Дәріс - 10.
Федоровтың 230 кеңістіктік торлары туралы түсінік. Кеңістіктік тор мен симметрияның жабық операцияларының үйлесімділігі

Дәріскер: х.ғ.к., доцент

Кудьярова Ж.Б.

- **Дәрістің мақсаты:** студенттерді Федоровтың 230 кеңістіктік топтарымен таныстыру, кеңістік топтарды нүктелік топтармен салыстырып бағалауды үйрету.

- Дәрісте 230 кеңістік топтардың ашылуы, дұрыс нүктелер жүйесі, шекті және шексіз құрылымдарды салыстыру, кеністік топтардың белгіленуі қарастырылады.

- Симметрияның кеңістік тобы дегеніміз кристаллдық құрылымның барлық мүмкін болатын элементтерінің жиынтығы.
- Симметрияның кеңістік тобы кристалл құрылымының симметриясын сипаттайды, ал симметрияның нүктелік тобы кристаллдың сыртқы формасының симметриясын және оның физикалық қасиеттерін сипаттайды.
- Әрбір нүктелік топқа бірнеше кеңістік топтар сәйкес келеді. Кристалл симметриясының кеңістік тобынан оның нүктелік тобын алу оңай. Ол үшін барлық трансляцияларды ойша жойып жіберу керек, яғни сырғымалы кескіндеу жазықтығын айналы жазықтыққа, ал винтті осьтерді симметрияның бұрылу осьтеріне айналдырып, содан соң барлық қалған симметрия элементтерін бір нүктеде қиылыспайтындай етіп ауыстыру қажет.
- Нүктелік топтардан барлық оған сәйкес келетін кеңістік топтарын шығару күрделі міндет болып табылады. Мысалы, егер нүктелік топқа 3 және 2 өстер кіретін болса, онда кеңістік топта бұл осьтер 3, 3_1, 3_2, 2 және 2_1 және олардың бірлескен түрінде бола алады.

- Осылайша кристаллдың құрылым симметриясының 230 кеңістік топтары немесе Федоровтың 230 симметрия тобы шығарылады.
- 230 кеңістік топтарын 1890-1894 жж. бір уақытта және бір-бірінен тәуелсіз түрде Е.С. Федоров және А. Шенфлис шығарған.
- Кеңістік топ симметрия элементтерінің жиынымен ғана емес, сонымен бірге симметриялық эквивалентті орналасулар санымен де сипатталады.

- *Дұрыс нүктелер жүйесі* дегеніміз бір-бірімен кеңістік топтың симметриялық түрленулері арқылы байланысқан симметриялық эквивалентті орналасулар (нүктелер) жиынтығы. Дұрыс нүктелер жүйесі бір нүктеден кеңістік топқа тән барлық симметрия операцияларының көмегімен қайталау арқылы алуға болады.
- Кеңістік топ үшін дұрыс нүктелер жүйесі деген түсінік нүктелі топтардағы қарапайым формалар түсінігімен бара тең. Дұрыс нүктелер жүйесі кристаллдап құрылымдық бірліктердің кеңістікте орналасуының геометриялық заңдарын сипаттайды.

- Дұрыс нүктелер жүйесін білу элементарлы ұяшыққа орналастыруға болатын әртүрлі типті атомдар санын анықтау үшін қажет. Дұрыс жүйенің барлық нүктелері кеңістік топ симметриясына түрлендірулері арқылы бір-бірімен бірігетін болғандықтан, әртүрлі типті атомдар бір жүйенің орнын баса алмайды.
- Қарапайым формалардағыдай, дұрыс нүктелер жүйесі үшін жалпы және жеке жүйелер түсінігі тән. Егер бастапқы нүкте симметрия элементтерінің тым болмағанда біреуінде жатса немесе бірдей симметрия элементтерінен теңдей ара қашықтықта тұрса жеке дұрыс нүктелер жүйесі алынады. Ал, егер бастапқы нүкте (демек, барлық қалған нүктелер) симметрия элементтерінің ешқайсысымен жанаспаса және бірдей симметрия элементтерінен теңдей емес ара қашықтықта жатса, онда жалпы дұрыс нүктелер жүйесі алынады.
- **Дұрыс нүктелер жүйесінің еселігі** дегеніміз бір-біріне симметриялық түрде эквивалентті болатын элементарлы ұяшықтың нүктелер саны. Еселік қарапайым формадан жақтар санына балама болып келеді. Жалпы дұрыс нүктелер жүйесінің үш еселік жекемен салыстырғанда жоғары.

