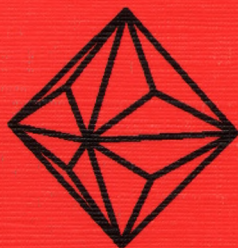


ЗАДАЧИ ПО КРИСТАЛЛОГРАФИИ



ЗАДАЧИ **ПО** **КРИСТАЛЛОГРАФИИ**

Под редакцией
проф. Е. В. Чупрунова и проф. А. Ф. Хохлова

*Рекомендовано Министерством образования
Российской Федерации в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений, обучающихся
по физическим и химическим специальностям*



Москва
Физматлит
2003

ББК 22.37
3 15
УДК 548.0

Рецензенты:

Кафедра кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета МГУ (зав. кафедрой член-корр. РАН *В.С. Урусов*), доктор физико-математических наук профессор *В.И. Симонов*

Коллектив авторов:

ГОЛОВА ЧЕВ Владимир Павлович, САФЬЯНОВ Юрий Николаевич, ЧУПРУНОВ Евгений Владимирович, ФАДДЕЕВ Михаил Андреевич, ХОХЛОВ Александр Федорович

Задачи по кристаллографии: Учеб. пособие для вузов / Под ред. Е. В. Чупрунова, А. Ф. Хохлова.—М.: Издательство Физико-математической литературы, 2003.—208 с.—ISBN 5-94052-066-3

Даны задачи по основным разделам кристаллографии. В начале каждого параграфа приводится обстоятельный разбор решений нескольких типичных задач, содержащий необходимую дополнительную информацию для самостоятельного решения последующих задач. Многие задачи содержат несколько вариантов, что позволяет индивидуализировать задания для студентов. Большая часть задач является оригинальной и отражает опыт авторов по преподаванию кристаллографии для студентов-физиков Нижегородского университета. Некоторые разделы, например операторный метод описания операций симметрии, некристаллографическая симметрия и др., вообще впервые представлены в задачах и упражнениях.

Для студентов физических и химических факультетов университетов, а также других вузов, изучающих дисциплину «Кристаллография».

Учебное издание

ЗАДАЧИ ПО КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Редактор *Е. А. Привалов*
Компьютерная графика *М. В. Ивановский*
Компьютерная верстка *Е. С. Незаева*
Оформление *М. Н. Грицук*

ИД № 01389 от 30.03.2000

Гигиеническое заключение № 77.99.10.953.Д.005466.07.03
от 25.07.2003

Подписано в печать 01.09.2003. Формат 60×90/16.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 13. Уч.-изд. л. 14,3.

Тираж 3000 экз. (1-й завод — 1500 экз.)

Заказ № 235

Издательство Физико-математической литературы
119071 Москва В-71, Ленинский проспект, 15

Отпечатано с готовых диапозитивов

ГП «Облиздат»

248640 г. Калуга, пл. Старый торг, 5

ISBN 5-94052-066-3

© Коллектив авторов, 2003

© Физматлит, 2003

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Глава 1. Геометрия кристаллической решетки	7
1.1. Кристаллографические системы координат, символы узлов, узловых рядов и плоскостей	7
1.2. Обратная решетка и расчетные формулы кристаллографии	11
1.3. Закон зон	15
Глава 2. Кристаллографические проекции	18
2.1. Сферическая проекция	18
2.2. Стереографическая проекция. Сетка Вульфа	24
Глава 3. Точечная симметрия кристаллов	46
3.1. Основные положения теории групп	46
3.2. Операции и элементы симметрии	52
3.3. Матричный метод описания операций симметрии	57
3.4. Точечные группы симметрии	60
3.5. Простые формы кристаллов	69
3.6. Принципы Кюри и Неймана	73
Глава 4. Пространственная симметрия кристаллов	77
4.1. Решетки Бравэ	77
4.2. Операторный метод описания операций симметрии	81
4.3. Операции пространственной симметрии кристаллических структур	84
4.4. Пространственные группы симметрии	87

Глава 5. Некристаллографические и обобщенные группы симметрии	93
5.1. Точечные группы симметрии с единственной осью 5-го, 7-го и более высоких порядков	93
5.2. Икосаэдрические группы симметрии	103
5.3. Черно-белые группы симметрии	113
Глава 6. Основы кристаллохимии	119
6.1. Плотнейшие упаковки	119
6.2. Структурные типы	123
Глава 7. Дефекты в кристаллах	131
7.1. Точечные дефекты	131
7.2. Дислокации в кристаллах	139
ОТВЕТЫ	146
ПРИЛОЖЕНИЯ	184
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	208

ПРЕДИСЛОВИЕ

Кристаллография как учебная дисциплина необходима при подготовке специалистов разных направлений — геологов, химиков, минералогов. Изучение кристаллографии имеет особое значение для профессиональной подготовки физиков, специализирующихся в области физики твердого тела и физического материаловедения. Кристаллография является одной из фундаментальных дисциплин, на которой базируется подготовка современного специалиста по физике конденсированного состояния.

Основы курса кристаллографии, который читается в настоящее время студентам-физикам Нижегородского государственного университета, были заложены академиком Н.В.Беловым еще в конце 40-х годов XX столетия. Опыт преподавания структурной кристаллографии в Нижегородском (Горьковском) университете отражен в ряде работ Н.В.Белова, которые вошли в книгу «Очерки по структурной кристаллографии и федоровским группам симметрии».

Данный курс кристаллографии учитывает достаточно высокий уровень математической подготовки студентов и использует соответствующий математический аппарат — аналитическую геометрию, векторный анализ, матричную алгебру, теорию групп и др.

Лекционные курсы в вузах обычно сопровождаются практическими и семинарскими занятиями, на которых решаются задачи с целью более глубокого усвоения лекционного материала. Не являются исключением и курсы кристаллографии, читаемые в разных вузах. Учебная литература по кристаллографии, которая издавалась в нашей стране, как правило, содержала некоторое количество задач. Наиболее обстоятельными в этом плане являются издания, подготовленные на кафедре кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета МГУ. Естественно, что авторы, наряду с новыми задачами, использовали и задачи, имеющиеся в изданной литературе. В некоторых случаях была использована идея задачи, в других — уточнена постановка задачи применительно к уровню знания студентов. Предполагается, что методика решения задач базируется на разделах математики, которые читаются студентам-физикам.

В 2004 году выходит в свет учебник Е.В.Чупрунова, А.Ф.Хохлова, М.А.Фаддеева «Основы кристаллографии», в котором обобщен опыт преподавания кристаллографии в Нижегородском университете. Предлагаемый читателям задачник является по существу

второй частью учебника. Тематика предлагаемых задач соответствует главам учебника, что делает необязательным теоретическое введение к задачнику. Вместе с тем, в начале каждого параграфа задачника приводится подробный разбор решений нескольких типовых задач, который содержит дополнительную информацию, необходимую для решения задач. Большинство задач содержит несколько вариантов, что позволяет индивидуализировать задания для студентов.

Значительная часть задач, приведенных в данном задачнике, является оригинальной. Некоторые разделы, например, операторный метод описания операций симметрии, некристаллографическая и черно-белая симметрия, вообще впервые систематически представлены в задачах и упражнениях по кристаллографии.

Задачник предназначен прежде всего для студентов физических специальностей, изучающих кристаллографию. Однако можно надеяться, что полезные задачи и методики их решения найдут для себя и студенты других естественно-научных специальностей, а также аспиранты, специализирующиеся в области структурной кристаллографии и физики твердого тела. Авторы будут благодарны всем читателям за высказанные замечания и предложения, которые, несомненно, будут полезны при возможных последующих изданиях и будут учтены в текущей работе со студентами и аспирантами.

Авторы признательны рецензентам данной работы — коллективу кафедры кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета МГУ во главе с членом-корреспондентом РАН профессором В.С.Урусовым, а также заведующему лабораторией рентгеноструктурного анализа Института кристаллографии РАН профессору В.И.Симонову.

Авторы выражают также благодарность преподавателям, аспирантам и всем сотрудникам кафедры кристаллографии и экспериментальной физики ННГУ за помощь в подготовке данного задачника.

Глава 1

ГЕОМЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

1.1. Кристаллографические системы координат, символы узлов, узловых рядов и плоскостей

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1.1. Найти индексы узлового ряда, проходящего через два узла кристаллической решетки с индексами $[[111]]$ и $[[\bar{1}10]]$.

Решение. Для характеристики системы взаимно параллельных узловых рядов используется узловой ряд, проходящий через начало координат $[[000]]$ и ближайший к нему узел, индексы которого и являются индексами узлового ряда. Таким образом, для решения задачи необходимо, используя трансляции решетки, поместить начало координат в один из заданных узлов, например $[[\bar{1}10]]$. При этом индексы узла, в который поместится начало координат, будут $[[000]]$, а индексы другого узла — $[[201]]$. Таким образом, индексы узлового ряда, проходящего через данный узел, будут $[201]$.

1.2. В кристаллическом пространстве задан вектор $\mathbf{R} = \mathbf{a}/4 + \mathbf{b}/3 + \mathbf{c}/2$, где $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ — базисные векторы трансляций. Является ли прямая, параллельная этому вектору, узловым рядом? Найти его индексы.

Решение. Любой вектор задает прямую, проходящую через начало координат, уравнение которой

$$\frac{X}{x_0} = \frac{Y}{y_0} = \frac{Z}{z_0},$$

где X, Y, Z — координаты произвольной точки прямой, а x_0, y_0, z_0 — компоненты вектора. Если эти компоненты являются рациональными числами, то можно подобрать общий множитель, в данном случае это 12, чтобы получить координаты другой точки на этой прямой, причем так, чтобы эти координаты являлись взаимно простыми числами. В нашем случае — это $(3, 4, 6)$. В кристаллической решетке любые точки с целочисленными координатами являются узлами, следовательно, данная прямая — узловой ряд с индексами $[346]$.

1.3. Найти индексы узловой плоскости, проходящей через три узла кристаллической решетки $[[1\ 1\ 0]]$, $[[1\ 0\ 1]]$, $[[0\ 1\ 1]]$.

Решение. Уравнение узловой плоскости имеет вид

$$hu + kv + lw = p.$$

Подставляя в это уравнение поочередно значения индексов узлов, заданных условием задачи, получим систему уравнений

$$h + k = p,$$

$$h + l = p,$$

$$k + l = p,$$

целочисленное решение которой $h = k = l = 1$, $p = 2$. Таким образом, индексы плоскости — $(1\ 1\ 1)$, и это будет вторая плоскость, считая от начала координат. Полагая $p = 1$ и решая ту же систему уравнений, можно убедиться, что ближайшая к началу координат плоскость проходит через узлы $[[1\ 0\ 0]]$, $[[0\ 1\ 0]]$, $[[0\ 0\ 1]]$.

1.4. Имеется кристаллическая решетка с базисом \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} . Записать матрицу перехода к новой кристаллографической системе координат, используя в качестве нового базиса кратчайшие трансляции в направлении узловых рядов с индексами $[1\ 1\ 0]$, $[\bar{1}\ 1\ 0]$, $[0\ 0\ 1]$. Как изменятся индексы узлов и плоскостей при переходе к новому базису? Останется ли новая элементарная ячейка примитивной?

Решение. Векторы нового базиса в базисе \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} имеют вид

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{B} = -\mathbf{a} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{C} = \mathbf{c}.$$

Следовательно, матрица перехода α_{ij} имеет вид

$$\alpha_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

а обратная матрица

$$\beta_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Используя матрицы, запишем индексы произвольного узла $[[U V W]]$ и индексы произвольной узловой плоскости $(H K L)$ в базисе A, B, C через индексы в базисе a, b, c в виде

$$U = \frac{u}{2} + \frac{v}{2}, \quad V = -\frac{u}{2} + \frac{v}{2}, \quad W = w;$$

$$H = h + k, \quad K = \bar{h} + k, \quad L = l.$$

Таким образом, узел $[[010]]$ в базисе A, B, C имеет координаты $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right]\right]$ и, следовательно, новая ячейка центрирована.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1.5. На рис. 1.1 изображен фрагмент бесконечной двумерной атомной сетки с двумя сортами атомов, обозначенных \circ и \bullet . Выбрать в этой сетке произвольную точку и отметить все гомологичные ей точки, т.е. указать решетку. Являются ли атомы \circ и \bullet гомологичными?

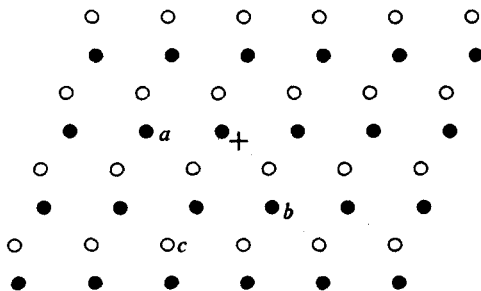


Рис. 1.1. К задаче 1.5

Для данной атомной сетки:

1) Выбрать элементарную ячейку этой решетки несколькими различными способами как в примитивном, так и непримитивном вариантах.

2) Определить, являются ли точки, в которых размещены атомы, узлами решетки при выборе начальной точки, обозначенной $+$. Сформулировать условия, при которых атомы \circ и \bullet размещаются в узлах решетки. Могут ли атомы \circ и \bullet одновременно размещаться в узлах решетки?

3) Провести прямую через атомы, обозначенные на рис. 1.1 буквами a и b . Записать индексы этой прямой при двух различных вариантах выбора элементарной ячейки. Изменяются ли индексы этой прямой при переносе начала координат?

4) Провести прямую через атомы a и c . Сформулировать условия, при которых эта прямая является узловым рядом.

1.6. В кристаллическом пространстве с базисными векторами трансляций \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} задан вектор $\mathbf{R} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}$. Является ли прямая, параллельная этому вектору, узловым рядом, если:

- 1) x , y , z являются рациональными числами;
- 2) хотя бы одно из чисел x , y , z является иррациональным числом?

1.7. Узловой ряд проходит через начало координат и некоторую точку, заданную координатами в виде правильных дробей. Как найти индексы узлового ряда?

1.8. Через две точки (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) кристаллического пространства с некоторым базисом \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} проведена прямая. При каких условиях данная прямая параллельна какому-либо узловому ряду?

1.9. Найти индексы узлового ряда, проходящего через узлы $[[231]]$ и $[[0\bar{1}1]]$.

1.10. Задан узловой ряд $[110]$. Записать индексы нескольких узлов, лежащих на параллельном узловом ряду, проходящем через узел $[[100]]$.

1.11. Решить задачу 1.10 в общем случае, т.е. для узлового ряда $[uvw]$. Записать индексы узлов, лежащих на параллельном узловом ряду, проходящем через узел $[[u_1v_1w_1]]$.

1.12. Найти индексы плоскости, проходящей через три узла кристаллической решетки $[[0\bar{1}1]]$, $[[3\bar{2}0]]$, $[[30\bar{2}]]$.

1.13. Найти индексы узлов кристаллической решетки, лежащих в плоскости (110) , проходящей через начало координат.

1.14. Узловая плоскость отсекает по координатным осям отрезки, равные $2a$, $3b$, c . Каковы ее индексы?

1.15. У некоторого кристалла был изменен базис таким образом, что индексы плоскостей (100) и (010) остались без изменения, а индексы плоскости $(\bar{1}01)$ стали (001) . Какие индексы в новом базисе получили плоскости (011) и (121) ? Какие индексы в новом базисе имеет старая координатная ось x ?

1.16. В кристаллической решетке перешли к новому базису, заданному кратчайшими трансляциями в направлениях узловых рядов $[011]$, $[101]$, $[110]$. Как изменятся при этом индексы узлового ряда $[111]$ и узловой плоскости (111) ?

1.2. Обратная решетка и расчетные формулы кристаллографии

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1.17. В гексагональном кристалле задан вектор обратной решетки $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$. Рассмотреть условия, при которых вектор \mathbf{H} будет параллелен некоторому узловому ряду. Записать компоненты разложения вектора \mathbf{H} по базисным векторам прямой решетки \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} .

Решение. Разложение вектора \mathbf{H} по базисным векторам прямой решетки будет иметь вид $\mathbf{H} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$, где n_1, n_2, n_3 — неизвестные и в общем случае не обязательно целые числа. Для решения задачи необходимо найти связь n_1, n_2, n_3 с h, k, l . Величины h, k, l определяют отрезки, отсекаемые узловой плоскостью с индексами (hkl) на координатных осях, которые могут быть выражены в виде векторов $\mathbf{a}/h, \mathbf{b}/k, \mathbf{c}/l$. Образует векторы $\mathbf{A} = \mathbf{a}/h - \mathbf{c}/l$ и $\mathbf{B} = \mathbf{b}/k - \mathbf{c}/l$, лежащие в плоскости (h, k, l) и составляющие с вектором \mathbf{H} угол 90° . Скалярные произведения $(\mathbf{H}\mathbf{A}) = (\mathbf{H}\mathbf{B}) = 0$, откуда, с учетом масштабных и угловых соотношений гексагональной решетки, получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{a^2}{h}n_1 - \frac{a^2}{2h}n_2 - \frac{c^2}{l}n_3 &= 0, \\ -\frac{a^2}{2k}n_1 + \frac{a^2}{k}n_2 - \frac{c^2}{l}n_3 &= 0. \end{aligned}$$

Решая эту систему уравнений, найдем:

$$\begin{aligned} n_1 : n_2 : n_3 &= \left| \begin{array}{cc|c} \frac{a^2}{2h} & -\frac{c^2}{l} & \\ \frac{a^2}{k} & -\frac{c^2}{l} & \end{array} \right| : \left| \begin{array}{cc|c} -\frac{c^2}{l} & \frac{a^2}{h} & \\ -\frac{c^2}{l} & -\frac{a^2}{2k} & \end{array} \right| : \left| \begin{array}{cc|c} \frac{a^2}{h} & -\frac{a^2}{2h} & \\ -\frac{a^2}{2k} & \frac{a^2}{k} & \end{array} \right| = \\ &= (2h + k) : (2k + h) : 3a^2l/2c^2. \end{aligned}$$

Из этого соотношения следует, что в общем случае n_1, n_2, n_3 не приводятся к взаимно простым числам и, следовательно, вектор обратной решетки $\mathbf{H}(hkl)$ (нормаль к плоскости с индексами (hkl)) не совпадает с узловым рядом. Возможность и степень совпадения определяется величиной c^2/a^2 . Например, если $c^2/a^2 \sim 3/2$, то нормаль к плоскости (hkl) (и соответствующий вектор \mathbf{H}) близка к направлению узлового ряда с индексами $[2h+k, 2k+h, l]$. Полное совпадение имеет место для векторов обратной решетки зоны $(hk0)$, каждый из которых совпадает с узловым рядом $[2h+k, 2k+h, 0]$. Например, координатные векторы обратной решетки (100) и (010) совпадают с направлениями узловых рядов $[210]$ и $[120]$ соответственно. Очевидно и совпадение направлений (001) и $[001]$, т.е. с и \mathbf{c}^* .

1.18. В ромбическом кристалле задан узловый ряд $[uvw]$. Рассмотреть условия, при которых плоскость $h'x + k'y + l'z = 1$, перпендикулярная этому узловому ряду, будет узловой. Определить связь коэффициентов уравнения $h'k'l'$ с индексами $[uvw]$.

Решение. Плоскость $(h'k'l')$ отсекает по координатным осям векторные отрезки a/h' , b/k' , c/l' . Образует векторы $A = a/h' - b/k'$, $B = a/h' - c/l'$, лежащие в этой плоскости. Из условия перпендикулярности вектора $R = ua + vb + wc$ векторам A и B следует $(R, A) = (R, B) = 0$. Составим систему уравнений

$$\frac{a^2u}{h'} - \frac{b^2v}{k'} = 0,$$

$$\frac{a^2u}{h'} - \frac{c^2w}{l'} = 0,$$

из которой имеем

$$\frac{1}{h'} : \frac{1}{k'} : \frac{1}{l'} = b^2c^2vw : a^2c^2uw : a^2b^2uv$$

или

$$h' : k' : l' = a^2u : b^2v : c^2w.$$

Из этого следует, что плоскость $h'k'l'$, перпендикулярная узловому ряду $[uvw]$, вообще говоря, не является узловой, кроме частных случаев координатных направлений и плоскостей $[100] - (100)$; $[010] - (010)$; $[001] - (001)$.

1.19. Рассмотреть условия, при которых в тетрагональном кристалле плоскость (101) составляет равные углы с трансляциями a и c .

Решение. Векторы a и c выразим через индексы соответствующих узловых рядов $[100]$ и $[001]$, а ориентацию плоскости будем характеризовать перпендикулярным к ней вектором обратной решетки $H = a^* + c^*$:

$$\cos(\widehat{Ha}) = \frac{1}{a(a^{*2} + c^{*2})^{1/2}} = \frac{1}{[1 + (a/c)^2]^{1/2}};$$

$$\cos(\widehat{Hc}) = \frac{1}{c(a^{*2} + c^{*2})^{1/2}} = \frac{1}{[1 + (c/a)^2]^{1/2}}.$$

Очевидно, что равенство углов может быть только при $c = a$ и тогда угол равен 45° .

1.20. Для условий задачи 1.4 выразить параметры обратной решетки в новой установке \mathbf{A}^* , \mathbf{B}^* , \mathbf{C}^* через старые параметры a^* , b^* , c^* . Нормальными к каким плоскостям старой установки они являются?

Решение. Используя контрвариантно (по столбцам) матрицу β_{ij} , имеем $\mathbf{A}^* = a^*/2 + b^*/2$, $\mathbf{B}^* = -a^*/2 + b^*/2$, $\mathbf{C}^* = c^*$. Векторы \mathbf{A}^* и \mathbf{B}^* выражаются через новые индексы HKL в виде (100) и (010) . Используя теперь матрицу β_{ij} ковариантно по строкам, выразим старые индексы hkl через новые HKL : $(1/2, 1/2, 0)$ для $\mathbf{A}^*(100)$, $(1/2, -1/2, 0)$ для $\mathbf{B}^*(010)$ и (001) для $\mathbf{C}^*(001)$. Таким образом, \mathbf{A}^* — нормаль к плоскости (110) , \mathbf{B}^* — $(\bar{1}10)$, \mathbf{C}^* — (001) .

1.21. В тетрагональном кристалле задан угол α между гранями (111) и $(\bar{1}\bar{1}1)$. Вычислить отношение параметров c/a .

Решение. Угол между узловыми плоскостями можно представить как угол между соответствующими векторами обратной решетки. Общая формула $\cos(\widehat{\mathbf{H}_1 \mathbf{H}_2}) = (\mathbf{H}_1 \cdot \mathbf{H}_2) / |\mathbf{H}_1| \cdot |\mathbf{H}_2|$. Учитывая масштабные и угловые соотношения тетрагональной ячейки, для векторов обратной решетки с индексами (111) и $(\bar{1}\bar{1}1)$ имеем

$$|\mathbf{H}_1| = |\mathbf{H}_2| = (2a^{*2} + c^{*2})^{1/2} = \{a^{*2}[2 + (c^*/a^*)^2]\}^{1/2},$$

$$(\mathbf{H}_1 \cdot \mathbf{H}_2) = -2a^{*2} + c^{*2} = a^{*2}[(c^*/a^*)^2 - 2],$$

$$\cos \alpha = \frac{(c^*/a^*)^2 - 2}{(c^*/a^*)^2 + 2},$$

откуда

$$\left(\frac{c^*}{a^*}\right)^2 = \frac{2(1 + \cos \alpha)}{1 - \cos \alpha} = \operatorname{ctg}^2 \frac{\alpha}{2}.$$

Отношение параметров элементарной ячейки c и a можно записать в виде

$$\frac{c}{a} = \frac{\operatorname{tg}(\alpha/2)}{\sqrt{2}}.$$

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1.22. В гексагональном кристалле задан узловой ряд $[uvw]$. Рассмотреть условия, при которых перпендикулярная к нему плоскость будет узловой.

1.23. Записать компоненты вектора, перпендикулярного узловой плоскости (hkl) , для ромбического кристалла. Совпадает ли он с узловым рядом?

1.24. Для тетрагонального кристалла показать, что взаимное совпадение векторов прямой и обратной решеток имеет место только для зон плоскостей $(h k 0)$ и направлений с индексами $[h k 0]$, а также $(0 0 1)$ и $[0 0 1]$.

1.25. Показать, что в кубическом кристалле любое направление обратной решетки $(h k l)$ совпадает с узловым рядом прямой решетки $[h k l]$.

1.26. Показать, что в кубическом кристалле любые угловые соотношения между узловыми рядами и плоскостями определяются только значениями индексов и не зависят от параметра (размеров) элементарной ячейки. Получить соответствующие рабочие формулы.

1.27. Показать, что в тетрагональном кристалле угловые соотношения для узловых рядов $[u v 0]$ и плоскостей $(h k 0)$ не зависят от параметров элементарной ячейки, а для узловых рядов $[u v w]$ и плоскостей $(h k l)$ зависят от отношения параметров элементарной ячейки c/a .

1.28. Показать, что в гексагональном кристалле угловые соотношения для узловых рядов с индексами $[u v 0]$ и плоскостей с индексами $(h k 0)$ не зависят от параметров элементарной ячейки, а для узловых рядов $[u v w]$ и плоскостей $(h k l)$ зависят от отношения параметров элементарной ячейки c/a .

1.29. В гексагональном кристалле задан угол α между узловым рядом $[1 0 0]$ и узловой плоскостью $(1 0 1)$. Вычислить угол φ между узловым рядом $[1 1 1]$ и узловой плоскостью $(1 1 1)$.

1.30. Для тетрагонального кристалла получить зависимость угла φ между направлениями $[1 1 1]$ прямой и $(1 1 1)$ обратной решеток в зависимости от параметров ячейки.

1.31. Найти направляющие косинусы нормали к плоскости $(h k l)$ кубического кристалла.

1.32. Найти направляющие косинусы нормали к плоскости $(h k l)$ ромбического кристалла с параметрами элементарной ячейки a, b, c .

1.33. Вычислить период идентичности вдоль узлового ряда $[1 1 1]$ кубического кристалла, параметр элементарной ячейки которого равен a .

1.34. Вычислить межплоскостное расстояние семейства плоскостей $(1 1 1)$ в кубическом кристалле с параметром элементарной ячейки, равным a .

1.35. В гексагональном кристалле перешли к новому, так называемому ортогексагональному базису $\mathbf{A} = 2\mathbf{a} + \mathbf{b}$, $\mathbf{B} = \mathbf{b}$, $\mathbf{C} = \mathbf{c}$. Чему равны параметры новой элементарной ячейки? Как изменится объем новой элементарной ячейки по отношению к старой?

1.36. Показать, что преобразование системы координат от базиса $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ к базису $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$, определяемое матрицей α_{ij} , приводит к объему новой ячейки $V_H = |\alpha_{ij}|V$.

1.37. Разъяснить геометрический смысл узлов обратной решетки с индексами, имеющими общий множитель.

1.3. Закон зон

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1.38. Плоскости $(h_1 k_1 l_1)$, $(h_2 k_2 l_2)$ и $(h_3 k_3 l_3)$ образуют зону плоскостей. Показать, что плоскости с индексами $(h_1 h_2 h_3)$, $(k_1 k_2 k_3)$ и $(l_1 l_2 l_3)$ также образуют зону плоскостей.

Решение. Из условия задачи следует, что детерминант

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0.$$

Детерминант

$$\begin{vmatrix} h_1 & h_2 & h_3 \\ k_1 & k_2 & k_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{vmatrix}$$

представляет собой детерминант транспонированной матрицы и также равен нулю. Следовательно, указанные плоскости образуют зону (таугональные).

1.39. Принадлежат ли плоскости (221) , (111) , (113) и (123) к одной зоне плоскостей? Найти индексы оси зоны для трех плоскостей, которые образуют зону.

Решение. Детерминант

$$\begin{vmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{vmatrix} = 0,$$

следовательно, плоскости (221) , (111) и (113) образуют зону плоскостей. Детерминант

$$\begin{vmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{vmatrix} \neq 0,$$

следовательно, плоскость (123) не входит в эту зону. Для нахождения индексов оси зоны $[uvw]$ берем любые две плоскости из трех, принадлежащих этой зоне, и находим в соответствии с мнемоническим правилом перекрестного умножения

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c} 2 & 2 & 1 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

индексы оси зоны $[1\bar{1}0]$.

1.40. Найти индексы плоскости (hkl) , в которой лежат узловые ряды $[110]$ и $[111]$.

Решение. Составим систему уравнений

$$\begin{aligned} h + k &= 0, \\ h + k + l &= 0, \end{aligned}$$

которую решим, используя мнемоническое правило перекрестного умножения

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c} 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

Таким образом, получим индексы плоскости $(1\bar{1}0)$.

1.41. Получить узловую сетку обратной решетки, отвечающей оси зоны $[111]$.

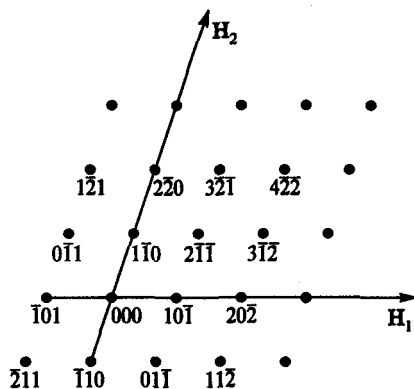


Рис. 1.2. К задаче 1.41

Решение. Индексы плоскостей, входящих в зону с осью $[111]$, связаны между собой соотношением $h + k + l = 0$. Это, например, плоскости $(10\bar{1})$ и $(1\bar{1}0)$. Сетку обратной решетки получим, если учтем, что каждой из плоскостей соответствует перпендикулярный ей вектор обратной решетки $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$. По двум векторам обратной

решетки: $\mathbf{H}_1 = 1 \cdot \mathbf{a}^* + 0 \cdot \mathbf{b}^* - 1 \cdot \mathbf{c}^*$ и $\mathbf{H}_2 = 1 \cdot \mathbf{a}^* - 1 \cdot \mathbf{b}^* + 0 \cdot \mathbf{c}^*$ можно определить масштабы сетки $|\mathbf{H}_1|$ и $|\mathbf{H}_2|$ и угол между ними $\cos \alpha = (\mathbf{H}_1 \cdot \mathbf{H}_2) / (|\mathbf{H}_1| \cdot |\mathbf{H}_2|)$. Такое построение можно выполнить для кристалла конкретной сингонии. Например, если это кубический кристалл, то масштабы $|\mathbf{H}_1| = |\mathbf{H}_2| = a^* \sqrt{2}$, а $\cos \alpha = 1/2$, т.е. угол равен 60° . В результате сетка имеет вид, показанный на рис. 1.2.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1.42. Плоскости с индексами $(h_1 k_1 l_1)$, $(h_2 k_2 l_2)$ и $(h_3 k_3 l_3)$ образуют зону плоскостей. Показать, что плоскости с индексами $(h_1 + k_1 k_1 l_1)$, $(h_2 + k_2 k_2 l_2)$ и $(h_3 + k_3 k_3 l_3)$ также образуют зону.

1.43. Показать, что плоскости (111) , $(\bar{1}7\bar{1})$ и $(2\bar{1}2)$ образуют зону. Найти индексы оси зоны.

1.44. Образуют ли зону плоскости (313) , (121) , (101) и (122) ? Найти индексы оси зоны плоскостей, которые образуют зону.

1.45. Показать, что плоскости (312) , $(3\bar{1}1)$ и $(1\bar{1}0)$ образуют зону. Найти индексы оси зоны.

1.46. Плоскости $(1\bar{1}1)$ и (111) образуют зону. Написать индексы еще нескольких плоскостей, входящих в эту же зону.

1.47. Какие плоскости входят в зону с осью $[\bar{1}20]$?

1.48. Какие три из указанных пяти плоскостей $(\bar{1}10)$, $(\bar{2}11)$, $(\bar{3}12)$, (113) и (101) образуют зону? Найти индексы оси зоны.

1.49. Плоскости (111) , (312) и (021) образуют зону. Какие плоскости еще входят в эту зону? Записать соотношение для индексов таких плоскостей.

1.50. Найти индексы узлового ряда, по которому пересекаются плоскости:

1) (321) и (132) ;

2) (111) и $(\bar{1}\bar{1}1)$.

1.51. Какую плоскость образуют узловые ряды $[210]$ и $[\bar{1}10]$?

1.52. Записать индексы плоскостей, входящих в зону с осью $[010]$.

1.53. Построить сетку обратной решетки для зоны $[101]$ ромбического кристалла.

1.54. Построить сетку обратной решетки кубического кристалла с осью зоны $[\bar{1}11]$.

1.55. Построить сетку обратной решетки моноклинного кристалла с осью зоны $[100]$.

Глава 2

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЕКЦИИ

2.1. Сферическая проекция

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

2.1. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан квадрат таким образом, что одна вершина совмещена с северным полюсом, а вторая находится на нулевом меридиане. Центр сферы лежит в плоскости квадрата. Определить сферические координаты всех вершин вписанного квадрата.

Решение. Сферическими координатами являются полярный угол ρ , который отсчитывается по меридиану от северного полюса, и азимут (долгота) φ , отсчитываемая от нулевого меридиана. По условию задачи, первая вершина квадрата имеет координаты северного полюса, т.е. $\rho = 0^\circ$. Угол φ северного полюса не определен (может иметь любое значение в диапазоне $0^\circ \leq \varphi \leq 360^\circ$). Без потери общности для северного полюса можно положить $\varphi = 0^\circ$ (см. рис. 2.1)

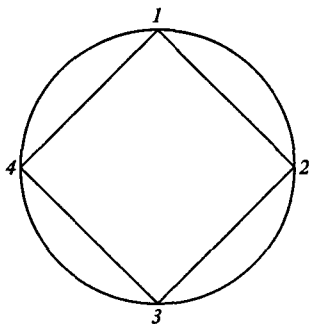


Рис. 2.1. Сечение сферы, содержащее вписанный квадрат. Цифрами обозначены номера вершин квадрата

Так как квадрат лежит в центральном сечении сферы, то его противоположная вершина (3 на рис. 2.1) совпадает с южным полюсом. Координаты южного полюса: $\rho = 180^\circ$, φ — не определен. Как и для северного полюса, положим для южного полюса $\varphi = 0^\circ$. Азимут второй вершины (также по условию задачи) равен нулю. Так как диагонали квадрата взаимно перпендикулярны, то вторая вершина лежит

на экваторе, и ее полярный угол равен 90° . Последняя (четвертая) вершина квадрата противоположна второй, следовательно, она также лежит на экваторе ($\rho = 90^\circ$) и имеет азимут $\varphi = 180^\circ$.

Ответ. Вершины вписанного квадрата имеют координаты:

- 1) $\varphi = 0^\circ$, $\rho = 0^\circ$;
- 2) $\varphi = 0^\circ$, $\rho = 90^\circ$;
- 3) $\varphi = 0^\circ$, $\rho = 180^\circ$;
- 4) $\varphi = 180^\circ$, $\rho = 90^\circ$.

2.2. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан правильный тетраэдр так, что одна его вершина совмещена с северным полюсом, а другая находится на нулевом меридиане. Определить сферические координаты всех вершин вписанного тетраэдра.

Решение.

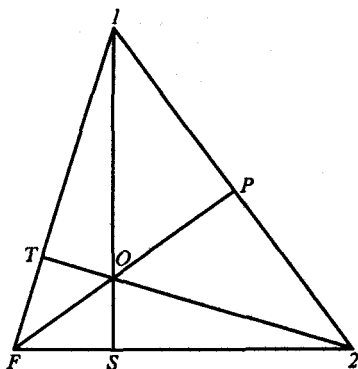
1-й способ. По условиям задачи, 1-я вершина тетраэдра имеет координаты северного полюса: $\varphi = 0^\circ$, $\rho = 0^\circ$; а 2-я вершина имеет нулевой азимут (долготу).

Все вершины правильного тетраэдра расположены на осях симметрии 3-го порядка. Через середины ребер тетраэдра проходят оси симметрии 2-го порядка, которые содержатся в зеркально-поворотных осях 4-го порядка. Следовательно, угол между двумя лучами, направленными из центра тетраэдра к его вершинам, равен удвоенному углу между соседними осями 3-го и 4-го порядка кубической точечной группы $T_h = \bar{4}3m$. Этот угол приблизительно равняется $2 \times 54^\circ 44' 8'' = 109^\circ 28' 16''$. Так как полярный угол первой вершины равен нулю, то координата ρ второй вершины вписанного тетраэдра имеет значение $109^\circ 28' 16''$.

Теперь заметим, что 2-я, 3-я и 4-я вершины тетраэдра связаны поворотами вокруг оси симметрии 3-го порядка, проходящей через 1-ю вершину, совмещенную с северным полюсом сферической системы координат. Следовательно, полярные углы 2-й, 3-й и 4-й вершин одинаковы, а азимуты различаются на 120° .

2-й способ. Угол между лучами, исходящими из центра тетраэдра и проходящими через его вершины, можно вычислять, пользуясь элементарной геометрией. Обозначим длину ребер тетраэдра буквой a . Грань тетраэдра представляет собой правильный треугольник, любая медиана которого является и высотой и биссектрисой. Следовательно, медиана грани равняется $h = a\sqrt{3}/2$. Заметим, что медианы грани пересекаются в точке, которая их делит в отношении 1 : 2. Проведем плоскость

Рис. 2.2. Сечение тетраэдра: Цифрами 1 и 2 обозначены вершины тетраэдра, буквой O — центр тетраэдра. Отрезки $1S$ и $2T$ — высоты тетраэдра, отрезок FP соединяет середины противоположных ребер тетраэдра



через первую и вторую вершины тетраэдра и через центр тетраэдра, совпадающий с центром сферы, описанной вокруг тетраэдра (см. рис. 2.2).

Отрезки $1F$ и $2F$ на рис. 2.2 являются медианами граней тетраэдра. Длина отрезка FS равна $\frac{h}{3}$. Используя прямоугольный треугольник $1SF$, вычисляем высоту тетраэдра H : длину отрезка $1S$

$$H = a\sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Рассматривая прямоугольные треугольники на рис. 2.2, нетрудно показать, что бимедиана тетраэдра FP делится точкой O пополам, а все высоты тетраэдра делятся той же точкой в отношении $1:3$. Поэтому синус угла $1OP$ может быть вычислен из прямоугольного треугольника $1OP$: $\sin(\angle 1OP) = 1/\sqrt{3}$. Треугольник $1O2$ равнобедренный, а отрезок OP является его высотой. Следовательно, угол между отрезками $O1$ и $O2$ вдвое больше угла $1OP$ и равен $109^\circ 28' 16''$.

Таким образом, мы вычислили полярные углы 3-х вершин тетраэдра. Их азимуты определяются симметрией тетраэдра.

О т в е т. Вершины вписанного тетраэдра имеют сферические координаты: 1) $\varphi = 0^\circ$, $\rho = 0^\circ$; 2) $\varphi = 0^\circ$, $\rho = 109^\circ 28' 16''$; 3) $\varphi = 120^\circ$, $\rho = 109^\circ 28' 16''$; 4) $\varphi = 240^\circ$, $\rho = 109^\circ 28' 16''$.

2.3. Поворотная ось 2-го порядка, проходящая через центр сферы, пересекает поверхность этой сферы в точке с координатами $\varphi_0 = 60^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$. На поверхности сферы зафиксирована также точка A с координатами $\varphi_1 = 110^\circ$, $\rho_1 = 20^\circ$. Вычислить сферические координаты точки, полученной из точки A поворотом вокруг заданной оси.

Р е ш е н и е. Любой поворот точки вокруг заданной оси может быть задан умножением матрицы данного изометрического преобразования на радиус-вектор исходной точки. Общий вид матрицы поворота на угол ω вокруг оси, заданной направляющими косинусами k_1, k_2, k_3 , может быть представлен в следующем виде:

$$\begin{bmatrix} C\omega + k_1^2 C' & k_3 S\omega + k_1 k_2 C' & -k_2 S\omega + k_1 k_3 C' \\ -k_3 S\omega + k_1 k_2 C' & C\omega + k_2^2 C' & k_1 S\omega + k_2 k_3 C' \\ k_2 S\omega + k_1 k_3 C' & -k_1 S\omega + k_2 k_3 C' & C\omega + k_3^2 C' \end{bmatrix}, \quad (2.1)$$

где символами $C\omega$ и $S\omega$ обозначены соответственно косинус и синус угла поворота ω , а $C' = (1 - C\omega)$.

