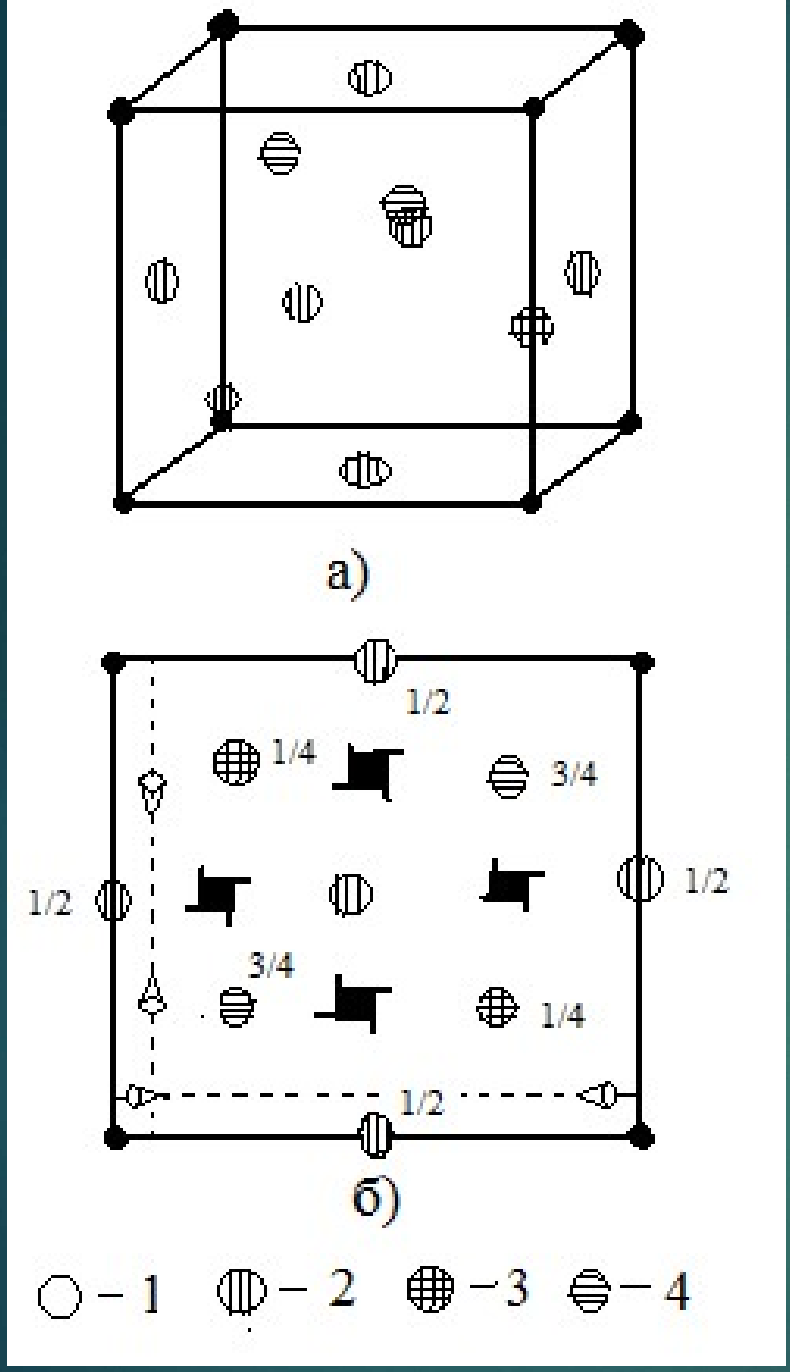
- Осындай сырғымалы кескінделу жазықтығын NaCl құрылымының жазық торшасынан табуға болады (сурет 2б); Na ионы (қара шеңбер) басқа Na ионымен, егер оны b сырғымалы кескінделу жазықтығында кескіндеп және жазықтық бойымен b/2-ге ауыстырсақ немесе оны a/2-ге ауыстырсақ бірігеді. Мұндай түрлендірулер кезінде барлық қалған Na иондары және барлық Cl иондары (ақ шеңбер) симметриялық түрде бір-бірімен бірігеді. 2б суретте NaCl құрылымының тек бір ғана жазық торшасы көрсетілген. Бұл құрылымды кеңістікте қарастыра отырып, осыған параллель сызба (чертеж) жазықтығының үстінде және одан соң да осындай торшаларды шексіз қайталануын көзге елестету керек. Сонда тағы бір сырғымалы кескінделу жазықтығы пайда болады – c типті жазықтық: ол сызба жазықтығына перпендикуляр және ондағы тасымалдану XY жазықтығына нормаль Z өсінің бойымен трансляцияның ½ периодына өтеді.
- Сырғымалы кескінделу жазықтықтарын шартты түрде пунктирлі немесе штрих пунктирлі сызықтармен кескіндейді және a, b, c символдарымен белгілейді. Сырғу X, Y, Z өстері бойымен бағытталғанда оның шамасы a/2, b/2, c/2-ні құрайды.