Шекті фигуралар (көпқырлылар)	Шексіз фигуралар (құрылымдар)
Берілген нүктелер (жақтар)	Берілген нүктелер (құрылымдық бірліктердің орталықтары)
Қарапайым форма	Дұрыс нүктелер жүйесі
Қарапайым формалар (жеке және жалпы)	Дұрыс нүктелер жүйесі (жеке және жалпы)
Жақтар саны (симметриялық эквивалентті жазықтықтар саны), нүктелік топтың реті	Нүктелер еселігі (элементарлы ұяшық көлемінде симметриялық эквивалентті орналасулар саны)

- Кеңістік топтарда белгілеу үшін халықаралық белгілерді және Шенфлис белгілерін пайдаланады.
- Халықаралық белгіде кеңістік топты сипаттау үшін бірінші орында әрқашан Бравэ торының типін білдіретін әріп тұрады, одан әрі – әрқайсысы белгілі орында симметриялық туындау элементтері орналасады. Жазудың ретін бұзу белгінің мағынасын өзгертіп жібереді.
- Егер бір бағытта айналы кескіндеу және сырғымалы кескіндеу жазықтығы да бар болса, онда топтың белгісіне қарапайым жазықтықтың m символы енгізіледі. Егер бір бағытта жазықтар да, осьтер де бар болса, белгілеуде жазықтық көрсетіледі. Егер қандай да бір орналасуда симметрия элементі жоқ болса, онда 1 санын жазады (мысалы, ***P312, P3$_1$12***).

- Кеңістік топты анықтағанда және жазғанда координатта және диагональді симметрия элементтерін ажырату маңызды, себебі олар әртүрлі симметрия элементтерін тудырады.

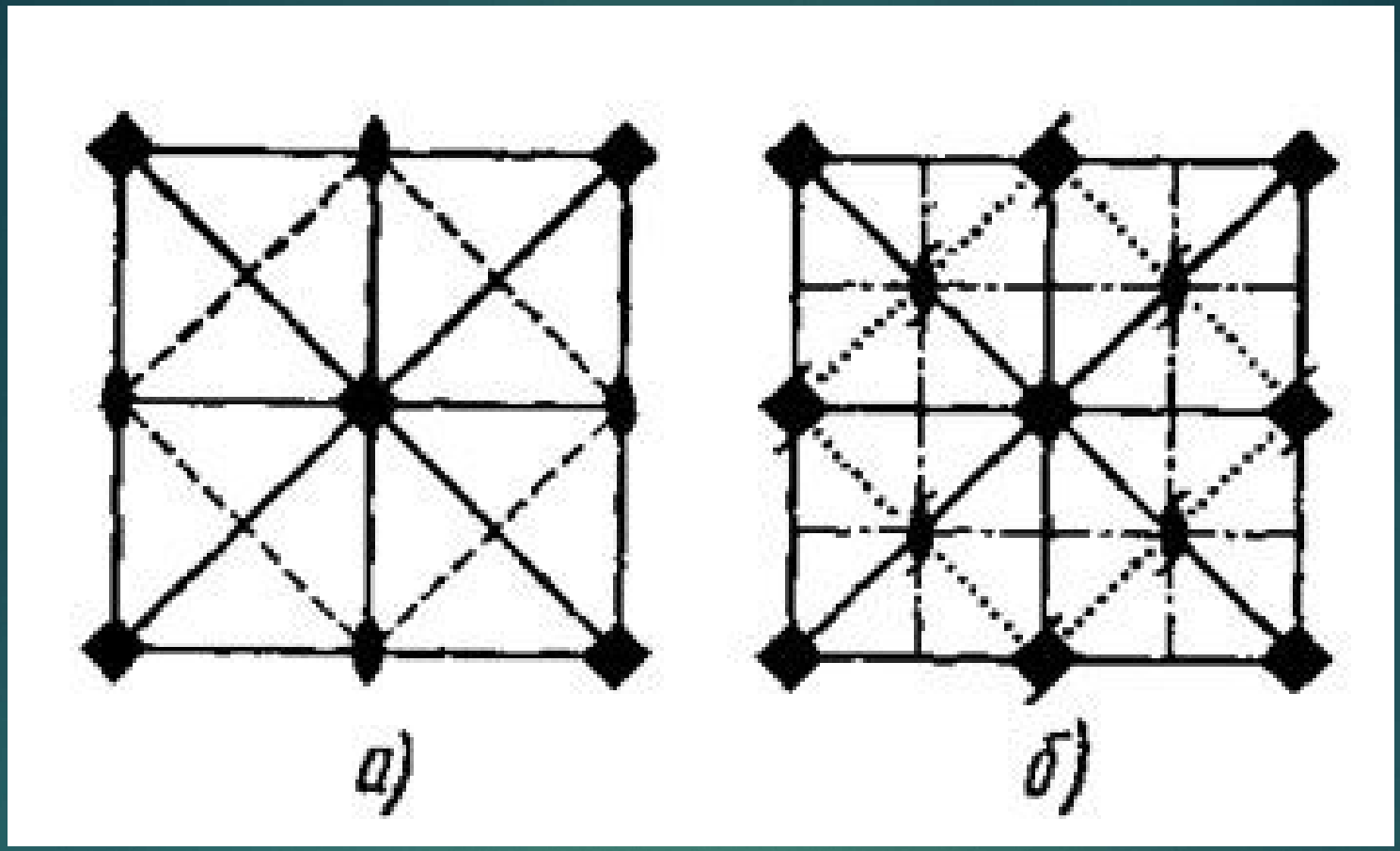
Кеңістік топтардың халықаралық символдарын белгілеу ережесі 6-кестеде келтірілген.