Если расположение оси, проходящей через центр сферы, задано сферическими координатами точки пересечения сферы ρ_0, φ_0 , то направляющие косинусы выразятся как

$$k_1 = \sin \rho_0 \cdot \cos \varphi_0, \quad k_2 = \sin \rho_0 \cdot \sin \varphi_0, \quad k_3 = \cos \rho_0. \quad (2.2)$$

Для оси 2-го порядка элементарный угол поворота равен 180° . Подстановка в (2.1) угла $\omega = \pi$ дает матрицу поворота на угол 180° вокруг оси,

заданной сферическими координатами ρ_0, φ_0 ,

$$\begin{bmatrix} 2S^2(\rho_0) \cdot C^2(\varphi_0) - 1 & S^2(\rho_0) \cdot S(2\varphi_0) & S(2\rho_0) \cdot C(\varphi_0) \\ S^2(\rho_0) \cdot S(2\varphi_0) & 2S^2(\rho_0) \cdot S^2(\varphi_0) - 1 & S(2\rho_0) \cdot S(\varphi_0) \\ S(2\rho_0) \cdot C(\varphi_0) & S(2\rho_0) \cdot S(\varphi_0) & 2C^2(\rho_0) - 1 \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

где буквами C и S обозначены значения косинуса и синуса соответственно.

Компоненты радиуса-вектора произвольной точки сферы выразятся через ее сферические координаты ρ_1, φ_1 следующим образом:

$$x_1 = R \cdot \sin \rho_1 \cdot \cos \varphi_1, \quad y_1 = R \cdot \sin \rho_1 \cdot \sin \varphi_1, \quad z_1 = R \cdot \cos \rho_1, \quad (2.4)$$

где R — радиус сферы.

Результат умножения матрицы (2.3) на вектор (2.4) даст компоненты (x_2, y_2, z_2) радиуса-вектора искомой точки, получаемой из исходной поворотом на 180° вокруг заданной оси.

Чтобы перейти к сферическим координатам ρ_2, φ_2 следует воспользоваться обратными тригонометрическими функциями. Координата ρ_2 вычисляется из уравнения $z_2 = R \cdot \cos \rho_2$, координата φ_2 — из уравнения $y_2/x_2 = \operatorname{tg}(\varphi_2)$. Квадрант диапазона угла φ_2 однозначно определяется знаками проекций x_2 и y_2 .

Для данной задачи вычисления дают следующие значения сферических координат искомой точки сферы: $\varphi_2 = 44^\circ$, $\rho_2 = 77^\circ$.

2.4. Плоскость отражения, проходящая через центр сферы, характеризуется нормалью с координатами $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 30^\circ$. На сфере расположена точка с координатами $\varphi_1 = 36^\circ$, $\rho_1 = 75^\circ$. Вычислить сферические координаты точки, эквивалентной исходной относительно отражения в заданной плоскости.

Решение. Отражение точки в произвольно ориентированной плоскости можно охарактеризовать соответствующей матрицей изометрического преобразования. Матрица отражения в плоскости может быть получена перемножением выше приведенной матрицы поворота на 180° (см. задачу 2.3) на матрицу инверсии в начале координат.

Если ориентация плоскости задана сферическими координатами нормали ρ_0, φ_0 , то матрица отражения получается из (2.3) сменой знаков всех элементов:

$$\begin{bmatrix} 1 - 2S^2(\rho_0) \cdot C^2(\varphi_0) & -S^2(\rho_0) \cdot S(2\varphi_0) & -S(2\rho_0) \cdot C(\varphi_0) \\ -S^2(\rho_0) \cdot S(2\varphi_0) & 1 - 2S^2(\rho_0) \cdot S^2(\varphi_0) & -S(2\rho_0) \cdot S(\varphi_0) \\ -S(2\rho_0) \cdot C(\varphi_0) & -S(2\rho_0) \cdot S(\varphi_0) & 1 - 2C^2(\rho_0) \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Для получения сферических координат отраженной точки матрица (2.5) умножается на вектор-столбец исходной точки, представленный в виде (2.4). Затем проводится переход от тригонометрических функций углов

φ_2 , ρ_2 к самим углам, как описано в решении предыдущей задачи. В данной задаче вычисления дают следующие значения сферических координат отраженной точки: $\varphi_2 = 4^\circ$, $\rho_2 = 128^\circ$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

2.5. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан правильный треугольник так, что одна его вершина совмещена с северным полюсом, а вторая находится на нулевом меридиане. Определить сферические координаты всех вершин вписанного треугольника.

2.6. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан равнобедренный прямоугольный треугольник таким образом, что его гипотенуза опирается на экватор, а противоположная вершина находится на нулевом меридиане. Определить сферические координаты всех вершин вписанного треугольника.

2.7. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан правильный пятиугольник так, что одна его вершина находится на пересечении нулевого меридиана с экватором, а соседняя расположена также на экваторе. Определить сферические координаты всех вершин вписанного пятиугольника.

2.8. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан правильный шестиугольник так, что одна его вершина совмещена с северным полюсом, а соседняя находится на нулевом меридиане. Определить сферические координаты всех вершин вписанного шестиугольника.

2.9. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан правильный восьмиугольник так, что одна его вершина совмещена с северным полюсом, а соседняя находится на нулевом меридиане. Определить сферические координаты всех вершин вписанного восьмиугольника.

2.10. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан куб таким образом, что одна его вершина совмещена с северным полюсом, а другая находится на нулевом меридиане. Определить сферические координаты всех вершин вписанного куба.

2.11. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан октаэдр так, что одна его вершина совмещена с северным полюсом, а другая находится на нулевом меридиане. Определить сферические координаты всех вершин вписанного октаэдра.

2.12. В сферу с нанесенной сеткой сферических координат вписан икосаэдр так, что одна его вершина совмещена с северным полюсом, а другая находится на нулевом меридиане. Определить сферические координаты всех вершин вписанного икосаэдра.

2.13. Поворотная ось 2-го порядка, проходящая через центр сферы, пересекает поверхность этой сферы в точке с координа-

тами ρ_0 и φ_0 . На поверхности сферы зафиксирована точка с координатами ρ_1 и φ_1 . Вычислить сферические координаты точки, эквивалентной исходной относительно поворота вокруг заданной оси, для следующих значений углов:

- 1) $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 30^\circ$, $\varphi_1 = 56^\circ$, $\rho_1 = 64^\circ$;
- 2) $\varphi_0 = 30^\circ$, $\rho_0 = 60^\circ$, $\varphi_1 = 68^\circ$, $\rho_1 = 28^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 120^\circ$, $\rho_0 = 54^\circ$, $\varphi_1 = 45^\circ$, $\rho_1 = 14^\circ$;
- 4) $\varphi_0 = 66^\circ$, $\rho_0 = 72^\circ$, $\varphi_1 = 118^\circ$, $\rho_1 = 32^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 240^\circ$, $\rho_0 = 36^\circ$, $\varphi_1 = 126^\circ$, $\rho_1 = 82^\circ$;
- 6) $\varphi_0 = 270^\circ$, $\rho_0 = 15^\circ$, $\varphi_1 = 82^\circ$, $\rho_1 = 46^\circ$;
- 7) $\varphi_0 = 36^\circ$, $\rho_0 = 12^\circ$, $\varphi_1 = 62^\circ$, $\rho_1 = 54^\circ$;
- 8) $\varphi_0 = 75^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$, $\varphi_1 = 38^\circ$, $\rho_1 = 22^\circ$;
- 9) $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$, $\varphi_1 = 24^\circ$, $\rho_1 = 68^\circ$;
- 10) $\varphi_0 = 150^\circ$, $\rho_0 = 24^\circ$, $\varphi_1 = 88^\circ$, $\rho_1 = 74^\circ$.

2.14. Плоскость симметрии, проходящая через центр сферы, характеризуется нормалью с координатами φ_0 и ρ_0 . На сфере расположена точка с координатами φ_1 и ρ_1 . Вычислить сферические координаты точки, эквивалентной исходной относительно отражения в заданной плоскости, для следующих значений углов:

- 1) $\varphi_0 = 120^\circ$, $\rho_0 = 60^\circ$, $\varphi_1 = 65^\circ$, $\rho_1 = 25^\circ$;
- 2) $\varphi_0 = 15^\circ$, $\rho_0 = 36^\circ$, $\varphi_1 = 162^\circ$, $\rho_1 = 81^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 240^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$, $\varphi_1 = 150^\circ$, $\rho_1 = 14^\circ$;
- 4) $\varphi_0 = 60^\circ$, $\rho_0 = 24^\circ$, $\varphi_1 = 180^\circ$, $\rho_1 = 75^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 45^\circ$, $\rho_0 = 65^\circ$, $\varphi_1 = 135^\circ$, $\rho_1 = 12^\circ$;
- 6) $\varphi_0 = 75^\circ$, $\rho_0 = 15^\circ$, $\varphi_1 = 120^\circ$, $\rho_1 = 60^\circ$;
- 7) $\varphi_0 = 36^\circ$, $\rho_0 = 32^\circ$, $\varphi_1 = 84^\circ$, $\rho_1 = 78^\circ$;
- 8) $\varphi_0 = 150^\circ$, $\rho_0 = 54^\circ$, $\varphi_1 = 30^\circ$, $\rho_1 = 10^\circ$;
- 9) $\varphi_0 = 300^\circ$, $\rho_0 = 48^\circ$, $\varphi_1 = 45^\circ$, $\rho_1 = 8^\circ$;
- 10) $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 12^\circ$, $\varphi_1 = 15^\circ$, $\rho_1 = 66^\circ$.

2.15. Поворотная ось 3-го порядка, проходящая через центр сферы, пересекает поверхность этой сферы в точке с координатами φ_0 и ρ_0 . На поверхности сферы зафиксирована точка с координатами φ_1 и ρ_1 . Вычислить сферические координаты двух точек,

эквивалентных исходной относительно поворота вокруг заданной оси, для следующих значений углов:

- 1) $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 30^\circ$, $\varphi_1 = 45^\circ$, $\rho_1 = 65^\circ$;
- 2) $\varphi_0 = 180^\circ$, $\rho_0 = 60^\circ$, $\varphi_1 = 80^\circ$, $\rho_1 = 32^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 45^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$, $\varphi_1 = 70^\circ$, $\rho_1 = 20^\circ$;
- 4) $\varphi_0 = 0^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$, $\varphi_1 = 30^\circ$, $\rho_1 = 36^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 60^\circ$, $\rho_0 = 36^\circ$, $\varphi_1 = 15^\circ$, $\rho_1 = 75^\circ$.

2.16. Поворотная ось 4-го порядка, проходящая через центр сферы, пересекает поверхность этой сферы в точке с координатами φ_0 и ρ_0 . На поверхности сферы зафиксирована точка с координатами φ_1 и ρ_1 . Вычислить сферические координаты трех точек, эквивалентных исходной относительно поворота вокруг заданной оси, для следующих значений углов:

- 1) $\varphi_0 = 45^\circ$, $\rho_0 = 0^\circ$, $\varphi_1 = 30^\circ$, $\rho_1 = 15^\circ$;
- 2) $\varphi_0 = 30^\circ$, $\rho_0 = 90^\circ$, $\varphi_1 = 90^\circ$, $\rho_1 = 60^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$, $\varphi_1 = 45^\circ$, $\rho_1 = 75^\circ$;
- 4) $\varphi_0 = 60^\circ$, $\rho_0 = 30^\circ$, $\varphi_1 = 15^\circ$, $\rho_1 = 45^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 180^\circ$, $\rho_0 = 60^\circ$, $\varphi_1 = 60^\circ$, $\rho_1 = 30^\circ$.

2.2. Стереографическая проекция. Сетка Вульфа

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

2.17. Построить стереографические проекции направлений (лучей), заданных сферическими координатами $\varphi_1 = 78^\circ$, $\rho_1 = 62^\circ$ и $\varphi_2 = 216^\circ$, $\rho_2 = 146^\circ$.

Решение. Изображение стереографической проекции направления, которое задано парой сферических координат φ и ρ , удобно выполнять с помощью специального шаблона, называемого сеткой Вульфа. Работы с сеткой Вульфа следует проводить, соблюдая следующие правила.

Лист кальки (или вошеной бумаги) кладется на шаблон. Все отметки на кальке выполняются тонко отточенным карандашом средней твердости. Сначала отмечается точка центра сетки. Затем на периферийной окружности сетки в направлении хода часовой стрелки отмечаются последовательно азимутальные углы (долготы) 0° , 90° , 180° и 270° короткими черточками, лежащими вне круга проекций. Эти отметки определяют положение двух взаимно перпендикулярных диаметров сетки Вульфа. Около каждой из них рекомендуется подписать соответствующие значения долготы $\varphi = 0^\circ$, $\varphi = 90^\circ$, $\varphi = 180^\circ$ и $\varphi = 270^\circ$. Не возбраняется прочертить тонкими прямыми линиями эти взаимно перпендикулярные диаметры.

Для изображения точки с произвольными сферическими координатами (φ , ρ) сначала следует отсчитать ее азимут (долготу) φ по периферийной окружности сетки в направлении хода часовой стрелки от отметки $\varphi = 0^\circ$ и на окружности поставить вспомогательную точку или короткую черточку. Для изображения первого направления ставим отметку на долготе $\varphi = 78^\circ$, для второго — на долготе $\varphi = 216^\circ$. Около сделанных отметок вне круга проекций подписываем порядковые номера отображаемых точек.

Затем калька поворачивается так, чтобы сделанная отметка совпала с любым из диаметров сетки. При этом необходимо следить за точным совмещением центров кальки и сетки. Полярное расстояние ρ отсчитывается вдоль диаметра сетки, и на кальке ставится точка, которая является искомой стереографической проекцией заданного направления.

Если, как у первого направления в данной задаче ($\rho_1 = 62^\circ$), полярное расстояние не превышает 90° , то отсчет величины ρ проводится от центра к периферии (в направлении соответствующей метки долготы φ). В подобных случаях луч направления пересекает верхнюю (переднюю) полусферу, которая расположена над кругом проекций. Построенная точка — стереографическая проекция направления — обводится кружком.

Второе направление характеризуется полярным расстоянием $\rho_2 = 146^\circ$, которое превышает 90° . Это значит, что луч направления пересекает нижнюю (заднюю) полусферу, расположенную под кругом проекций. В подобных ситуациях, согласно правилам работы с сеткой Вульфа, величина ρ отсчитывается от центра до периферийной окружности и далее назад по тому же диаметру к центру круга проекций. Эквивалентной (и более простой) операцией в этом случае является отсчет величины $\rho - 90^\circ$ от сделанной метки на периферийной окружности к центру сетки. Точки — стереографические проекции направлений, лежащих в нижнем полушарии, — отмечаются крестиком. Следовательно, при решении данной задачи от метки $\varphi_2 = 216^\circ$ на окружности отсчитываем вдоль диаметра сетки по направлению к центру круга проекций угловое расстояние $146^\circ - 90^\circ = 56^\circ$ и полученную точку отмечаем крестиком.

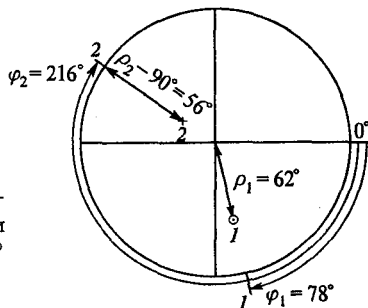


Рис. 2.3. Стереографические проекции направлений 1 и 2 со сферическими координатами $\varphi_1 = 78^\circ$, $\rho_1 = 62^\circ$ и $\varphi_2 = 216^\circ$, $\rho_2 = 146^\circ$ соответственно

Построенные точки на стереографической проекции целесообразно занумеровать, подписывая рядом с каждой точкой ее порядковый номер (см. рис. 2.3).

Примечание. При работе с калькой категорически возбраняется скреплять ее центр с центром сетки булавкой или иголкой. Подобное закрепление приводит к разрывам как кальки, так и шаблона и, следовательно, к неконтролируемому относительному смещению центров кальки и сетки.

2.18. Измерить угол между направлениями (лучами), заданными сферическими координатами 1) $\varphi_1 = 86^\circ$, $\rho_1 = 32^\circ$ и 2) $\varphi_2 = 163^\circ$, $\rho_2 = 56^\circ$.

Решение.

1-й способ. Измерение угла между двумя лучами, направления которых задаются парами сферических координат φ_1 , ρ_1 и φ_2 , ρ_2 соответственно, можно проводить графически с помощью сетки Вульфа. Методика изображения направлений в виде точек стереографической проекции изложена в решении задачи 2.17.

Для определения угла между двумя пересекающимися в пространстве прямыми следует найти плоскость, в которой лежат эти прямые, а затем измерить полученный плоский угол.

Известно, что любой меридиан сетки Вульфа представляет собой стереографическую проекцию некоторой плоскости, проходящей через центр круга проекций. Поэтому после того, как на кальке будут отмечены обе точки (стереографические проекции заданных направлений), их необходимо поворотом вывести на один меридиан сетки. Этот меридиан является стереографической проекцией плоскости, в которой лежат оба луча данных направлений (см. рис. 2.4). Отсчет углового расстояния между

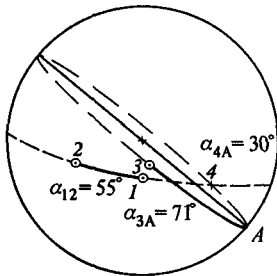


Рис. 2.4. К расчету угловых расстояний между направлениями, заданными сферическими координатами $\varphi_1 = 86^\circ$, $\rho_1 = 32^\circ$ и $\varphi_2 = 163^\circ$, $\rho_2 = 56^\circ$; $\varphi_3 = 76^\circ$, $\rho_3 = 23^\circ$ и $\varphi_4 = 34^\circ$, $\rho_4 = 119^\circ$

построенными точками проводится непосредственно вдоль найденного меридиана. Так как в данной задаче оба направления расположены в одном и том же (верхнем) полушарии, то искомый угол между направлениями совпадает с измеренным угловым расстоянием, равным 55° (с точностью до 1°).

Примечание. На стандартном шаблоне меридианы проведены с интервалом в 2° . Если построенные точки не ложатся ни на один из нанесенных на сетку меридианов, следует разместить эти точки на некотором воображаемом меридиане, проходящем между нарисованными. При этом важно следить за равноудаленностью точек от нарисованных меридианов. Таким образом можно добиться погрешности отсчета координат в 1° .

2-й способ. Для вычисления угла α_{12} между направлениями, заданными двумя парами сферических координат, можно использовать известную формулу сферической геометрии:

$$\cos \alpha_{12} = \cos \rho_1 \cdot \cos \rho_2 + \sin \rho_1 \cdot \sin \rho_2 \cdot \cos (\varphi_1 - \varphi_2). \quad (2.6)$$

Так как косинус — функция четная, приведенная формула определяет лишь абсолютное значение угла α_{12} в интервале $0^\circ \leq \alpha_{12} \leq 180^\circ$, что вполне достаточно для решения поставленной задачи. Вычисление угла α_{12} следует проводить на калькуляторе или персональном компьютере, пользуясь какими-либо стандартными приложениями или оригинальной программой.

Заметим, что большинство компьютерных приложений содержат только одну обратную тригонометрическую функцию — арктангенс. Поэтому вычисленный по формуле (2.6) косинус искомого угла необходимо сначала пересчитать в тангенс:

$$\operatorname{tg} x = \frac{\sqrt{1 - \cos^2 x}}{\cos x}, \quad (2.7)$$

а затем от полученного значения взять арктангенс, величину которого удобно представить в градусной мере.

Подстановка данных настоящей задачи в формулы (2.6), (2.7) и последующее вычисление арктангенса дает искомое значение угла $\alpha_{12} = 55^\circ 2'$, что отличается от величины, полученной с помощью сетки Вульфа, менее чем на 1° .

Примечание. Второй способ дает более точный результат, но требует использования вычислительной техники. Первый способ более трудоемок, но дает результаты в наглядном виде, удобном для дальнейшей работы.

Ответ. Угол между заданными направлениями приблизительно равен 55° .

2.19. Измерить угол между направлениями, заданными сферическими координатами 3) $\varphi_3 = 76^\circ$, $\rho_3 = 23^\circ$ и 4) $\varphi_4 = 34^\circ$, $\rho_4 = 119^\circ$.

Решение.

1-й способ. Данная задача отличается от предыдущей тем, что полярное расстояние второй точки превышает 90° . Следовательно, в данной задаче первое направление расположено в верхнем полушарии, а второе — в нижнем полушарии относительно круга проекций. Согласно общепринятым обозначениям (см. задачу 2.17), на стереографической проекции точка первого направления обводится кружком, а вторая изображается крестиком.

В случаях, когда точки стереографической проекции находятся в разных полушариях, для получения углового расстояния между ними их следует поворотом кальки вывести на два меридиана, зеркально симметричных относительно вертикального диаметра (см. рис. 2.4).

Для каждой точки измеряется угловое расстояние до ближайшего полюса сетки Вульфа (отсчет обоих расстояний проводится от одного и того же полюса!). В данном случае угловое расстояние от первой точки до ближайшего полюса составляет $\alpha_{3A} = 71^\circ$. Угловое расстояние от второй точки до того же полюса равно $\alpha_{4A} = 30^\circ$. Искомое угловое расстояние равняется сумме измеренных значений, в данной задаче $\alpha_{34} = \alpha_{3A} + \alpha_{4A} = 71^\circ + 30^\circ = 101^\circ$.

2-й способ. Для вычисления угла между заданными направлениями применим, как и в предыдущей задаче, формулу сферической геометрии (2.6). Заметим, что если, как в данной задаче, одно из полярных расстояний превышает 90° (т.е. данные точки принадлежат различным полушариям), косинус угла между направлениями становится отрицательным. Это значит, что значение угла α_{34} лежит в диапазоне $(90^\circ; 180^\circ)$. Однако стандартная функция арктангенса дает главное значение, ограниченное пределами $(-90^\circ; +90^\circ)$. Поэтому если $\cos \alpha_{34} < 0$, то после вычисления тангенса по формуле (2.2) следует обратиться к стандартной функции арктангенса, а затем к полученной величине добавить 180° . Результат будет представлять собой абсолютную величину искомого угла α_{34} .

Вычисления изложенным методом с использованием данных настоящей задачи дают значение $101^\circ 5'$, что хорошо согласуется с результатом, полученным с помощью сетки Вульфа.

Примечание. Сумма угловых расстояний до ближайшего полюса дает всегда значение $\alpha \leq 180^\circ$. Сумма угловых расстояний до противоположного полюса при этом равняется $360^\circ - \alpha$.

Ответ. Угол между заданными направлениями приблизительно равен 101° .

2.20. По двум точкам, заданным следующими парами сферических координат: $\varphi_A = 136^\circ$, $\rho_A = 54^\circ$ и $\varphi_B = 248^\circ$, $\rho_B = 32^\circ$, построить стереографическую проекцию большого круга, построить его полюс и определить сферические координаты этого полюса.

Решение. Большой круг образуется сечением сферы плоскостью, проходящей через две заданные точки на поверхности сферы и центр этой сферы. Полюс большого круга образуется пересечением сферы нормалью к плоскости данного сечения. Из двух точек пересечения в качестве полюса выбирается точка, лежащая в верхнем полушарии относительно круга проекций.

Положение большого круга, заданного двумя точками на координатной сфере, удобно изобразить на стереографической проекции, пользуясь шаблоном сетки Вульфа. Правила построения точек, задаваемых парами сферических координат, на стереографической проекции приведены при разборе предыдущих задач. Руководствуясь вышеизложенной методикой, отметим на кальке положения обеих данных точек A и B . Поворачивая кальку, приведем эти точки на общий меридиан сетки Вульфа.

Теперь можно аккуратно прорисовать на кальке карандашом найденный меридиан тонкой линией от северного полюса сетки до южного. Рекомендуется при проведении дуги располагать шаблон с калькой таким образом, чтобы рисующая рука находилась с вогнутой стороны дуги.

Изображенная кривая представляет собой проекцию дуги искомого большого круга, расположенную в верхнем полушарии. Дополнительная дуга этого же круга, лежащая в нижнем полушарии, расположена зеркально-симметрично относительно диаметра, стягивающего эти дуги. При необходимости дуга нижнего полушария прорисовывается штриховой линией.

По построению диаметр, стягивающий дугу большого круга, является центральным меридианом сетки. Перпендикуляром к нему является экватор сетки. По определению полюса угловое расстояние от него до любой точки проекции дуги его большого круга равно 90° . Таким образом, для нахождения полюса остается от точки пересечения построенной проекции дуги верхнего полушария отсчитать вдоль экватора угловое расстояние, равное 90° . Полученная точка P_{AB} будет искомым полюсом. Она отмечается на кальке, обводится кружочком, рядом ставится ее обозначение (например: « P_{AB} » — см. рис. 2.5).

Для определения полярного расстояния ρ_{AB} построенной точки необходимо расположить ее на любом диаметре сетки и отсчитать угловое расстояние от центра сетки (полюс полагается находящемся в верхнем полушарии). В данной задаче $\rho_{AB} = 65^\circ$. На периферийной окружности делаем вспомогательную отметку на том диаметре, где находится точка полюса. Для определения долготы (азимута) полюса φ_{AB} необходимо повернуть кальку в исходное положение и отсчитать величину φ_{AB} вдоль периферийной окружности сетки от нулевого значения $\varphi = 0^\circ$ до вспомогательной отметки. В данной задаче получаем $\varphi_{AB} = 26^\circ$.

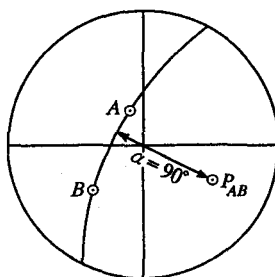


Рис. 2.5. Стереографическая проекция дуги большого круга, проходящего через 2 точки, заданные парами сферических координат: $\varphi_A = 136^\circ$, $\rho_A = 54^\circ$ и $\varphi_B = 248^\circ$, $\rho_B = 32^\circ$ и полюс этого большого круга P_{AB} со сферическими координатами $\varphi_{AB} = 26^\circ$, $\rho_{AB} = 65^\circ$

Ответ. Сферические координаты полюса приблизительно равны $\varphi_{AB} = 26^\circ$, $\rho_{AB} = 65^\circ$.

2.21. Через 2 точки, заданные следующими парами сферических координат: $\varphi_A = 53^\circ$, $\rho_A = 26^\circ$ и $\varphi_B = 146^\circ$, $\rho_B = 138^\circ$, провести большой круг, построить его полюс и определить сферические координаты этого полюса.

Решение. Задача отличается от предыдущей тем, что первая точка находится в верхнем полушарии, а вторая — в нижнем. После построения первая точка обводится кружком, а вторая — помечается крестиком.

Для получения большого круга на стереографической проекции в подобных задачах следует, поворачивая кальку, расположить построенные точки на двух меридианах сетки Вульфа, зеркально симметричных относительно вертикального диаметра (см. рис. 2.6). Меридиан, на котором лежит первая точка (обведенная кружком), представляет собой дугу искомого большого круга, расположенную в верхнем полушарии. Зеркально симметричный меридиан, на котором лежит вторая точка (помеченная крестиком), является дугой того же большого круга, находящейся в нижнем полушарии. Обе дуги стягиваются вертикальным диаметром сетки.

Положение точки полюса, как и в предыдущей задаче, находится отсчетом углового расстояния 90° вдоль экватора сетки от точки пересечения дуги верхнего полушария с экватором. Определение сферических координат полюса проводится так же, как и в задаче 2.20.

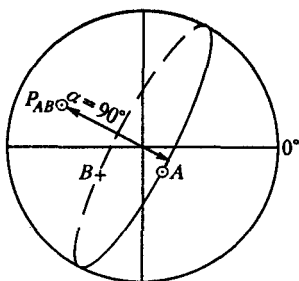


Рис. 2.6. Большой круг, проходящий через две точки, заданные парами сферических координат: $\varphi_A = 53^\circ$, $\rho_A = 26^\circ$ и $\varphi_B = 146^\circ$, $\rho_B = 138^\circ$ и его полюс P_{AB}

Ответ: Сферические координаты полюса равны $\varphi_{AB} = 207^\circ$, $\rho_{AB} = 66^\circ$.

2.22. Точка со сферическими координатами $\varphi_0 = 44^\circ$, $\rho_0 = 32^\circ$ является полюсом некоторой дуги большого круга. Построить стереографическую проекцию этой дуги.

Решение. Сначала по заданным сферическим координатам на кальке строится стереографическая проекция полюса методом, рассмотренным в задаче 2.17. Затем поворотом кальки проекция полюса совмещается с горизонтальным диаметром сетки Вульфа. Вдоль диаметра по направлению к центру сетки, и переходя за него, отсчитывается угловое расстояние 90° . Полученная точка находится на определенном меридиане, который является дугой искомого большого круга. Прочертив меридиан, пользуясь рекомендациями, приведенными в решении задачи 2.20, получим изображение искомой дуги. Вид стереографической проекции дуги и ее полюса аналогичен изображенному на рис. 2.5.

2.23. Две пары точек со сферическими координатами $\varphi_1 = 172^\circ$, $\rho_1 = 46^\circ$, $\varphi_2 = 16^\circ$, $\rho_2 = 64^\circ$ и $\varphi_3 = 140^\circ$, $\rho_3 = 40^\circ$, $\varphi_4 = 82^\circ$, $\rho_4 = 106^\circ$ соответственно определяют две дуги больших кругов. Найти угол между этими дугами.

Решение. Угол между двумя пересекающимися кривыми равен по определению углу между касательными к данным кривым, проведенным в точке их пересечения.

Любой большой круг на стереографической проекции является изображением некоторой плоскости, проходящей через центр круга проекций. Ориентация плоскости однозначно определяется положением ее нормали. Угол между плоскостями равен углу между их нормальными с точностью до дополнительного угла. Стереографической проекцией нормали является полюс соответствующей дуги большого круга. Так как в качестве полюсов всегда берутся точки, лежащие в верхнем полушарии, то угловое расстояние между полюсами равняется наименьшему ($\leq 90^\circ$) углу между плоскостями.

Следовательно, решение данной задачи сводится к последовательным этапам, подробно рассмотренным при решении предыдущих задач. Сначала по заданным парам точек проводятся две дуги больших кругов и строятся их полюсы P_{12} и P_{34} (см. решение задач 2.20 и 2.21). В данной задаче полюсы имеют сферические координаты $\varphi_{12} = 278^\circ$, $\rho_{12} = 74^\circ$ и $\varphi_{34} = 2^\circ$, $\rho_{34} = 58^\circ$ соответственно. Затем измеряется (или

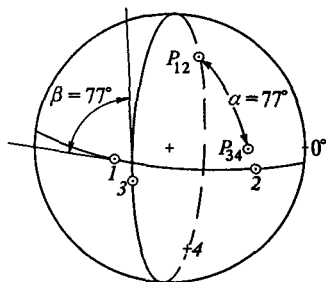


Рис. 2.7. К определению угла между дугами больших кругов. Показан угол β между касательными к дугам в точке пересечения и угловое расстояние α между соответствующими полюсами

вычисляется) угловое расстояние между точками P_{12} и P_{34} по методике, приведенной в решении задач 2.18 и 2.19. В результате получаем угловое расстояние, равное 77° . Соответствующие построения на стереографической проекции приведены на рис. 2.7.

О т в е т. Угол между заданными дугами больших кругов приблизительно равен 77° .

2.24. Направление задано сферическими координатами $\varphi_0 = 135^\circ$, $\rho_0 = 55^\circ$. Определить всевозможные направления, образующие угол $\alpha = 30^\circ$ с заданным.

Решение. С помощью сетки Вульфа отметим на кальке стереографическую проекцию заданного направления в виде точки C_0 со сферическими координатами φ_0 и ρ_0 (см. задачу 2.17). Теперь задача сводится к

построению геометрического места точек, стоящих на угловое расстояние α от точки с координатами φ_0 и ρ_0 . Согласно свойству стереографической проекции, эти точки на круге проекций образуют окружность, причем центр ее, вообще говоря, не совпадает со стереографической проекцией исходного направления (точкой C_0). Подобные задачи часто называются построением малого круга.

Универсальный способ построения малого круга заключается в следующей процедуре. Поворотом кальки точка C_0 совмещается с произвольным меридианом сетки Вульфа. Вдоль этого меридиана отсчитываются угловые расстояния α в обе стороны и ставятся на кальке две точки. Затем калька вновь поворачивается и точка C_0 совмещается с другим меридианом сетки. Опять проводится отсчет углов α в обе стороны вдоль меридиана и отмечается новая пара точек. Повторяя эту процедуру несколько раз, можно построить совокупность точек, которые достаточно определенно обрисовывают окружность — искомый малый круг. Точка C_0 является его полюсом.

Для вычерчивания малого круга по полученным точкам удобно использовать тот же шаблон с сеткой Вульфа. Сдвинув кальку к полюсу, можно найти параллель, которая является круговой дугой того же радиуса, что и искомая окружность. Можно найти положение кальки, при котором все полученные точки окружности, лежащие внутри шаблона, будут укладываться на найденную параллель. Прочертив круговую дугу, повернем кальку и прочертим вдоль той же параллели продолжение дуги. В результате вычерчивается полная окружность, на которой укладываются все построенные точки.

При наличии циркуля решение задачи значительно упрощается. Поворотом кальки полюс C_0 совмещается с экватором сетки Вульфа. В обе стороны вдоль экватора отсчитываются углы α и отмечаются две точки. Полученный отрезок делится пополам. Полученная вспомогательная точка C_1 является центром искомой окружности. Взяв раствор циркуля, равный половине построенного отрезка, и поставив иглу циркуля в точку C_1 , проводим окружность, точки которой являются стереографическими проекциями искомого направления (см. рис. 2.8).

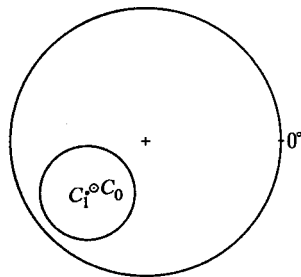


Рис. 2.8. Малый круг с радиусом 30° и со сферическими координатами полюса $\varphi_0 = 135^\circ$, $\rho_0 = 55^\circ$. Точка C_0 — полюс малого круга (стереографическая проекция заданного направления), точка C_1 — центр окружности малого круга на стереографической проекции

Примечание. Центр малого круга совпадает с полюсом лишь в том случае, если полюс находится в центре круга проекций ($\rho_0 = 0^\circ$ или 180°).

2.25. Направление задано сферическими координатами $\varphi_0 = 210^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$. Определить всевозможные направления, образующие угол $\alpha = 60^\circ$ с заданным.

Решение. Данная задача аналогична предыдущей. Точка C_0 со сферическими координатами $\varphi_0 = 210^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$ является полюсом малого круга, который необходимо построить на стереографической проекции с помощью сетки Вульфа. Но в процессе построения точек, удаленных от полюса C_0 на угловое расстояние $\alpha = 60^\circ$, обнаруживается, что некоторые точки не попадают внутрь круга проекций. Это означает, что некоторые направления изображаются точками нижней полушеры, которые имеют координаты $\rho > 90^\circ$.

Совместим полюс C_0 с диаметром сетки Вульфа, отсчитаем угол $\alpha = 60^\circ$ в направлении центра проекций и поставим вспомогательную точку (точка A на рис. 2.9). Затем отсчитаем вдоль того же диаметра 15° до края круга проекций, а затем еще 45° в обратном направлении к центру круга. Полученную точку пометим крестиком (точка B на рис. 2.9). Построенные точки принадлежат дугам малого круга, расположенным в разных полушариях. Другие точки малого круга строятся методом, описанным в решении предыдущей задачи.

Целесообразно поворачивать кальку так, чтобы полюс C_0 совмещался с толстыми параллелями на шаблоне. Тогда легче отсчитывать углы α вдоль соответствующих меридианов. Точки, расположенные на угловом расстоянии α от полюса C_0 и попадающие в круг проекций, образуют дугу малого круга, расположенную в верхнем полушарии. Если при отсчете угловое расстояние n от полюса C_0 до полюса шаблона меньше величины α , то точку малого круга необходимо поместить в нижнее полушарие. Для этого от полюса сетки откладывается угловое расстояние $(\alpha - n)$ вдоль меридиана, который расположен зеркально симметрично относительно диаметра сетки. Полученная точка отмечается на кальке крестиком. На рис. 2.9 изображена пара точек D и E , построенная для случая $n = 30^\circ$ и $\alpha = 60^\circ$.

Поворачивая кальку, построим несколько пар точек. В результате мы увидим, что малый круг в этой задаче состоит из двух круговых дуг различного радиуса. Одна дуга образована стереографическими проекциями точек верхней полушеры, вторая — нижней. С помощью сетки Вульфа прочертим обе дуги способом, описанным в предыдущей задаче. Дуги малого круга, построенного по данным задачи, приведены на рис. 2.10.

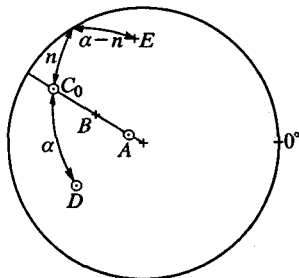


Рис. 2.9. К построению малого круга с радиусом 60° и со сферическими координатами полюса $\varphi_0 = 210^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$

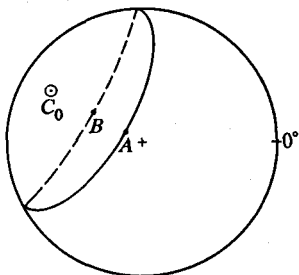


Рис. 2.10. Дуги малого круга с радиусом 60° и со сферическими координатами полюса $\varphi_0 = 210^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$

Примечание. Если полюс находится на периферийной окружности ($\rho_0 = 90^\circ$), то поворотом кальки он совмещается с любым полюсом шаблона. Отсчитывая от полюса угол α по любому меридиану, мы найдем определенную параллель. Прочертив дугу по этой параллели, мы получим совмещенные друг с другом дуги верхнего и нижнего полушарий искомого малого круга.

2.26. Заменить плоскость проекции на другую, проходящую через две точки, заданные парами сферических координат: $\varphi_A = 132^\circ$, $\rho_A = 56^\circ$ и $\varphi_B = 250^\circ$, $\rho_B = 34^\circ$. Изобразить положение точек с исходными сферическими координатами $\varphi_1 = 55^\circ$, $\rho_1 = 77^\circ$; $\varphi_2 = 183^\circ$, $\rho_2 = 109^\circ$ и $\varphi_3 = 228^\circ$, $\rho_3 = 72^\circ$ на новой плоскости проекций. Определить сферические координаты точек 1, 2 и 3 относительно новой плоскости проекций.

Решение. Любая плоскость, проходящая через центр кристаллического комплекса, может быть принята за плоскость проекций. Данная задача заключается в переходе к новой системе сферических координат: изменению направления полярной оси и смещению точки начала отсчета долготы (азимута). Переход от одной системы к другой может реализоваться двумя последовательными поворотами сферы вокруг двух осей, проходящих через неподвижный центр сферы.

Новая полярная ось перпендикулярна новой плоскости проекций, поэтому ее направление задается положением полюса дуги большого круга, проходящей через точки A и B со сферическими координатами (φ_A, ρ_A) и (φ_2, ρ_2) соответственно. Следовательно, первая часть решения задачи заключается в определении координат полюса дуги, заданной сферическими координатами двух ее точек (см. задачи 2.20 и 2.21).

Пользуясь сеткой Вульфа, нанесем на кальку стереографические проекции точек A и B и построим стереографическую проекцию дуги большого круга, проходящего через них. Затем построим полюс

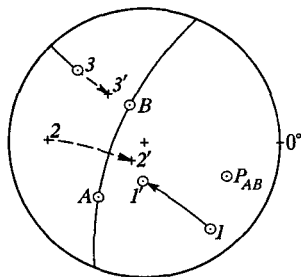


Рис. 2.11. Замена плоскости проекций. Полюс P_{AB} — новый центр проекций. Точки $1'$, $2'$ и $3'$ — стереографические проекции точек 1, 2 и 3 соответственно после замены плоскости проекций

этой дуги P_{AB} и определим сферические координаты этого полюса, которые в этой задаче оказываются равными: $\varphi_{AB} = 24^\circ$, $\rho_{AB} = 65^\circ$ (см. рис. 2.11).