Сурет 3 –m симметрия жазықтығының және a, b, c, n, d сырғымалы кескінделу жазықтығының әрекеті



Сурет 5 - Көлемцентрлік кубты) ұяшық (а) және оның (001) жазықтығына проекциясы (б



Сызбада қарапайым көріну үшін тек екі d жазықтығы көрсетілген; осы жазықтықтарға параллель болатын жазықтықтар әрбір ¼ ұяшық параметрі сайын қайталанады. Әртүрлі шеңберлермен бірдей атомдар белгіленген:

1 – ұяшық төбелерінде;

2 – жақ орталарында;

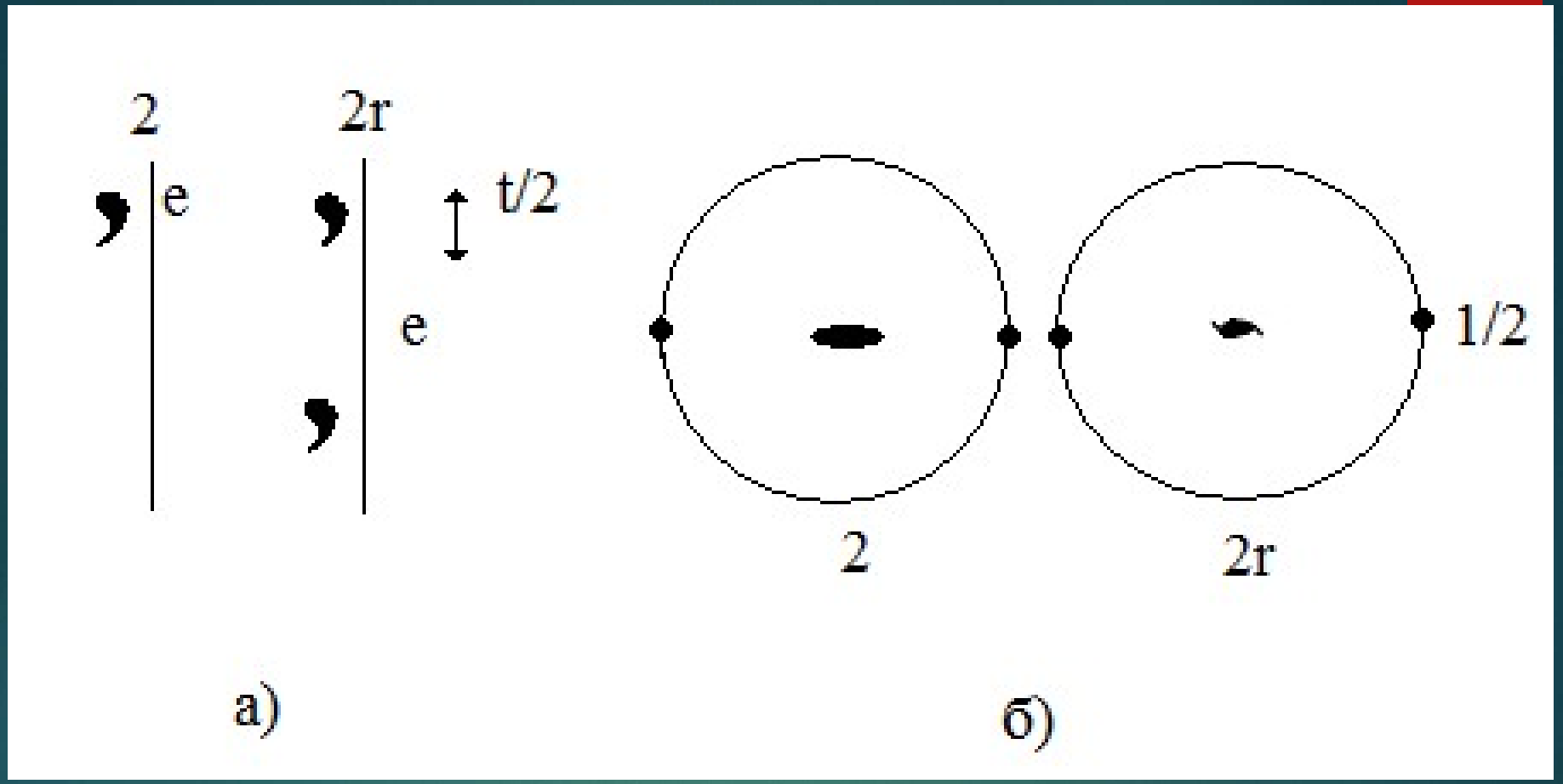
3 – ¼ биіктіктегі квадрант жұптарының орталарында;