Кесте 6. Кеңістік топтар символдарын жазу ережесі

Сингония	Символдағы орынның реті			
	1-ші	2-ші	3-ші	4-ші
Триклинді	Бравэ торының типі	Кездесетін симметрия элементі	-	-
Моноклинді		2 немес 2_1 осьтері және оған перпендикуляр жазықтық	-	-
Ромбалық		Перпендикулярлы жазықтық немесе параллельді ось		
		X осі	Y осі	Z осі
Тригональді және гексагональді		Жоғарғы ретті ось және оған перпендикуляр жазықтық	Координатты жазықтық немесе ось	Диагональді жазықтық немесе ось
Тетрагональді				
Кубты		Координатты жазықтық немесе ось	3	Диагональді жазықтық немесе ось

- Кеңістік топтардың қарапайым мысалдарын келтірейік.
- Триклинді сингонияда Бравэнің тек примитивті ұяшығы болады (3 кесте). 1 класында макроскопиялық симметрия элементтерінің ешқайсысы жоқ, қарапайым формалар тек моноэдрлар болып табылады. 1 класс кристаллдарының құрылымында бөлшектер трансляция көмегімен симметриялық түрде қайталанады. Бұл кластың жалғыз кеңістік тобының символы *P1* болады. Символдағы бірлік 1 топта ешқандай симметрия элементтері жоқ екенін көрсетеді (трансляциялардан басқа) көрсетеді.
- Моноклинді сингонияның символдарында инверсия центрі бар кластар үшін Бравэ ұяшығының типін білдіретін әріптен кейін [010] бағытына сәйкес келетін, яғни кристаллографиялық *Y* осі бойымен өтетін осьтің атауы қойылады, содан соң көлбеу сызық көмегімен оған перпендикуляр жазықтық (егер бар болса) көрсетіледі. Мысалы, $P2_1/m$ белгілеуі примитивті моноклинді торда 2_1 винтті ось бар екенін, ал оған перпендикуляр айналы кескінделу жазықтығы m өтетінін көрсетеді.
- Егер моноклинді құрылымда тек бір симметрия элементі бар болса, онда Бравэ ұяшығының типін көрсететін әріптен кейін осы жалғыз симметрия элементі жазылады. Мысалы, Cc белгілеуі моноклинді базоцентрлік ұяшықта [010] бағыттың бойымен сырғымалы кескіндеу жазықтары *C* орналасатынын білдіреді. Моноклинді сингонияда примитивті *(P)* және центрленген *(C)* Бравэ ұяшықтары болуы мүмкін *(4-кестені қараңыз)*.