Так как этот полюс является стереографической проекцией новой полярной оси, то замена плоскости проекций осуществляется смещением полюса P_{AB} в центр круга проекций. С помощью сетки Вульфа это смещение осуществляется в два этапа. Сначала поворотом кальки на

угол φ_{AB} полюс P_{AB} перемещается на экватор сетки (горизонтальный диаметр). Для определенности поместим полюс в его правую половину экватора шаблона. Поворот сферы проекций на угол, равный ρ_{AB} , вокруг вертикального диаметра шаблона совместит полюс P_{AB} с центром сетки. При этом дуга большого круга (с точками A и B) переместится и займет положение крайнего левого меридиана. Заданные точки 1 , 2 и 3 также переместятся в том же направлении вдоль своих параллелей на то же угловое расстояние ρ_{AB} (равное 65° в данной задаче). Точка 1 , находящаяся в верхнем полушарии, передвинется влево на угол 65° и займет положение $1'$. Точка 2 расположена в нижнем полушарии, поэтому она сдвинется в противоположном направлении — вправо тоже на угол 65° и примет положение $2'$. Точка 3 , сначала сместившись влево до периферийной окружности на угловое расстояние 19° , затем перейдет в нижнее полушарие и передвинется вправо по той же параллели сетки еще на угол 46° . В результате исходная точка 3 займет положение $3'$ (см. рис. 2.11).

Полученные точки $1'$, $2'$ и $3'$ отмечаются на той же кальке. Измерение сферических координат новых проекций исходных точек можно провести с помощью сетки Вульфа. Полярные расстояния определяются однозначно, как описано в решении задачи 2.17. Азимут (долготу) удобно отсчитывать от старой отметки $\varphi = 0$, сделанной на кальке около периферийной окружности. В данной задаче сферические координаты точек $1'$, $2'$ и $3'$ на новой плоскости проекций имеют следующие значения: $\varphi'_1 = 97^\circ$, $\rho'_1 = 32^\circ$; $\varphi'_2 = 127^\circ$, $\rho'_2 = 160^\circ$ и $\varphi'_3 = 235^\circ$, $\rho'_3 = 131^\circ$.

Примечание. Если мы будем рассчитывать новые сферические координаты заданных направлений для новой плоскости проекции аналитическим преобразованием системы координат, то мы получим новые значения долготы (азимута) относительно нового начала отсчета азимута. Различие значений азимутальных углов при этом равняется долготе полюса новой проекции φ_{AB} .

2.27. Вычислить сферические координаты φ_B и ρ_B точки B , диаметрально противоположной точке A с координатами $\varphi_A = 232^\circ$, $\rho_A = 35^\circ$. Изобразить положение точек на стереографической проекции.

Решение. Диаметрально противоположные точки по определению лежат на концах любого диаметра сферы. Если эти точки не совпадают с полюсами сферической системы координат, всегда существует единственная плоскость, содержащая данный диаметр и полярную ось. Эта плоскость рассекает сферу по двум диаметрам, пересечения которых с экватором дадут азимуты (долготы) диаметрально противоположных точек. Отсюда сразу следует, что азимутальные углы этих точек различаются на 180° .

Если азимут φ_A точки A меньше 180° , то азимут диаметрально противоположной точки φ_B вычисляется простым сложением $\varphi_B = \varphi_A + 180^\circ$. Если же азимут φ заданной точки A превышает 180° , то сложение проводится по модулю 360° , и азимут φ_B вычисляется по формуле $\varphi_B = \varphi_A - 180^\circ$.

Полярные углы диаметрально противоположных точек ρ_A и ρ_B являются взаимно дополняющими до 180° , что хорошо видно на рис. 2.12а. Следовательно, координата ρ_B диаметрально противоположной точки всегда вычисляется как разность $\rho_B = 180^\circ - \rho_A$.

В данной задаче для точки B , диаметрально противоположной заданной точке A , получаем следующие значения сферических координат:

$$\varphi_B = 232^\circ - 180^\circ = 52^\circ \quad \text{и} \quad \rho_B = 180^\circ - 35^\circ = 145^\circ.$$

Изображение диаметрально противоположных точек на стереографической проекции выполняется согласно правилам, приведенным в решении задачи 2.17. Связи сферических координат диаметрально противоположных точек, приведенные выше, обуславливают особенности взаиморасположения стереографических проекций этих точек. Обе проекции лежат на одной прямой, проходящей через центр круга проекции. Если одна точка принадлежит верхнему полушарию, то другая — нижнему, и наоборот. Следовательно, на стереографической проекции диаметрально противоположные точки всегда изображаются крестиком и кружком (см. рис. 2.12б). Исключением является частный случай, когда диаметрально противоположные точки лежат на экваторе.

Примечание 1. Примерами диаметрально противоположных точек являются точки пересечения сферы осью, проходящей через центр сферы.

Примечание 2. Северный и южный полюсы сферической системы координат являются особым случаем диаметрально противоположных точек. Их полярные углы различаются на 180° , а долготы (азимуты) имеют неопределенные значения.

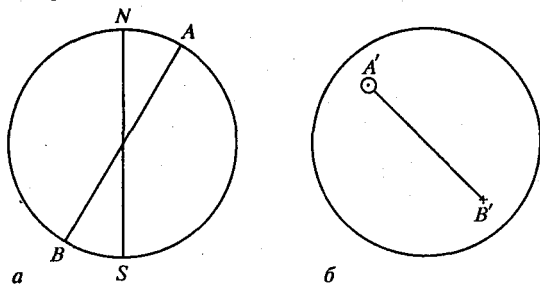


Рис. 2.12. К решению задачи 2.27: а) сечение сферической системы координат, содержащее диаметрально противоположные точки A и B . N и S — северный и южный полюсы сферы; б) круг стереографической проекции. A' и B' — стереографические проекции диаметрально противоположных точек A и B

2.28. Две точки на сфере заданы сферическими координатами $\varphi_1 = 75^\circ$, $\rho_1 = 42^\circ$, и $\varphi_2 = 8^\circ$, $\rho_2 = 31^\circ$. Построить стереографическую проекцию оси, лежащей в плоскости проекции, поворотом вокруг которой совмещаются две заданные точки. Определить величину угла поворота.

Решение. С помощью сетки Вульфа отметим обе исходные точки на кальке. Так как точки 1 и 2 совмещаются поворотом, то они находятся на одинаковом угловом расстоянии от оси симметрии, т.е. располагаются на окружности некоторого малого круга. Повернем кальку так, чтобы точки 1 и 2 расположились на одной параллели. По условиям задачи проекции точек выхода поворотной оси располагаются на периферийной окружности. Отметим точки обоих полюсов, которые и будут представлять собой проекции выходов оси симметрии. Угол поворота отсчитывается вдоль параллели от точки 1 до точки 2. Этот угол равен 45° . Вернув кальку в исходное положение, обнаружим, что точки выхода оси имеют долготы 30° и 210° .

Примечание 1. Угол поворота, совмещающего заданные точки, не является угловым расстоянием α_{12} между этими точками. Угол α_{12} является кратчайшим угловым расстоянием между точками сферы и отсчитывается по дуге большого круга. Для измерения угла α_{12} необходимо повернуть кальку так, чтобы точки 1 и 2 оказались на одном меридиане. Отсчет происходит вдоль найденного меридиана. В данной задаче угловое расстояние $\alpha_{12} \sim 40^\circ$.

Примечание 2. Если заданные точки принадлежат разным полушариям сферы, то измерение угла поворота осуществляется с переходом через периферийную окружность, как это описано в решениях задач 2.25 и 2.26.

2.29. Два направления (луча) заданы сферическими координатами $\varphi_1 = 15^\circ$, $\rho_1 = 28^\circ$ и $\varphi_2 = 298^\circ$, $\rho_2 = 70^\circ$. Построить стереографическую проекцию плоскости отражения, относительно которой симметричны данные направления. Найти координаты полюса этой плоскости.

Решение. Пользуясь шаблоном с сеткой Вульфа, отмечаем на кальке стереографические проекции заданных направлений — точки 1 и 2. Поворотом кальки точки 1 и 2 выводим на общую параллель сетки и прочерчиваем дугу малого круга между точками 1 и 2. Угловое расстояние между этими точками делим пополам и на параллели отмечаем точку 3. Последняя точка принадлежит стереографической проекции искомой плоскости. Стереографическая проекция части плоскости, находящейся в

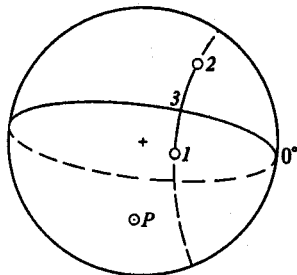


Рис. 2.13.

К решению задачи 2.29

верхней полусфере, изображается меридианом, проходящим через точку 3. Стереографическая проекция части плоскости, находящейся в нижней полусфере, изображается зеркально меридианом относительно центрального (см. рис. 2.13). Нахождение точки полюса и определение его коорди-

нат выполняется согласно решению задачи 2.20. В результате получим, что при заданных условиях сферические координаты полюса имеют значения: $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 60^\circ$.

2.30. Два направления (луча) заданы сферическими координатами $\varphi_1 = 16^\circ$, $\rho_1 = 76^\circ$ и $\varphi_2 = 54^\circ$, $\rho_2 = 35^\circ$. Построить стереографическую проекцию поворотной оси 2-го порядка, относительно которой симметричны два заданных направления. Определить сферические координаты выхода оси.

Решение. Изобразим на кальке стереографические проекции заданных направлений — точки 1 и 2. Поворотом кальки переведем эти точки на общий меридиан сетки Вульфа. Дугу найденного меридиана между точками 1 и 2 разделим пополам. Полученная точка будет представлять собой стереографическую проекцию искомой оси 2-го порядка (точнее, проекцию точки пересечения верхней полусферы искомой осью 2-го порядка). В данной задаче сферические координаты выхода искомой оси 2-го порядка через верхнюю полусферу имеют значения $\varphi_0 = 16^\circ$, $\rho_0 = 76^\circ$.

Примечание. Обычно на стереографической проекции изображается только точка пересечения осью верхней полусферы. Точка второго выхода оси (точка пересечения осью нижней полусферы) может быть построена как диаметрально противоположная (см. задачу 2.27).

2.31. Полюсы A и B двух дуг больших кругов заданы сферическими координатами $\varphi_A = 15^\circ$, $\rho_A = 42^\circ$ и $\varphi_B = 328^\circ$, $\rho_B = 88^\circ$. Построить стереографическую проекцию оси, поворотом вокруг которой совмещаются эти дуги большого круга. Определить величину угла поворота.

Решение. На кальке, пользуясь шаблоном с сеткой Вульфа, отметим полюсы A и B и построим соответствующие дуги больших кругов (см. задачу 2.22). Полученные дуги представляют собой стереографические проекции плоскостей, проходящих через центр сферы проекций. Совмещение дуг больших кругов производится поворотом вокруг прямой линии пересечения соответствующих плоскостей. Эта прямая является искомой поворотной осью. На стереографической проекции точка пересечения дуг больших кругов C представляет собой проекцию точки поворотной оси на верхней полусфере (см. рис. 2.14). Определяя сферические координаты точки C (см. задачу 2.20), получим значения $\varphi_C = 237^\circ$, $\rho_C = 56^\circ$.

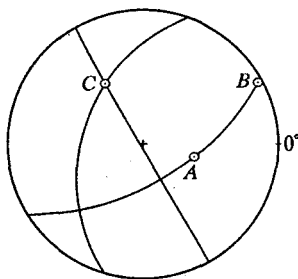


Рис. 2.14.

К решению задачи 2.31

Рассматривая полученную точку как полюс, построим новую дугу большого круга. Эта дуга является стереографической проекцией плос-

кости, перпендикулярной линии пересечения исходных плоскостей. На этой дуге оказываются расположенными полюсы A и B , так как они являются проекциями нормалей исходных плоскостей (см. рис. 2.14). Совмещение дуг больших кругов эквивалентно совмещению полюсов соответствующих плоскостей. Поэтому искомым углом поворота отсчитывается по построенной дуге между точками A и B , как рекомендовано в решении задач 2.18 и 2.19.

О т в е т. Сферические координаты оси, поворотом вокруг которой совмещаются заданные дуги большого круга: $\varphi_C = 237^\circ$, $\rho_C = 56^\circ$. Угол поворота равен 60° .

2.32. Направление оси 4-го порядка задано сферическими координатами $\varphi_A = 30^\circ$, $\rho_A = 45^\circ$. Некоторая точка имеет сферические координаты $\varphi_1 = 114^\circ$, $\rho_1 = 62^\circ$. Построить стереографические проекции точек, симметрично эквивалентных исходной относительно поворота вокруг заданной оси. Определить сферические координаты полученных точек.

Р е ш е н и е. Сначала с помощью сетки Вульфа на кальке строятся стереографические проекции оси (точка A) и исходной точки 1 (см. рис. 2.15). Затем поворотом кальки точки 1 и A выводятся на общий меридиан. Так как двукратный поворот 4-го порядка эквивалентен повороту 2-го порядка, то легко построить стереографическую проекцию точки 2 , получаемой из точки 1 поворотом на 180° вокруг оси A . Для этого вдоль найденного меридиана от точки A откладываем в противоположную сторону от точки 1 угловое расстояние α_{1A} , равное углу между точками 1 и A . Тем самым получим первую эквивалентную точку 2 .

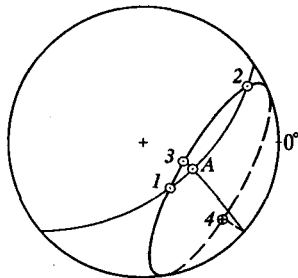


Рис. 2.15.

К решению задачи 2.32

Для нахождения двух других эквивалентных точек следует построить малый круг радиуса α_{1A} с центром в точке A , согласно рекомендациям, изложенным в решении задач 2.24 и 2.25. В данной задаче часть малого круга разместится в нижней полусфере (см. рис. 2.15). Искомые эквивалентные точки 3 и 4 должны совмещаться с найденными точками 1 и 2 поворотом на 90° . Воспользуемся тем, что параллели и меридианы сетки Вульфа в любой точке пересекаются под прямым углом. Поворотом кальки выведем точки 1 и 2 на общую параллель. Тогда точка A (проекция оси) и искомые точки 3 и 4 расположатся на одном и том же меридиане сетки Вульфа, точнее на пересечении этим меридианом ранее построенного малого круга. Исходные данные настоящей задачи таковы, что точка 3 принадлежит верхней полусфере. Напротив, точка 4 оказывается в нижней полусфере и находится на пересечении зеркально симметричного меридиана с дугой малого круга, расположенного в нижней полусфере (см. рис. 2.15).

Примечание. Все четыре точки 1, 2, 3 и 4 лежат на одной окружности малого круга, центр которого не совпадает с проекцией оси (точкой *A*).

Ответ. Точки 1, 2, 3 и 4, эквивалентные относительно поворота вокруг заданной оси 4-го порядка, имеют следующие сферические координаты: $\varphi_1 = 114^\circ$, $\rho_1 = 62^\circ$; $\varphi_2 = 248^\circ$, $\rho_2 = 26^\circ$; $\varphi_3 = 101^\circ$, $\rho_3 = 48^\circ$; $\varphi_4 = 46^\circ$, $\rho_4 = 110^\circ$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

2.33. Измерить угол между направлениями, заданными следующими парами сферических координат, указанными в таблице:

- 1) $\varphi_1 = 77^\circ$, $\rho_1 = 63^\circ$ и $\varphi_2 = 65^\circ$, $\rho_2 = 41^\circ$;
- 2) $\varphi_1 = 149^\circ$, $\rho_1 = 24^\circ$ и $\varphi_2 = 136^\circ$, $\rho_2 = 97^\circ$;
- 3) $\varphi_1 = 95^\circ$, $\rho_1 = 102^\circ$ и $\varphi_2 = 267^\circ$, $\rho_2 = 49^\circ$;
- 4) $\varphi_1 = 179^\circ$, $\rho_1 = 45^\circ$ и $\varphi_2 = 253^\circ$, $\rho_2 = 25^\circ$;
- 5) $\varphi_1 = 42^\circ$, $\rho_1 = 132^\circ$ и $\varphi_2 = 121^\circ$, $\rho_2 = 53^\circ$;
- 6) $\varphi_1 = 42^\circ$, $\rho_1 = 91^\circ$ и $\varphi_2 = 307^\circ$, $\rho_2 = 179^\circ$;
- 7) $\varphi_1 = 61^\circ$, $\rho_1 = 109^\circ$ и $\varphi_2 = 43^\circ$, $\rho_2 = 113^\circ$;
- 8) $\varphi_1 = 127^\circ$, $\rho_1 = 74^\circ$ и $\varphi_2 = 234^\circ$, $\rho_2 = 12^\circ$;
- 9) $\varphi_1 = 143^\circ$, $\rho_1 = 92^\circ$ и $\varphi_2 = 96^\circ$, $\rho_2 = 63^\circ$;
- 10) $\varphi_1 = 96^\circ$, $\rho_1 = 171^\circ$ и $\varphi_2 = 26^\circ$, $\rho_2 = 24^\circ$.

2.34. Построить полюс большого круга, проходящего через две точки сферы, заданные следующими парами сферических координат:

- 1) $\varphi_1 = 17^\circ$, $\rho_1 = 36^\circ$ и $\varphi_2 = 115^\circ$, $\rho_2 = 14^\circ$;
- 2) $\varphi_1 = 292^\circ$, $\rho_1 = 48^\circ$ и $\varphi_2 = 33^\circ$, $\rho_2 = 139^\circ$;
- 3) $\varphi_1 = 84^\circ$, $\rho_1 = 10^\circ$ и $\varphi_2 = 62^\circ$, $\rho_2 = 98^\circ$;
- 4) $\varphi_1 = 172^\circ$, $\rho_1 = 84^\circ$ и $\varphi_2 = 12^\circ$, $\rho_2 = 82^\circ$;
- 5) $\varphi_1 = 224^\circ$, $\rho_1 = 12^\circ$ и $\varphi_2 = 302^\circ$, $\rho_2 = 34^\circ$;
- 6) $\varphi_1 = 202^\circ$, $\rho_1 = 152^\circ$ и $\varphi_2 = 74^\circ$, $\rho_2 = 72^\circ$;
- 7) $\varphi_1 = 162^\circ$, $\rho_1 = 106^\circ$ и $\varphi_2 = 336^\circ$, $\rho_2 = 174^\circ$;
- 8) $\varphi_1 = 237^\circ$, $\rho_1 = 45^\circ$ и $\varphi_2 = 226^\circ$, $\rho_2 = 127^\circ$;
- 9) $\varphi_1 = 342^\circ$, $\rho_1 = 88^\circ$ и $\varphi_2 = 14^\circ$, $\rho_2 = 76^\circ$;
- 10) $\varphi_1 = 268^\circ$, $\rho_1 = 114^\circ$ и $\varphi_2 = 69^\circ$, $\rho_2 = 125^\circ$.

Найти сферические координаты полюса.

2.35. Точки сферы со следующими сферическими координатами являются полюсами дуг большого круга:

- 1) $\varphi_0 = 78^\circ$, $\rho_0 = 62^\circ$;
- 2) $\varphi_0 = 235^\circ$, $\rho_0 = 44^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 92^\circ$, $\rho_0 = 87^\circ$;
- 4) $\varphi_0 = 334^\circ$, $\rho_0 = 34^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 184^\circ$, $\rho_0 = 10^\circ$;
- 6) $\varphi_0 = 166^\circ$, $\rho_0 = 68^\circ$;
- 7) $\varphi_0 = 272^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$;
- 8) $\varphi_0 = 352^\circ$, $\rho_0 = 52^\circ$;
- 9) $\varphi_0 = 49^\circ$, $\rho_0 = 26^\circ$;
- 10) $\varphi_0 = 103^\circ$, $\rho_0 = 31^\circ$.

Построить стереографические проекции этих дуг.

2.36. Две дуги больших кругов заданы двумя парами точек (1, 2) и (3, 4) со следующими сферическими координатами соответственно:

- | | | | |
|------------------------------|------------------------|---------------------------|------------------------|
| 1) $\varphi_1 = 53^\circ$, | $\rho_1 = 24^\circ$, | $\varphi_2 = 216^\circ$, | $\rho_2 = 106^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 214^\circ$, | $\rho_3 = 142^\circ$, | $\varphi_4 = 128^\circ$, | $\rho_4 = 16^\circ$; |
| 2) $\varphi_1 = 72^\circ$, | $\rho_1 = 86^\circ$, | $\varphi_2 = 69^\circ$, | $\rho_2 = 164^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 124^\circ$, | $\rho_3 = 14^\circ$, | $\varphi_4 = 312^\circ$, | $\rho_4 = 19^\circ$; |
| 3) $\varphi_1 = 167^\circ$, | $\rho_1 = 32^\circ$, | $\varphi_2 = 23^\circ$, | $\rho_2 = 48^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 46^\circ$, | $\rho_3 = 154^\circ$, | $\varphi_4 = 152^\circ$, | $\rho_4 = 76^\circ$; |
| 4) $\varphi_1 = 298^\circ$, | $\rho_1 = 26^\circ$, | $\varphi_2 = 22^\circ$, | $\rho_2 = 63^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 82^\circ$, | $\rho_3 = 29^\circ$, | $\varphi_4 = 32^\circ$, | $\rho_4 = 94^\circ$; |
| 5) $\varphi_1 = 312^\circ$, | $\rho_1 = 14^\circ$, | $\varphi_2 = 248^\circ$, | $\rho_2 = 46^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 119^\circ$, | $\rho_3 = 93^\circ$, | $\varphi_4 = 24^\circ$, | $\rho_4 = 69^\circ$; |
| 6) $\varphi_1 = 113^\circ$, | $\rho_1 = 116^\circ$, | $\varphi_2 = 103^\circ$, | $\rho_2 = 79^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 262^\circ$, | $\rho_3 = 58^\circ$, | $\varphi_4 = 47^\circ$, | $\rho_4 = 82^\circ$; |
| 7) $\varphi_1 = 118^\circ$, | $\rho_1 = 38^\circ$, | $\varphi_2 = 242^\circ$, | $\rho_2 = 112^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 216^\circ$, | $\rho_3 = 58^\circ$, | $\varphi_4 = 53^\circ$, | $\rho_4 = 62^\circ$; |
| 8) $\varphi_1 = 298^\circ$, | $\rho_1 = 88^\circ$, | $\varphi_2 = 112^\circ$, | $\rho_2 = 94^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 346^\circ$, | $\rho_3 = 128^\circ$, | $\varphi_4 = 208^\circ$, | $\rho_4 = 122^\circ$; |
| 9) $\varphi_1 = 52^\circ$, | $\rho_1 = 48^\circ$, | $\varphi_2 = 150^\circ$, | $\rho_2 = 162^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 132^\circ$, | $\rho_3 = 62^\circ$, | $\varphi_4 = 124^\circ$, | $\rho_4 = 126^\circ$; |
| 10) $\varphi_1 = 92^\circ$, | $\rho_1 = 104^\circ$, | $\varphi_2 = 85^\circ$, | $\rho_2 = 73^\circ$ и |
| $\varphi_3 = 60^\circ$, | $\rho_3 = 5^\circ$, | $\varphi_4 = 35^\circ$, | $\rho_4 = 78^\circ$. |

Измерить угол между этими дугами.

2.37. Две дуги больших кругов A и B заданы сферическими координатами своих полюсов:

- 1) $\varphi_A = 96^\circ$, $\rho_A = 12^\circ$, $\varphi_B = 165^\circ$, $\rho_B = 40^\circ$;
- 2) $\varphi_A = 106^\circ$, $\rho_A = 54^\circ$, $\varphi_B = 151^\circ$, $\rho_B = 52^\circ$;
- 3) $\varphi_A = 112^\circ$, $\rho_A = 15^\circ$, $\varphi_B = 95^\circ$, $\rho_B = 60^\circ$;
- 4) $\varphi_A = 206^\circ$, $\rho_A = 67^\circ$, $\varphi_B = 32^\circ$, $\rho_B = 18^\circ$;
- 5) $\varphi_A = 116^\circ$, $\rho_A = 28^\circ$, $\varphi_B = 138^\circ$, $\rho_B = 74^\circ$;
- 6) $\varphi_A = 134^\circ$, $\rho_A = 68^\circ$, $\varphi_B = 232^\circ$, $\rho_B = 48^\circ$;
- 7) $\varphi_A = 323^\circ$, $\rho_A = 4^\circ$, $\varphi_B = 154^\circ$, $\rho_B = 22^\circ$;
- 8) $\varphi_A = 222^\circ$, $\rho_A = 40^\circ$, $\varphi_B = 173^\circ$, $\rho_B = 9^\circ$;
- 9) $\varphi_A = 332^\circ$, $\rho_A = 23^\circ$, $\varphi_B = 313^\circ$, $\rho_B = 58^\circ$;
- 10) $\varphi_A = 226^\circ$, $\rho_A = 13^\circ$, $\varphi_B = 273^\circ$, $\rho_B = 8^\circ$.

Измерить угол между этими дугами.

2.38. Направление (луч) задано сферическими координатами ρ_0 и φ_0 . Построить стереографическую проекцию всевозможных направлений (лучей), образующих угол α с заданным:

- 1) $\varphi_0 = 110^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$, $\alpha = 25^\circ$;
- 2) $\varphi_0 = 180^\circ$, $\rho_0 = 20^\circ$, $\alpha = 42^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 30^\circ$, $\rho_0 = 60^\circ$, $\alpha = 45^\circ$;
- 4) $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 30^\circ$, $\alpha = 60^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 270^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$, $\alpha = 30^\circ$;
- 6) $\varphi_0 = 120^\circ$, $\rho_0 = 80^\circ$, $\alpha = 40^\circ$;
- 7) $\varphi_0 = 300^\circ$, $\rho_0 = 120^\circ$, $\alpha = 75^\circ$;
- 8) $\varphi_0 = 45^\circ$, $\rho_0 = 150^\circ$, $\alpha = 20^\circ$;
- 9) $\varphi_0 = 10^\circ$, $\rho_0 = 100^\circ$, $\alpha = 50^\circ$;
- 10) $\varphi_0 = 75^\circ$, $\rho_0 = 90^\circ$, $\alpha = 65^\circ$.

2.39. Направление (луч) задано сферическими координатами φ_1 и ρ_1 . Новая плоскость проекций задана ее полюсом со сферическими координатами φ_0 и ρ_0 . Найти новые сферические координаты φ'_1 и ρ'_1 направления (луча) относительно новой плоскости

проекций:

- | | | | |
|-------------------------------|-----------------------|---------------------------|------------------------|
| 1) $\varphi_0 = 108^\circ$, | $\rho_0 = 32^\circ$, | $\varphi_1 = 46^\circ$, | $\rho_1 = 110^\circ$; |
| 2) $\varphi_0 = 172^\circ$, | $\rho_0 = 12^\circ$, | $\varphi_1 = 264^\circ$, | $\rho_1 = 42^\circ$; |
| 3) $\varphi_0 = 56^\circ$, | $\rho_0 = 26^\circ$, | $\varphi_1 = 168^\circ$, | $\rho_1 = 143^\circ$; |
| 4) $\varphi_0 = 231^\circ$, | $\rho_0 = 70^\circ$, | $\varphi_1 = 156^\circ$, | $\rho_1 = 35^\circ$; |
| 5) $\varphi_0 = 3^\circ$, | $\rho_0 = 80^\circ$, | $\varphi_1 = 212^\circ$, | $\rho_1 = 173^\circ$; |
| 6) $\varphi_0 = 34^\circ$, | $\rho_0 = 42^\circ$, | $\varphi_1 = 331^\circ$, | $\rho_1 = 56^\circ$; |
| 7) $\varphi_0 = 121^\circ$, | $\rho_0 = 63^\circ$, | $\varphi_1 = 64^\circ$, | $\rho_1 = 166^\circ$; |
| 8) $\varphi_0 = 172^\circ$, | $\rho_0 = 22^\circ$, | $\varphi_1 = 207^\circ$, | $\rho_1 = 68^\circ$; |
| 9) $\varphi_0 = 100^\circ$, | $\rho_0 = 38^\circ$, | $\varphi_1 = 328^\circ$, | $\rho_1 = 96^\circ$; |
| 10) $\varphi_0 = 152^\circ$, | $\rho_0 = 8^\circ$, | $\varphi_1 = 236^\circ$, | $\rho_1 = 32^\circ$. |

2.40. Плоскость, проходящую через две точки, заданные парами сферических координат: φ_A, ρ_A и φ_B, ρ_B , принять за новую плоскость проекций. Изобразить положение точки с исходными сферическими координатами φ_1, ρ_1 на новой плоскости проекций. Найти сферические координаты φ'_1 и ρ'_1 данной точки относительно новой плоскости проекций:

- | | | | |
|-------------------------------|------------------------|---------------------------|------------------------|
| 1) $\varphi_A = 226^\circ$, | $\rho_A = 66^\circ$, | $\varphi_B = 352^\circ$, | $\rho_B = 142^\circ$, |
| $\varphi_1 = 154^\circ$, | $\rho_1 = 38^\circ$; | | |
| 2) $\varphi_A = 68^\circ$, | $\rho_A = 122^\circ$, | $\varphi_B = 204^\circ$, | $\rho_B = 46^\circ$, |
| $\varphi_1 = 45^\circ$, | $\rho_1 = 137^\circ$; | | |
| 3) $\varphi_A = 125^\circ$, | $\rho_A = 110^\circ$, | $\varphi_B = 290^\circ$, | $\rho_B = 84^\circ$, |
| $\varphi_1 = 146^\circ$, | $\rho_1 = 48^\circ$; | | |
| 4) $\varphi_A = 87^\circ$, | $\rho_A = 98^\circ$, | $\varphi_B = 192^\circ$, | $\rho_B = 10^\circ$, |
| $\varphi_1 = 99^\circ$, | $\rho_1 = 4^\circ$; | | |
| 5) $\varphi_A = 271^\circ$, | $\rho_A = 62^\circ$, | $\varphi_B = 182^\circ$, | $\rho_B = 69^\circ$, |
| $\varphi_1 = 345^\circ$, | $\rho_1 = 148^\circ$; | | |
| 6) $\varphi_A = 168^\circ$, | $\rho_A = 36^\circ$, | $\varphi_B = 223^\circ$, | $\rho_B = 152^\circ$, |
| $\varphi_1 = 237^\circ$, | $\rho_1 = 73^\circ$; | | |
| 7) $\varphi_A = 72^\circ$, | $\rho_A = 16^\circ$, | $\varphi_B = 54^\circ$, | $\rho_B = 18^\circ$, |
| $\varphi_1 = 30^\circ$, | $\rho_1 = 41^\circ$; | | |
| 8) $\varphi_A = 120^\circ$, | $\rho_A = 81^\circ$, | $\varphi_B = 274^\circ$, | $\rho_B = 114^\circ$, |
| $\varphi_1 = 318^\circ$, | $\rho_1 = 138^\circ$; | | |
| 9) $\varphi_A = 207^\circ$, | $\rho_A = 50^\circ$, | $\varphi_B = 52^\circ$, | $\rho_B = 46^\circ$, |
| $\varphi_1 = 296^\circ$, | $\rho_1 = 122^\circ$; | | |
| 10) $\varphi_A = 184^\circ$, | $\rho_A = 30^\circ$, | $\varphi_B = 270^\circ$, | $\rho_B = 106^\circ$, |
| $\varphi_1 = 30^\circ$, | $\rho_1 = 86^\circ$. | | |

2.41. Вычислить сферические координаты точки ρ_B и φ_B диаметрально противоположной данной, имеющей следующие координаты:

- | | | | |
|------------------------------|------------------------|-------------------------------|------------------------|
| 1) $\varphi_A = 38^\circ$, | $\rho_A = 56^\circ$; | 2) $\varphi_A = 286^\circ$, | $\rho_A = 132^\circ$; |
| 3) $\varphi_A = 45^\circ$, | $\rho_A = 14^\circ$; | 4) $\varphi_A = 322^\circ$, | $\rho_A = 82^\circ$; |
| 5) $\varphi_A = 174^\circ$, | $\rho_A = 115^\circ$; | 6) $\varphi_A = 205^\circ$, | $\rho_A = 47^\circ$; |
| 7) $\varphi_A = 214^\circ$, | $\rho_A = 146^\circ$; | 8) $\varphi_A = 28^\circ$, | $\rho_A = 68^\circ$; |
| 9) $\varphi_A = 153^\circ$, | $\rho_A = 158^\circ$; | 10) $\varphi_A = 346^\circ$, | $\rho_A = 71^\circ$. |

Изобразить положение точек на стереографической проекции.

2.42. Две точки на сфере заданы следующими координатами:

- | | | | | |
|------------------------------|----------------------|---|---------------------------|------------------------|
| 1) $\varphi_1 = 108^\circ$, | $\rho_1 = 36^\circ$ | и | $\varphi_2 = 333^\circ$, | $\rho_2 = 58^\circ$; |
| 2) $\varphi_1 = 54^\circ$, | $\rho_1 = 28^\circ$ | и | $\varphi_2 = 41^\circ$, | $\rho_2 = 86^\circ$; |
| 3) $\varphi_1 = 66^\circ$, | $\rho_1 = 122^\circ$ | и | $\varphi_2 = 72^\circ$, | $\rho_2 = 77^\circ$; |
| 4) $\varphi_1 = 22^\circ$, | $\rho_1 = 135^\circ$ | и | $\varphi_2 = 335^\circ$, | $\rho_2 = 154^\circ$; |
| 5) $\varphi_1 = 44^\circ$, | $\rho_1 = 58^\circ$ | и | $\varphi_2 = 75^\circ$, | $\rho_2 = 142^\circ$. |

Построить стереографическую проекцию плоскости отражения, относительно которой симметричны данные направления. Найти координаты полюса этой плоскости.

2.43. Два направления (луча) заданы следующими сферическими координатами:

- | | | | | |
|------------------------------|----------------------|---|---------------------------|------------------------|
| 1) $\varphi_1 = 68^\circ$, | $\rho_1 = 62^\circ$ | и | $\varphi_2 = 161^\circ$, | $\rho_2 = 134^\circ$; |
| 2) $\varphi_1 = 26^\circ$, | $\rho_1 = 32^\circ$ | и | $\varphi_2 = 334^\circ$, | $\rho_2 = 73^\circ$; |
| 3) $\varphi_1 = 48^\circ$, | $\rho_1 = 110^\circ$ | и | $\varphi_2 = 42^\circ$, | $\rho_2 = 140^\circ$; |
| 4) $\varphi_1 = 42^\circ$, | $\rho_1 = 25^\circ$ | и | $\varphi_2 = 181^\circ$, | $\rho_2 = 53^\circ$; |
| 5) $\varphi_1 = 54^\circ$, | $\rho_1 = 18^\circ$ | и | $\varphi_2 = 260^\circ$, | $\rho_2 = 137^\circ$. |
| 6) $\varphi_1 = 22^\circ$, | $\rho_1 = 112^\circ$ | и | $\varphi_2 = 155^\circ$, | $\rho_2 = 170^\circ$; |
| 7) $\varphi_1 = 114^\circ$, | $\rho_1 = 24^\circ$ | и | $\varphi_2 = 346^\circ$, | $\rho_2 = 57^\circ$; |
| 8) $\varphi_1 = 34^\circ$, | $\rho_1 = 38^\circ$ | и | $\varphi_2 = 159^\circ$, | $\rho_2 = 104^\circ$; |
| 9) $\varphi_1 = 18^\circ$, | $\rho_1 = 66^\circ$ | и | $\varphi_2 = 96^\circ$, | $\rho_2 = 89^\circ$; |
| 10) $\varphi_1 = 34^\circ$, | $\rho_1 = 72^\circ$ | и | $\varphi_2 = 359^\circ$, | $\rho_2 = 105^\circ$. |

Построить стереографическую проекцию плоскости отражения, относительно которой симметричны данные направления. Найти координаты полюса этой плоскости.

2.44. Два направления (луча) заданы следующими сферическими координатами:

- 1) $\varphi_1 = 150^\circ$, $\rho_1 = 56^\circ$ и $\varphi_2 = 341^\circ$, $\rho_2 = 68^\circ$;
- 2) $\varphi_1 = 24^\circ$, $\rho_1 = 112^\circ$ и $\varphi_2 = 220^\circ$, $\rho_2 = 96^\circ$;
- 3) $\varphi_1 = 52^\circ$, $\rho_1 = 44^\circ$ и $\varphi_2 = 116^\circ$, $\rho_2 = 105^\circ$;
- 4) $\varphi_1 = 32^\circ$, $\rho_1 = 20^\circ$ и $\varphi_2 = 125^\circ$, $\rho_2 = 112^\circ$;
- 5) $\varphi_1 = 38^\circ$, $\rho_1 = 65^\circ$ и $\varphi_2 = 60^\circ$, $\rho_2 = 26^\circ$;
- 6) $\varphi_1 = 120^\circ$, $\rho_1 = 36^\circ$ и $\varphi_2 = 346^\circ$, $\rho_2 = 32^\circ$;
- 7) $\varphi_1 = 8^\circ$, $\rho_1 = 74^\circ$ и $\varphi_2 = 193^\circ$, $\rho_2 = 102^\circ$;
- 8) $\varphi_1 = 24^\circ$, $\rho_1 = 68^\circ$ и $\varphi_2 = 201^\circ$, $\rho_2 = 140^\circ$;
- 9) $\varphi_1 = 12^\circ$, $\rho_1 = 38^\circ$ и $\varphi_2 = 169^\circ$, $\rho_2 = 136^\circ$;
- 10) $\varphi_1 = 44^\circ$, $\rho_1 = 58^\circ$ и $\varphi_2 = 217^\circ$, $\rho_2 = 76^\circ$.

Построить стереографическую проекцию поворотной оси 2-го порядка, относительно которой симметричны два заданных направления. Определить сферические координаты выхода оси.

2.45. Полюса A и B двух дуг большого круга заданы следующими сферическими координатами:

- 1) $\varphi_A = 196^\circ$, $\rho_A = 55^\circ$ и $\varphi_B = 233^\circ$, $\rho_B = 44^\circ$;
- 2) $\varphi_A = 334^\circ$, $\rho_A = 35^\circ$ и $\varphi_B = 167^\circ$, $\rho_B = 74^\circ$;
- 3) $\varphi_A = 310^\circ$, $\rho_A = 50^\circ$ и $\varphi_B = 140^\circ$, $\rho_B = 86^\circ$;
- 4) $\varphi_A = 195^\circ$, $\rho_A = 20^\circ$ и $\varphi_B = 290^\circ$, $\rho_B = 36^\circ$;
- 5) $\varphi_A = 164^\circ$, $\rho_A = 40^\circ$ и $\varphi_B = 272^\circ$, $\rho_B = 51^\circ$.

Построить стереографическую проекцию оси, поворотом вокруг которой совмещаются эти дуги большого круга. Определить величину угла поворота.

2.46. Направление оси 4-го порядка задано сферическими координатами φ_A , ρ_A . Некоторая точка сферы имеет сферические координаты φ_1 , ρ_1 . Для ниже приведенных числовых значений координат построить стереографические проекции точек, симметрично эквивалентных исходной относительно поворотов вокруг заданной оси, и определить сферические координаты полученных точек:

- 1) $\varphi_A = 70^\circ$, $\rho_A = 36^\circ$ и $\varphi_1 = 35^\circ$, $\rho_1 = 12^\circ$;
- 2) $\varphi_A = 108^\circ$, $\rho_A = 54^\circ$ и $\varphi_1 = 38^\circ$, $\rho_1 = 22^\circ$;
- 3) $\varphi_A = 90^\circ$, $\rho_A = 40^\circ$ и $\varphi_1 = 42^\circ$, $\rho_1 = 76^\circ$;
- 4) $\varphi_A = 210^\circ$, $\rho_A = 15^\circ$ и $\varphi_1 = 66^\circ$, $\rho_1 = 70^\circ$;
- 5) $\varphi_A = 180^\circ$, $\rho_A = 72^\circ$ и $\varphi_1 = 86^\circ$, $\rho_1 = 24^\circ$.