4 – ¾ биіктіктегі квадранттардың қарама-қарсы жұптарының орталарында орналасқан атомдар

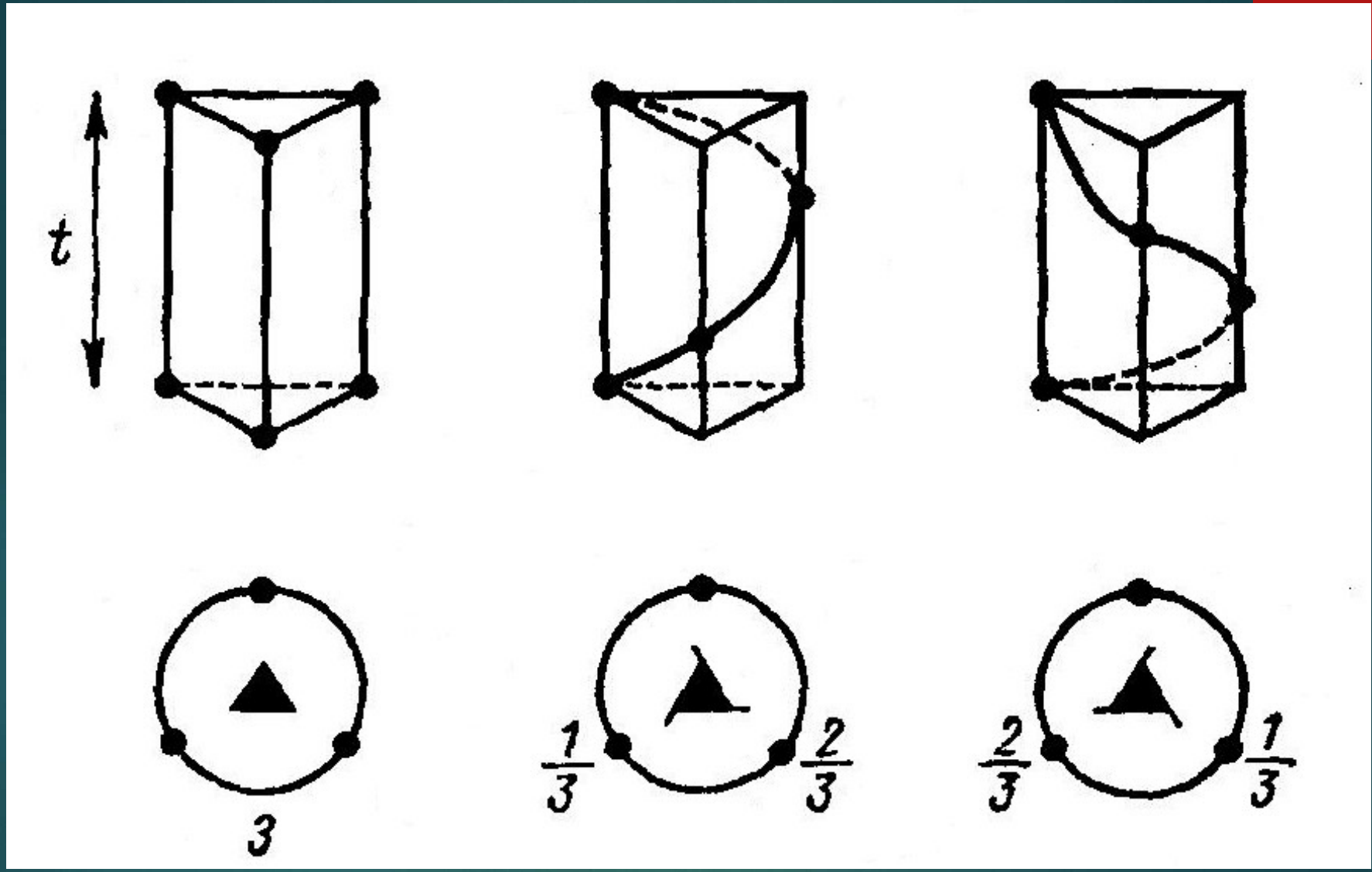
Сурет 6– Алмаз құрылымының элементарлы ұяшығы (а) және оның (001) жазықтығына проекциясы (б)