- Ромбалық сингонияның кеңістік топтарының символдарында Бравэ ұяшығының типін көрсететін әріптен кейін координатты осьтерге перпендикуляр жазықтықтарды немесе осы осьтерге паралель симметрия осьтерін білдіретін әріптер жазылады. Мысалы, *Pnc2* белгілеуі *P*-ұяшықта құрылымда *n* типті жазықтық *X* осіне нормаль және *C* типті жазықтық *Y* осіне, ал олардың қиылысында *Z* осіне параллель 2-лік ось пайда болатынын көрсетеді.
- Тетрагональді сингонияның символдарында 4-лік осьтен соң үшінші орында [100] бағытындағы симметрия элементі көрсетіледі, яғни элементарлы квадрат жағына параллель болатын, ал соңында, яғни төртінші позицияда [110] бағытындағы, яғни элементарлы квадрат диагоналі бойымен өтетін симметрия элементі көрсетіледі.
- Сонымен, *P4mm* символы примитивті тетрогональді ұяшықта *m* жазықтықтары координатты және диагональді бағыттарда өтетіндігін көрсетеді. Координатты жазықтықтар трансляциялармен бірлесіп *m* жазықтығын, ал диагональді – *c* жазықтығын тудырады. *m* және *c* жазықтықтарының қиылысында 2-лік ось пайда болады (30а-сурет).



Сурет 30 – Кеңістік топтар

а) *P4mm* және б) *14mm* кеңістіктік топтар

Сол кластың симметрия элементі *4mm* Бравэнің көлемцентрлік ұяшығының трансляцияларымен бірігіп, анағұрлым күрделі *14mm* кеңістік тобын береді (сурет 30б).

- Кристаллдардың кеңістік тобы рентген құрылымдық талдаудың көмегімен анықталады. Дұрыс нүктелер жүйесін білу элементарлы ұяшықтағы атомдардың координатын табуды жеңілдетеді.
- Кристаллдардың 230 кеңістік топтар бойынша таралуы бірыңғай болмайды. Іс жүзінде зерттелген кристаллдың құрылымдарды көпшілігі 3-4 ондаған кеңістік тобымен сипатталады.

Кристаллическая система (сингония)	Класс симметрии (точечная группа)	Символ Шенфлиса	Международное обозначение
Триклинная	триклино-педиальный (моноэдрический)	$C1$	1
	триклинно-пинакоидальный	C_i	$\bar{1}$
Моноклинная	моноклино-сфеноидальный (диэдрический осевой)	C_2	2
	моноклинно-доматический	C_s	m
	моноклинно-призматический	C_{2h}	2/m
Ромбическая	ромбо-сфеноидальный (ромбо-тетраэдрический)	D_2	222
	ромбо-пирамидальный	C_{2v}	mm2
	ромбо-дипирамидальный (бипирамидальный)	D_{2h}	mmm
Тетрагональная	тетрагонально-пирамидальный	C_4	4
	тетрагонально-дисфеноидальный (тетраэдрический)	S_4	$\bar{4}$
	тетрагонально-дипирамидальный	C_{4h}	4/m
	тетрагонально-трапецоэдрический	D_4	422
	дитетрагонально-пирамидальный	C_{4v}	4mm
	тетрагонально-скаленоэдрический	D_{2d}	$\bar{4}$2m или $\bar{4}$m2
	дитетрагонально-дипирамидальный	D_{2h}	4/mmm
Тригональная	тригонально-пирамидальный	C_3	3
	ромбоэдрический	S_6 (C_{3i})	$\bar{3}$
	тригонально-трапецоэдрический	D_3	32 или 321 или 312
	дитригонально-пирамидальный	C_{3v}	3m или 3m1 или 31m
	дитригонально-скаленоэдрический	D_{3d}	$\bar{3}$m или $\bar{3}$m1 или $\bar{3}$1m
Гексагональная	гексагонально-пирамидальный	C_6	6
	тригонально-дипирамидальный	C_{3h}	$\bar{6}$
	гексагонально-дипирамидальный	C_{6h}	6/m
	гексагонально-трапецоэдрический	D_6	622
	дигексагонально-пирамидальный	C_{6v}	6mm
	дитригонально-дипирамидальный	D_{3h}	$\bar{6}$m2 $\bar{6}$2m
	дигексагонально-дипирамидальный	D_{6h}	6/mmm
Кубическая	тетартоидальный (тритетраэдрический)	T	23
	диплоидальный (дидодекаэдрический)	T_h	m$\bar{3}$
	гироидальный (триоктаэдрический)	O	432
	тетраэдрический (гексатетраэдрический)	T_d	$\bar{4}$3m
	гексаоктаэдрический	O_h	m$\bar{3}$m

Обозначения элементов симметрии по Шенфлису

C – одна ось симметрии

D – группа симметрии с осями 2-го порядка перпендикулярными к основной (вертикальной) оси симметрии.