Глава 3

ТОЧЕЧНАЯ СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

3.1. Основные положения теории групп

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

3.1. Выяснить, является ли группой множество всех действительных чисел относительно операции умножения.

Решение. Для решения подобных задач, во-первых, необходимо убедиться, что данное множество замкнуто относительно заданной бинарной операции. В рассматриваемом случае произведение любых двух действительных чисел всегда есть действительное число, т.е. множество всех действительных чисел замкнуто относительно операции умножения чисел.

Во-вторых, следует проверить выполнение всех «групповых постулатов». Умножение любых трех действительных чисел всегда ассоциативно, т.е. данный «постулат» выполняется. Для нахождения единичного элемента e мы должны решить уравнение

$$r \times e = e \times r = r,$$

которое должно выполняться для всех действительных чисел r . Это уравнение имеет единственное решение $e = 1$.

Выясним, можно ли каждому элементу r данного множества сопоставить обратный элемент r^{-1} , принадлежащий тому же множеству. Для этого необходимо решить уравнение

$$r \times r^{-1} = r^{-1} \times r = e.$$

Этому уравнению удовлетворяют пары чисел r и $1/r$. При этом, если $r \neq 0$, то действительному числу r соответствует действительное число $1/r$. Для $r = 0$ это утверждение не справедливо. Таким образом, группой относительно операции умножения чисел является множество всех действительных чисел, исключая ноль.

3.2. Построить группу, приняв за генераторы матрицы

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

а в качестве групповой операции — операцию умножения матриц. Найти все ее подгруппы, построить квадрат Кейли.

Решение. Решение подобных задач удобно начать с построения таблицы умножения группы — ее квадрата Кейли. Для этого начертим контуры таблицы и запишем данные в условии задачи генераторы, а также единичный элемент в соответствующих клетках первой строки и первого столбца квадрата Кейли:

	e	A	B		
e					
A					
B					

Построение группы удобно начинать с построения циклических подгрупп, порожденных каждым генератором. Матрица A порождает подгруппу второго порядка с групповым множеством $\{A, e\}$, матрица B — циклическую подгруппу также второго порядка $\{B, e\}$. В этом легко убедиться, умножая матрицы A и B на себя:

$$A \times A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e,$$

$$B \times B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e.$$

Исходя из этого, мы можем заполнить соответствующие клетки квадрата Кейли. С учетом очевидных равенств $A \times e = e \times A = A$ и $B \times e = e \times B = B$, мы можем получить следующий фрагмент квадрата Кейли:

	e	A	B		
e	e	A	B		
A	A	e			
B	B		e		

Далее вычислим произведение

$$A \times B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Полученная матрица представляет собой новый элемент группы, который обозначим через C . Таким образом,

$$A \times B = C.$$

Аналогично получаем

$$B \times A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = C.$$

Перемножая соответствующие матрицы, можно непосредственно получить:

$$A \times C = C \times A = B, \quad C \times C = e.$$

Таким образом, квадрат Кейли данной группы можно записать в виде

	e	A	B	C
e	e	A	B	C
A	A	e	C	B
B	B	C	e	A
C	C	B	A	e

Мы получили конечную группу четвертого порядка. Кроме тривиальной подгруппы, состоящей из одного единичного элемента, полученная группа содержит две циклические подгруппы второго порядка.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

3.3. Построить группу, приняв в качестве генератора матрицу

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

В качестве операции группового умножения принять операцию умножения матриц. Построить квадрат Кейли, найти все подгруппы.

3.4. Построить группу, приняв в качестве генераторов матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad B = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

В качестве операции группового умножения принять операцию умножения матриц. Построить квадрат Кейли, найти все подгруппы.

3.5. Выяснить, являются ли группами следующие множества:

- 1) Множество всех целых чисел относительно операции сложения;
- 2) Множество всех целых чисел относительно операции умножения;

- 3) Множество всех рациональных чисел относительно операции умножения;
- 4) Множество всех рациональных чисел относительно операции сложения;
- 5) Множество всех действительных чисел относительно операции сложения;
- 6) Множество всех корней уравнения $y^n = 1$ относительно операции умножения комплексных чисел.

3.6. Выяснить, являются ли группами множества:

- 1) Множество всех векторов вида $\mathbf{T} = u\mathbf{a}$, где u — множество всех целых чисел, относительно операции сложения векторов;
- 2) Множество всех векторов вида $\mathbf{T} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b}$, где u, v принадлежат множеству всех целых чисел, относительно операции сложения векторов;
- 3) Множество всех векторов вида $\mathbf{T} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$, где u, v, w принадлежат множеству всех целых чисел, относительно операции сложения векторов.

3.7. Выяснить, являются ли группами относительно операции умножения матриц множества всех матриц вида:

$$1) A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \det A = 1,$$

a_{ij} — любые действительные числа;

$$2) A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \det A = -1,$$

a_{ij} — любые действительные числа.

3.8. Построить групповое множество, квадрат Кейли и найти подгруппы групп матриц, приняв за генераторы:

$$1) \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad 2) \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$3) \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad 4) \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

В качестве групповой операции взять операцию умножения матриц.

3.9. Построить групповое множество, квадрат Кейли и найти подгруппы групп матриц, приняв за генераторы:

$$1) A \cong \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$2) A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$3) A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

В качестве групповой операции взять операцию умножения матриц.

3.10. Показать, что все группы третьего порядка взаимно изоморфны.

3.11. Выяснить, являются ли взаимно изоморфными группы, порожденные матрицами:

$$1) A_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$2) A_1 = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad A_2 = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$3) A_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$4) A_1 = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

3.12. Выяснить, являются ли взаимно изоморфными группы, порожденные генераторами A_1, B_1 и A_2, B_2 :

$$A_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad B_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad B_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

3.13. По заданным генераторам построить группу, найти ее подгруппы и записать разложения по левым и правым смежным классам. Какие из подгрупп являются инвариантными (нормальными делителями):

$$1) A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \text{ и } B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

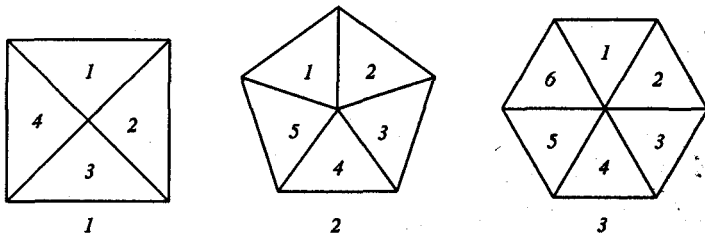
$$2) A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}?$$

3.14. Рассмотрим множество поворотов пространства вокруг некоторой оси. Введем операцию «умножения» поворотов, состоящую в том, что «произведение» двух поворотов представляет собой поворот на угол, равный сумме углов поворотов «сомножителей» по модулю 360° . Построить группы, приняв за генераторы повороты на следующие углы: 1) 90° ; 2) 120° ; 3) 60° . Построить квадраты Кейли, найти подгруппы. Определить, какие группы из задачи 3.8 изоморфны получившимся группам.

3.15. Найти условия, при которых множество поворотов является конечной группой.

3.16. Показать, что если порядок группы — простое число, то такая группа является циклической.

3.17. Построить группы перестановок, относительно которых инвариантны приведенные многоугольники. Указать их подгруппы.



3.18. Пронумеровать грани правильного тетраэдра числами 1, 2, 3, 4. Найти группу перестановок, относительно которых инвариантен данный тетраэдр.

3.19. Доказать, что множество всех линейных преобразований координат точек трехмерного пространства вида

$$x'_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3,$$

$$x'_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3,$$

$$x'_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3$$

образует группу. Указать операцию группового умножения.

3.20. Доказать, что множество всех линейных преобразований координат точек трехмерного пространства вида

$$x'_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \tau_1,$$

$$x'_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \tau_2,$$

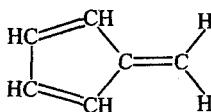
$$x'_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \tau_3$$

образует группу. Указать операцию группового умножения.

3.2. Операции и элементы симметрии

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

3.21. Определить элементы и операции симметрии плоской молекулы



Решение. Введем систему координат: ось x направим вниз, ось y — вправо, ось z — перпендикулярно рисунку. Плоскость, в которой лежит молекула, является для нее зеркальной плоскостью симметрии. Операция симметрии m_z отражает молекулу и каждый атом в себя, меняя местами лицевую и обратную части атомов. Вторая плоскость симметрии m_x перпендикулярна первой плоскости и параллельна координатной плоскости yz . Операция симметрии m_x отражает верхнюю часть молекулы в нижнюю, а нижнюю — в верхнюю. По линии пересечения этих плоскостей симметрии проходит поворотная ось второго порядка. Операция симметрии 2_y поворачивает молекулу на 180° вокруг этой оси, совмещая ее при этом с собой.

3.22. К множеству операций симметрии $m_x, m_y, m_z, 2_x, 2_y, 2_z$ добавить операции симметрии, которые сделают его группой.

Решение. Перемножив попарно операции симметрии заданной совокупности: $m_x \times m_x = e$, $m_x \times m_y = 2_z$, $m_x \times 2_x = \bar{1}$ и т. д., получим только две новые операции симметрии e и $\bar{1}$. Перемножая между собой все полученные операции и операции заданной совокупности, находим, что получившееся множество замкнуто относительно операции умножения. Групповое множество имеет вид

$$G = \{e, \bar{1}, m_x, m_y, m_z, 2_x, 2_y, 2_z\}.$$

Полученная группа имеет порядок $n = 8$.

3.23. Какой операции симметрии зеркального поворота тождественна операция инверсионного поворота $\bar{6}$?

Решение. Операцию симметрии поворота с инверсией $\bar{6}$ можно описать как действие сложной операции: поворот вокруг оси на элементарный угол $\varphi = 360^\circ/n = 60^\circ$ ($n = 6$) и инверсию в точке. Изобразим ее действие на стереографической проекции (рис. 3.1).

Исходный крестик 1 операцией поворота $\bar{6}$ будет переведен в положение 2, из которого операция инверсии $\bar{1}$ переведет его в кружок 3 (рис. 3.1а). Чтобы получить кружок 3 из крестика 1 операцией зеркального поворота, необходимо повернуть крестик 1 против часовой стрелки на угол $\varphi' = 180^\circ - 60^\circ = 120^\circ$ в положение 4, что будет соответствовать операции 3^{-1} (рис. 3.1б). Затем операцией отражения в плоскости симметрии m , совпадающей с плоскостью рисунка, перевести его в кру-

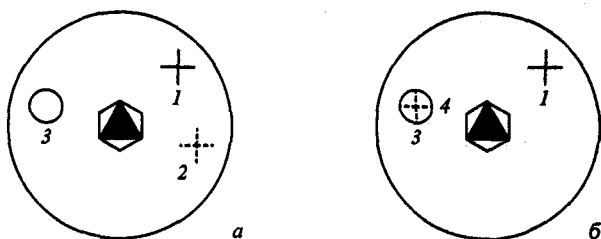


Рис. 3.1. К решению задачи 3.23

жок 3 (рис. 3.1б). Действию этих двух простых операций 3^{-1} и m эквивалентна операция зеркального поворота 3^{-1} . Следует отметить, что положения крестиков 2 и 4 приведены только для наглядного показа действия сложных операций.

3.24. Показать, что поворотная ось шестого порядка геометрически совпадает с поворотными осями второго и третьего порядка.

Решение. Групповое множество операций симметрии, отвечающих оси шестого порядка, запишем в виде

$$G = \{e, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5\}.$$

Порядок группы равен $n = 6$. Нетривиальными подгруппами этой группы, согласно теореме Лагранжа, могут быть группы порядка $n = 2$ и $n = 3$. Изобразим на стереографической проекции (рис. 3.2) действие операций множества G .

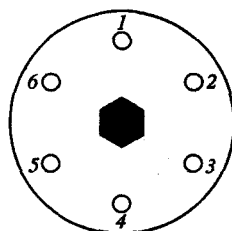


Рис. 3.2.
К решению задачи 3.24

Кружок 1 операцией $e = 6^6$ переводится сам в себя, операцией 6 (поворотом на 60°) — в кружок 2, операцией 6^2 — в кружок 3 и т. д. Из проекции видно, что кружок 4, полученный операцией 6^3 , может быть также получен поворотом вокруг оси, совпадающей по направлению с осью шестого порядка, на угол $\varphi = 180^\circ$, т.е. операцией 2. Следовательно, операция 6^3

эквивалентна операции 2. Повторное действие операции 2 переводит кружок 4 в кружок 1. Поэтому можем выделить подгруппу операций $G = \{e, 2\}$ порядка $n = 2$, соответствующую оси второго порядка. Этой же операцией поворота попарно связаны кружки 2 и 5, 3 и 6.

Далее видим, что кружок 1 переводится в кружок 3 поворотом на угол $\varphi = 120^\circ$, т.е. операция 6^2 эквивалентна операции 3, а в кружок 5 — поворотом на угол $\varphi = 240^\circ$, т.е. операция 6^4 эквивалентна операции 3^2 . Наконец, поворотом на угол $\varphi = 360^\circ$ кружок 1 самосовмещается, т.е. операция 6^6 эквивалентна операции 3^3 , и обе равны операции e . Полученное групповое подмножество операций $G = \{e, 3, 3^2\}$ порядка $n = 3$ соответствует оси третьего порядка.

Найденные подгруппы можно легко получить также построением квадрата Кейли.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

3.25. Определить элементы симметрии плоских молекул, изображенных на рис. 3.3.

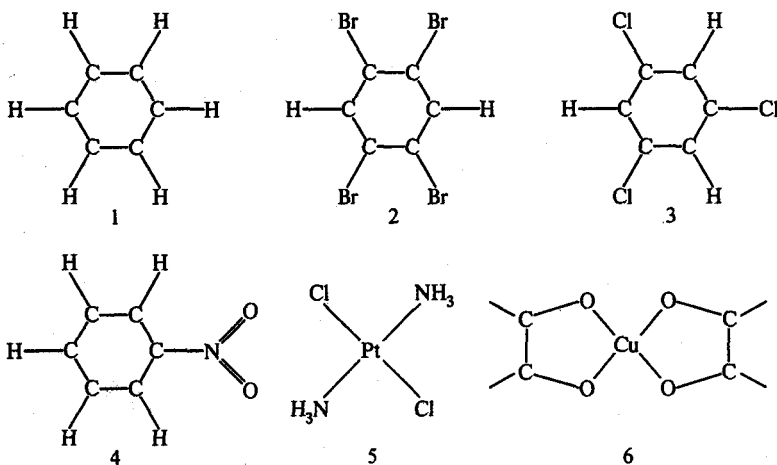


Рис. 3.3. К условию задачи 3.25

3.26. Определить элементы симметрии объемных молекул, изображенных на рис. 3.4. (Сечение молекулы на (2), (3) и (7) представляет собой квадрат, на (5), (6) и (8) — равносторонний треугольник, на (1) все углы O—C—O составляют 120° .)

3.27. Перечислить элементы симметрии многогранников, изображенных на рис. 3.5.

3.28. Какие элементы симметрии эквивалентны сложным осям симметрии: 1) $\bar{3}$; 2) $\bar{3}$; 3) $\bar{6}$; 4) $\bar{6}$?

3.29. Показать, что групповое множество, отвечающее инверсионной оси третьего порядка, содержит в себе подмножество, соответствующее поворотной оси третьего порядка.

3.30. Показать, что групповое множество, отвечающее зеркально-поворотной оси четвертого порядка, содержит в себе подмножество, соответствующее поворотной оси второго порядка.

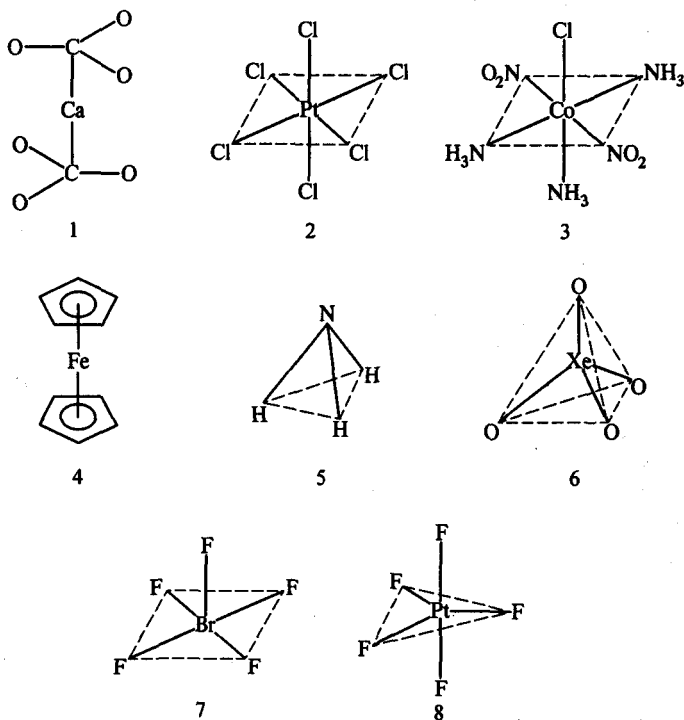


Рис. 3.4. К условию задачи 3.26

3.31. Показать, что групповое множество, отвечающее инверсионной оси шестого порядка, содержит в себе подмножество, соответствующее поворотной оси третьего порядка.

3.32. Показать эквивалентность зеркально-поворотной оси третьего порядка и инверсионной оси шестого порядка.

3.33. Показать эквивалентность зеркально-поворотной оси четвертого порядка и инверсионной оси четвертого порядка.

3.34. Показать эквивалентность зеркально-поворотной оси шестого порядка и инверсионной оси третьего порядка.

3.35. Перечислить операции симметрии, самосовмещающие молекулы, изображенные на рис. 3.3: варианты 1–4.



Рис. 3.5. К условию задачи 3.27

3.36. Какую операцию симметрии необходимо добавить к перечисленным операциям симметрии, чтобы получилась группа:

- 1) $\{e, 2_z, m_z, \dots\}$;
- 2) $\{e, 2_x, 2_y, \dots\}$;
- 3) $\{3^1, 3^{-1}, \dots\}$;
- 4) $\{2_x, 2_y, 2_z, 3^1, 3^2, \dots\}$;
- 5) $\{e, 3^1, 3^2, \bar{3}^1, \bar{3}^{-1}, \dots\}$;
- 6) $\{e, 4^1, 4^{-1}, \dots\}$;
- 7) $\{e, 2, 4^1, \dots\}$;
- 8) $\{e, 2_x, 2_y, 2_z, m, 4^1, 4^{-1}, \dots\}$;
- 9) $\{e, 2, 3^1, 3^{-1}, 6^{-1}, \dots\}$;
- 10) $\{e, m, 3^1, 3^{-1}, \bar{6}^{-1}, \dots\}$?

3.37. Указать, какие из перечисленных множеств операций симметрии соответствуют одному элементу симметрии:

- 1) $\{3^1, 3^2, 3^3\}$;
- 2) $\bar{3}^1, \bar{3}^2, \bar{3}^3$;
- 3) $\{e, \bar{1}, 3^1, 3^{-1}, \bar{3}^1, \bar{3}^{-1}\}$;
- 4) $\{2, 4^1, 4^{-1}, 4^4\}$;
- 5) $\{e, 2, 4^1, 4^{-1}\}$;
- 6) $\{4^1, 4^2, 4^3, 4^4, m\}$;
- 7) $\{m, 3^1, 3^2, 3^3, \bar{6}^1, \bar{6}^{-1}\}$;
- 8) $\{e, 2, 3^1, 3^{-1}, 6^1, 6^{-1}\}$;
- 9) $\{m, \bar{1}, 3^1, 3^{-1}, \bar{3}^1, \bar{6}^1\}$.

3.38. Какой операции зеркального поворота соответствует операция инверсионного поворота:

- 1) $\bar{1}$;
- 2) $\bar{3}^3$;
- 3) $\bar{5}^5$;
- 4) $\bar{4}^1$;
- 5) $\bar{6}^5$?

3.39. Какой операции поворота с инверсией соответствует операция зеркального поворота:

- 1) $\overset{\circ}{1}$; 2) $\overset{\circ}{3}^1$; 3) $\overset{\circ}{4}^1$; 4) $\overset{\circ}{6}^3$; 5) $\overset{\circ}{6}^5$?

3.40. Какой операции симметрии эквивалентны операции:

- 1) $\overset{\circ}{6}^3$; 2) $\overset{\circ}{6}^3$; 3) $\overset{\circ}{6}^3$?

3.41. Какая операция симметрии связывает точки с координатами:

- 1) x, y, z и $-x, -y, -z$; 2) x, y, z и $x, -y, -z$;
 3) x, y, z и $x, y, -z$; 4) x, y, z и $-y, x, z$;
 5) x, y, z и $y, -x, -z$?

3.3. Матричный метод описания операций симметрии

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

3.42. Записать матрицу операции отражения в плоскости xz . Определить, является ли данная операция операцией первого или второго рода.

Решение. Операция симметрии m_{xz} — это отражение в плоскости симметрии, нормаль к которой параллельна диагонали координатной плоскости xz . В результате симметрического преобразования, тройка базисных векторов X, Y, Z перейдет в тройку базисных векторов X', Y', Z' (рис. 3.6), а матрица этого преобразования имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Определитель этой матрицы равен

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = -1,$$

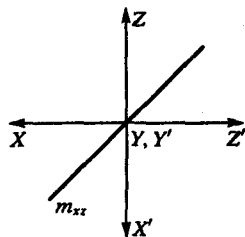


Рис. 3.6.

т.е. операция m_{xz} — операция второго рода.

К решению задачи 3.42

3.43. Какому преобразованию соответствуют последовательно выполненные операции отражения в плоскости m_y и поворота вокруг оси 2_{xy} ?

Решение. Запишем и перемножим матрицы симметрических преобразований операций $m_y \times 2_{xy}$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Полученная матрица соответствует операции инверсионного поворота на 90° против часовой стрелки вокруг оси Z , т.е. $\bar{4}^1$. Итак, произведение операций равно $m_y \times 2_{xy} = \bar{4}^1$.

3.44. Проверить матричным методом, будет ли выполняться соотношение

$$3_z \times 2_x = 2_x \times 3_z.$$

Решение. Запишем матрицы данных операций симметрии. В гексагональной системе координат матрицы этих операций и результат их умножения будут выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} 3_z \times 2_x &= \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Полученная матрица соответствует операции симметрии 2_y . Аналогично имеем

$$2_x \times 3_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Эта матрица соответствует операции 2_u . Поскольку в результате перемножения $3_z \times 2_x$ и $2_x \times 3_z$ получили матрицы разных операций симметрии, равенство не выполняется. Другими словами, повороты 2_x и 3_z некоммумутативны.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

3.45. Записать матрицу преобразования операции симметрии в кристаллографической системе координат и определить какого рода эта операция:

- | | | | | | |
|---------------------|------------------------|---------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| 1) 2_x ; | 2) 2_y ; | 3) 2_z ; | 4) 2_{xy} ; | 5) $2_{\bar{xy}}$; | 6) 2_{xz} ; |
| 7) 2_{yz} ; | 8) m_x ; | 9) m_y ; | 10) m_z ; | 11) m_{xy} ; | 12) $m_{\bar{xy}}$; |
| 13) $\bar{1}$; | 14) 3_z^1 ; | 15) 3_z^{-1} ; | 16) $\bar{3}_z^1$; | 17) 4_x^1 ; | 18) 4_y^1 ; |
| 19) 4_z^1 ; | 20) 4_z^{-1} ; | 21) $\bar{4}_z^1$; | 22) $\bar{4}_z^{-1}$; | 23) 6_z^1 ; | 24) 6_z^{-1} ; |
| 25) $\bar{6}_z^1$; | 26) $\bar{6}_z^{-1}$; | 27) 3_{xyz}^1 ; | 28) $3_{\bar{xyz}}^1$; | 29) $3_{\bar{xy}z}^1$; | 30) $3_{x\bar{y}z}^1$. |

3.46. В кристаллографической системе координат найти матрицу симметрического преобразования, эквивалентную последовательному действию двух операций симметрии и определить,

какой операции симметрии она соответствует:

- | | | | |
|--------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------|
| 1) $2_z \times m_z$; | 2) $2_x \times \bar{1}$; | 3) $2_y \times 2_z$; | 4) $2_x \times 2_{xy}$; |
| 5) $2_x \times m_{xy}$; | 6) $m_x \times m_y$; | 7) $m_x \times m_{xy}$; | 8) $m_y \times \bar{1}$; |
| 9) $4_z^1 \times m_z$; | 10) $4_z^1 \times m_x$; | 11) $4_z^1 \times 2_x$; | 12) $\bar{4}_z^1 \times m_x$; |
| 13) $\bar{4}_z^1 \times 2_x$; | 14) $3_z^1 \times m_z$; | 15) $3_z^1 \times m_x$; | 16) $3_z^1 \times 2_y$; |
| 17) $6_z^1 \times m_z$; | 18) $6_z^1 \times m_y$; | 19) $6_z^1 \times 2_x$; | 20) $6_z^1 \times 2_u$; |
| 21) $6_z^1 \times \bar{1}$; | 22) $\bar{6}_z^1 \times m_x$; | 23) $\bar{6}_z^1 \times 2_{yu}$; | 24) $3_{xyz}^1 \times m_x$; |
| 25) $3_{xyz}^1 \times 2_y$; | 26) $3_{xyz}^1 \times m_{xy}$; | 27) $4_x^1 \times 4_y^1$; | 28) $4_x^1 \times 2_{xy}$; |
| 29) $4_x^1 \times 3_{xyz}^1$; | 30) $4_x^1 \times m_{xz}$. | | |

3.47. Проверить, будут ли выполняться соотношения:

- | | |
|--|--|
| 1) $2_x \times 2_y = 2_y \times 2_x$; | 2) $m_x \times m_y = m_y \times m_x$; |
| 3) $2_x \times m_z = m_z \times 2_x$; | 4) $3_z^1 \times m_z = m_z \times 3_z^1$; |
| 5) $6_z^1 \times \bar{1} = \bar{1} \times 6_z^1$; | 6) $2_x \times 2_{xy} = 2_{xy} \times 2_x$; |
| 7) $m_x \times m_{xy} = m_{xy} \times m_x$; | 8) $\bar{6}_z^1 \times m_y = m_y \times \bar{6}_z^1$; |
| 9) $4_x^1 \times 4_y^1 = 4_y^1 \times 4_x^1$; | 10) $3_{xyz}^1 \times 2_x = 2_x \times 3_{xyz}^1$. |

3.48. Какие координаты получит точка с координатами x, y, z после действия следующей операции симметрии:

- | | | | | |
|---------------------|---------------|---------------------|-----------------------|-------------------|
| 1) m_y ; | 2) 2_z ; | 3) 2_{xz} ; | 4) 2_{yz} ; | 5) 4_x^1 ; |
| 6) 4_y^1 ; | 7) 4_z^1 ; | 8) 4_z^{-1} ; | 9) $\bar{4}_z^{-1}$; | 10) 3_z^{-1} ; |
| 11) $\bar{3}_z^1$; | 12) 6_z^1 ; | 13) $\bar{6}_z^1$; | 14) 6_z^{-1} ; | 15) 3_{xyz}^1 ? |

3.49. Какие индексы получит грань (hkl) кристалла после симметричных преобразований, заданных в задаче 3.48 ?

3.50. Какие симметричные преобразования связывают следующие грани кристалла:

- | | |
|--|--|
| 1) (hkl) и $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$; | 2) (hkl) и $(kh\bar{l})$; |
| 3) (hkl) и $(hk\bar{l})$; | 4) (hkl) и (khl) ; |
| 5) (hkl) и $(\bar{k}\bar{h}\bar{l})$; | 6) (hkl) и $(k\bar{h}\bar{l})$; |
| 7) (hkl) и $(\bar{k}hl)$; | 8) (hkl) и $(h\bar{h} + \bar{k}l)$; |
| 9) (hkl) и $(h + k\bar{k}l)$; | 10) (hkl) и (klh) ? |

3.4. Точечные группы симметрии

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

3.51. Вывести группу симметрии, приняв за генераторы операции отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, перпендикулярной к одной из плоскостей. Изобразить элементы симметрии группы на стереографической проекции. Дать обозначение группы по Шенфлису и Герману–Могену. Записать элементы группового множества.

Решение. Решение задачи удобно начать с построения стереографической проекции элементов симметрии. Введем систему координат с осями x, y, z , совпадающими с нормальными к плоскостям и с осью симметрии. Построим стереографическую проекцию элементов симметрии генераторов группы, обозначив их $m_x, m_y, 2_y$ (рис. 3.7а).

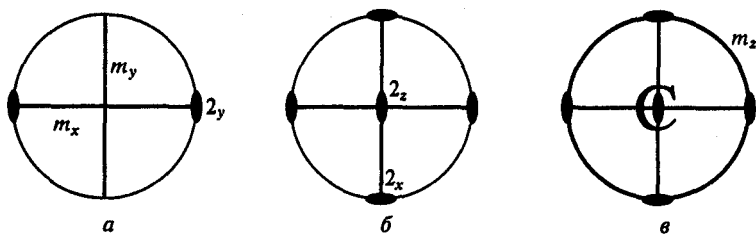


Рис. 3.7. К построению стереографической проекции группы mmm

Используя mmN - и $22N$ -теоремы умножения операций симметрии, получим $m_x \times m_y = 2_z, 2_y \times 2_z = 2_x$ (рис. 3.7б). Далее получим: $m_x \times 2_x = \bar{1}, 2_x \times m_y = m_z$ (рис. 3.7в). Можно убедиться, что дальнейшее перемножение между собой операций симметрии дает уже имеющиеся операции: $m_x \times m_x = 2_x \times 2_x = \bar{1} \times \bar{1} = e, m_x \times m_z = 2_y, 2_x \times \bar{1} = m_x$ и т.д. Таким образом, групповое множество состоит из восьми элементов. Оно записывается символически следующим образом: $G = \{e, m_x, m_y, m_z, 2_x, 2_y, 2_z, \bar{1}\}$. Порядок группы равен восьми.

В кристаллическом пространстве, описываемом данной группой симметрии, имеются три взаимно перпендикулярных особых направления второго порядка — оси второго порядка и совпадающие с ними нормали к плоскостям симметрии. Все три особых направления являются симметрично неэквивалентными. Следовательно, группа принадлежит к ромбической сингонии и имеет полный международный символ (символ Германа–Могена) $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ или сокращенный — mmm . По Шенфлису, группа обозначается символом D_{2h} .

3.52. Дополнить стереографическую проекцию элементов симметрии точечной группы (рис. 3.8) и записать ее обозначение в международной символике и по Шенфлису.

Решение е. Для решения задачи используем тот факт, что элементы симметрии можно «размножать» операциями симметрии группы как обычные точки, прямые и плоскости кристаллического пространства. В этой задаче ось третьего порядка размножится осью четвертого порядка в четыре эквивалентные оси.

Далее будем производить перемножение уже найденных операций симметрии в совокупности с «размножением» полученных элементов симметрии. Из следствия tmN -теоремы найдем, что в группе будут четыре плоскости симметрии, проходящих через ось четвертого порядка и составляющих друг с другом угол 45° (рис. 3.9а), что соответствует половине элементарного угла поворота оси четвертого порядка.

Аналогично через каждую ось третьего порядка должны проходить три плоскости симметрии, составляющих друг с другом угол 60° (рис. 3.9б).

В точках 1 и 3 (рис. 3.9б) пересекаются три плоскости симметрии, расположенные под равными углами 45° друг к другу. По tmN -теореме возникает ось четвертого порядка по линии их пересечения, а также четвертая плоскость симметрии, совпадающая с плоскостью чертежа. В точках 2, 4, 6, 7, 8, 9 пересекаются по две взаимно перпендикулярные плоскости симметрии, что эквивалентно наличию осей второго порядка по линии их пересечения. Наконец, поворот вокруг оси четвертого порядка и отражение в перпендикулярной плоскости дадут центр инверсии (рис. 3.9в).

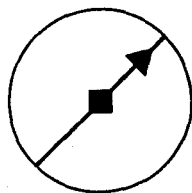


Рис. 3.8.
К условию задачи 3.52

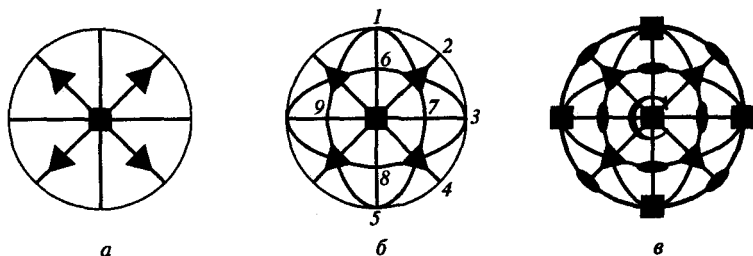


Рис. 3.9. К решению задачи 3.52

Можно убедиться, что, перемножая любые из найденных операций симметрии, будем получать уже ранее найденные элементы симметрии, т.е. полученное множество операций симметрии замкнуто. Обозначение группы: $O_h = \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m} = m\bar{3}m$.

3.53. Записать квадрат Кейли для точечной группы C_{2h} .

Решение. Квадрат Кейли (групповая таблица умножения) позволяет наглядно отобразить все операции симметрии точечной группы, а также операции, эквивалентные произведению двух любых операций симметрии данной группы.

Изобразим стереографическую проекцию группы и выберем на ней, в качестве исходного, крестик 1 (рис. 3.10). Крестик 3 получим, действуя на крестик 1 операцией симметрии 2, а кружки 2 и 4 — операциями m и $\bar{1}$ соответственно. Единичная операция симметрии e переводит крестик 1 в себя.

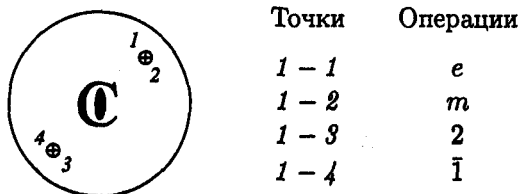


Рис. 3.10. Стереографическая проекция и операции симметрии группы C_{2h}

Порядок группы C_{2h} равен четырем. Квадрат Кейли будет содержать $4 \times 4 = 16$ клеток. В клетках первой строки и первого столбца записываем операции симметрии. В клетках на пересечении строк и столбцов записываем операции симметрии, получающиеся в результате перемножения операций из первого столбца на операции из первой строки. Например, $2 \times 2 = e$, $2 \times m = \bar{1}$, $2 \times \bar{1} = m$ и т. д. Квадрат Кейли имеет вид

e	2	m	$\bar{1}$
2	e	$\bar{1}$	m
m	$\bar{1}$	e	2
$\bar{1}$	m	2	e

3.54. Записать символами Шенфлиса и Германа-Могена точечную группу, заданную кристаллографической формулой (символом Бравэ) L_44L_25PC .

Решение. Кристаллографическая формула (символ Бравэ) отображает вид и количество элементов симметрии, характерных для данной группы. Данная точечная группа характеризуется одной осью четвертого порядка L_4 , четырьмя осями второго порядка L_2 , четырьмя вертикальными и одной горизонтальной плоскостями симметрии P и центром инверсии C . Такой набор элементов симметрии характерен для точечной группы, принадлежащей тетрагональной сингонии. В кристаллическом пространстве с такой точечной симметрией имеются три симме-

трично неэквивалентных особых направления. Одно направление, ось z решетки, располагается параллельно оси четвертого порядка. Второе направление идет по оси $x(y)$ параллельно нормали к плоскости m , а третье — вдоль диагонали между осями x и y и параллельно нормали к другой плоскости m , которая неэквивалентна первой плоскости. В соответствии с правилом записи международных символов точечных групп тетрагональной сингонии на первой позиции записываем характеристику особого направления по оси z — ось четвертого порядка и перпендикулярную ей плоскость симметрии. На второй позиции записываем символ одной из координатных плоскостей симметрии, на третьей — символ диагональной плоскости симметрии. Обозначение группы в символикe Германа–Могена будет $\frac{4}{m}mm$, а по Шенфлису — D_{4h} .

3.55. Перечислить нетривиальные подгруппы точечной группы D_{2h} и записать их групповые множества.

Решение. Группа D_{2h} является группой восьмого порядка и может иметь нетривиальные подгруппы второго и четвертого порядка. С учетом ориентации элементов симметрии относительно кристаллографических осей, подгруппами второго порядка будут:

$$\begin{array}{lll} C_2 = m = \{e, m_x\}; & C_2 = m = \{e, m_y\}; & C_2 = m = \{e, m_z\}; \\ C_2 = 2 = \{e, 2_x\}; & C_2 = 2 = \{e, 2_y\}; & C_2 = 2 = \{e, 2_z\}; \\ C_i = \bar{1} = \{e, \bar{1}\}. & & \end{array}$$

Подгруппами четвертого порядка являются:

$$\begin{array}{ll} C_{2h} = \frac{2}{m} = \{e, 2_x, m_x, \bar{1}\}; & C_{2h} = \frac{2}{m} = \{e, 2_y, m_y, \bar{1}\}; \\ C_{2h} = \frac{2}{m} = \{e, 2_z, m_z, \bar{1}\}; & C_{2v} = mm2 = \{e, m_x, m_y, 2_z\}; \\ C_{2v} = mm2 = \{e, m_x, m_z, 2_y\}; & C_{2v} = mm2 = \{e, m_y, m_z, 2_x\}; \\ D_2 = 222 = \{e, 2_x, 2_y, 2_z\}. & \end{array}$$

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

3.56. Нарисовать полную стереографическую проекцию элементов симметрии точечных групп, для которых генераторы заданы графически на рис. 3.11. Записать обозначение групп по Герману–Могену и Шенфлису.