- ***Симметрияның винтті өсі*** дегеніміз симметрия өстерінің және оған параллель бірігіп әрекет ететін тасымал жиынтығы.
- Симметрияның винтті өстерін шырша шишкаларының қабыршақтарының орналасуымен салыстыруға болады. Шеңберлі гайкалы винтте шексіз ретті винтті симметрия өсі бар, ал алтықырлы гайкасы бар винтте – винтті өс алтыншы ретті. Қарапайым инверсионды және айналы – бұрылмалы өстермен салыстырғанда кристалдық құрылым симметриясына винтті өстер тек қана екіншілік, үштік, төрттік және алтылық болып келеді.
- Винтті өстерді оң және сол винтті өстерге бөледі. Оң винтті өс жағдайында өс бойымен орын ауыстыру сағат тілі бойынша айналумен қосарланған, ал сол винтті өстер жағдайында сағат тіліне қарсы. Винтті өс екі санмен белгіленеді, мысалы: 4_1. Үлкен сан өстің ретін көрсетеді. Индексте көрсетілген сан ¼ дегенді білдіреді, яғни өс бойымен тасымалдану шамасын көрсетеді.

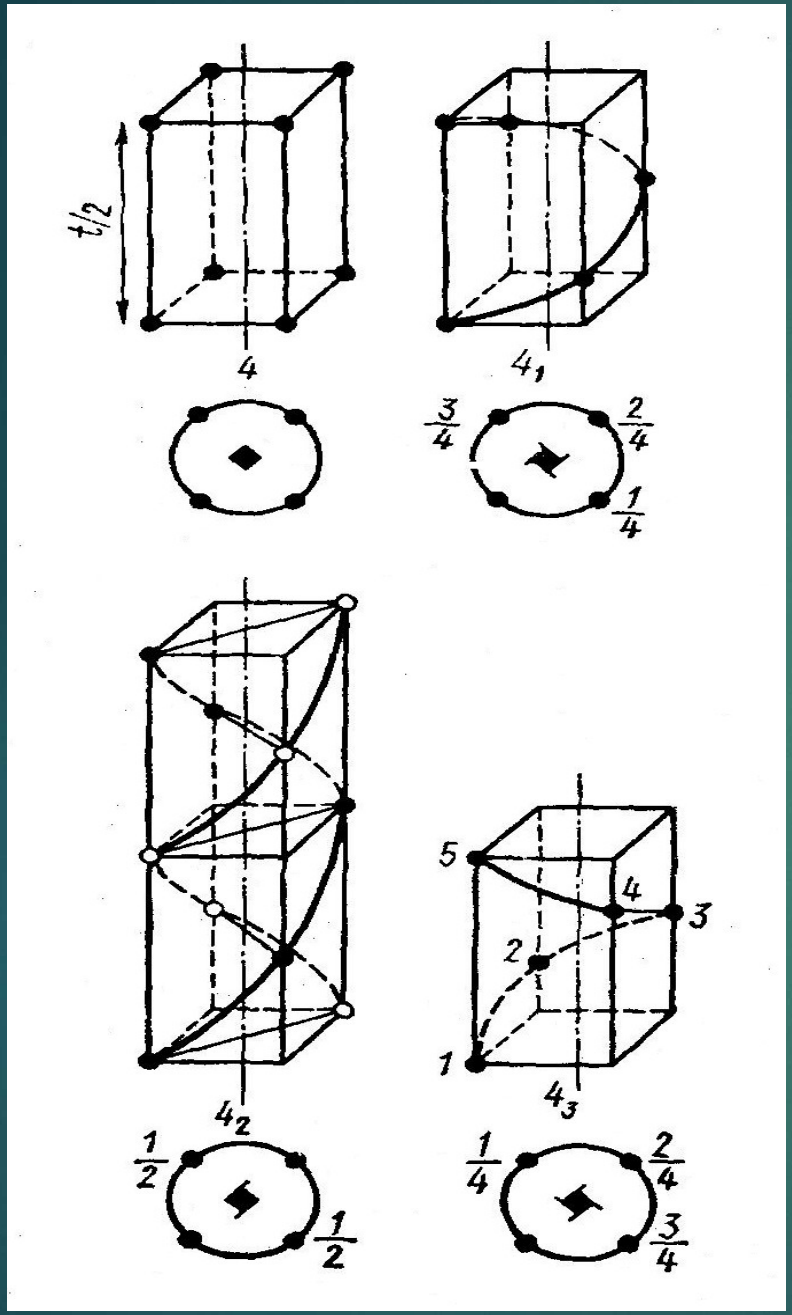
- 7 а суретте қарапайым бұрылу өсі 2 және екінші ретті винтті өстің 2_1 жеке жағдайда, яғни өс сызба жазықтығында жатқан кезіндегі әрекеттері салыстырылған. 2_1 винтті өстің әрекеті 180^0-қа бұру арқылы өс бойымен t/2 шамасына тасымалдаудан тұрады, мұндағы t – шамасы болуы мүмкін емес, өйткені 180^0-қа келесі тасымалдау, яғни толыө айналым кезінде орын алмастыру трансляцияға тең болуы тиіс. Екінші ретті винтті өс үшін оң және сол айналымдар бір нәтижеге алып келеді, яғни оң 2_1 сол 2_1-ге эквивалентті, басқаша айтқанда 2_1 өсі бейтарап.
- Сызба жазықтығына перпендикуляр болатын 2_1 өстің маңында айналдырған кезде фигура сызба жазықтығында қалмайды, ол өс бойымен ½ трансляция периодына ығысады, және ½ деп белгіленген (сурет 7б).