T, O – оси симметрии кубического класса (тетраэдра и октаэдра).

C_n – одна вертикальная полярная ось симметрии порядка n,

C_{nv} – одна вертикальная полярная ось порядка n и n плоскостей симметрии расположенных вдоль неё,

C_{nh} – одна ось порядка n (неполярная) и плоскость симметрии перпендикулярная к ней

D_n – одна вертикальная ось симметрии порядка n и n перпендикулярных осей симеттрии 2-го порядка,

D_{nh} – одна вертикальная ось симметрии порядка n плоскостей вдоль неё и перпендикулярная ей плоскость симметрии,

S_n – одна вертикальная зеркально-поворотная ось порядка n (иногда применяется обозначение Sni, индекс i обозначает инверсионную ось)

$V=D_2$ – сочетание трех взаимно перпендиклярных осей 2-ого порядка,

$V_h=D_{2h}$ – сочетание трех взаимно перпендикулярных осей 2-ого порядка и плоскостей симметрии перпендикулярных каждой из осей,

$V_d=D_{2d}$ - сочетание трех взаимно перпендикулярных осей 2-ого порядка и диагональных плоскостей симметрии,

T_d – оси симметрии тетраэдра и диагональные плоскости симметрии,

O_h – сочетание осей симметрии октаэдра и координатных плоскостей симметрии

Единственная ось считается осью Z. Если осей несколько, то вертикальной осью считается ось высшего порядка. Добавленные к вертикальной оси плоскости симметрии обозначаются соответственно индеками: v-вертикальные плоскости, h-горизонтальные, d-диагональные.

Символика Германа — Могена

Международная символика (символика Германа-Могена) для обозначения кристаллографических классов (точечных групп) использует следующие правила:

n — ось симметрии n-го порядка.

$\bar{\mathbf{n}}$ — инверсионная ось симметрии n-го порядка.

m — плоскость симметрии.

nm или **nmm**— ось симметрии n-го порядка и n плоскостей симметрии, проходящих вдоль неё.

n/m — ось симметрии порядка n и плоскость симметрии, к ней перпендикулярная.

n3 — ось симметрии порядка n и n осей второго порядка, к ней перпендикулярных.

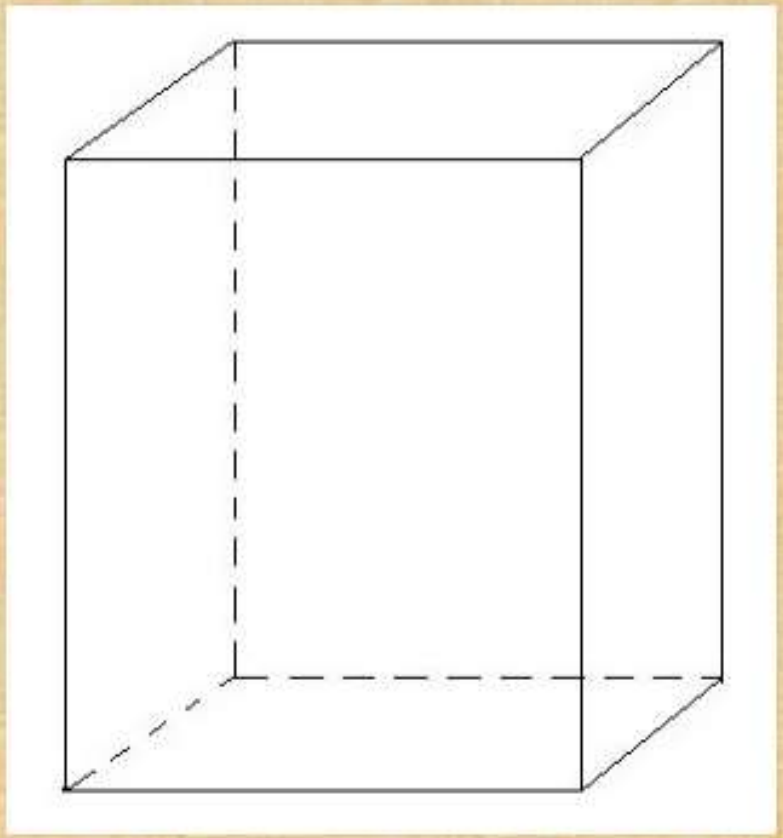
n/mmm — ось симметрии n-го порядка и плоскости параллельные и перпендикулярные к ней.