3.57. Вывести точечные группы симметрии и записать их символы двумя способами. Генераторы заданы следующими операциями симметрии:

1) Поворот вокруг оси второго порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости симметрии;

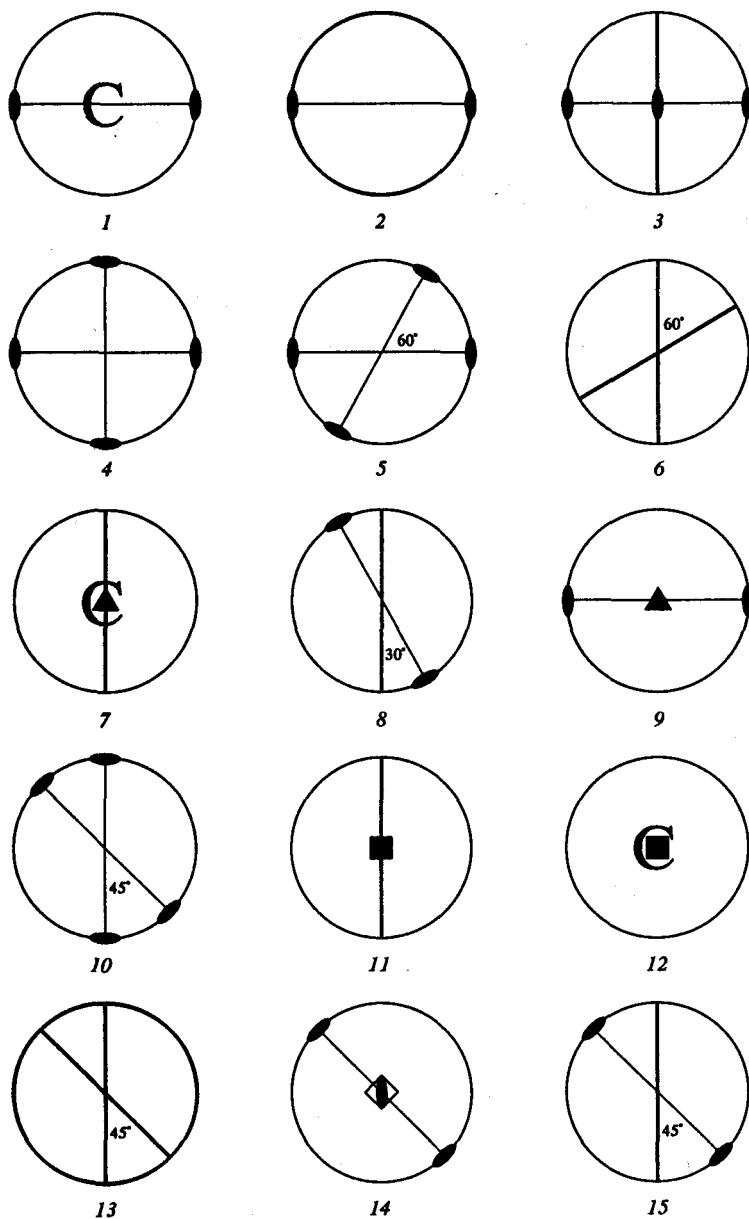


Рис. 3.11 (начало). К задаче 3.56

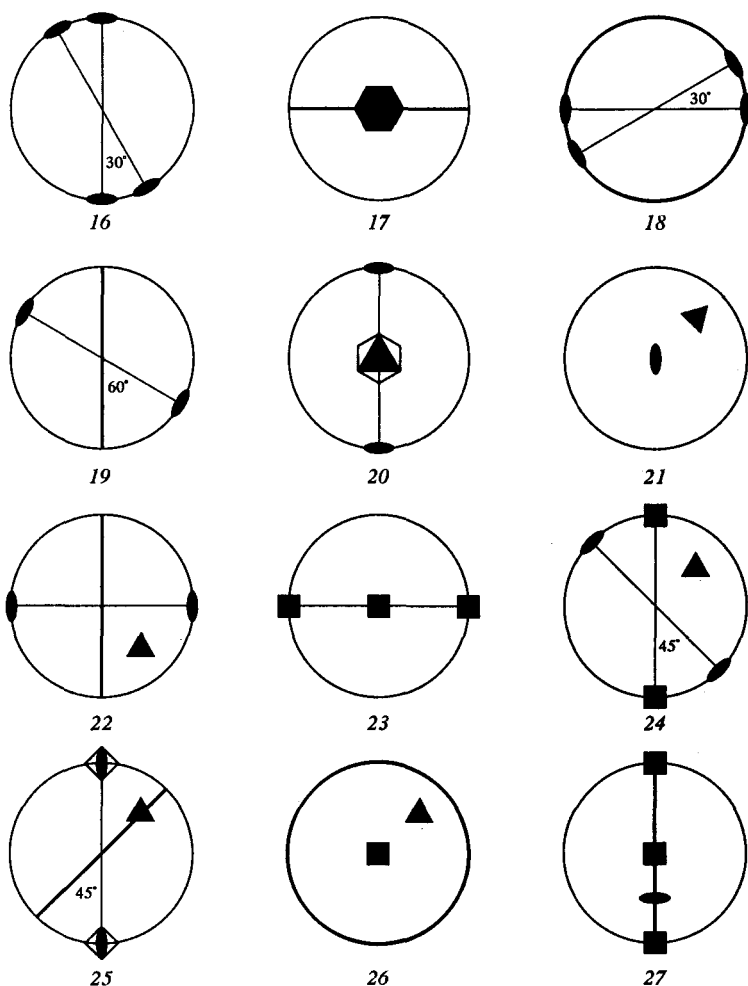


Рис. 3.11 (продолжение). К задаче 3.56

2) Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, лежащей в этой плоскости;

3) Последовательные повороты вокруг двух взаимно перпендикулярных осей второго порядка;

4) Отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, лежащей в одной и перпендикулярной второй плоскости;

- 5) Поворот вокруг оси четвертого порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости симметрии;
- 6) Два последовательных поворота вокруг осей второго порядка, составляющих между собой угол 45° ;
- 7) Последовательные отражения в двух плоскостях симметрии, расположенных под углом 45° друг к другу;
- 8) Последовательные отражения в трех плоскостях симметрии, две из которых пересекаются под углом 45° , а третья им перпендикулярна;
- 9) Последовательные повороты вокруг взаимно перпендикулярных осей четвертого и второго порядка и отражение в центре инверсии;
- 10) Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг зеркальной оси четвертого порядка, лежащей в этой плоскости;
- 11) Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с ней угол 45° ;
- 12) Повороты вокруг двух осей второго порядка, составляющих друг с другом угол 60° ;
- 13) Последовательные отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 60° ;
- 14) Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с плоскостью угол 30° ;
- 15) Последовательные повороты вокруг перпендикулярных друг к другу осей шестого и оси второго порядка;
- 16) Последовательные отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 30° ;
- 17) Последовательные отражения в трех плоскостях симметрии, две из которых пересекаются под углом 30° , а третья им перпендикулярна;
- 18) Отражения в двух пересекающихся под углом 30° плоскостях симметрии и центре инверсии;
- 19) Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с плоскостью угол 60° ;
- 20) Последовательные повороты вокруг перпендикулярных друг к другу зеркальной оси третьего порядка и поворотной оси второго порядка.

3.58. Нарисовать стереографические проекции элементов симметрии точечных групп: C_2 , C_s , C_3 , C_{3i} , C_4 , S_4 , C_6 , C_{6h} , C_{3h} .

3.59. Вывести точечные группы и записать их символы по Шенфлису и Германа–Могену. Генераторы заданы элементами симметрии:

- 1) 4_z и 2_x ;
- 2) $2_z, 2_x$ и $\bar{1}$;
- 3) $6_z, 2_x$ и $\bar{1}$;
- 4) 3_z и m_y ;
- 5) $4_z, m_{xy}$ и 3_{xyz} .

3.60. Записать международные символы (Германа–Могена) точечных групп, заданных символами Шенфлиса:

- 1) C_{3v}, C_{3h}, D_{3h} ;
- 2) C_{4v}, C_{4h}, D_{4h} ;
- 3) C_{6v}, C_{6h}, D_{6h} ;
- 4) T, T_h, T_d .

3.61. Записать символы Шенфлиса точечных групп, заданных международными символами:

- 1) $\bar{1}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$;
- 2) $\bar{3}m, \bar{4}2m, \bar{6}m2, \bar{4}3m$.

3.62. Записать символами Шенфлиса и Германа–Могена точечные группы, заданные кристаллографической формулой (символом Бравэ):

- 1) L_2, P, L_2PC ;
- 2) $3L_2, L_22P, 3L_23PC$;
- 3) $L_4, L_4PC, L_44L_2, L_44P, \bar{L}_4, \bar{L}_42L_22P$;
- 4) $L_3, \bar{L}_3C, L_33L_2, L_33P, \bar{L}_33L_23PC$;
- 5) $L_6, L_6PC, L_66L_2, L_66P, L_66L_27PC, L_3P, L_33L_24P$;
- 6) $3L_24L_3, 3L_24L_33PC, 3L_44L_36L_2, 3\bar{L}_44L_36P, 3L_44L_36L_29PC$.

3.63. Записать стандартными международными символами точечные группы, заданные нестандартным образом в этой же системе обозначений:

- 1) $\frac{2}{m}mm$;
- 2) $22m$;
- 3) $\frac{2}{m}m2$;
- 4) $42m$;
- 5) $\bar{4}22$;
- 6) $\bar{4}mm$;
- 7) $43m$;
- 8) $\frac{4}{m}3$;
- 9) $23m$;
- 10) $62m$.

3.64. Записать квадраты Кейли для следующих точечных групп:

$$1) 222; \quad 2) m\bar{3}m; \quad 3) \frac{4}{m}; \quad 4) 32; \quad 5) \frac{6}{m}.$$

3.65. Записать элементы группового множества для групп:

$$1) S_4; \quad 2) D_{2d}; \quad 3) D_3; \quad 4) C_{3h}; \quad 5) S_6; \quad 6) T.$$

3.66. Указать порядок точечных групп симметрии: D_{2h} , D_{3h} , D_{2d} , D_{3d} , D_{4h} , D_{6h} .

3.67. Перечислить точечные группы, являющиеся подгруппами следующих точечных групп симметрии:

$$1) D_2 = 222; \quad 2) D_{2h} = m\bar{3}m; \quad 3) D_{3d} = \bar{3}m;$$

$$4) D_{4h} = \frac{4}{m} m\bar{3}m; \quad 5) T = 23.$$

3.68. В какие точечные группы симметрии следующие группы входят как подгруппы:

$$1) D_3 = 32; \quad 2) C_6 = 6; \quad 3) S_4 = \bar{4};$$

$$4) D_{2h} = m\bar{3}m; \quad 5) T = 23?$$

3.69. Какая точечная группа симметрии входит как подгруппа в максимальное число точечных групп симметрии?

3.70. Какие две точечные группы симметрии не входят в качестве подгрупп в другие кристаллографические группы?

3.71. Показать, что точечные группы D_{4d} и D_{6d} являются некристаллографическими.

3.72. Какие точечные группы получатся в результате добавления центра инверсии к групповым множествам следующих групп:

$$1) D_2, D_4, D_3, D_6; \quad 2) C_2, C_3, C_4, C_6; \quad 3) C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v};$$

$$4) D_{2d}, D_{3d}, D_{3h}; \quad 5) 23, 432?$$

3.73. Какая новая точечная группа симметрии получится, если к групповому множеству указанной группы добавить новую операцию симметрии?

1) В группе $m\bar{3}m$ — отражение в плоскости, перпендикулярной оси второго порядка;

2) В группе $m\bar{3}m$ — поворот вокруг оси шестого порядка, совпадающей с осью второго порядка;

3) В группе 222 — отражение в плоскости, перпендикулярной одной из осей;

4) В группе 222 — отражение в плоскости, параллельной одной из осей и делящей пополам угол между двумя другими;

- 5) В группе mmm — отражение в плоскости m_{xy} ;
- 6) В группе $\bar{6}$ — отражение в плоскости m_x ;
- 7) В группе $\bar{6}$ — поворот вокруг оси 2_x ;
- 8) В группе $3m$ — поворот вокруг оси 2_x ;
- 9) В группе $\bar{4}2m$ — отражение в плоскости m_z .

3.5. Простые формы кристаллов

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

3.74. Построить гномостереографическую проекцию простых форм в группе C_{2v} .

Решение. Выберем исходную грань в общем положении по отношению к элементам симметрии (рис. 3.12) и размножим ее всеми элементами симметрии. Получатся четыре симметрично-эквивалентные грани, образующих общую простую форму — ромбическую пирамиду $\{hkl\}$, выходы нормалей к граням которой обозначены цифрами 1. Если исходную грань выберем параллельно оси второго порядка, то получим четыре грани (обозначены цифрами 2), образующие частную форму — ромбическую призму $\{hk0\}$. Простая частная форма — диэдр $\{h0l\}$ получится, если исходная грань будет перпендикулярна к одной плоскости симметрии и наклонена к другой. На рисунке она обозначена цифрами 3. Исходная грань, параллельная плоскости симметрии, образует частную форму пинакоид $\{h00\}$, грани которого обозначены цифрами 4. Исходная грань, перпендикулярная оси второго порядка, образует моноэдр с единственной гранью $\{00l\}$ (цифра 5).

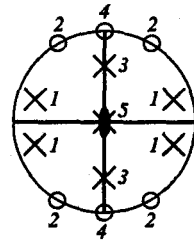


Рис. 3.12. Простые формы группы C_{2v} на гномостереографической проекции

3.75. Записать индексы всех граней ромбододекаэдра.

Решение. Индексы граней ромбододекаэдра можно получить, используя матрицы симметрических преобразований (см. приложения 2 и 3) и правило преобразования индексов плоскостей. Ромбододекаэдр является частной простой формой во всех группах кубической сингонии. Он представляет собой 12-гранник, образованный конгруэнтными гранями в виде ромбов, параллельными диагональным плоскостям симметрии куба, т.е. гранями типа $\{110\}$. Получим ромбододекаэдр как частную простую форму в группе O . Запишем индексы граней, которые получаются из грани (110) операциями симметрии 3_{xyz} и 4_z .

Правило преобразования индексов плоскостей имеет вид

$$\begin{aligned} H &= \alpha_{11}h + \alpha_{12}k + \alpha_{13}l, \\ K &= \alpha_{21}h + \alpha_{22}k + \alpha_{23}l, \\ L &= \alpha_{31}h + \alpha_{32}k + \alpha_{33}l. \end{aligned}$$

Перемножив матрицу преобразования операции 3_{xyz} и столбец индексов грани (110), получим

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Это означает, что полученная грань имеет индексы (101).

Перемножая матрицу преобразования операции 4_z и столбец индексов исходной грани, получим

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

т.е. индексы грани ($1\bar{1}0$).

Аналогично, перемножая остальные матрицы операций симметрии группы O и столбец индексов грани (110), получим индексы других граней: (011), ($\bar{1}10$), ($\bar{1}01$), ($10\bar{1}$), ($0\bar{1}1$), (011), ($\bar{1}\bar{1}0$), ($\bar{1}0\bar{1}$), ($0\bar{1}\bar{1}$).

Следует иметь в виду, что порядок группы O равен 24, а исходная грань ромбододекаэдра находится в частном положении с кратностью позиции, равной 12. Поэтому каждая грань может быть получена двумя операциями симметрии. Например, грань (101) также получится операцией преобразования 4_x^{-1}

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3.76. Определить симметрию многогранника, образованного комбинацией простых форм: дитетрагональной призмы, двух дитетрагональных пирамид и моноэдра.

Решение. Дитетрагональная призма встречается в группах C_{4v} , D_4 , D_{4h} и D_{2d} . Дитетрагональная пирамида и моноэдр могут быть только в одной из этих групп, а именно, в группе C_{4v} . Следовательно, симметрию такого многогранника можно описать в рамках точечной группы симметрии $C_{4v} = 4mm$. Он инвариантен относительно оси четвертого порядка и четырех плоскостей симметрии, параллельных этой оси.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

3.77. Какая простая форма получится в группе C_2 , если исходная грань расположена по отношению к поворотной оси: а) произвольно, б) параллельно, в) перпендикулярно?

3.78. Какие простые формы получатся в группе C_3 , если исходная грань расположена по отношению к поворотной оси: а) произвольно, б) параллельно, в) перпендикулярно?

3.79. Вывести все частные простые формы в группе C_{4h} и построить их гномостереографические проекции.

3.80. Вывести общие простые формы в группах:

- 1) C_n ; 2) C_{nv} ; 3) C_{nh} ; 4) D_n ; 5) D_{nh} ;
6) D_{nd} ; 7) S_2 ; 8) S_4 ; 9) S_6

и построить их гномостереографические проекции.

3.81. В каких группах встречаются простые формы:

- 1) тригональная пирамида;
2) тригональная бипирамида;
3) дитригональная пирамида;
4) дитригональная бипирамида?

3.82. Какие существуют разновидности тетраэдра и в каких группах?

3.83. Для каких групп характерна общая простая форма скаленоида?

3.84. Дать другое название ромбической призмы.

3.85. Дать другое название ромбического тетраэдра.

3.86. В каких группах общей формой является трапецоэдр?

3.87. Как отличить левую и правую энантиоморфные формы трапецоэдра?

3.88. В какой группе тетрагональная бипирамида является общей простой формой и в каких группах частной формой?

3.89. В какой группе гексагональная пирамида является общей простой формой и в каких группах частной простой формой?

3.90. В каких группах ромбоэдр является общей или частной простой формой?

3.91. В группе S_4 грань занимает общее положение. Какая это простая форма? В каких группах она является частной формой?

3.92. Назовите элементы симметрии диэдра осевого и диэдра плоскостного.

3.93. Назовите общие простые формы для всех групп кубической сингонии.

3.94. В каких группах кубической сингонии может быть простая форма: 1) тетраэдр; 2) октаэдр?

3.95. По каким признакам можно определить, к какой точечной группе принадлежит куб?

3.96. Какова симметрия граней куба в каждой кубической точечной группе?

3.97. Как можно получить ромбододекаэдр из:

- 1) пирамидального куба;
- 2) пирамидального октаэдра?

3.98. Какую форму можно считать промежуточной между:

- 1) октаэдром и кубом;
- 2) октаэдром и ромбододекаэдром;
- 3) кубом и ромбододекаэдром?

3.99. Могут ли в огранке кубического кристалла одновременно присутствовать: 1) два куба; 2) два октаэдра; 3) два тетраэдра?

3.100. Какие простые формы кубической сингонии могут встречаться в кристалле только в единственном числе? Какие несколько раз?

3.101. Можно ли получить многогранник, образованный только пинакоидами? В каких группах?

3.102. В каких группах могут быть только закрытые простые формы?

3.103. Перечислить группы, в которых могут быть только открытые простые формы. Какие это простые формы?

3.104. Какие закрытые простые формы существуют в ромбической сингонии?

3.105. Изобразить на гномостереографической проекции простые формы группы 222.

3.106. Изобразить на гномостереографической проекции общую простую форму групп: 1) D_3 , 2) D_{3h} , 3) D_{3d} .

3.107. Изобразить на гномостереографической проекции ромбоэдр в группах D_3 , D_{3d} , C_{3i} .

3.108. Записать индексы всех граней простой формы, полученной в группе C_{4h} размножением грани в общем положении.

3.109. Записать индексы всех граней простой формы, полученной в группе D_4 размножением грани (101).

3.110. Записать индексы всех граней гексагональной бипирамиды, если исходная грань имеет индексы: 1) $(10\bar{1}1)$; 2) $(11\bar{2}1)$.

3.111. Записать индексы всех граней простой формы, полученной в группе C_3 размножением грани, параллельной оси третьего порядка и:

- 1) расположенной произвольно по отношению к координатным осям x и y ;
- 2) отсекающей равные отрезки на осях x и y ;
- 3) параллельной оси y .

3.112. Определить симметрию многогранника, образованного комбинацией простых форм:

- 1) ромбической призмы, диэдра и моноэдра;
- 2) ромбической призмы и ромбического тетраэдра;
- 3) дитетрагональной призмы, двух дитетрагональных пирамид и моноэдра;
- 4) дитетрагональной призмы и тетрагонального тетраэдра;
- 5) дитетрагональной призмы и дитетрагональной бипирамиды;
- 6) дитетрагональной бипирамиды и тетрагональной бипирамиды;
- 7) дитригональной пирамиды и двух моноэдров;
- 8) гексагональной призмы, тригональной пирамиды и моноэдра;
- 9) ромбоэдра и дигексагональной призмы;
- 10) тригональной призмы и ромбоэдра;
- 11) гексагональной призмы и гексагонального трапецоэдра;
- 12) дигексагональной призмы, гексагональной пирамиды и моноэдра;
- 13) дитригональной бипирамиды, тригональной призмы и пинакоида;
- 14) куба, октаэдра и ромбододекаэдра;
- 15) куба, тетраэдра и пентагондододекаэдра;
- 16) пирамидального октаэдра и пентагондододекаэдра;
- 17) пирамидального куба и пирамидального тетраэдра;
- 18) пентагонтриоктаэдра и ромбододекаэдра.

3.113. Какое минимальное число простых форм может иметь многогранник с симметрией: 1) C_2 ; 2) C_3 ; 3) C_4 ; 4) C_{3i} ; 5) C_{3h} ; 6) C_{4h} ; 7) C_{6v} ; 8) D_{3d} ; 9) T_h .

3.6. Принципы Кюри и Неймана

ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

3.114. Кристалл NaCl поместили в однородное электрическое поле, вектор напряженности которого совпадает с направлением $[1\bar{1}0]$. Найти симметрию кристалла в поле.

Решение. В соответствии с принципом Кюри симметрия кристалла в однородном поле определяется группой, которая является пересечением групп симметрии кристалла и поля. В данной задаче это пересечение точечной группы симметрии кристалла NaCl — O_h и однородного электрического поля — $C_{\infty v}$:

$$G = O_h \cap (C_{\infty v})_{[1\bar{1}0]}.$$

Изобразим элементы симметрии на стереографических проекциях (рис. 3.13).

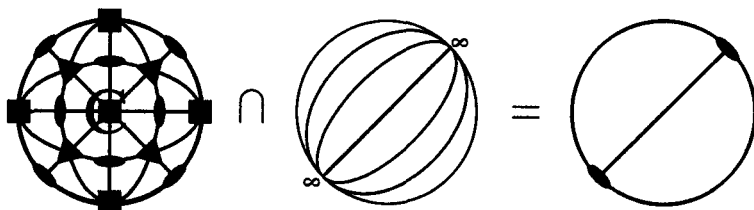


Рис. 3.13. К решению задачи 3.114

Как видно из рисунка, общими элементами симметрии групп O_h и $C_{\infty v}$ в данном случае являются ось второго порядка и две плоскости симметрии. Следовательно, группа симметрии NaCl в данном электрическом поле понижается до ромбической C_{2v} .

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

3.115. К кристаллу с точечной группой симметрии T приложено однородное электрическое поле вдоль направления:

- 1) $[100]$; 2) $[110]$; 3) $[111]$; 4) $[hk0]$; 5) $[hkk]$; 6) $[hkl]$.

Найти симметрию кристалла в поле.

3.116. К кристаллу дигидрофосфата калия (KDP) с точечной группой симметрии $D_{2d} = \bar{4}2m$ приложено однородное электрическое поле вдоль направления: 1) $[001]$; 2) $[010]$; 3) $[110]$; 4) $[\bar{1}11]$. Найти симметрию кристалла в поле.

3.117. Как следует направить однородное электрическое поле, чтобы оптически одноосный кристалл с симметрией D_{4h} остался одноосным?

3.118. В каком направлении нужно приложить однородное электрическое поле к кристаллу сфалерита (точечная группа T_d), чтобы его симметрия понизилась до: 1) гексагональной; 2) ромбической; 3) моноклинной; 4) триклинной?

3.119. Кристалл NaCl поместили в однородное электрическое поле, вектор напряженности которого совпадает с направлением: 1) оси четвертого порядка; 2) оси третьего порядка; 3) произвольно ориентированным в плоскости m . Найти симметрию кристалла в поле.

3.120. Определить симметрию кристалла с точечной группой $O = 432$ в поле одноосного механического растяжения, приложенного вдоль кристаллографического направления:

- 1) $[100]$; 2) $[110]$; 3) $[111]$; 4) $[hk0]$; 5) $[hkl]$.

3.121. Определить симметрию кристалла кварца (точечная группа D_3) в поле одноосного механического сжатия, приложенного вдоль направления: 1) оси третьего порядка; 2) оси второго порядка.

3.122. Симметрия граней кристалла описывается одной из «плоских» точечных групп $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, C_s, C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$. При измерении микротвердости кристалла на его грани ставится отпечаток четырехгранной алмазной пирамиды (ее симметрия C_{4v}). Пользуясь принципом Кюри, определить максимальную симметрию, которую может приобрести отпечаток при вдавлении алмазной пирамиды в различных случаях симметрии грани.

3.123. Определить симметрию кристалла с точечной группой D_{4h} в однородном магнитном поле, действующем в направлении: 1) вдоль оси четвертого порядка; 2) перпендикулярно оси четвертого порядка; 3) вдоль оси второго порядка.

3.124. Определить симметрию кристалла сегнетовой соли (точечная группа D_2) в однородном магнитном поле, действующем в направлении: 1) $[100]$; 2) $[110]$; 3) $[111]$.

3.125. Пользуясь принципом Неймана, определить возможные точечные группы симметрии пиромагнитных кристаллов (кристаллов, имеющих спонтанную намагниченность).

3.126. Пользуясь принципом Неймана, определить возможные точечные группы симметрии кристаллов, в которых может проявляться пьезоэлектрический эффект.

3.127. Определить симметрию монокристалла титаната бария в сегнетоэлектрической фазе, если вектор спонтанной поляризации направлен вдоль $[001]$. Группа симметрии $BaTiO_3$ в параэлектрической фазе O_h .

3.128. Как нужно вырезать пластинку из сфалерита (ZnS , точечная группа T_d), чтобы при приложении к ее граням одноосного сжатия кристалл поляризовался?

3.129. Найти все варианты изменения точечной группы симметрии кристалла с группой C_{2h} , если в кристалле осуществляется сегнетоэлектрический фазовый переход. Рассмотреть следующие кристаллографические направления, по которым предположительно может располагаться вектор спонтанной поляризации:

1) $[100]$; 2) $[010]$; 3) $[001]$; 4) $[hk0]$;

5) $[h0l]$; 6) $[0kl]$; 7) $[hkl]$.

3.130. В кристаллах каких точечных групп и вдоль каких направлений (указать индексы) приложение однородного электрического поля не вызывает изменения симметрии?

3.131. Вдоль каких кристаллографических направлений (указать индексы) одноосное механическое растяжение не меняет симметрию кристаллов тетрагональной и гексагональной сингоний?

3.132. Указать кристаллографические направления (индексы), при приложении вдоль которых однородного электрического поля, кристалл с симметрией $\bar{6}m2$ понизит симметрию до: 1) ромбической; 2) моноклинной.

3.133. К кристаллу с симметрией $\bar{6}$ приложили однородное электрическое поле вдоль направлений: 1) $[001]$; 2) $[100]$. Определить симметрию кристалла в поле.

3.134. В кристаллах каких тетрагональных точечных групп симметрии приложение однородного электрического поля любого направления (в том числе $[001]$) приводит к изменению симметрии оптической индикатрисы ($D_{\infty h}$)?

3.135. Используя принцип Неймана, определить ненулевые компоненты некоторого векторного свойства кристалла, имеющего симметрию:

- 1) $C_{4v} = 4mm$; 2) $C_s = 1m1$; 3) $C_2 = 112$.

3.136. В кристаллах каких точечных групп симметрии вектор спонтанной поляризации в кристаллофизической системе координат характеризуется: 1) одной; 2) двумя; 3) тремя ненулевыми компонентами?

3.137. Какие из одноосных кристаллов не будут изменять симметрию оптической индикатрисы при внесении их в однородное электрическое поле, направленное по оси высшего порядка?

3.138. Возможен ли пьезоэффект в кристалле с симметрией $D_3 = 32$ при всестороннем сжатии? В каком направлении следует сжимать кристалл, чтобы имел место пьезоэффект?

Глава 4

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

4.1. Решетки Бравэ

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

4.1. Определить тип решетки Бравэ ромбического кристалла, в элементарной ячейке которого содержится четыре атома двух сортов с координатами: атомы А — $1/2, 0, 0$ и $0, 1/2, 1/2$; атомы В — $0, 0, 1/2$ и $1/2, 1/2, 0$.

Решение. Оба атома А, так же как и атомы В, связаны между собой одним и тем же вектором переноса $(a + b + c)/2$. Это означает наличие объемно-центрированной решетки I. Для наглядности можно брать трансляционно идентичные пары атомов с координатами: А — $1/2, 0, 0$ и $1, 1/2, 1/2$; В — $0, 0, 1/2$ и $1/2, 1/2, 1$.

4.2. На рис. 4.1 приведена проекция элементарной ячейки кубического кристалла с двумя сортами атомов, обозначенных \bullet и \circ с указанием высоты в долях ребра элементарной ячейки по оси с. Определить тип решетки Бравэ.

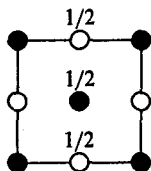


Рис. 4.1. К задаче 4.2

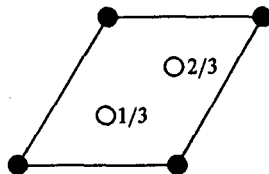


Рис. 4.2. К задаче 4.3

Решение. Легко подсчитать, что в ячейке имеется по две пары независимых атомов \bullet и \circ . Зафиксируем атом \bullet , находящийся в начале координат. Из рисунка видно, что такой же атом находится в точке с координатами $1/2, 1/2, 1/2$. Аналогично, каждому атому \circ соответствует эквивалентный атом, полученный сдвигом на вектор $1/2, 1/2, 1/2$. В результате имеем объемно-центрированную решетку I.

4.3. На рис. 4.2 приведена проекция элементарной ячейки гексагонального кристалла с двумя сортами атомов, обозначенных \bullet и \circ . Определить тип решетки Бравэ.

Решение. Очевидно, что поскольку в элементарной ячейке находится один атом сорта \bullet и два атома сорта \circ , решетка может быть только примитивной.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

4.4. На рис. 4.3 приведены проекции элементарных ячеек тетрагональных кристаллов. Определить тип решеток Браве.

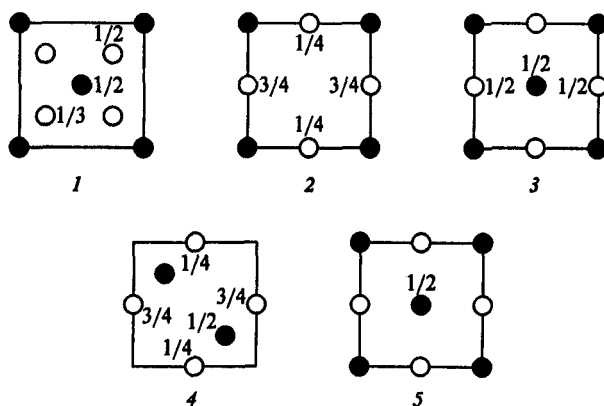


Рис. 4.3. К задаче 4.4

4.5. На рис. 4.4 приведены проекции элементарных ячеек ромбических кристаллов. Определить тип решеток Браве.

4.6. На рис. 4.5 приведены проекции элементарных ячеек моноклинных кристаллов. Определить тип решеток Браве.

4.7. На рис. 4.6 приведены проекции элементарных ячеек гексагональных кристаллов. Определить тип решеток Браве.

4.8. На рис. 4.7 приведены проекции элементарных ячеек кубических кристаллов. Определить тип решеток Браве.

4.9. Определить тип решетки Браве кубического кристалла, в элементарной ячейке которого содержатся два атома: атом А с координатами $1/4, 1/4, 1/4$ и атом В с координатами $3/4, 3/4, 3/4$, если: 1) атомы А и В различны и 2) атомы А и В одинаковы.

4.10. Определить тип решетки Браве ромбического кристалла, в элементарной ячейке которого содержатся четыре атома одного сорта в позициях с координатами $x, y, z; \bar{x}, \bar{y}, z; 1/2+x, 1/2-y, \bar{z}; 1/2-x, 1/2+y, \bar{z}$.

4.11. Определить тип решетки Браве моноклинного кристалла, в элементарной ячейке которого содержатся четыре атома одного сорта в позициях с координатами $x, y, z; x, 1/2+y, \bar{z}; 1/2+x, y, 1/2+z; 1/2+x, y, 1/2-z$.

4.12. Показать, что не существует решетки с центрировкой только двух пар граней.

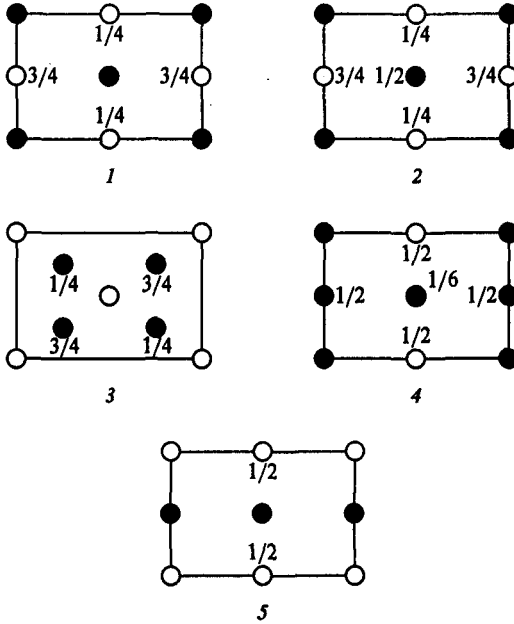


Рис. 4.4. К задаче 4.5

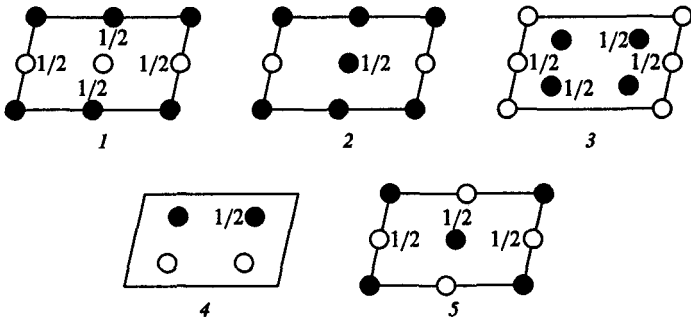


Рис. 4.5. К задаче 4.6

4.13. Доказать с помощью чертежа, что тетрагональная F решетка Бравэ сводится к I решетке с другой ориентацией осей. Записать матрицу перехода.

4.14. Записать матрицу преобразования примитивной гексагональной решетки Бравэ в ортогексагональную. Какого типа будет новая решетка Бравэ?

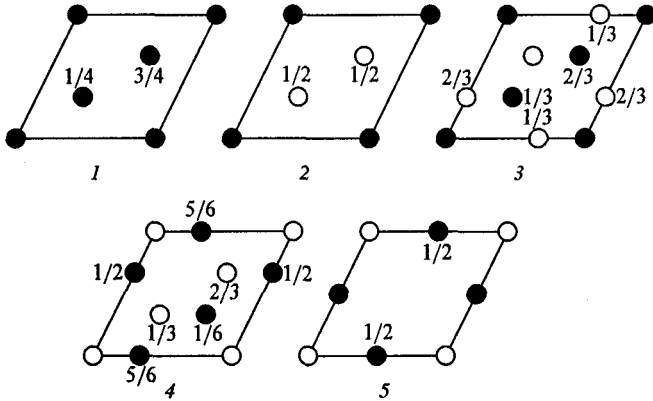


Рис. 4.6. К задаче 4.7

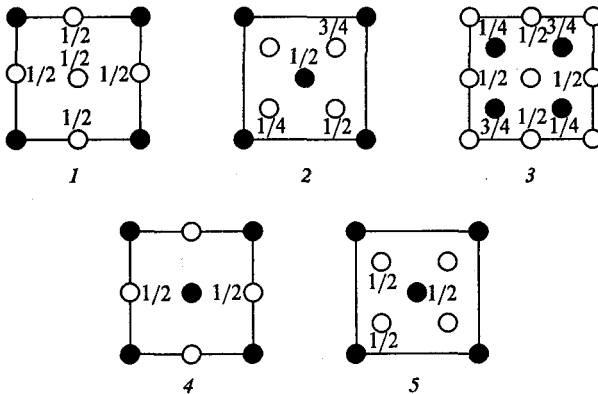


Рис. 4.7. К задаче 4.8

4.15. Записать матрицу преобразования дважды центрированной гексагональной ячейки в примитивную ромбоэдрическую.

4.16. Какой будет точечная симметрия ячейки, построенной на векторах $\mathbf{r}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b})$, $\mathbf{r}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{c})$, $\mathbf{r}_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{b} + \mathbf{c})$ кубической гранецентрированной решетки Бравэ?

4.2. Операторный метод описания операций симметрии

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

4.17. Найти матричное представление оператора, описывающего в декартовой системе координат изометрическое преобразование на плоскости, преобразующее треугольник ABC с координатами вершин $A(0; 0)$, $B(2; 1)$, $C(4; 3)$ в треугольник abc с координатами вершин $a(1; 1)$, $b(-1; 0)$, $c(-3; -2)$ (рис. 4.8).

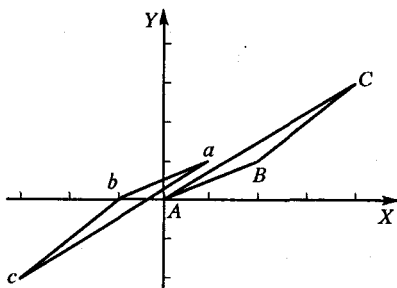


Рис. 4.8. К задаче 4.17

Решение. Действие оператора преобразования $\{\varphi | t(\varphi)\}$ на координаты вершин треугольника ABC можем записать в виде системы операторных уравнений:

$$\{\varphi | t(\varphi)\} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\{\varphi | t(\varphi)\} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\{\varphi | t(\varphi)\} \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ -2 \end{pmatrix}$$

или в виде уравнений относительно элементов матрицы a_{ij} обобщенного поворота φ и компонент t_i вектора трансляционной составляющей преобразования $t(\varphi)$:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Записав данную систему уравнений в виде

$$\begin{aligned}t_1 &= 1, \\t_2 &= 1, \\2a_{11} + a_{12} + t_1 &= -1, \\2a_{21} + a_{22} + t_2 &= 0, \\4a_{11} + 3a_{12} + t_1 &= -3, \\4a_{21} + 3a_{22} + t_2 &= -2\end{aligned}$$

и решив ее, получим

$$t_1 = 1, \quad t_2 = 1, \quad a_{11} = -1, \quad a_{12} = 0, \quad a_{21} = 0, \quad a_{22} = -1.$$

Таким образом, оператор данного изометрического преобразования $\{\varphi | \mathbf{t}(\varphi)\}$ может быть представлен матрицей $\varphi_{ij} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ с вектором переноса $\mathbf{t} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, что эквивалентно операции инверсии в точке с координатами $(1/2, 1/2)$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

4.18. Доказать, что $\{e | \mathbf{a}\}^n = \{e | n\mathbf{a}\}$, где n — целое число, а символ $\{e | \mathbf{a}\}^n$ обозначает умножение оператора $\{e | \mathbf{a}\}$ на себя n раз.

4.19. Доказать, что $\{e | \mathbf{a}\}r_1 - \{e | \mathbf{a}\}r_2 \neq \{e | \mathbf{a}\}(r_1 - r_2)$. Пояснить геометрический смысл этого неравенства.

4.20. Пусть $g = \{\varphi | \mathbf{t}(\varphi)\}$ — кристаллографическая операция симметрии, а \mathbf{R} — трансляция решетки. Найти произведение операций $g \times \mathbf{R} \times g^{-1}$. Сформулировать условие кристаллографичности точечной операции φ .

4.21. Записать с помощью операторов операции симметрии, принадлежащие групповому множеству следующих точечных групп:

$$1) C_2; \quad 2) C_{2v}; \quad 3) C_{2h}; \quad 4) C_{4v}; \quad 5) D_2; \quad 6) C_{3h}.$$

4.22. Записать с помощью операторов квадраты Кейли для следующих точечных групп: 1) C_{2v} ; 2) C_{2h} ; 3) S_4 .

4.23. Представить в операторном виде следующие изометрические операции:

1) Поворот пространства вокруг прямой линии на угол 90° и смещение в направлении вектора $\mathbf{t} = \mathbf{a} + \mathbf{c}$, где вектор \mathbf{c} параллелен, а вектор \mathbf{a} перпендикулярен прямой линии — оси поворота;

2) Поворот вокруг прямой линии на угол 45° и смещение на вектор \mathbf{c} в направлении, параллельном прямой;

3) Поворот вокруг прямой линии на угол 180° и смещение на вектор \mathbf{c} в направлении, параллельном прямой;

4) Поворот вокруг прямой линии на угол 180° и смещение на вектор \mathbf{a} в направлении, перпендикулярном этой прямой;

5) Поворот вокруг прямой линии на угол 180° и смещение на вектор \mathbf{d} в направлении, составляющем с прямой угол 45° .

4.24. Найти операторное представление, описывающее изометрическое преобразование на плоскости, переводящее треугольник ABC в треугольник abc с декартовыми координатами вершин:

1) $A(0; 0)$, $B(1; 3)$, $C(4; 1)$, $a(6; 3)$, $b(7; 6)$, $c(10; 4)$;

2) $A(0; 0)$, $B(1; 3)$, $C(4; 1)$, $a(5; 2)$, $b(8; 3)$, $c(6; 6)$;

3) $A(0; 0)$, $B(1; 3)$, $C(4; 1)$, $a(8; 0)$, $b(5; 1)$, $c(7; 4)$.

Интерпретировать полученные результаты.

4.25. Построить оператор, описывающий результат последовательного выполнения преобразований, полученных в задаче 4.24:

1) преобразования из пункта 1, затем из пункта 2;

2) преобразования из пункта 1, затем из пункта 3;

3) преобразования из пункта 2, затем из пункта 3;

4) выполнить задания 1, 2, 3, сменив последовательность выполнения преобразований.

В каждом из заданий получить координаты вершин новых треугольников $a'b'c'$. Интерпретировать полученные результаты.

4.26. Записать матричное представление оператора ab , описывающего следующие изометрические операции:

1) отражение в плоскости x, y , $1/4$;

2) отражение в плоскости x, y , $1/2$;

3) поворот вокруг винтовой оси второго порядка $0, y, 1/2$;

4) поворот вокруг оси четвертого порядка $0, 1/2, z$;

5) инверсию в точке с координатами $0, 1/2, 1/2$.