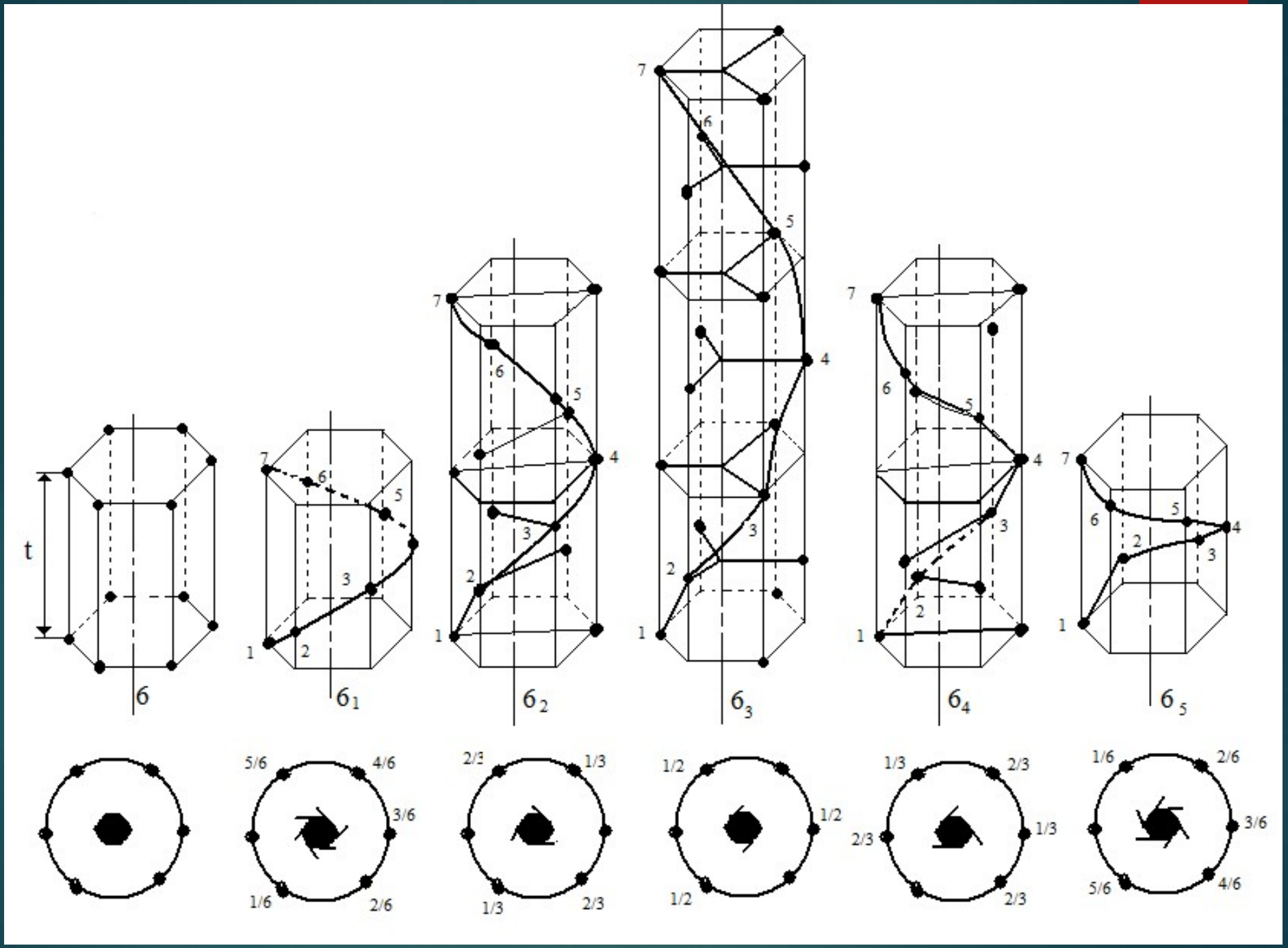
Сурет 7– сызба жазықтығына қатысты орналасқан 2 айналмалы симметрия осі және 2_1 – винтті симметерия осьтерінің әрекеті
а – жазықтықтың өзінде; б - перпендикуляр



Сурет 8 - 3 айналмалы симметрия осі мен 3_1 және 3_2 винтті симметерия осьтерінің әрекеті



Сурет 9 – Симметрия осьтерінің әрекеті 4 айналмалы симметрия осі мен 4_1, 4_2 және 4_3 винтті симметерия осьтерінің әрекеті



Сурет 10 - Симметрия осьтерінің әрекеті

Бақылау сұрақтары:

- Кристалдар құрылымы симметриясының трансляциялық элементтерін сипаттаңыз.
- Симметрияның кеңістіктік топтарын талқылаңыз.
- Трансляцияны түсіндіріңіз.
- Жылжымалы шағылу жазықтығы, бұрандалы осьтерді сипаттаңыз, әрекеттерін түсіндіріңіз.

Әдебиеттер:

- Современные методы кристаллохимического прогноза: учебно-методическое пособие / Н.Н Еремин., Е.И. Марченко, Т.А. Еремина. – М.: «КДУ», 2024. – 114 с.
- Пущаровский Д.Ю. Минералогическая кристаллография. – М.: Геокарт, 2020 г. - 342 с.
- Абдулкаримова Р.Г., Кудьярова Ж.Б. Кристаллохимия, Алматы. - 2015. – 158 с.