$\bar{\mathbf{n}}$**m2** или $\bar{\mathbf{n}}$**2m** (**n**— чётное) — инверсионная ось симметрии n-го порядка, **n/2** плоскостей симметрии, проходящих вдоль неё и **n/2** осей второго порядка, к ней перпендикулярных.

$\bar{\mathbf{n}}$**m** (**n**— нечётное) — инверсионная ось симметрии n-го порядка, **n** плоскостей симметрии, проходящих вдоль неё и n осей второго порядка, к ней перпендикулярных.

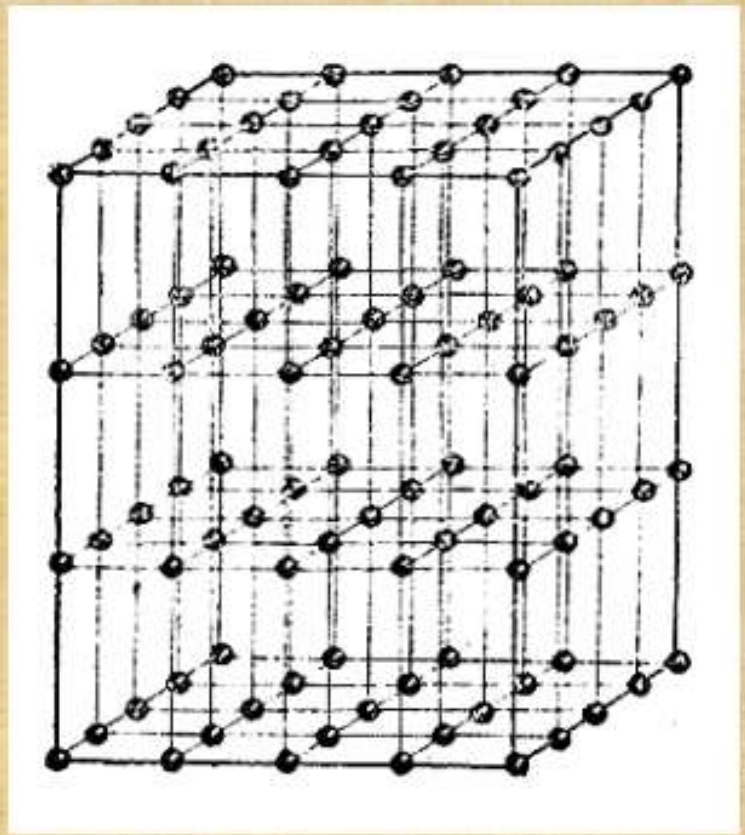
Символ пространственной группы содержит символ решетки Браве (заглавную букву P, A, B, C, I, R или F) и международный символ точечной группы. При этом символы осей и плоскостей симметрии в символе могут изменяться на символы винтовых осей и скользящих плоскостей в соответствии с их наличием в данном конкретном кристаллическом пространстве.

Внешняя форма и внутренняя структура кристалла



Многогранник

Симметрия описывается точечной группой



Кристаллическая решетка

Симметрия описывается пространственной группой

Бақылау сұрақтары:

1. Федоровтың 230 кеңістіктік топтары туралы түсінігін талқылаңыз.
2. Дұрыс нүктелер жүйесіне анықтама беріңіз және оны қарапайым формамен салыстырыңыз.
3. Кеңістік топтарды белгілеу үшін халықаралық белгілерді және Шенфлис белгілерін пайдалануды талқылаңыз.
4. Кеңістік топтар символдарын жазу ережесін түсіндіріңіз.
5. Шекті және шексіз құқрылымдарды салыстырыңыз.

Әдебиеттер:

1. Современные методы кристаллохимического прогноза: учебно-методическое пособие / Н.Н Еремин., Е.И. Марченко, Т.А. Еремина. – М.: «КДУ», 2024. – 114 с.
2. Пущаровский Д.Ю. Минералогическая кристаллография. – М.: Геокарт, 2020 г. - 342 с.
3. Абдулкаримова Р.Г., Кудьярова Ж.Б. Кристаллохимия, Алматы. - 2015. – 158 с.
4. Калистратова, Л. Ф. Физические основы кристаллографии [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Л. Ф. Калистратова ; Минобрнауки России, ОмГТУ. – Электрон. текст. дан. (2,43 Мб). – Омск : Изд-во ОмГТУ, 2020.
5. Кузьмичева Г.М. Основные разделы кристаллографии. – М.: МИТХТ, 2002. – 80 с.