4.27. Записать координаты вершин треугольника abc , получен-

ного из треугольника ABC операцией $\left\{ \bar{1} \left| \frac{\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}}{2} \right. \right\}$, где $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ —

орты декартовой системы координат. Координаты вершин треугольника ABC : $A(0, 1/2, 0)$, $B(1/2, 1/2, 0)$, $C(1/2, 0, 0)$. Указать координаты центра инверсии.

4.3. Операции пространственной симметрии кристаллических структур

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

4.28. Как будет обозначаться плоскость скользящего отражения a_z , если в ортогональной системе координат поменять между собой оси x и z ?

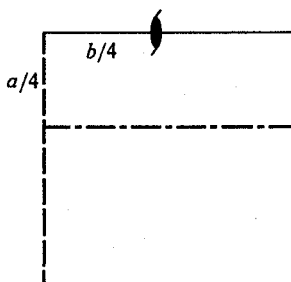
Решение. Плоскость скользящего отражения a_z располагается перпендикулярно оси z и имеет трансляционную компоненту $a/2$ вдоль оси x . После переименования осей плоскость будет располагаться перпендикулярно оси x , а ее трансляционная составляющая будет направлена вдоль оси z . Следовательно, новое обозначение плоскости будет c_x .

4.29. Найти результирующую операцию симметрии, эквивалентную последовательным отражениям в плоскостях симметрии a_y и n_x .

Решение. Запишем операторы $n_x = \left\{ m_x \left| \frac{b+c}{2} \right. \right\}$ и $a_y = \left\{ m_y \left| \frac{a}{2} \right. \right\}$ и найдем их произведение. С учетом последовательности действий операторов на точку, запишем

$$\begin{aligned} n_x \times a_y &= \left\{ m_x \left| \frac{b+c}{2} \right. \right\} \times \left\{ m_y \left| \frac{a}{2} \right. \right\} = \left\{ m_x \times m_y \left| m_x \frac{a}{2} + \frac{b+c}{2} \right. \right\} = \\ &= \left\{ m_x \times m_y \left| \left(-\frac{a}{2} \right) + \frac{b+c}{2} \right. \right\} = \left\{ 2_z \left| \frac{b-a}{2} + \frac{c}{2} \right. \right\}. \end{aligned}$$

Этот оператор описывает поворот вокруг винтовой оси 2_{1z} , параллельной оси z и смещенной от линии пересечения плоскостей a_y и n_x на $\frac{b-a}{2}$ (рис. 4.9).



4.30. Какая операция симметрии связывает две симметрично эквивалентные точки x, y, z и $y, y-x, 1/2+z$?

Решение. Связь между координатами симметрично эквивалентных точек определяется столбцами обратной матрицы β_{ij} (контравариантно). Для заданных точек получаем матрицу

$$\beta_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

что соответствует повороту на 60° по часовой стрелке вокруг оси z . Следовательно, точечное преобразование соответствует операции 6_z^{-1} . Трансля-

Рис. 4.9.

К решению задачи 4.29

ционная компонента определяется матрицей-столбцом $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c/2 \end{pmatrix}$. Таким

образом, координаты точек связаны оператором $\left\{ 6_z^{-1} \left| \frac{c}{2} \right. \right\}$, что соответствует операции поворота вокруг трехзаконной оси шестого порядка по часовой стрелке, т.е. 6_{3z}^{-1} .

4.31. Определить тип решетки Браве ромбического кристалла, в котором имеется плоскость скользящего отражения a_z , одновременно являющаяся и плоскостью b_z .

Решение. Для решения задачи перемножим операции симметрии a_z и b_z :

$$a_z \times b_z = \left\{ m_z \left| \frac{\mathbf{a}}{2} \right. \right\} \times \left\{ m_z \left| \frac{\mathbf{b}}{2} \right. \right\} = \left\{ m_z \times m_z \left| m_z \frac{\mathbf{b}}{2} + \frac{\mathbf{a}}{2} \right. \right\} = \left\{ e \left| \frac{\mathbf{a} + \mathbf{b}}{2} \right. \right\}.$$

В результате мы получили чистую трансляцию $\frac{\mathbf{a} + \mathbf{b}}{2}$. Следовательно, имеем базоцентрированную решетку C .

4.32. Как изменятся координаты точки x, y, z после симметрического преобразования в плоскости a_z , расположенной на расстоянии $c/4$ от начала координат?

Решение. Оператор указанного преобразования запишется в виде $\left\{ m_z \left| \frac{\mathbf{a} + \mathbf{c}}{2} \right. \right\}$. Действие этого оператора на точку с координатами x, y, z описывается уравнением

$$\left\{ m_z \left| \frac{\mathbf{a} + \mathbf{c}}{2} \right. \right\} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + x \\ y \\ \frac{1}{2} - z \end{pmatrix}.$$

Таким образом, после симметрического преобразования координаты точки будут $1/2 + x, y, 1/2 - z$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

4.33. Как изменится наименование плоскости c_x при преобразовании системы координат в соответствии с указанными матри-

цами:

$$1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix}; \quad 2) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad 3) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$4) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}; \quad 5) \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}.$$

4.34. Как изменится наименование плоскостей b_x и a_y , если поменять местами оси x и y ?

4.35. Какое симметрическое преобразование связывает точки:

- 1) $x, y, z \rightarrow \bar{y}, x, 1/4 + z$;
- 2) $x, y, z \rightarrow 1/2 - x, 1/2 + y, 1/2 + z$;
- 3) $x, y, z \rightarrow \bar{y}, x, z$;
- 4) $x, y, z \rightarrow x, \bar{y}, \bar{z}$;
- 5) $x, y, z \rightarrow y - x, \bar{x}, z$.

Записать преобразование в операторном виде.

4.36. Какие координаты получит точка x, y, z после симметрического преобразования:

- 1) $b_x(a/4)$; 2) 3_{1z}^1 ; 3) 4_{2z}^2 ; 4) 2_{xy} ; 5) 6_{2z}^4 ?

4.37. Найти результирующую операцию симметрии при последовательном выполнении следующих симметрических преобразований в ортогональных осях:

- 1) $n_y \times a_z$; 2) $m_y \times c_{\bar{x}y}$; 3) $a_z \times m_x$; 4) $2_{1x} \times a_z$; 5) $4_{2z}^2 \times m_z$;
- 6) $n_x \times 2_{1x}$; 7) $m_y \times n_x$; 8) $m_y \times a_z$; 9) $n_x \times a_z$; 10) $n_x \times n_y$;
- 11) $a_y \times b_z$; 12) $a_y \times c_x$; 13) $c_x \times c_y$; 14) $c_x \times 2_{1x}$; 15) $b_x \times n_z$.

4.38. Определить тип решетки Бравэ ромбического кристалла, у которого чередуются (т.е. располагаются параллельно на расстоянии четверти целой трансляции) указанные плоскости симметрии:

- 1) a_z и b_z ; 2) m_z и n_z ; 3) m_y и c_y ; 4) a_y и c_y ; 5) b_x и n_x .

4.39. Определить тип решетки Бравэ кристалла, в котором чередуются две пары плоскостей: m_x и b_x по оси x и a_z и n_z по оси z .

4.40. Показать, что в тетрагональных кристаллах с винтовой осью 4_1 не могут размещаться плоскости m_z .

4.4. Пространственные группы симметрии

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

4.41. На рис. 4.10 указаны генераторы пространственной группы. Используя теоремы умножения операций симметрии, закончить чертеж графика пространственной группы, указать символ группы и точечный класс, к которому принадлежит данная пространственная группа. Записать координаты правильных систем точек общего и частного положений, указав симметрию позиции и величину симметрии.

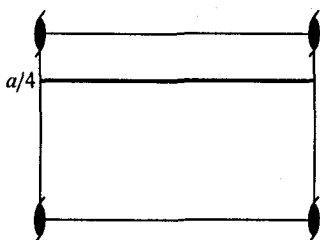


Рис. 4.10

К решению задачи 4.41

Решение. Введем систему координат с осью z , параллельной винтовой оси, и осью x , перпендикулярной плоскости симметрии. При перемножении винтового поворота 2_{1z} с трансляциями решетки \mathbf{a} и \mathbf{b} , перпендикулярными винтовой оси, возникают оси 2_{1z} на серединах трансляций. Отражение в плоскости m_x при перемножении с трансляцией \mathbf{a} дает плоскость m_x , расположенную на расстоянии $\frac{3}{4}a$ от начала координат. Рассмотрим произведение

$$\begin{aligned} m_x \times 2_{1z} &= \left\{ m_x \left| \frac{\mathbf{a}}{2} \right. \right\} \times \left\{ 2_z \left| \frac{\mathbf{c}}{2} \right. \right\} = \\ &= \left\{ m_z \times 2_z \left| m_x \frac{\mathbf{c}}{2} + \frac{\mathbf{a}}{2} \right. \right\} = \left\{ m_y \left| \frac{\mathbf{a} + \mathbf{c}}{2} \right. \right\} = n_y. \end{aligned}$$

Перемножая отражение в полученной плоскости n_y с трансляцией \mathbf{b} , получим плоскость n_y на половине трансляции \mathbf{b} . Кроме того, необходи-

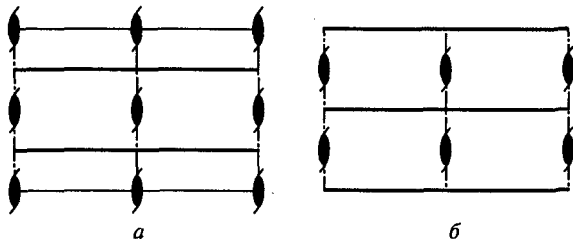


Рис. 4.11. К задаче 4.41

мо размножить все получившиеся элементы симметрии трансляциями решетки. График получившейся группы показан на рис. 4.11а. На рис. 4.11б приведен график этой же группы со стандартным выбором начала координат. Ее символ $Pmn2_1$, группа принадлежит к классу C_{2v} .

Кратность общей правильной системы точек равна 4; координаты точек, принадлежащие общей правильной системе, могут быть получены из точки с координатами x, y, z действием на нее операторами группы таким образом, чтобы размноженные точки всегда находились внутри или на границе элементарной ячейки. Действуя операторами аналогично тому, как было показано в задаче 4.32, получим следующие координаты точек общей правильной системы точек: $x, y, z; -x, y, z (m_x); 1/2 + x, \bar{y}, 1/2 + z (n_y); 1/2 - x, \bar{y}, 1/2 + z (2_{1z})$. Имеется частная правильная система точек с симметрией позиции m , величиной симметрии 2 и координатами $0, y, z; 1/2, \bar{y}, 1/2 + z$.

4.42. Задана правильная система точек: $x, y, z; y - x, \bar{x}, z; \bar{y}, x - y, z; \bar{x}, \bar{y}, 1/2 + z; x - y, x, 1/2 + z; y, y - x, 1/2 + z$. Записать символ пространственной группы, нарисовать график и указать частные правильные системы точек.

Решение. Найдем операторы, связывающие точки правильной системы с исходной точкой x, y, z . Для точки $y - x, \bar{x}, z$; можно записать уравнение

$$\{\varphi | t(\varphi)\} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y - x \\ -x \\ z \end{pmatrix}$$

или (в матричном виде)

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y - x \\ -x \\ z \end{pmatrix}.$$

Это матричное уравнение эквивалентно системе алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} a_{11}x + a_{12}y + a_{13}z + t_1 &= y - x \\ a_{21}x + a_{22}y + a_{23}z + t_2 &= -x \\ a_{31}x + a_{32}y + a_{33}z + t_3 &= z \end{aligned}$$

Отсюда непосредственно видно, что $t_1 = t_2 = t_3 = 0$, $a_{11} = -1$, $a_{12} = 1$, $a_{21} = -1$, $a_{33} = 1$, $a_{13} = a_{22} = a_{23} = a_{31} = a_{32} = 0$. Матрицу можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Транспонированная матрица

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

соответствует операции 3_2^1 . Таким образом, точку с координатами $y - x, \bar{x}, z$ можно получить из точки x, y, z поворотом вокруг оси

третьего порядка, параллельной оси z и проходящей через начало координат. Аналогично рассуждая, можно получить, что точка с координатами \bar{y} , $x - y$, z получается из точки с координатами x , y , z оператором, поворотная часть которого описывается матрицей

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

а трансляционная — вектором

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

что соответствует повороту $3z^2$ вокруг оси третьего порядка, проходящей через начало координат. Для других точек аналогично получаем: точка \bar{x} , \bar{y} , $1/2 + z$ получается из исходной оператором с матрицей

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и вектором

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix},$$

что соответствует повороту вокруг винтовой оси второго порядка 2_{1z} ; точка с координатами $x - y$, x , $1/2 + z$ получается оператором с матрицей

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и вектором

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix},$$

что соответствует повороту 6^5_{3z} ; наконец точка с координатами y , $y - x$, $1/2 + z$ получается из исходной оператором с матрицей

$$\begin{pmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и вектором

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix},$$

что соответствует повороту 6_{3z}^1 . Учитывая, что $3^2 = 6_3^4$ и $3^1 = 6_3^2$, получаем, что данная правильная система точек соответствует пространственной группе $P6_3$ (рис. 4.12). Имеются частные положения на винтовых осях с симметрией 3, кратностью 2. Координаты частных правильных систем точек $2/3, 1/3, z$ и $1/3, 2/3, 1/2 + z$.

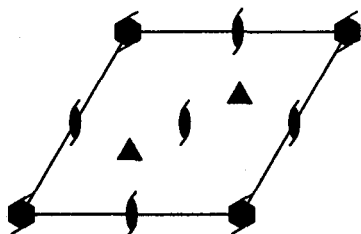


Рис. 4.12.

К решению задачи 4.42

4.43. Доказать, что символы $Bba2$ и $C2cb$ выражают одну и ту же пространственную группу $C_{2v}^{17} = Aba2$. Записать матрицы преобразований системы координат для перехода в стандартную установку.

Решение. Нарисуем координатный репер с указанием трансляционных компонент плоскостей скользящего отражения (показаны стрелками) в стандартной установке $Aba2$ (рис. 4.13а).

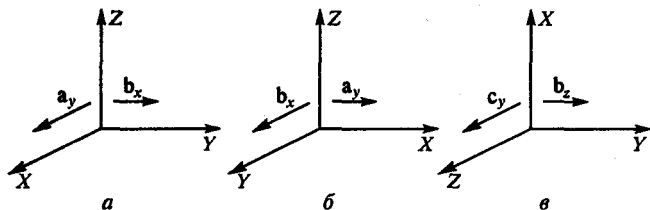


Рис. 4.13. К задаче 4.43

Преобразование перестановки осей x и y описывается матрицей

$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. При этом символы плоскостей скользящего отражения

изменяются так, как это показано на рис. 4.13б. Символ пространственной группы будет $Bba2$. При перестановке осей x и z с матрицей

перестановки $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ символ группы будет $C2cb$ (рис. 4.13в).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

4.44. На рис. 4.14 указаны элементы симметрии, с помощью которых можно генерировать пространственные группы. Используйте

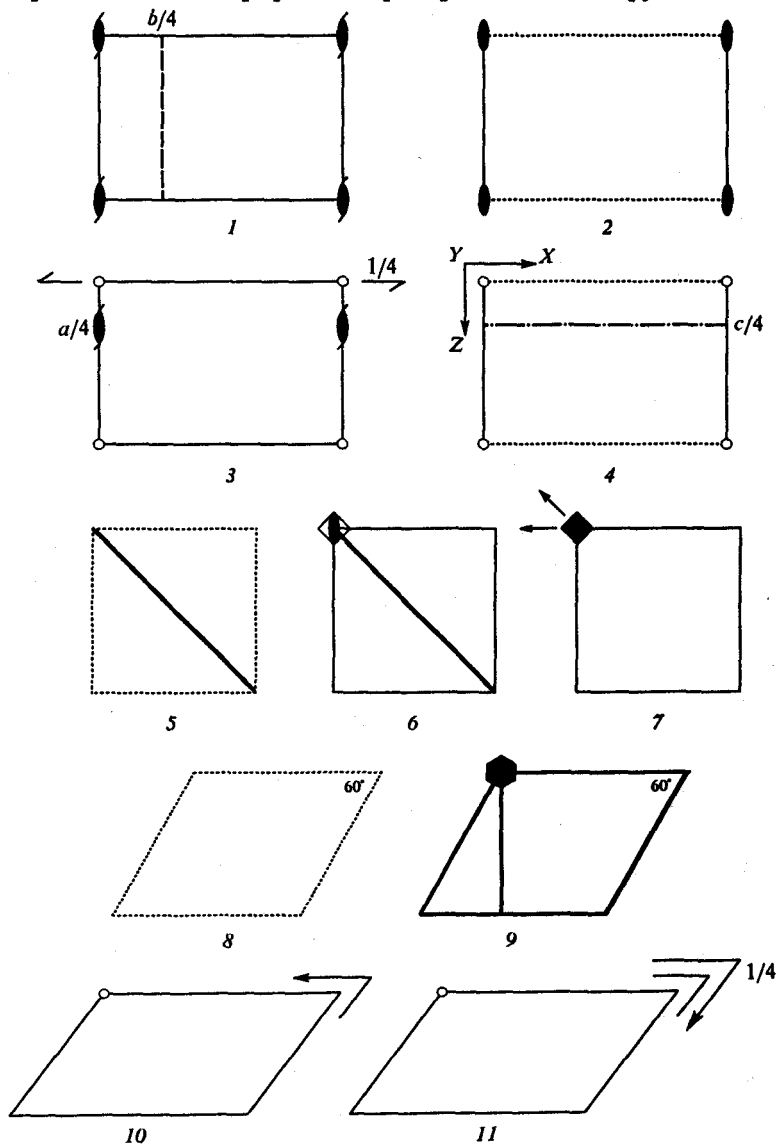


Рис. 4.14. К задаче 4.44. Тонкими линиями обозначены границы элементарной ячейки

зую теоремы умножения, закончить чертеж, указать символ пространственной группы, точечный класс по Шенфлису. Записать координаты правильных систем точек общего и частного положений, указать величину и симметрию позиций.

4.45. Для пространственной группы $D_{2h}^{16} = Pnma$ указать символы изоморфных преобразований системы координат пространственных групп и соответствующие матрицы.

4.46. Для пространственной группы $D_{2h}^{14} = Pbcn$ указать символы изоморфных преобразований системы координат пространственных групп и соответствующие матрицы.

4.47. Объясните почему группы $Ammm$ и $Cmmm$ изоморфны одной группе $D_{2h}^{19} = Cmmm$, а группы $Amm2$ и $Cmm2$ представляют разные группы C_{2v}^{14} и C_{2v}^{11} .

4.48. Получить полный развернутый символ пространственных групп с указанием всех чередующихся и совпадающих элементов симметрии:

$$1) C_{2h}^5 = B \frac{2}{b}; \quad 2) C_{2v}^{12} = Cmc2_1; \quad 3) D_{2h}^{16} = Pnma;$$

$$4) D_{2h}^{18} = Cmta; \quad 5) C_{4v}^{10} = I4cm.$$

4.49. Дополнить символ пространственной группы пропущенными элементами симметрии:

$$1) P \frac{2}{m} \frac{2}{?} \frac{2_1}{a}; \quad 2) P \frac{2_1}{b} \frac{2_1}{?} \frac{2}{m}; \quad 3) P \frac{2}{?} \frac{2_1}{c} \frac{2_1}{m}; \quad 4) P4_2n?; \quad 5) P6_3?c.$$

4.50. Задана правильная система точек общего положения. Какой пространственной группе она соответствует? Записать символ, нарисовать график пространственной группы:

$$1) \pm\{x, y, z; x, 1/2 + y, z; 1/2 + x, y, 1/2 + z;$$

$$1/2 + x, 1/2 + y, 1/2 - z\};$$

$$2) \{x, y, z; \bar{x}, \bar{y}, z; 1/2 - x, 1/2 + y, z; 1/2 + x, 1/2 - y, z;$$

$$x, 1/2 + y, 1/2 + z; \bar{x}, 1/2 - y, 1/2 + z; 1/2 - x, y, 1/2 + z;$$

$$1/2 + x, \bar{y}, 1/2 + z\};$$

$$3) \pm\{x, y, z; 1/2 + x, 1/2 - y, 1/2 - z; \bar{x}, 1/2 + y, \bar{z};$$

$$1/2 - x, \bar{y}, 1/2 + z\};$$

$$4) \{x, y, z; \bar{y}, x, 1/2 + z; \bar{x}, \bar{y}, z; y, \bar{x}, 1/2 + z; y, x, 1/2 + z;$$

$$x, \bar{y}, z; \bar{y}, \bar{x}, 1/2 + z; \bar{x}, y, z\};$$

$$5) \{x, y, z; \bar{x}, \bar{y}, 1/2 + z; \bar{y}, x - y, 1/3 + z; y - x, \bar{x}, 2/3 + z;$$

$$x - y, x, 1/6 + z; y, y - x, 5/6 + z\}.$$

4.51. Нарисовать график и записать общую правильную систему точек для пространственных групп: $P \frac{2_1}{b}$; $P2_12_12_1$; $I222$; $Cmm2$; $Aba2$; $Ima2$; $I4$; $P4bm$; $P4cc$; $I4mm$; $P321$; $P31m$; $P6$; $P622$; $P6_3tc$.

Глава 5

НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ И ОБОБЩЕННЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

5.1. Точечные группы симметрии с единственной осью 5-го, 7-го и более высоких порядков

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

5.1. Записать матрицы для следующих операций симметрии:

1) 8_z^1 ; 2) $\bar{7}_z^3$; 3) $(\bar{9}_z)^2$;

4) $2^1(22.5^\circ, 67.5^\circ, 90^\circ)$;

5) $m(-36^\circ, -126^\circ, 90^\circ)$.

Решение. Для матричного описания некристаллографических операций симметрии удобно использовать декартову систему координат. При этом направление оси $Z(X_3)$ выбирается совпадающим с осью симметрии наибольшего порядка, ось $X(X_1)$ — по одному из особых направлений (если они есть) в плоскости, перпендикулярной к этой оси симметрии, а ось $Y(X_2)$ — перпендикулярно к координатным осям $Z(X_3)$ и $X(X_1)$.

Если описываемые особые направления совпадают с координатными осями, то к символу направления добавляется соответствующий индекс (например, для оси восьмого порядка, совпадающей с осью $Z(X_3)$, запишем символ 8_z). Для особых направлений, которые не совпадают с координатными осями, указываются в скобках углы, которые данное направление составляет с координатными осями. Например, запись $2(22.5^\circ, 67.5^\circ, 90^\circ)$ означает, что данная ось второго порядка лежит в плоскости, перпендикулярной оси Z , и составляет с осями X и Y углы 22.5° и 67.5° соответственно. При этом условимся считать положительным отсчет углов в направлении против часовой стрелки относительно направления оси.

1. Операция 8_z^1 представляет собой поворот против часовой стрелки на угол $\varphi = 2\pi/8$ вокруг оси Z . Выполним соответствующее преобразование системы координат и построим ортогональную систему координат $X'Y'Z'$. Матрица углов φ_{ij} между «новыми» и «старыми» осями координат

нат имеет вид

$$\varphi_{ij}(8_z^1) = \begin{pmatrix} \frac{\pi}{4} & \frac{\pi}{4} & \frac{\pi}{2} \\ \frac{3\pi}{4} & \frac{\pi}{4} & \frac{\pi}{2} \\ \frac{\pi}{2} & \frac{\pi}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

а матрица косинусов этих углов (направляющих косинусов) запишется в виде

$$\alpha_{ij}(8_z^1) = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Эта матрица и будет матрицей поворота 8_z^1 . Нетрудно убедиться, что ее определитель равен 1.

2. Поворот $\bar{7}_z^3$ представляет собой 3-х кратный инверсионный поворот вокруг оси z против часовой стрелки на угол $2\pi/7$. Для решения задачи удобно сначала найти матрицу однократного поворота 7_z^1 . Выполним соответствующее преобразование системы координат и построим ортогональную систему координат $X'Y'Z'$. Матрица углов φ_{ij} между «новыми» и «старыми» осями координат имеет вид

$$\varphi_{ij}(7_z^1) = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{7} & \frac{\pi}{2} - \frac{2\pi}{7} & \frac{\pi}{2} \\ \frac{\pi}{2} + \frac{2\pi}{7} & \frac{2\pi}{7} & \frac{\pi}{2} \\ \frac{\pi}{2} & \frac{\pi}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

а матрица косинусов углов запишется в виде

$$\alpha_{ij}(7_z^1) = \begin{pmatrix} \cos \frac{2\pi}{7} & \sin \frac{2\pi}{7} & 0 \\ -\sin \frac{2\pi}{7} & \cos \frac{2\pi}{7} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Матрицу однократного инверсионного поворота $\bar{7}_z^1$ можно построить, умножив матрицу $\alpha_{ij}(7_z^1)$ на матрицу

$$\alpha_{ij}(\bar{1}) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix},$$

соответствующую операции инверсии. Результатом умножения будет матрица

$$\alpha_{ij}(\bar{7}_z^1) = \begin{pmatrix} -\cos \frac{2\pi}{7} & -\sin \frac{2\pi}{7} & 0 \\ \sin \frac{2\pi}{7} & -\cos \frac{2\pi}{7} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Заметим, что инверсионный поворот не содержит самостоятельных операций поворота и инверсии, и в данном случае умножение соответствующих матриц играет лишь вспомогательную роль. Тот же результат можно получить, если непосредственно выполнить инверсионный поворот координатной системы и разложить единичные векторы полученной «новой» системы по «старому» базису.

Матрицу трехкратного инверсионного поворота $\bar{7}_z^1$ получим, выполняя последовательные умножения матриц

$$\alpha_{ij}(\bar{7}_z^3) = \alpha_{ij}(\bar{7}_z^1) \cdot \alpha_{ij}(\bar{7}_z^1) \cdot \alpha_{ij}(\bar{7}_z^1).$$

Окончательно получаем

$$\alpha_{ij}(\bar{7}_z^3) = \begin{pmatrix} -\cos \frac{6\pi}{7} & -\sin \frac{6\pi}{7} & 0 \\ -\sin \frac{6\pi}{7} & -\cos \frac{6\pi}{7} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Определитель данной матрицы равен -1 , что свидетельствует о том, что трехкратный инверсионный поворот $\bar{7}_z^3$ представляет собой операцию второго рода.

3. Построим вначале матрицу однократного зеркального поворота $\overset{\circ}{9}_z^1$. Как и для рассмотренных выше операций, выберем ортогональные системы координат XYZ и $X'Y'Z'$, связанные друг с другом операцией $\overset{\circ}{9}_z^1$. Матрица направляющих косинусов запишется в виде

$$\alpha_{ij}(\overset{\circ}{9}_z^1) = \begin{pmatrix} \cos \frac{2\pi}{9} & \sin \frac{2\pi}{9} & 0 \\ -\sin \frac{2\pi}{9} & \cos \frac{2\pi}{9} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Определитель этой матрицы, как и следовало ожидать, равен -1 .

Матрицу двукратного зеркального поворота $\overset{\circ}{9}_z^2$ получим умножением матрицы $\alpha_{ij}(\overset{\circ}{9}_z^1)$ на себя:

$$\alpha_{ij}(\overset{\circ}{9}_z^2) = \alpha_{ij}(\overset{\circ}{9}_z^1) \cdot \alpha_{ij}(\overset{\circ}{9}_z^1) = \begin{pmatrix} \cos \frac{4\pi}{9} & \sin \frac{4\pi}{9} & 0 \\ -\sin \frac{4\pi}{9} & \cos \frac{4\pi}{9} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Вычисление определителя данной матрицы дает значение +1. Это говорит о том, что операция $\overset{\circ}{9}_z^2$ является операцией симметрии первого рода, т.е. чистым поворотом. Действительно, можно непосредственно убедиться, что $\overset{\circ}{9}_z^2 = 9_z^2$.

4. Введем ортогональные системы координат XYZ и $X'Y'Z'$, связанные друг с другом операцией поворота вокруг оси второго порядка $2^1(22.5^\circ, 67.5^\circ, 90^\circ)$, которая составляет с координатными осями XYZ углы соответственно 22.5° , 67.5° и 90° (рис. 5.1). Аналогично предыдущим задачам получаем матрицу углов и матрицу косинусов — матрицу данной операции симметрии:

$$\varphi_{ij} = \begin{pmatrix} 45^\circ & 45^\circ & 90^\circ \\ 45^\circ & 135^\circ & 90^\circ \\ 90^\circ & 90^\circ & 180^\circ \end{pmatrix},$$

$$\alpha_{ij}\{2^1(22.5^\circ, 67.5^\circ, 90^\circ)\} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

5. Для построения матрицы отражения в плоскости симметрии $m(-36^\circ, -126^\circ, 90^\circ)$ построим ортогональные системы координат XYZ

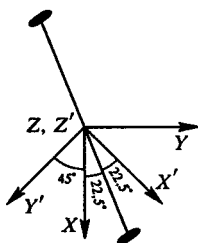


Рис. 5.1. К решению задачи 5.1(4)

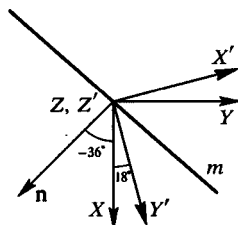


Рис. 5.2. К решению задачи 5.1(5)

и $X'Y'Z'$, связанные друг с другом отражением в данной плоскости (рис. 5.2).

При этом учтем, что углы, приведенные в обозначении операции симметрии, являются углами, которые составляет с координатными осями нормаль к плоскости симметрии π , а не сама плоскость. Аналогично предыдущим задачам строим матрицу углов и матрицу косинусов, которая и является матрицей, соответствующей данной операции симметрии:

$$\varphi_{ij} = \begin{pmatrix} 90^\circ + 18^\circ & 18^\circ & 90^\circ \\ 18^\circ & 90^\circ - 18^\circ & 90^\circ \\ 90^\circ & 90^\circ & 0^\circ \end{pmatrix},$$

$$\alpha_{ij} \{m(-36^\circ, -126^\circ, 90^\circ)\} = \begin{pmatrix} -\sin 18^\circ & \cos 18^\circ & 0 \\ \cos 18^\circ & \sin 18^\circ & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

5.2. Построить группу симметрии, приняв за генераторы поворот вокруг оси второго порядка и отражение в плоскости симметрии, составляющей с осью угол 22.5° . Построить стереографическую проекцию элементов симметрии группы, записать ее обозначения по Шенфлису и Герману–Могену, записать групповое множество, указать порядок группы, перечислить подгруппы.

Решение. Изобразим на стереографической проекции элементы симметрии, отвечающие операциям-генераторам (рис. 5.3).

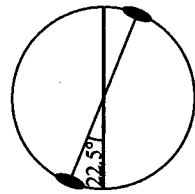


Рис. 5.3.

К решению задачи 5.2

Для построения группы воспользуемся теоремами умножения операций симметрии. В

соответствии с $2m\dot{N}$ -теоремой, умножение операции поворота вокруг оси второго порядка и отражение в плоскости симметрии, составляющей с осью угол $\varphi = 22.5^\circ$, дает зеркальный поворот на угол $2\varphi = 45^\circ$:

$$\begin{array}{c} 2 \cdot m = \dot{N} (45^\circ) \\ \swarrow \quad \searrow \\ 22.5^\circ \end{array}$$

Этому повороту соответствует зеркально-поворотная ось восьмого порядка $\dot{8}$, лежащая в заданной плоскости отражения и расположенная перпендикулярно исходной оси второго порядка. Зеркально-поворотной оси восьмого порядка соответствует циклическая группа восьмого порядка, причем четные степени поворота представляют собой простые повороты на углы 90° , 180° , 270° и 360° .

Таким образом, $(\overset{\circ}{8})^2 = 4^1$, $(\overset{\circ}{8})^4 = 4^2 = 2^1$, $(\overset{\circ}{8})^6 = 4^3$, $(\overset{\circ}{8})^8 = 4^4 = e$.

Далее, последовательно применяя следствия из $2m\dot{N}$ -теоремы, получаем чередующиеся через углы $\varphi = 22.5^\circ$ оси второго порядка и зеркальные плоскости симметрии. Стереографическая проекция данной группы показана на рис. 5.4.

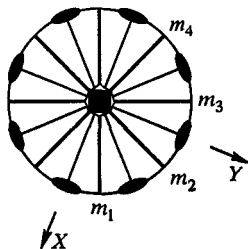


Рис. 5.4. К решению задачи 5.2. Стереографическая проекция элементов симметрии группы $D_{4d} = \bar{8}2m$

Данная группа в системе обозначений Шенфлиса обозначается символом D_{4d} , в международных обозначениях (по Герману–Могену) — $\bar{8}2m$. Групповое множество имеет вид:

$$D_{4d} = \bar{8}2m =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} (\overset{\circ}{8})^1, (\overset{\circ}{8})^2 = 4^1, (\overset{\circ}{8})^3, (\overset{\circ}{8})^4 = 4^2 = 2^1, \\ (\overset{\circ}{8})^5, (\overset{\circ}{8})^6 = 4^3, (\overset{\circ}{8})^7, (\overset{\circ}{8})^8 = e, \\ 2_x, 2_{xy}, 2_y, 2_{\bar{xy}}, m_1, m_2, m_3, m_4 \end{array} \right\}.$$

Непосредственным подсчетом числа элементов группового множества можно убедиться, что порядок данной группы равен 16.

5.3. Показать, что точечная группа симметрии с международным символом \dot{N} в системе Шенфлиса имеет символы: C_{Ni} , если $N = 2l + 1$; $C_{N/2h}$, если $N = 4l + 2$; S_N , если $N = 4l$, $l = 0, 1, 2, \dots$

Решение. Пусть инверсионная ось совпадает с осью Z декартовой системы координат. Матрица однократного инверсионного поворота \bar{N}_z^1 вокруг этой оси на угол $\varphi = \frac{2\pi}{N}$ имеет вид

$$\alpha_{ij}(\bar{N}_z^1) = \begin{pmatrix} -\cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & -\cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Умножая матрицу $2l$ раз на себя, получим матрицу $2l$ -кратного инверсионного поворота

$$\alpha_{ij}(\bar{N}_z^{2l}) = \begin{pmatrix} \cos 2l\varphi & \sin 2l\varphi & 0 \\ -\sin 2l\varphi & \cos 2l\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

Непосредственным расчетом можно убедиться, что определитель этой матрицы равен +1. Таким образом, все четные степени инверсионного поворота эквивалентны простым поворотам, при этом $2l$ -я степень

инверсионного поворота соответствует повороту на угол $2l \frac{2\pi}{N}$. Умножив матрицу (5.2) на матрицу $\alpha_{ij}(\bar{N}_z^1)$, получаем матрицу, соответствующую «нечетной степени» инверсионного поворота \bar{N}^{2l+1}

$$\alpha_{ij}(\bar{N}_z^{2l+1}) = \begin{pmatrix} -\cos(2l+1)\varphi & -\sin(2l+1)\varphi & 0 \\ \sin(2l+1)\varphi & -\cos(2l+1)\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Определитель этой матрицы равен -1 .

Перейдем теперь к решению сформулированных задач.

1. Пусть $N = 2l + 1$. Используя матрицы (5.2) и (5.3), найдем матрицу, отвечающую операции \bar{N}_z^N . При нечетном N операция \bar{N}_z^N описывается матрицей

$$\alpha_{ij}(\bar{N}_z^N) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

что соответствует операции инверсии $\bar{1}$. Очевидно, что для операции \bar{N}_z^N матрица будет иметь вид

$$\alpha_{ij}(\bar{N}_z^{2N}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

т.е. операция \bar{N}_z^{2N} является тождественной операцией e . Таким образом, инверсионной оси N -го порядка с $N = 2l + 1$ соответствует циклическая группа порядка $2N$.

Групповое множество циклической группы, соответствующей инверсионной оси \bar{N} , включает в себя единичный элемент $e = \bar{N}^{2N}$, $N - 1$ простых поворотов и N инверсионных поворотов, включая и операцию инверсии $\bar{1} = \bar{N}^N$. В системе Шенфлиса такие группы обозначаются символом C_{Ni} .

2. Пусть $N = 4l + 2$. Число N в данном случае всегда четное, поэтому матрица операции \bar{N}_z^N представляет собой единичную матрицу

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad \text{Таким образом, циклическая группа, порожденная ин-$$

версионным поворотом \bar{N}^1 с $N = 4l + 2$, имеет порядок N . Все четные степени инверсионного поворота \bar{N}^1 будут тождественны простым поворотам вокруг поворотной оси порядка $N/2$.

Запишем матрицу для операции $\bar{N}_z^{N/2}$, учитывая, что элементарный угол поворота вокруг оси $\varphi = 2\pi/N$,

$$\alpha_{ij}(\bar{N}_z^{N/2}) = \alpha_{ij}(\bar{N}_z^{2l+1}) = \begin{pmatrix} -\cos \frac{N}{2}\varphi & -\sin \frac{N}{2}\varphi & 0 \\ \sin \frac{N}{2}\varphi & -\cos \frac{N}{2}\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Эта матрица соответствует отражению в плоскости симметрии m_z , которое входит в состав группового множества рассматриваемой циклической группы. Таким образом, групповое множество, отвечающее инверсионной оси \bar{N} ($N = 2l + 1$), помимо единичного элемента, содержит $\bar{N}^N \left(\frac{N}{2} - 1 \right)$ простых поворотов вокруг поворотной оси порядка $N/2$ и $N/2$ инверсионных поворотов нечетных степеней. В системе Шенфлиса такие группы обозначаются символом $C_{\frac{N}{2}h}$.

3. Пусть $N = 4l$. Как и в предыдущем случае,

$$\alpha_{ij}(\bar{N}^N) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

т.е. инверсионные повороты образуют циклическую группу N -го порядка. Все четные степени инверсионного поворота \bar{N}^1 тождественны простым поворотам вокруг поворотной оси порядка $N/2$. Поскольку $N = 4l$, то число $N/2$ — также четное. Тогда из (5.2) следует, что

$$\alpha_{ij}(\bar{N}^{N/2}) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

т.е. в групповом множестве присутствует поворот вокруг оси второго порядка 2_z^1 . В системе Шенфлиса такая группа будет иметь символ S_N .

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

5.4. Записать матрицы следующих симметрических преобразований и сравнить их между собой:

- 1) $5^2, \bar{5}^2, \left(\overset{\circ}{5} \right)^2$; 2) $5^3, \bar{5}^3, \left(\overset{\circ}{5} \right)^3$; 3) $7^1, \left(\overset{\circ}{7} \right)^1, \bar{7}^1$;
 4) $m_x, m_y, m_{\bar{x}y}, m_{xy}$; 5) $2_x, 2_y, 2_{xy}, 2_{\bar{x}y}$.

5.5. Какому зеркальному повороту соответствуют следующие инверсионные повороты:

$$1) \bar{5}^1, \bar{5}^2; 2) \bar{5}^3, \bar{5}^4; 3) \bar{7}^4, \bar{7}^5; 4) \bar{8}^2, \bar{8}^3; 5) \bar{10}^2, \bar{10}^2?$$

5.6. Какому инверсионному повороту соответствуют следующие зеркальные повороты:

$$1) \left(\overset{\circ}{5}\right)^1, \left(\overset{\circ}{5}\right)^4; 2) \left(\overset{\circ}{5}\right)^2, \left(\overset{\circ}{5}\right)^3; 3) \left(\overset{\circ}{7}\right)^4, \left(\overset{\circ}{7}\right)^5;$$

$$4) \left(\overset{\circ}{8}\right)^2, \left(\overset{\circ}{8}\right)^3; 5) \left(\overset{\circ}{10}\right)^2, \left(\overset{\circ}{10}\right)^3?$$

5.7. Показать, что приведенные символы описывают одну и ту же точечную группу симметрии.

- 1) C_{ni} и \bar{n} , если n — нечетное;
- 2) C_{nh} и $\bar{2n}$, если $n = 4l + 2$, $l = 1, 2, 3, \dots$;
- 3) S_n и \bar{n} , если $n = 4l$, $l = 1, 2, 3, \dots$

5.8. Построить группу симметрии по заданным на стереографической проекции генераторам (рис. 5.5). Построить полную стереографическую проекцию элементов симметрии группы. Обозначить группу по Шенфлису и международными обозначениями (по Герману–Могену). Определить порядок группы.

5.9. Показать, что группа S_{14} содержит подгруппу C_7 .

5.10. Показать, что группа $\bar{18}$ содержит подгруппу C_9 .

5.11. Указать порядок следующих групп и записать их международные символы:

- 1) D_{5d} ; 2) D_{5h} ; 3) D_7 ; 4) D_{9h} ; 5) D_{9d} ; 6) D_{4d} ;
- 7) C_{12h} ; 8) C_{7i} ; 9) D_{7h} ; 10) D_{10} ; 11) D_{8h} ; 12) S_{12} .

5.12. Вывести точечные группы симметрии, записать их символы, взяв в качестве генераторов следующие операции симметрии.

1) Повороты вокруг двух осей второго порядка, пересекающихся под углом: а) 15° ; б) 18° ; в) 10° .

2) Отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом: а) 10° ; б) 36° ; в) $22,5^\circ$.

3) Инверсию и повороты вокруг двух осей второго порядка, пересекающихся под углом: а) 15° ; б) 18° ; в) 10° .

4) Инверсию и отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом: а) 10° ; б) 36° ; в) $22,5^\circ$.

5) Отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, пересекающихся под углом: а) 15° ; б) 20° ; в) $22,5^\circ$.

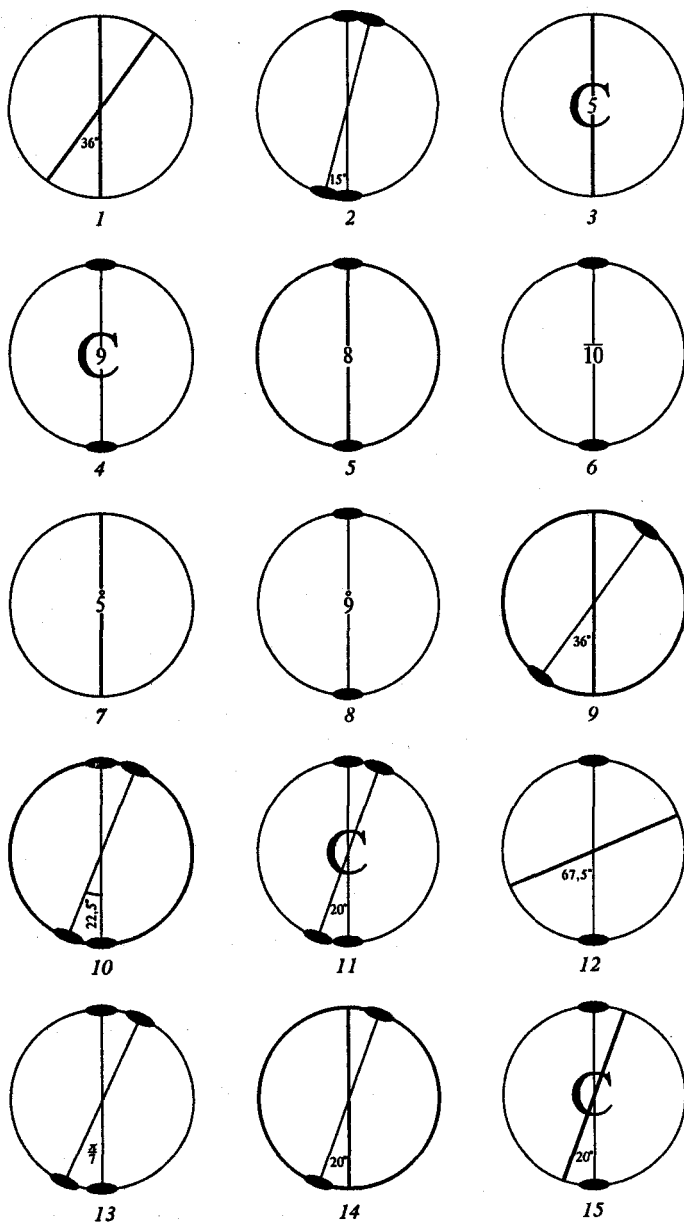


Рис. 5.5. К условию задачи 5.8

б) Инверсию, отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с плоскостью угол: а) 15° ; б) 20° ; в) $22,5^\circ$.

5.13. Показать, что матрицы одинаковых четных степеней зеркальных, инверсионных и обычных поворотов совпадают и имеют вид

$$\alpha_{ij}(\overset{\circ}{N}_z^{2l}, \bar{N}_z^{2l}, N_z^{2l}) = \begin{pmatrix} \cos 2l\varphi & \sin 2l\varphi & 0 \\ -\sin 2l\varphi & \cos 2l\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где $\varphi = \frac{2\varphi}{N}$.

5.14. Показать, что матрицы нечетных степеней зеркального поворота имеют вид

$$\alpha_{ij}(\overset{\circ}{N}_z^l) = \begin{pmatrix} \cos l\varphi & \sin l\varphi & 0 \\ -\sin l\varphi & \cos l\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

где $\varphi = \frac{2\varphi}{N}$, а l — любое нечетное число.

5.15. Показать, что матрицы нечетных степеней инверсионных поворотов имеют вид

$$\alpha_{ij}(\overset{\circ}{N}_z^l) = \begin{pmatrix} -\cos l\varphi & -\sin l\varphi & 0 \\ \sin l\varphi & -\cos l\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

где $\varphi = \frac{2\varphi}{N}$, а l — любое нечетное число.

5.2. Икосаэдрические группы симметрии

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

5.16. Найти минимальный угол между поворотными осями 2-го и 5-го порядков в точечной группе симметрии Y .

Решение. Точечная группа Y характеризуется набором элементов симметрии, включающим поворотные оси 5-го, 3-го и 2-го порядков. Построим сферу произвольного радиуса, центр которой совпадает с точкой пересечения всех осей симметрии точечной группы Y . Рассмотрим

сферический треугольник ABC , вершины которого образованы пересечением соседних осей 5-го, 3-го и 2-го порядков с этой сферой. Согласно теоремам точечной кристаллографии, углы при вершинах построенного сферического треугольника равны половинам элементарных углов поворотов соответствующих осей симметрии

$$A = \pi/5, \quad B = \pi/3, \quad C = \pi/2. \quad (5.4)$$

Минимальный угол между осями 2-го и 5-го порядков равен стороне сферического треугольника, т.е. угловой мере дуги AC , которую обозначим для краткости буквой b .

Используем формулу косинусов сферической тригонометрии

$$\cos(B) = -\cos(A) \cdot \cos(C) + \sin(A) \cdot \sin(C) \cdot \cos(b). \quad (5.5)$$

Вычисляя $\sin(\pi/5)$, воспользуемся представлением $\cos(\pi/5) = \tau/2$, где τ — иррациональное число, называемое золотым сечением и равное $(\sqrt{5} + 1)/2$. Подставляя углы (5.4) в уравнение (5.5), выразим значение косинуса дуги AC : $\cos(b) = \tau/\sqrt{1 + \tau^2}$. Используя обратные тригонометрические функции, получим, что искомый угол с точностью до одной угловой секунды равен $31^\circ 43' 3''$.

5.17. Найти минимальные углы между поворотными осями 5-го порядка в точечной группе симметрии Y .

Решение. В группе Y имеются 6 поворотных осей 5-го порядка. Минимально возможный угол образуют оси 5-го порядка, которые связаны между собой поворотом на угол π вокруг соседней оси 2-го порядка группы Y . Ясно, что ось 2-го порядка является биссектрисой этого угла между осями 5-го порядка. Используя метод, изложенный в предыдущей задаче, получим, что минимальный угол между соседними поворотными осями 2-го и 5-го порядков равен $31^\circ 43' 3''$. Следовательно, минимальный угол между двумя осями 5-го порядка вдвое больше и равен $63^\circ 26' 6''$.

5.18. Построить стереографическую проекцию точечной группы по следующим трем генераторам:

- 1) поворот вокруг оси 2-го порядка;
- 2) поворот вокруг оси 3-го порядка, перпендикулярной оси 2-го порядка;
- 3) поворот вокруг оси 5-го порядка, перпендикулярной оси 2-го порядка, причем угол α между осями 3-го и 5-го порядков составляет $37^\circ 22' 39''$.

Решение. Будем строить стереографические проекции элементов симметрии на кальке, используя сетку Вульфа. Центр круга проекций совместим с точкой пересечения трех заданных осей симметрии, причем плоскость проекций расположим перпендикулярно оси 2-го порядка. Стереографическая проекция оси 2-го порядка займет центр круга проекций. Две остальные оси расположатся в плоскости круга проекций,

выходы осей разместятся на периферии круга проекций (см. рис. 5.6а). Для определенности обозначим заданные оси символами d_1 , t_1 и p_1 . Будем отсчитывать долготу φ от одного из выходов оси 3-го порядка t_1 . Это значит, что эта точка имеет координаты $\rho = 90^\circ$, $\varphi = 0^\circ$. Долгота отсчитывается по часовой стрелке, поэтому один из выходов оси 5-го порядка p_1 имеет координаты $\rho = 90^\circ$, $\varphi = \alpha$. Противоположные выходы осей t_1 и p_1 имеют долготы 180° и $180^\circ + \alpha$.

Построение элементов симметрии группы будем вести путем «размножения» осей поворотами вокруг других осей. Эти операции представляют собой построения малых кругов, согласно рекомендациям, которые даны в задачах 2.24 и 2.25 (глава 2, § 2.2).

Сначала «размножим» ось 2-го порядка d_1 поворотами вокруг оси 3-го порядка t_1 на углы 120° и 240° (или -120°). Соответствующий малый круг имеет радиус 90° , поэтому три оси 2-го порядка лежат в одной плоскости, перпендикулярной оси 3-го порядка t_1 . Стереографической проекцией этой плоскости является отрезок прямой, соединяющий точки A и B , которые получают отсчет по периферийной окружности в обе стороны по 90° от точки с координатами $\rho = 90^\circ$, $\varphi = 0^\circ$ (см. рис. 5.6б). Для нахождения точек выхода осей 2-го порядка, эквивалентных оси d_1 , следует вдоль отрезка AB от центра проекций отложить

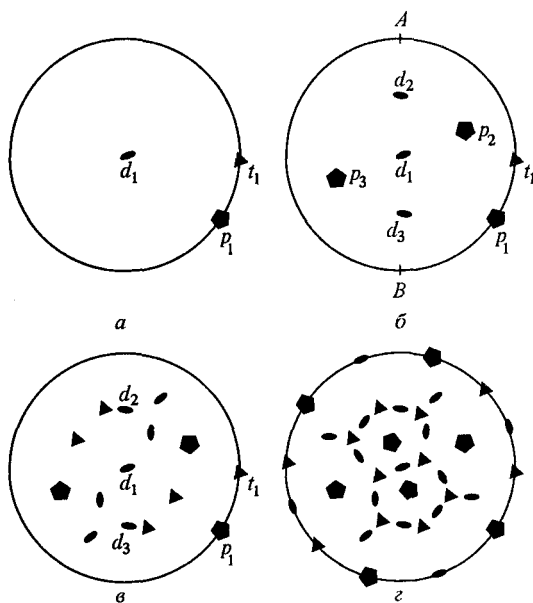


Рис. 5.6. К решению задачи 5.18

по 120° , т.е. элементарный угол поворота вокруг оси 3-го порядка. При этом мы перейдем в нижнюю полусферу сферической проекции. При изображении осей симметрии на стереографической проекции принято изображать точку пересечения осью верхней полусферы. Поэтому пе-

рейдем к диаметрально противоположным точкам (см. задачу 2.27) и получим стереографические проекции выходов двух осей 2-го порядка d_2 и d_3 (см. рис. 5.6б). Угловые расстояния между точками проекций d_1, d_2 и d_1, d_3 равны 60° .

Теперь «размножим» ось 5-го порядка p_1 поворотами вокруг оси t_1 . Построим малый круг с центром в точке t_1 , лежащим на периферийной окружности, и радиусом α . Повернем кальку так, чтобы точка t_1 совместилась с полюсом сетки Вульфа. При этом точка p_1 совместится с некоторой параллелью сетки. Вдоль этой параллели следует отложить углы 120° в обе стороны от точки p_1 . Отсчет в одну сторону дает точку пересечения верхней полусферы осью 5-го порядка p_2 . Отсчетом в противоположную сторону мы получаем точку в нижней полусфере. Переходя к диаметрально противоположной точке, получим стереографическую проекцию p_3 точки выхода еще одной оси 5-го порядка. Можно заметить, что оси p_2 и p_3 связаны между собой поворотом вокруг оси d_1 (см. рис. 5.6б).

Перейдем к «размножению» осей 2-го и 3-го порядков d_1 и t_1 поворотами вокруг оси 5-го порядка P_1 на углы, кратные $2\pi/5$ ($2\pi/5, 4\pi/5, 6\pi/5$ и $8\pi/5$ или $\pm 2\pi/5$ и $\pm 4\pi/5$). Проведем построения, аналогичные выше описанным, получим еще четыре оси 2-го и четыре оси 3-го порядков (см. рис. 5.6в).

Продолжая подобные процедуры, мы получим множество элементов симметрии, содержащее шесть осей 5-го порядка, десять осей 3-го порядка и пятнадцать осей 2-го порядка (см. рис. 5.6г). Можно убедиться непосредственной проверкой, что повороты вокруг этих осей образуют точечную икосаэдрическую группу Y .

Примечание. Вышеприведенная последовательность построения элементов симметрии не является единственно возможной. Любой другой порядок размножения поворотных осей также приведет к набору элементов симметрии икосаэдрической группы Y .

5.19. Записать матрицу поворота вокруг оси 3-го порядка, ориентация которой в выбранной системе декартовых координат задана следующими направляющими косинусами: $\tau/\sqrt{3}, 1/(\tau\sqrt{3}), 0$, где τ — золотое сечение (см. задачу 5.16).

Решение. Матрица поворота на произвольный угол φ вокруг оси, заданной направляющими косинусами k_1, k_2, k_3 , представляется в общем виде (2.1), приведенном в решении задачи 2.3 (глава 2, § 2.1). Подстановка значений углов $\varphi = \pm 2\pi/3$ и заданных направляющих косинусов в общую форму (2.1) дает следующие матрицы:

$$\text{для поворота на угол } \varphi = 2\pi/3: 3^1 = \begin{bmatrix} \tau/2 & 1/2 & -1/(2\tau) \\ 1/2 & -1/(2\tau) & \tau/2 \\ 1/(2\tau) & -\tau/2 & -1/2 \end{bmatrix},$$

$$\text{для поворота на угол } \varphi = -2\pi/3: 3^2 = \begin{bmatrix} \tau/2 & 1/2 & 1/(2\tau) \\ 1/2 & -1/(2\tau) & -\tau/2 \\ -1/(2\tau) & \tau/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$

или в более компактном виде: $\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \tau & 1 & \mp 1/\tau \\ 1 & -1/\tau & \pm \tau \\ \pm 1/\tau & \mp \tau & -1 \end{bmatrix}$,

где верхний знак соответствует повороту на угол $\varphi = 2\pi/3$, а нижний — на угол $\varphi = -2\pi/3$.

5.20. Вычислить угол между соседними гранями икосаэдра.

Решение. Угол между плоскостями граней равен углу между нормальными к граням. Грани икосаэдра перпендикулярны осям симметрии 3-го порядка. Соседние грани имеют общие ребра, через центры которых проходят оси 2-го порядка. Следовательно, угол между нормальными к соприкасающимся граням равен удвоенному углу между соседними осями 3-го и 2-го порядка. Вычисляя углы между осями способом, изложенным в решении задачи 5.16, получим искомый угол между соседними гранями $2 \cdot 20^\circ 54' 19'' = 41^\circ 48' 38''$.

5.21. Икосаэдр вписан в сферу единичного радиуса. Начало системы декартовых координат совмещено с точкой пересечения осей симметрии додекаэдра. Ось OZ проходит через одну из вершин многогранника. Соседняя вершина, соединенная ребром с первой, лежит в координатной плоскости OXZ . Вычислить координаты всех вершин икосаэдра.

Решение. Икосаэдр имеет 12 вершин. Через каждые две противоположные вершины проходят оси 5-го порядка. По условиям задачи одна из вершин (назовем ее первой) имеет декартовы координаты: $0, 0, 1$. Эта вершина лежит на оси 5-го порядка, которую обозначим p_1 . Вторая вершина расположена в точке пересечения описанной сферы другой осью 5-го порядка p_2 . Оси p_1 и p_2 связаны между собой поворотом вокруг оси 2-го порядка d_1 , которая расположена также в координатной плоскости OXZ . Следовательно, оси p_1 и p_2 образуют угол $2\alpha_{25}$, где α_{25} — минимальный угол между поворотными осями 2-го и 5-го порядков в группе точечной симметрии Y . Таким образом, координаты второй вершины многогранника имеют значения: $x_2 = \sin(2\alpha_{25})$, $y_2 = 0$, $z_2 = \cos(2\alpha_{25})$. По формуле косинусов сферической тригонометрии (5.5) вычисляется $\cos(\alpha_{25}) = \tau/\sqrt{1+\tau^2}$ (см. решение задачи 5.16), где τ — золотое сечение. Следовательно, координаты второй вершины представятся в виде: $x_2 = 2/\sqrt{5}$, $y_2 = 0$, $z_2 = 1/\sqrt{5}$. Для нахождения координат других вершин многогранника воспользуемся тем, что вершины симметричны относительно поворотов вокруг осей симметрии икосаэдра. Используя общее выражение (2.1), запишем матрицы поворотов вокруг оси 5-го порядка p_1 , проходящей через первую вершину. Очевидно, что направляющие косинусы этой оси равняются $k_1 = 0$, $k_2 = 0$, $k_3 = 1$. Для углов поворота $\varphi = \pm 2\pi/5$ получим матрицу

$$\begin{bmatrix} 1/(2\tau) & \pm\sqrt{1+\tau^2}/2 & 0 \\ \mp\sqrt{1+\tau^2}/2 & 1/(2\tau) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (5.6)$$

где верхний знак соответствует повороту на угол $\varphi = 2\pi/5$, а нижний — повороту на $\varphi = -2\pi/5$. Умножив матрицу (5.6) на вектор координат второй вершины $(2/\sqrt{5}, 0, 1/\sqrt{5})$, получим координаты 3-й и 4-й вершин икосаэдра: $x_3 = 1/(\tau\sqrt{5})$, $y_3 = -\sqrt{(1+\tau^2)}/5$, $z_3 = 1/\sqrt{5}$ и $x_4 = 1/(\tau\sqrt{5})$, $y_4 = \sqrt{(1+\tau^2)}/5$, $z_4 = 1/\sqrt{5}$.

Теперь запишем матрицу поворота на углы $\varphi = \pm 4\pi/5$ вокруг оси OZ :

$$\begin{bmatrix} -\tau/2 & \pm\sqrt{1+\tau^2}/\tau & 0 \\ \mp\sqrt{1+\tau^2}/\tau & -\tau/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.7)$$

Верхний знак соответствует повороту на угол $\varphi = 4\pi/5$, а нижний — повороту на $\varphi = -4\pi/5$. Умножим матрицу (5.7) на вектор координат второй вершины $(2/\sqrt{5}, 0, 1/\sqrt{5})$, получим координаты 5-й и 6-й вершин икосаэдра: $x_5 = -\tau/\sqrt{5}$, $y_5 = -\sqrt{(1+\tau^2)}/5/\tau$, $z_5 = 1/\sqrt{5}$ и $x_6 = -\tau/\sqrt{5}$, $y_6 = \sqrt{(1+\tau^2)}/5/\tau$, $z_6 = 1/\sqrt{5}$.

Наконец, заметим, что каждой вершине икосаэдра соответствует противоположная, связанная с исходной операцией инверсии. Следовательно, координаты остальных шести вершин получаем из уже полученных смежной всех знаков:

$$\begin{array}{lll} x_7 = 0, & y_7 = 0, & z_7 = -1; \\ x_8 = -2/\sqrt{5}, & y_8 = 0, & z_8 = -1/\sqrt{5}; \\ x_9 = -1/(\tau\sqrt{5}), & y_9 = \sqrt{(1+\tau^2)}/5, & z_9 = -1/\sqrt{5}; \\ x_{10} = -1/(\tau\sqrt{5}), & y_{10} = -\sqrt{(1+\tau^2)}/5, & z_{10} = -1/\sqrt{5}; \\ x_{11} = \tau/\sqrt{5}, & y_{11} = \sqrt{(1+\tau^2)}/5/\tau, & z_{11} = -1/\sqrt{5}; \\ x_{12} = \tau/\sqrt{5}, & y_{12} = -\sqrt{(1+\tau^2)}/5/\tau, & z_{12} = -1/\sqrt{5}. \end{array}$$

5.22. Найти все нетривиальные подгруппы точечной группы симметрии Y , содержащие повороты 5-го порядка.

Решение. Элементами симметрии точечной группы Y являются 6 различных осей 5-го порядка. Повороты вокруг этих осей генерируют группы C_5 . Перпендикулярно каждой оси 5-го порядка располагается 5 осей 2-го порядка, что порождает группы D_5 . В результате группа Y содержит 6 подгрупп C_5 и 6 подгрупп D_5 .

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

5.23. Найти минимальный угол между поворотными осями 3-го и 5-го порядков в точечной группе симметрии Y .

5.24. Найти минимальный угол между поворотными осями 2-го и 3-го порядков в точечной группе симметрии Y .

5.25. Найти наименьший угол между поворотными осями 3-го порядка в точечной группе симметрии Y .

5.26. Вычислить всевозможные углы между осями 2-го порядка в точечной группе симметрии Y .

5.27. Вычислить наименьший угол между зеркальными плоскостями в точечной группе симметрии Y_h .

5.28. Найти все нетривиальные подгруппы точечной группы симметрии Y , содержащие повороты 3-го порядка.

5.29. Найти все нетривиальные подгруппы точечной группы симметрии Y_h :

- 1) содержащие повороты 5-го порядка;
- 2) содержащие повороты 3-го порядка.

5.30. Построить стереографические проекции кубических групп, которые являются подгруппами:

- 1) точечной группы симметрии Y_h ;
- 2) точечной группы симметрии Y .

5.31. Построить стереографическую проекцию точечной группы, используя в качестве генераторов повороты вокруг осей 2-го, 3-го и 5-го порядков, расположенных последовательно в одной плоскости. Угол между осями 2-го и 3-го порядков $\alpha = 20^\circ 54' 19''$, угол между осями 3-го и 5-го порядков $\beta = 37^\circ 22' 39''$.

5.32. Построить стереографическую проекцию точечной группы по следующим трем генераторам:

- 1) поворот вокруг оси 2-го порядка;
- 2) отражение в плоскости, перпендикулярной оси 2-го порядка;
- 3) поворот вокруг оси 5-го порядка, составляющей угол $31^\circ 43' 3''$ с осью 2-го порядка.

5.33. Построить стереографическую проекцию точечной группы по следующим трем генераторам:

- 1) поворот вокруг оси 5-го порядка;
- 2) поворот вокруг оси 3-го порядка, составляющей угол $37^\circ 22' 39''$ с осью 5-го порядка;
- 3) инверсия в точке пересечения указанных осей.

5.34. Построить стереографические проекции точечных групп по генераторам, указанным на рис. 5.7:

а) ось 2-го порядка лежит в плоскости проекций и перпендикулярна плоскости, содержащей оси 5-го порядка. Угол между осями 5-го порядка равен $63^\circ 26' 6''$;

б) все три оси симметрии расположены в одной плоскости. Угол между осями 5-го и 3-го порядков равен $37^\circ 22' 39''$, угол между осями 5-го и 2-го порядков равен $31^\circ 43' 3''$;

в) оси 5-го и 3-го порядка лежат в плоскости отражения. Ось 3-го порядка ориентирована перпендикулярно плоскости проекций. Угол между осями 5-го и 3-го порядков равен $37^{\circ}22'39''$.

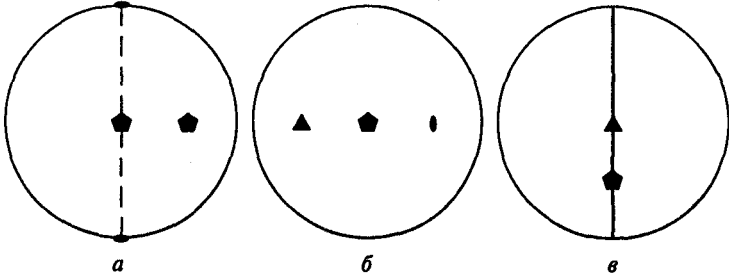


Рис. 5.7. К условию задачи 5.34

5.35. Построить стереографические проекции точечных групп по генераторам, указанным на рис. 5.8:

а) одна ось 2-го порядка лежит в плоскости проекций и составляет с плоскостью отражения угол 30° . Вторая ось 2-го порядка расположена в плоскости отражения под углом $69^{\circ}05'44''$ относительно нормали к плоскости проекций;

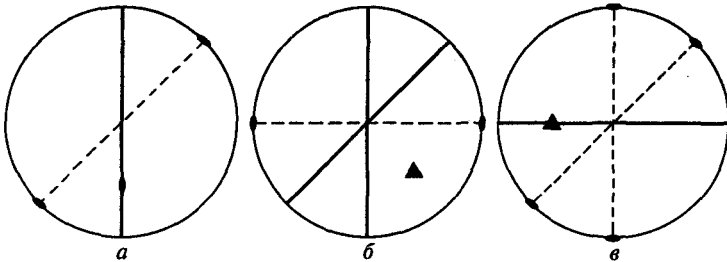


Рис. 5.8. К условию задачи 5.35

б) две плоскости отражения, перпендикулярные плоскости проекций, пересекаются между собой под углом 36° . Ось 2-го порядка расположена в плоскости проекций перпендикулярно одной из отражающих плоскостей. Выход оси 3-го порядка лежит на биссектрисе прямого угла, образованного стереографическими проекциями оси 2-го порядка и перпендикулярной плоскости. Угол между осью 3-го порядка и линией пересечения плоскостей отражения составляет $37^{\circ}22'39''$;

в) две оси 2-го порядка лежат в плоскости проекций, угол между ними 36° . Плоскость отражения перпендикулярна плоскости про-

екций и одной из осей 2-го порядка. Ось 3-го порядка расположена в плоскости отражения и составляет угол $37^{\circ}22'39''$ с нормалью к плоскости проекций.

5.36. Построить стереографические проекции точечных групп по генераторам, указанным на рис. 5.9:

а) две оси 2-го порядка лежат в плоскости проекций, угол между ними 60° . Ось 5-го порядка расположена в плоскости, перпендикулярной плоскости проекций и одной из осей 2-го порядка. Угол между осью 5-го порядка и нормалью к плоскости проекций равен $37^{\circ}22'39''$;

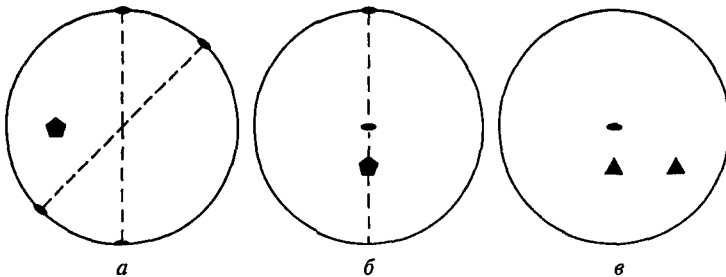


Рис. 5.9. К условию задачи 5.36

б) оси 2-го порядка взаимно перпендикулярны. Угол между осью 5-го порядка и одной из осей 2-го порядка составляет $31^{\circ}43'3''$. Все три оси расположены в одной плоскости, перпендикулярной плоскости проекций;

в) ось 2-го порядка перпендикулярна плоскости проекций. Оси 3-го порядка лежат в плоскостях, угол между которыми равен 45° . Одна из осей 3-го порядка образует с осью 2-го порядка угол $20^{\circ}54'19''$, вторая — угол, равный $54^{\circ}44'8''$.

5.37. Записать матрицы поворота вокруг оси 5-го порядка, ориентация которой в выбранной системе декартовых координат задана следующими направляющими косинусами:

- 1) $(1/\sqrt{1+\tau^2}, \tau/\sqrt{1+\tau^2}, 0)$; 2) $(0, 1/\sqrt{1+\tau^2}, \tau/\sqrt{1+\tau^2})$;
- 3) $(\tau/\sqrt{1+\tau^2}, 0, 1/\sqrt{1+\tau^2})$; 4) $(-1/\sqrt{1+\tau^2}, \tau/\sqrt{1+\tau^2}, 0)$;
- 5) $(0, -1/\sqrt{1+\tau^2}, \tau/\sqrt{1+\tau^2})$; 6) $(\tau/\sqrt{1+\tau^2}, 0, -1/\sqrt{1+\tau^2})$,

где $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2$ — золотое сечение.

5.38. Записать матрицы поворота вокруг оси 3-го порядка, ориентация которой в выбранной системе декартовых координат

задана следующими направляющими косинусами:

- 1) $(0, \tau/\sqrt{3}, 1/(\tau\sqrt{3}))$; 2) $(1/(\tau\sqrt{3}), 0, \tau/\sqrt{3})$;
- 3) $(\tau/\sqrt{3}, -1/(\tau\sqrt{3}), 0)$; 4) $(0, \tau/\sqrt{3}, -1/(\tau\sqrt{3}))$;
- 5) $(-1/(\tau\sqrt{3}), 0, \tau/\sqrt{3})$,

где τ — золотое сечение.

5.39. Записать матрицы поворота вокруг оси 2-го порядка, ориентация которой в выбранной системе декартовых координат задана следующими направляющими косинусами:

- 1) $(1/(2\tau), \tau/2, 1/2)$; 2) $(-1/(2\tau), \tau/2, 1/2)$;
- 3) $(1/(2\tau), -\tau/2, 1/2)$; 4) $(1/(2\tau), \tau/2, -1/2)$;
- 5) $(1/2, 1/(2\tau), \tau/2)$; 6) $(-1/2, 1/(2\tau), \tau/2)$;
- 7) $(1/2, -1/(2\tau), \tau/2)$; 8) $(1/2, 1/(2\tau), -\tau/2)$;
- 9) $(\tau/2, 1/2, 1/(2\tau))$; 10) $(-\tau/2, 1/2, 1/(2\tau))$;
- 11) $(\tau/2, -1/2, 1/(2\tau))$; 12) $(\tau/2, 1/2, -1/(2\tau))$,

где τ — золотое сечение.

5.40. Указать симметрию грани:

1) правильного пентагон-додекаэдра; 2) икосаэдра; 3) ромбического триаконтаэдра; 4) пирамидального додекаэдра; 5) пирамидального икосаэдра; 6) триаксис-икосаэдра; 7) пентагон-изоэдра в точечной группе \bar{Y} .

5.41. Указать симметрию грани:

1) правильного пентагон-додекаэдра; 2) икосаэдра; 3) ромбического триаконтаэдра; 4) пирамидального додекаэдра; 5) пирамидального икосаэдра; 6) триаксис-икосаэдра; 7) гексаксис-икосаэдра в точечной группе Y_h .

5.42. Вычислить угол между соседними гранями:

- 1) правильного пентагон-додекаэдра;
- 2) ромбического триаконтаэдра.

5.43. Правильный пентагон-додекаэдр вписан в сферу единичного радиуса. Начало системы декартовых координат совмещено с точкой пересечения осей симметрии додекаэдра. Ось OZ проходит через одну из вершин многогранника. Соседняя вершина, соединенная ребром с первой, лежит в координатной плоскости OXZ . Вычислить координаты всех вершин пентагон-додекаэдра.

5.3. Черно-белые группы симметрии

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

5.44. Вывести черно-белую точечную группу симметрии, приняв за генераторы операции отражений в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси антисимметрии второго порядка, перпендикулярной к одной из плоскостей. Изобразить элементы симметрии группы на стереографической проекции. Дать обозначение группы. Записать элементы группового множества.

Решение. Решение задачи удобно начать с построения стереографической проекции элементов симметрии. Введем ортогональную систему координат, оси X и Y которой совпадают с нормальными к плоскостям симметрии. Построим стереографическую проекцию элементов симметрии генераторов группы, обозначив их m_x , m_y , $2'_x$ (рис. 5.10а).

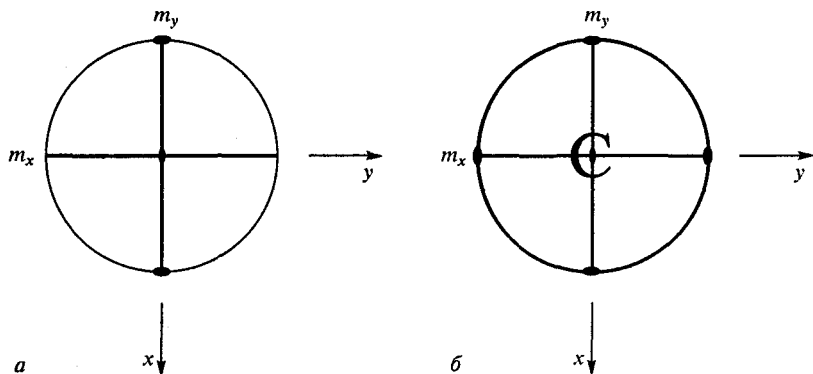


Рис. 5.10. К построению стереографической проекции черно-белой группы $\frac{2'}{m} \frac{2'}{m} \frac{2}{m'}$ (цветное изображение этого рисунка см. на третьей стороне обложки)

При этом обычные «одноцветные» элементы симметрии обозначаем так же, как и раньше, а черно-белые (антисимметричные) — выделяем красным цветом.

Используя теоремы умножения операций симметрии, получим: $m_x \times m_y = 2_z$, $2'_x \times 2_z = 2'_y$, $m_x \times 2'_x = \bar{1}'$, $2'_x \times m_y = m'_z$ (рис. 5.10б). Можно убедиться, что дальнейшее перемножение между собой операций симметрии дает уже имеющиеся операции: $m_x \times m_x = 2'_x \times 2'_x = \bar{1}' \times \bar{1}' = e$, $m_x \times m'_z = 2'_y$, $2'_x \times \bar{1}' = m_x$ и т.д. Таким образом, групповое множество состоит из восьми элементов. Оно записывается символически следующим образом: $G = \{e, m_x, m_y, m'_z, 2'_x, 2'_y, 2_z, \bar{1}'\}$. Порядок группы равен восьми.

Полученная группа принадлежит к ромбической сингонии и имеет полный международный символ (символ Германа-Могена) $\frac{2'}{m} \frac{2'}{m} \frac{2}{m'}$.

5.45. Дополнить стереографическую проекцию элементов симметрии черно-белой точечной группы (рис. 5.11а) и записать ее обозначение.

Решение. Для решения задачи вначале используем тот факт, что элементы симметрии можно «размножить» операциями симметрии группы как обычные точки, прямые и плоскости кристаллического пространства. В этой задаче ось третьего порядка размножит черно-белые оси четвертого порядка в три эквивалентные оси.

Далее будем производить перемножение уже найденных операций симметрии в совокупности с «размножением» полученных элементов симметрии. Применяя следствие из mmN -теоремы умножения операций симметрии, получаем, что произведения поворотов вокруг оси третьего порядка и отражения в плоскости m дадут отражения в трех плоскостях симметрии, проходящих через ось и повернутых относительно друг друга на угол 60° .

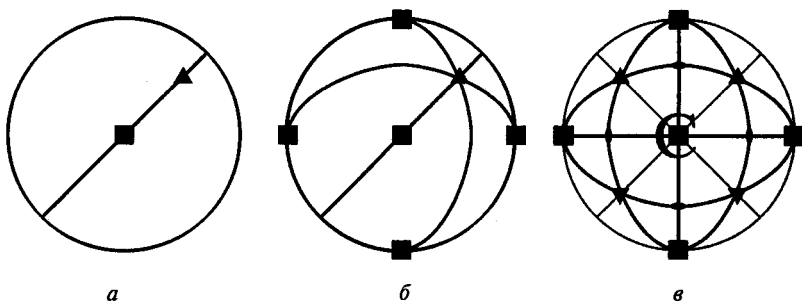


Рис. 5.11. К решению задачи 5.45 (цветное изображение этого рисунка см. на третьей стороне обложки)

Произведение поворотов вокруг оси антисимметрии четвертого порядка и отражения в плоскости симметрии, проходящей через ось, дадут две плоскости антисимметрии и одну зеркальную плоскость симметрии, проходящие через ось:

$$\begin{array}{c}
 4' \cdot m_1 = m'_2, \\
 \swarrow \searrow \\
 45^\circ \\
 (4')^2 \cdot m_1 = 2 \cdot m_1 = m_3, \\
 \swarrow \searrow \\
 90^\circ \\
 (4')^3 \cdot m_1 = m'_4, \\
 \swarrow \searrow \\
 135^\circ
 \end{array}$$

Плоскости симметрии, пересекаясь, дадут еще три оси третьего порядка. Наконец, в результате перемножения взаимно перпендикулярных плоскостей симметрии и антисимметрии получатся оси антисимметрии второго порядка.

Перпендикулярно каждой оси антисимметрии четвертого порядка располагается плоскость антисимметрии. Перемножая соответствующие им операции, получим:

$$(4')^1 * m'_\perp = (\overset{\circ}{4})^1; \quad (4')^2 * m'_\perp = \bar{1}'; \quad (4')^3 * m'_\perp = (\overset{\circ}{4})^{-1}.$$

Таким образом, на стереографической проекции элементов симметрии группы необходимо изобразить центр антиинверсии. Можно убедиться, что, перемножая любые из найденных операций симметрии, будем получать уже имеющиеся операции симметрии, т.е. полученное множество замкнуто.

Символ данной группы может быть получен по обычным правилам с учетом того, что некоторые из элементов являются элементами антисимметрии. Таким образом получаем, что символ данной группы $\frac{4'}{m'} \bar{3} \frac{2'}{m}$.

5.46. Построить групповое множество группы, которую можно получить, добавив к групповому множеству группы D_4 операцию антиотождествления $1'$. Найти ее порядок и записать символ.

Решение. Запишем групповое множество группы D_4 :

$$D_4 = \{e, 2_1^1, 2_2^1, 2_3^1, 2_4^1, 4^1 = 4^{-1}, 4^2 = 2^1, 4^3\}.$$

Добавим к данному множеству операцию антиотождествления и умножим ее с каждой операцией группы D_4 :

$$\begin{aligned} 2_1^1 * 1' &= 2_1^{\prime 1}; & 2_2^1 * 1' &= 2_2^{\prime 1}; & 2_3^1 * 1' &= 2_3^{\prime 1}; & 2_4^1 * 1' &= 2_4^{\prime 1}; \\ 4^1 * 1' &= (4^1)'; & 4^2 * 1' &= (4^2)'; & 4^3 * 1' &= (4^3)'. \end{aligned}$$

Таким образом, групповое множество данной группы можно записать в виде

$$\begin{aligned} \{e, 2_1^1, 2_2^1, 2_3^1, 2_4^1, 4^1, 4^2 = 2^1, 4^3 = \\ = 4^{-1}, 1', 2_1^{\prime 1}, 2_2^{\prime 1}, 2_3^{\prime 1}, 2_4^{\prime 1}, (4^1)', (4^2)', (4^3)'\}. \end{aligned}$$

Мы получили «серую» группу шестнадцатого порядка $4221'$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

5.47. Вывести точечные группы симметрии и записать их символы. Построить стереографические проекции элементов симметрии. Для каждой группы записать групповое множество. Генераторы заданы следующими операциями симметрии:

- 1) поворот вокруг оси второго порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости антисимметрии;
- 2) отражение в плоскости антисимметрии и поворот вокруг оси антисимметрии второго порядка, лежащей в этой плоскости;
- 3) последовательные повороты вокруг двух взаимно перпендикулярных осей антисимметрии второго порядка;
- 4) отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси антисимметрии второго порядка, лежащей в одной и перпендикулярной второй плоскости;
- 5) поворот вокруг оси антисимметрии четвертого порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости антисимметрии;
- 6) два последовательных поворота вокруг осей антисимметрии второго порядка, составляющих между собой угол 45° ;
- 7) последовательные отражения в двух плоскостях антисимметрии, расположенных под углом 45° друг к другу;
- 8) последовательные отражения в трех плоскостях, две из которых (плоскости антисимметрии) пересекаются под углом 45° , а третья плоскость симметрии им перпендикулярна;
- 9) последовательные повороты вокруг взаимно перпендикулярных осей антисимметрии четвертого и второго порядков и отражение в центре антиинверсии;
- 10) отражение в плоскости антисимметрии и поворот вокруг зеркальной оси четвертого порядка, лежащей в этой плоскости;
- 11) отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси антисимметрии второго порядка, составляющей с ней угол 45° ;
- 12) повороты вокруг двух осей антисимметрии второго порядка, составляющих друг с другом угол 60° ;
- 13) последовательные отражения в двух плоскостях антисимметрии, пересекающихся под углом 60° ;
- 14) отражение в плоскости антисимметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с плоскостью угол 30° ;
- 15) последовательные повороты вокруг перпендикулярных друг к другу осей антисимметрии шестого и второго порядков;
- 16) последовательные отражения в плоскостях симметрии и антисимметрии, пересекающихся под углом 30° ;
- 17) последовательные отражения в трех плоскостях антисимметрии, две из которых пересекаются под углом 30° , а третья им перпендикулярна;
- 18) отражения в двух пересекающихся под углом 30° плоскостях симметрии и центре антиинверсии; 19) отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси антисимметрии второго порядка, составляющей с ней угол 60° ;

20) последовательные отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 60° , и операция антиотождествления;

21) отражение в плоскости симметрии, поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с плоскостью угол 30° , и операция антиотождествления;

22) отражение в плоскости симметрии, поворот вокруг оси симметрии второго порядка, составляющей с ней угол 45° , и операция антиотождествления;

23) последовательные отражения в трех плоскостях симметрии, две из которых пересекаются под углом 45° , а третья плоскость симметрии им перпендикулярна, и операция антиотождествления;

24) последовательные повороты вокруг взаимно перпендикулярных осей симметрии четвертого и второго порядков, отражение в центре инверсии и операция антиотождествления;

25) отражение в плоскости симметрии, поворот вокруг зеркальной оси четвертого порядка, лежащей в этой плоскости, и операция антиотождествления.

5.48. Перечислить точечные группы, являющиеся подгруппами следующих точечных групп:

$$1) 2'2'2; \quad 2) \frac{2}{m'} \frac{2}{m'} \frac{2}{m'}; \quad 3) \bar{3}'m'; \quad 4) \frac{4'}{m} \frac{2}{m} \frac{2'}{m'}; \quad 5) 231'.$$

5.49. Дополнить стереографические проекции элементов симметрии (антисимметрии) черно-белых групп (рис. 5.12). Записать символы групп.

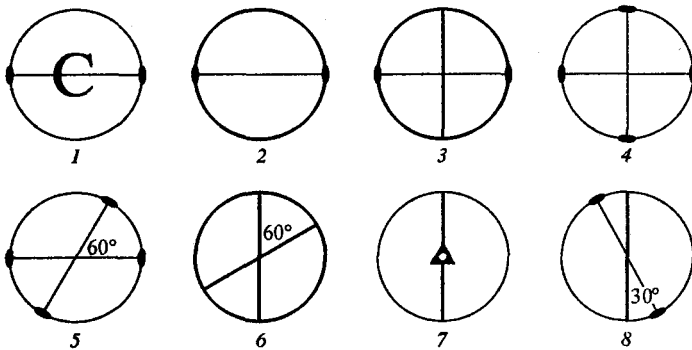


Рис. 5.12 (начало). К условию задачи 5.49 (цветное изображение этого рисунка см. на четвертой стороне обложки)

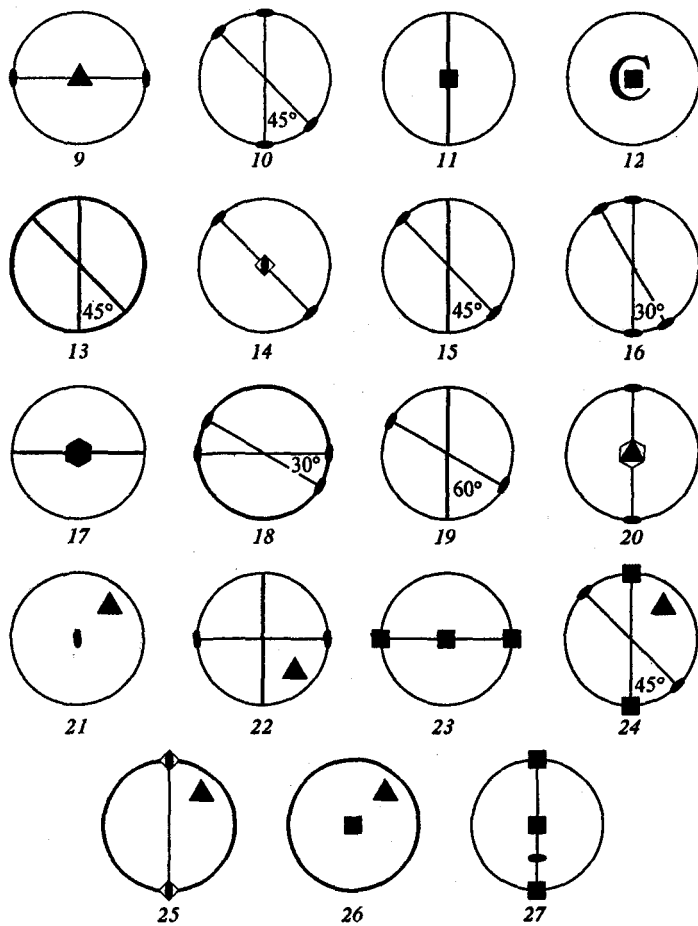


Рис. 5.13 (продолжение). К условию задачи 5.49 (цветное изображение этого рисунка см. на четвертой стороне обложки)

Глава 6

ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОХИМИИ

6.1. Плотнейшие упаковки

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

6.1. Определить симметрию плотнейшей упаковки одинаковых кругов и одинаковых эллипсов на плоскости.

Решение. Нарисуем идеальную плотнейшую упаковку одинаковых кругов на плоскости и график ее пространственной группы симметрии (рис. 6.1).

Из рисунка видно, что эта упаковка представляет собой двумерную периодическую структуру с гексагональной симметрией. Каждый круг касается шести соседних, т.е. имеет координационное число, равное шести. Плоская элементарная ячейка представляет собой ромб со стороной, равной диаметру круга. Между кругами в слое образуются пустоты, каждая из которых образована тремя соседними взаимно касающимися кругами.

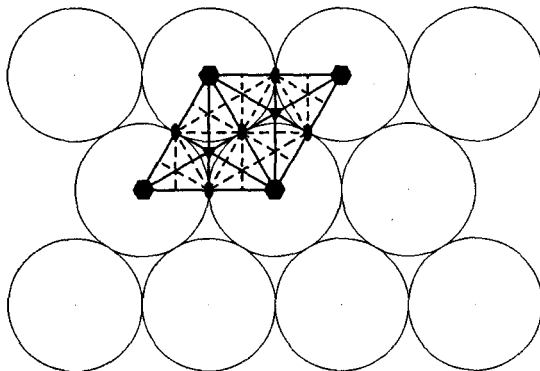


Рис. 6.1. Упаковка одинаковых кругов на плоскости и график ее пространственной группы симметрии $р6m$

Из рисунка видно, что через центр каждого круга проходит ось симметрии шестого порядка, через каждую пустоту — ось третьего порядка, а через центры соседних кругов — зеркальные плоскости симметрии. Приняв, наряду с трансляциями, эти операции симметрии за генераторы, построим график двумерной пространственной группы симметрии (рис. 6.1). Нетрудно убедиться, что это двумерная группа $р6m$.

Рассмотрим теперь упаковку одинаковых эллипсов на плоскости (рис. 6.2).

Выделим элементарную ячейку и найдем элементы симметрии упаковки. Во-первых, можно заметить, что решетка является центрированной, т.е. кроме двух трансляций по границам элементарной ячейки

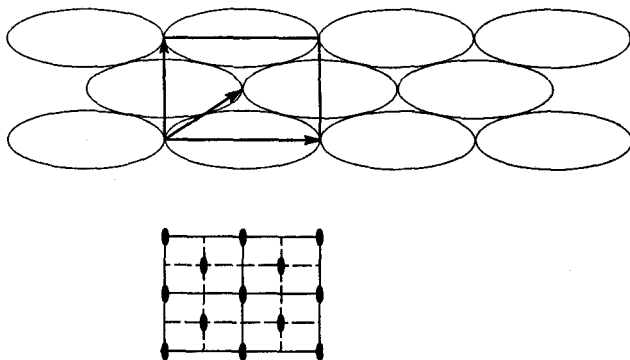


Рис. 6.2. Упаковка одинаковых эллипсов на плоскости и график ее двумерной пространственной группы симметрии stm

имеется еще центрирующая трансляция, равная половине диагонали элементарной ячейки (трансляции на рис. 6.2 показаны стрелками). Из рисунка можно сразу увидеть взаимно перпендикулярные зеркальные плоскости симметрии m и оси второго порядка, расположенные в точках их пересечений. Умножая операции отражения с центрирующей трансляцией, получаем взаимно перпендикулярные скользящие плоскости симметрии a или b . Таким образом, пространственная группа данной упаковки — stm .

6.2. Определить симметрию позиций в центрах пустот плотнейшей упаковки одинаковых кругов и одинаковых эллипсов на плоскости.

Решение. Обратимся к графикам плоских пространственных групп симметрии rbm и stm , которые описывают симметрию обеих упаковок, или воспользуемся Интернациональными таблицами. Из рис. 6.1 видно, что через центр каждой пустоты проходит ось третьего порядка и три зеркальные плоскости симметрии. Следовательно, симметрия позиции $3m = C_{3v}$. Из рис. 6.2 можно увидеть, что через центр каждой пустоты проходит лишь зеркальная плоскость симметрии m , и симметрия позиции $m = C_s$.

Те же результаты можно получить, используя Интернациональные таблицы. Будем исходить из того, что пустоты располагаются по правильным системам точек групп rbm и stm . Определим кратность этих правильных систем точек. В упаковке на рис. 6.1 на элементарную ячейку приходится две пустоты. Следовательно, правильная система точек, по которой располагаются центры пустот, должна иметь кратность 2.

Для упаковки эллипсов на рис. 6.2 число пустот на элементарную ячейку 4 (две пустоты принадлежат ячейке полностью и четыре пустоты, расположенные на границе ячейки, принадлежат ей наполовину). Из Интернациональных таблиц находим, что в двумерной группе rbm имеется одна двукратная правильная система точек

$$2 \quad b \quad 3m \quad 1/3, 2/3; 2/3, 1/3,$$

по которой и располагаются пустоты в упаковке кругов на плоскости. Следовательно, симметрия позиции $3m = C_{3v}$.

В группе stm имеются следующие четырехкратные правильные системы точек, по одной из которых располагаются пустоты в упаковке эллипсов. Это правильные системы точек:

$$\begin{array}{llll} 4 & e & m & 0, y; 0, \bar{y} \\ 4 & d & m & x, 0; 0, \bar{x} \\ 4 & c & 2 & 1/4, 1/4; 1/4, 3/4. \end{array}$$

Из рис. 6.2 видно, что пустоты располагаются на границе элементарной ячейки, следовательно, их координаты могут иметь вид $0, y$ или $x, 0$ в зависимости от конкретного наименования осей координат. Таким образом, симметрия позиций, в которой располагаются центры пустот в деформированной упаковке, $m = C_s$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

6.3. Как изменятся точечные и пространственные группы симметрии упаковок одинаковых кругов и одинаковых эллипсов на плоскости, если пустоты (все или их часть) плотно заполняются кругами соответствующего радиуса? Рассмотреть различные способы заполнения пустот в пределах элементарной ячейки.

6.4. Как изменится симметрия плотнейшей упаковки одинаковых кругов на плоскости, если ее подвергнуть однородному растяжению вдоль направлений, проходящих через центры кругов и центры пустот? Определить соответствующую группу пространственной симметрии.

6.5. Как изменится точечная и пространственная симметрия трехслойной плотнейшей упаковки, если ее подвергнуть однородной деформации:

- 1) в направлении оси четвертого порядка;
- 2) в направлении оси третьего порядка;
- 3) в направлении оси второго порядка;
- 4) в произвольном направлении, лежащем в одной из плоскостей симметрии?

6.6. Как изменится точечная и пространственная симметрия двухслойной плотнейшей упаковки, если ее подвергнуть однородной деформации:

- 1) в направлении оси третьего порядка;
- 2) в направлении координатной оси второго порядка?

6.7. Может ли быть получена вся бесконечная плотнейшая упаковка одинаковых шаров из одного шара только с помощью трансляций решетки:

- 1) двухслойная плотнейшая упаковка;
- 2) трехслойная плотнейшая упаковка?

6.8. Найти группу симметрии, относительно которой инвариантны плотнейшие упаковки одинаковых шаров любой слойности.

6.9. Вывести формулу для расчета плотности заполнения пространства (отношение объемов частиц, расположенных в элементарной ячейке, к объему элементарной ячейки) для плотнейших упаковок одинаковых шаров в пространстве. Считать заданными объем элементарной ячейки, радиус шара и число шаров на ячейку.

6.10. Вычислить и сравнить между собой плотность заполнения для следующих упаковок одинаковых шаров в пространстве:

- 1) двухслойной плотнейшей упаковки;
- 2) трехслойной плотнейшей упаковки;
- 3) кубической объемноцентрированной упаковки;
- 4) кубической примитивной упаковки.

6.11. Определить координационное число и координационный многогранник для шаров:

- 1) в кубической примитивной упаковке;
- 2) в кубической объемноцентрированной упаковке.

6.12. Вычислить плотность заполнения для упаковки одинаковых шаров, координаты которых совпадают с координатами атомов углерода в структуре алмаза.

6.13. Найти коэффициенты упаковки для плотнейшей упаковки двух типов шаров, большие из которых образуют трехслойную плотнейшую упаковку, а меньшие располагаются в пустотах. При каком соотношении радиусов коэффициент упаковки максимален? Рассмотреть случаи, когда меньшие шары заполняют все тетраэдрические и октаэдрические пустоты.

6.14. Найти коэффициенты упаковки для плотнейшей упаковки двух типов шаров, большие из которых образуют двухслойную плотнейшую упаковку, а меньшие располагаются в пустотах. При каком соотношении радиусов коэффициент упаковки максимален? Рассмотреть случаи, когда меньшие шары заполняют:

- 1) все тетраэдрические пустоты;
- 2) все октаэдрические пустоты.

6.15. В двухслойной плотнейшей упаковке заполнена половина тетраэдрических пустот, находящихся в элементарной ячейке. Найти возможные пространственные группы симметрии упаковки, записать координаты шаров, пустых и заполненных пустот. Какие структурные типы описывает данная упаковка?

6.16. Найти возможные пространственные группы симметрии, которыми описываются структуры, построенные на базе идеальной двухслойной упаковки и содержащие два сорта атомов при разных вариантах размещения меньших по размерам атомов в пустотах упаковки.

6.17. Определить группу симметрии внутренних электрических полей в центрах шаров, октаэдрических и тетраэдрических пустот для:

- 1) идеальной двухслойной упаковки;
- 2) идеальной трехслойной упаковки.

6.18. Известно, что координационные многогранники каждого шара в «пустой» двухслойной и трехслойной упаковках — соответственно гексагональный и кубический кубооктаэдры. Зная пространственные группы симметрии упаковок и считая заданным радиус шара, найти координаты вершин обоих кубооктаэдров.

6.2. Структурные типы

ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

6.19. Кристаллы некоторого химического соединения состава A_2X , атомная структура которых построена по принципу плотнейшей упаковки, описываются пространственной группой $R6_3mc$. Атомы A располагаются по правильной системе точек, полученной из точки $1/3, 2/3, 3/8$, а атомы X — из точки $1/3, 2/3, 0$. Какие пустоты данной плотнейшей упаковки заняты? К какому структурному типу относятся данные кристаллы? Определить симметрию позиций в кристаллическом пространстве, которые занимают атомы A и X .

Решение. Как следует из Интернациональных таблиц, позиции, в которых находятся атомы как A , так и X , принадлежат к двукратным правильным системам точек $1/3, 2/3, z$; $2/3, 1/3, z + 1/2$. Эти правильные системы точек различаются лишь координатами z атомов. Отсюда следует, что в элементарной ячейке содержатся две формульные единицы состава A_2X (два атома A и два атома X). Это свидетельствует о том, что данная структура построена по закону двухслойной упаковки. При этом плотнейшую упаковку могут образовывать как атомы A , так и атомы X . Для определенности допустим, что плотнейшую упаковку образуют атомы X , а атомы A располагаются в пустотах.

Пространственная группа симметрии $R6_3mc$ данного кристалла, являясь подгруппой $P\frac{6_3}{m}mc$, также свидетельствует о том, что его атомная структура должна быть на базе двухслойной плотнейшей упаковки.

Два атома А могут занимать все октаэдрические пустоты или половину тетраэдрических пустот двухслойной плотнейшей упаковки. Если бы атомы А заполнили все октаэдрические пустоты, то пространственная группа симметрии данного кристалла совпадала бы с пространственной группой симметрии «пустой» двухслойной плотнейшей упаковки $P\frac{6_3}{m}mc$.

Понижение симметрии до подгруппы $R6_3mc$ означает, что в данной кристаллической структуре атомы А заполняют половину тетраэдрических пустот. Известно, что одинаковые с шарами координаты x и y в двухслойной упаковке имеют тетраэдрические пустоты, о чем свидетельствует также и разность z -координат атомов $z(A)$ и $z(X)$, равная $3/8$, что равно расстоянию от центра тетраэдрической пустоты до центра шара упаковки.

Закон заполнения пустот можно получить следующим образом. Симметрия данной структуры характерна тем, что, по сравнению с группой $P\frac{6_3}{m}mc$, отсутствует плоскость симметрии m_z . Это означает, что из двух тетраэдров, связанных в «пустой» двухслойной упаковке плоскостью симметрии, заполнен лишь один. Другими словами, все заполненные тетраэдры имеют одинаковую ориентацию своих вершин. Иногда говорят, что в данной структуре все заполненные тетраэдры «смотрят своими вершинами в одну сторону».

Из курса кристаллографии следует, что мы фактически описали один из весьма распространенных структурных типов — структурный тип вюрцита ZnS .

Определить симметрию позиций, которые занимают в кристаллическом пространстве атомы структуры, можно из характеристик правильных систем точек, по которым они располагаются. Из Интернациональных таблиц видно, что обе правильные системы точек располагаются на оси третьего порядка. Учитывая, что по оси третьего порядка пересекаются три зеркальные плоскости симметрии m , симметрия позиций $C_{3v} = 3m$. Следовательно, и атомы А, и атомы Х в структуре вюрцита занимают позиции с симметрией $C_{3v} = 3m$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

6.20. Атомная структура некоторого соединения АХ описывается пространственной группой $F43m$, в которой атомы А располагаются по правильной системе точек, полученной из точки $0, 0, 0$, а атомы Х — $1/4, 1/4, 1/4$. Выяснить, атомы какого типа, А или Х, образуют плотнейшую упаковку и какую именно. Какие пустоты данной плотнейшей упаковки заняты? К какому структурному типу относятся данные кристаллы?

6.21. Атомная структура некоторого соединения $AХ$ описывается пространственной группой $P_{\frac{63}{m}}$ -тс, причем атомы A и X располагаются по правильным системам точек, которые получаются из точек $0, 0, 0$ и $1/3, 2/3, 1/4$ соответственно. Выяснить, атомы какого типа, A или X , образуют плотнейшую упаковку и какую именно. Какие пустоты данной плотнейшей упаковки заняты? К какому структурному типу относится атомная структура данного кристалла?

6.22. Какова в кристаллическом пространстве симметрия позиций, которые занимают центры шаров, октаэдрических и тетраэдрических пустот для структур:

- 1) каменной соли $NaCl$; 2) вюрцита ZnS ;
- 3) сфалерита ZnS ; 4) алмаза C ;
- 5) цинка Zn ; 6) вольфрама W .

6.23. Кристаллы перекиси бария BaO_2 имеют $NaCl$ -подобную структуру. При этом можно считать, что центры атомов бария расположены по закону плотнейшей упаковки, а линейные группы O_2 ориентированы вдоль одной из осей четвертого порядка плотнейшей упаковки атомов бария. Определить пространственную группу кристалла BaO_2 и записать координаты атомов бария и кислорода.

6.24. Кристаллы $NaNH_2$ имеют $NaCl$ -подобную структуру. Можно считать, что центры атомов натрия расположены по закону плотнейшей упаковки, а линейные группы NH_2 ориентированы вдоль одной из осей третьего порядка плотнейшей упаковки атомов натрия. Определить пространственную группу кристалла $NaNH_2$ и записать координаты атомов, если центр линейной группы $F-H-F$ совпадает с центром замещаемого в $NaCl$ -структуре атома.

6.25. Кристаллы пирита FeS_2 описываются пространственной группой симметрии $Pa\bar{3}$ с четырьмя формульными единицами в элементарной ячейке. Найти координаты атомов железа и серы. Как изменится пространственная группа симметрии, если вместо атомов серы в центр тяжести «гантели» S_2 поместить один шарообразный атом? Какова симметрия позиций в кристаллическом пространстве, занимаемых в структуре пирита атомами железа и серы?

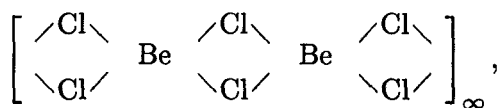
6.26. В кристаллической структуре Li_2O атомы кислорода образуют трехслойную плотнейшую упаковку, а атомы лития располагаются в тетраэдрических пустотах. Определить пространственную группу симметрии данного кристалла, число формульных единиц на элементарную ячейку и координаты атомов лития и кислорода. К какому структурному типу принадлежит данная структура?

6.27. Какое минимальное число формульных единиц может иметь кристаллическая структура, атомная структура которой описывается пространственной группой $F43m$?

6.28. Атомная структура кристаллов NaTl может быть описана как две структуры типа алмаза из атомов Na и атомов Tl, смещенные относительно друг друга на половину телесной диагонали кубической элементарной ячейки. Записать пространственную группу данной структуры и координаты атомов. Какой структурный тип получится, если отождествить оба атома?

6.29. Гексагональная модификация арсенида титана TiAs кристаллизуется в пространственной группе $P\frac{6_3}{m}mc$ с двумя формульными единицами в элементарной ячейке. Определить координаты атомов структуры и симметрию позиций в кристаллическом пространстве, занимаемых атомами. К какому структурному типу относится данный кристалл?

6.30. Атомная структура кристалла хлористого бериллия $BeCl_2$ инвариантна относительно пространственной группы $Ibam$ с четырьмя формульными единицами на элементарную ячейку. При этом образуются бесконечные цепи вида



в которых координация атомов бериллия — искаженная тетраэдрическая. Определить позиции в кристаллическом пространстве, в которых находятся атомы структуры.

6.31. Кристалл RbCl принадлежит кубической сингонии (пространственная группа $Pm3m$). Элементарная ячейка имеет ребро длиной $a = 3,74 \text{ \AA}$ и содержит одну формульную единицу. Чему равно кратчайшее расстояние между атомами:

- 1) Rb—Cl; 2) Rb—Rb; 3) Cl—Cl.

6.32. Кристалл $SrCl_2$ принадлежит кубической сингонии (пространственная группа $Fm3m$). Элементарная ячейка имеет ребро длиной $a = 6,98 \text{ \AA}$ и содержит четыре формульные единицы. Вычислить кратчайшее расстояние между атомами:

- 1) Sr—Cl; 2) Sr—Sr; 3) Cl—Cl.

6.33. Интерметаллическая фаза MnAs кристаллизуется в гексагональной сингонии с пространственной группой $P\frac{6_3}{m}mc$. Эле-

ментарная ячейка с параметрами $a = 3,71 \text{ \AA}$, $c = 5,69 \text{ \AA}$ содержит две формульные единицы. Считая, что данная структура хорошо описывается принципом плотнейшей упаковки, вычислить кратчайшее расстояние между атомами:

- 1) Mn-Mn; 2) Mn-As; 3) As-As.

6.34. Литий кристаллизуется в кубической сингонии с пространственной группой $Im\bar{3}m$. Элементарная ячейка имеет параметр $a = 3,509 \text{ \AA}$ и содержит два атома. Считая, что данная структура хорошо описывается принципом плотной упаковки, вычислить кратчайшее расстояние между атомами лития.

6.35. Кристаллы триазида циануровой кислоты $[\text{NC}(\text{N}_3)]_3$ кристаллизуются в пространственной группе $P\frac{6_3}{m}$ с двумя формульными единицами на элементарную ячейку. Доказать, что все молекулы $[\text{NC}(\text{N}_3)]_3$ в данном кристалле плоские.

6.36. Кристалл MnSb кристаллизуется в гексагональной сингонии в пространственной группе $P\frac{6_3}{m}c$ с двумя формульными единицами на элементарную ячейку. Определить координационные многогранники атомов структуры.

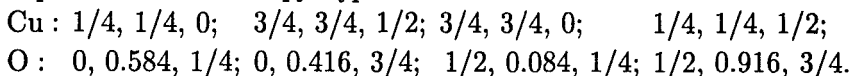
6.37. Кристалл LiH кристаллизуется в кубической сингонии в пространственной группе $Fm\bar{3}m$ с четырьмя формульными единицами на элементарную ячейку. Определить координационные многогранники атомов структуры.

6.38. Определить симметрию позиций, занимаемых атомами титана и кислорода в структуре рутила TiO_2 , атомная структура которого описывается пространственной группой $P\frac{4_2}{m}nm$, а в элементарной ячейке содержатся две формульные единицы.

6.39. Молекула тетрафенилметана $(\text{C}_6\text{H}_5)_4\text{C}$ представляет собой центральный атом углерода, который связан ковалентными связями с одним из атомов углерода каждого из фенильных колец C_6H_5 . Кристалл тетрафенилметана описывается пространственной группой $P\bar{4}2_1c$. Элементарная ячейка содержит две формульные единицы (молекулы). Определить координацию центрального атома углерода. Записать символ структурного класса данного кристалла.

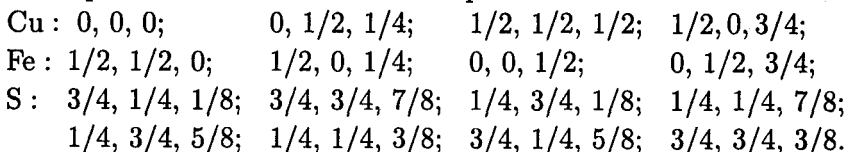
6.40. Кристаллическая структура тенорита CuO описывается пространственной группой $C1\frac{2}{c}1$ (минералогическая установка). Результаты рентгеноструктурного анализа дают следующие

координаты атомов структуры:



Пользуясь Интернациональными таблицами, определить симметрию позиций в кристаллическом пространстве, занимаемых атомами меди и кислорода.

6.41. Кристаллическая структура халькопирита CuFeS_2 характеризуется тетрагональной элементарной ячейкой, в которой атомы располагаются в точках с координатами:



Определить пространственную группу симметрии халькопирита.

6.42. Кристаллическая структура LiOH может быть условно описана в терминах плотнейших упаковок таким образом, что гидроксильные группы (OH) располагаются по закону плотнейшей трехслойной упаковки, а атомы лития занимают половину тетраэдрических пустот. При этом слои занятых и незанятых пустот располагаются перпендикулярно оси четвертого порядка плотнейшей упаковки. Определить пространственную группу симметрии данной структуры, число формульных единиц, приходящихся на элементарную ячейку, координаты атомов и симметрию позиций в кристаллическом пространстве, занимаемых атомами. В чем состоит условность описания данной структуры в терминах плотнейших упаковок?

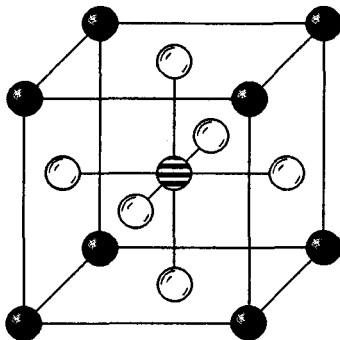


Рис. 6.3. К задаче 6.43

6.43. На рис. 6.3 схематически изображена кубическая элементарная ячейка кристалла CaTiO_3 (атом титана расположен в цен-

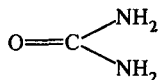
тре элементарной ячейки). Определить пространственную группу данного кристалла, число формульных единиц на элементарную ячейку, координаты атомов и симметрию позиций в кристаллическом пространстве, занятых каждым типом атомов. Описать структуру в терминах плотнейших упаковок.

6.44. Атомная структура кристалла куперита PtS характеризуется пространственной группой $P\frac{4_2}{m}mc$ с двумя формульными единицами на элементарную ячейку. Учитывая характерную для атомов двухвалентной платины квадратную координацию, определить позиции, занятые атомами в данной структуре.

6.45. Молекула некоторого органического соединения с симметрией mmm сохраняет в кристалле свою симметрию. Определить, какой из перечисленных пространственных групп: $I\frac{4}{m}mm$, $I\bar{4}m2$, $I4mm$, $I\bar{4}2m$, $I422$, $P222$ и $P2_12_12_1$ — принадлежит атомная структура данного кристалла. Найти число формульных единиц в элементарной ячейке.

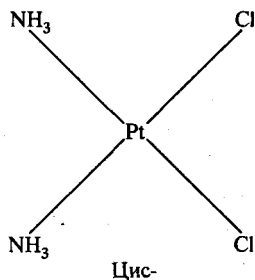
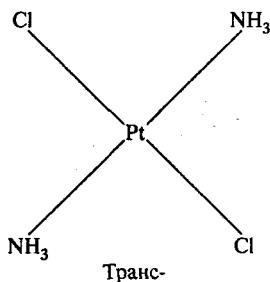
6.46. Доказать, что в молекулярном соединении AX_2 , кристаллическая структура которого описывается пространственной группой $Pa3$, при минимальном числе молекул на элементарную ячейку молекула должна быть линейной.

6.47. Кристаллы мочевины состава



относятся к тетрагональной сингонии. В элементарной ячейке содержатся две формульные единицы. Перечислить возможные пространственные группы для кристалла мочевины.

6.48. Соединение $\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2$ может кристаллизоваться в транс- и цис-конфигурациях. Какая из конфигураций может быть



реализована в кристалле с пространственной группой $P\frac{2_1}{b}$ при двух формульных единицах в элементарной ячейке?

6.49. Какими пространственными группами из пяти возможных групп: $I222$, $P2_12_12_1$, $I2_12_12_1$, $Im\bar{3}m$ и $Im\bar{3}2$ — описывается кристаллическая структура простого вещества, в элементарной ячейке которого содержится 2 атома?

6.50. Зная длину ребра элементарной ячейки, вывести формулу для расчета атомного радиуса металлов, структуры которых описывается трехслойной плотнейшей упаковкой. Рассчитать значения атомных радиусов для меди ($a = 3,6147 \text{ \AA}$), золота ($a = 4,07832 \text{ \AA}$) и алюминия ($a = 4,0495 \text{ \AA}$).

6.51. Вывести формулу для вычисления плотности кристалла, если известен его состав и атомная структура. Провести вычисления для меди, алюминия, магния, вольфрама. Сравнить с табличными значениями.

Глава 7

ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ

7.1. Точечные дефекты

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

7.1. Определить число, тип, координаты и симметрию межатомных пустот (междоузлий) в структуре α -Fe. Рассчитать размеры пустот.

Решение. Структура α -Fe описывается пространственной группой $O_h^9 = Im\bar{3}m$, в которой атомы железа располагаются по правильной системе точек

$$2 \ a \ m\bar{3}m \ 0, 0, 0; \ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$$

Анализ изображения атомной структуры (рис.7.1) показывает, что один из типов пустот находится в серединах граней элементарной ячейки.

Координаты одной из таких пустот можно записать в виде $\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$.

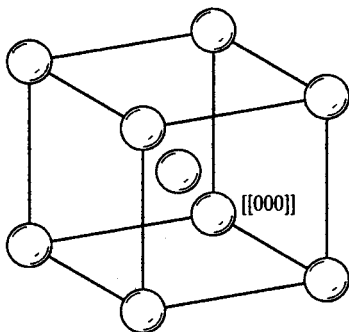


Рис. 7.1. Атомная структура α -Fe

Пустоты, эквивалентные данной, должны располагаться по шестикратной правильной системе точек. Анализ правильных систем точек группы $Im\bar{3}m$ показывает, что имеется одна шестикратная правильная

система точек:

$$6 \quad b \quad \frac{4}{m}mm \quad \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right); \quad \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right); \quad \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right); \\ \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right); \quad \left(0, \frac{1}{2}, 0\right); \quad \left(0, 0, \frac{1}{2}\right).$$

Из координат правильной системы точек видно, что пустоты, эквивалентные данной, располагаются не только в центрах граней, но и на серединах ребер элементарной ячейки.

Каждая из пустот образована шестью атомами железа, находящимися в вершинах тетрагональных бипирамид, симметрия которых $\frac{4}{m}mm$ (искаженный октаэдр). Бипирамиды попарно ориентированы своими осями четвертого порядка по осям x, y, z кристаллографической системы координат (рис. 7.2).

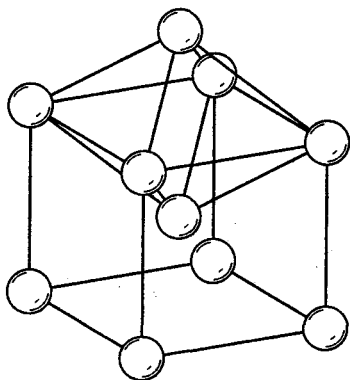


Рис. 7.2. Пустота в виде тетрагональной бипирамиды в структуре α -Fe

Так, например, бипирамида, отвечающая пустоте с координатами $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$, образована атомами, которые находятся в узлах решетки $[[000]]$, $[[100]]$, $[[010]]$, $[[110]]$ (вершины квадратного сечения) и $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$, $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \bar{1}\right]\right]$ (вершины на оси четвертого порядка вдоль оси z). Такую же ориентацию имеет бипирамида, отвечающая пустоте с координатами $\left(0, 0, \frac{1}{2}\right)$. Ее вершины совпадают с узлами решетки $[[000]]$, $[[001]]$, $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$, $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \bar{1}\right]\right]$, $\left[\left[\frac{1}{2} \bar{1} \frac{1}{2}\right]\right]$, $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$.

Наименьший размер эта пустота имеет в направлении оси четвертого порядка. Расстояние между поверхностями ближайших шаров в этом направлении равно $r_1 = \frac{a}{2} - R_{\text{Fe}}$. Здесь a — параметр решетки кристалла α -Fe, R_{Fe} — атомный радиус железа. Атомный радиус железа можно получить, если принять во внимание, что вдоль телесной диагонали элементарной ячейки α -Fe размещаются два соприкасающихся атома железа. Следовательно,

$$a\sqrt{3} = 4R_{\text{Fe}} \quad \text{и} \quad r_1 = a \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{4} \right) \sim 0,067a.$$

Учитывая, что параметр элементарной ячейки кристалла α -Fe равен 2,86645 Å, получим $r_1 \sim 0,1921$ Å. Другой размер этой пустоты равен

$$\frac{a\sqrt{2}}{2} - R_{\text{Fe}} = a \left(\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{4} \right) \sim 0,2741a \sim 0,7857 \text{ Å}.$$

Второй тип пустот в этой структуре образован четырьмя атомами железа и представляет собой тетрагональный тетраэдр с симметрией $D_{2d} = 42m$. Два ребра такого тетраэдра равны параметру элементарной

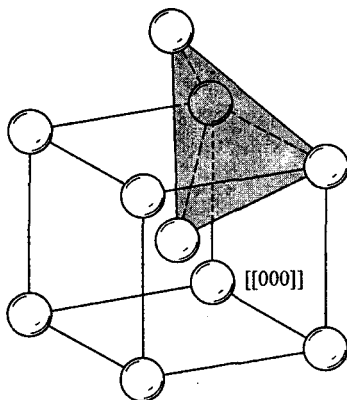


Рис. 7.3. Пустота в виде тетрагонального тетраэдра в структуре α -Fe

ячейки a . Они располагаются параллельно ребрам куба. Четыре других ребра параллельны направлениям $\langle 111 \rangle$. Их длины равны $\frac{a\sqrt{3}}{2}$ (рис. 7.3).

Число таких пустот в элементарной ячейке и координаты их центров можно определить, подобрав соответствующую правильную систему точек группы $Tm\bar{3}m$. Из Интернациональных таблиц найдем, что в данной

группе есть двенадцатикратная правильная система точек с симметрией позиции $\bar{4}2m$:

$$12 \quad d \quad \bar{4}2m \quad \begin{array}{l} \frac{1}{4}, 0, \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0; \quad 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}; \quad \frac{3}{4}, 0, \frac{1}{2}; \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0; \quad 0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}; \quad \frac{3}{4}, \frac{1}{2}, 0; \quad 0, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}; \\ \frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}; \quad \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 0; \quad 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}. \end{array}$$

Расстояние от центра каждой пустоты до центра каждого шара одинаково и равно $\frac{a\sqrt{5}}{4}$. Соответственно размер пустоты равен $r_2 = \frac{a\sqrt{5}}{4} - R_{\text{Fe}} = a \frac{\sqrt{5} - \sqrt{3}}{4} \sim 0,126a = 0,3612 \text{ \AA}$.

7.2. Определить число, тип, координаты и симметрию межатомных пустот (междуузлий) в структуре сфалерита ZnS . Рассчитать размеры этих пустот.

Решение. Структура сфалерита описывается пространственной группой $T_d^2 = F\bar{4}3m$. Структура может быть описана как трехслойная плотнейшая упаковка атомов серы с атомами цинка, располагающимися в половине тетраэдрических пустот плотнейшей упаковки (рис. 7.4).

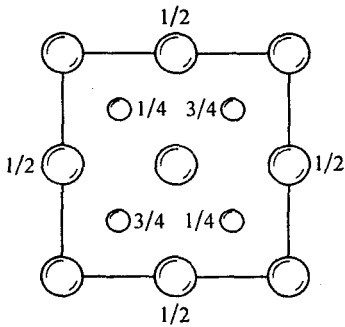


Рис. 7.4. Элементарная ячейка кристалла сфалерита

Параметр кубической элементарной ячейки a равен $5,406 \text{ \AA}$. Атомы серы располагаются по правильной системе точек

$$4 \quad a \quad \bar{4}3m \quad \begin{array}{l} 0, 0, 0; \\ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \quad \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \quad 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \end{array}$$

образуя при этом трехслойную плотнейшую упаковку. Атомы цинка располагаются в половине тетраэдрических пустот по правильной системе точек с координатами

$$4 \quad c \quad \bar{4}3m \quad \begin{array}{l} \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \\ \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \quad \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \quad \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}. \end{array}$$

В структуре сфалерита остаются незаполненными четыре октаэдрические пустоты, которые располагаются по правильной системе точек группы $T_d^2 = F\bar{4}3m$

$$4 \quad b \quad \bar{4}3m \quad \begin{array}{l} \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2}, 0, 0; \quad 0, \frac{1}{2}, 0; \quad 0, 0, \frac{1}{2}, \end{array}$$

а также четыре тетраэдрические пустоты, располагающиеся по правильной системе точек

$$4 \quad d \quad \bar{4}3m \quad \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}.$$

Атомы серы наиболее плотно уложены в направлении диагоналей граней элементарной ячейки (в этих направлениях шары плотнейшей кубической упаковки касаются друг друга). Следовательно, $4R_S = a\sqrt{2}$, откуда, с учетом значения параметра элементарной ячейки, $R_S \sim 1,9113 \text{ \AA}$. Расстояние Zn-S равно четверти длины пространственной диагонали куба, т.е. $2,3408 \text{ \AA}$. Отсюда $R_{Zn} = a \left(\frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{\sqrt{2}}{4} \right) \sim 0,07946a = 0,4281 \text{ \AA}$. В идеальной плотнейшей упаковке это соответствует размеру тетраэдрической пустоты r_T . Радиус октаэдрической пустоты $r_O = \frac{a}{2} - R_S = a \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{4} \right) \sim 0,1464a = 0,7917 \text{ \AA}$.

Заметим, что симметрия тетраэдрической пустоты — $\bar{4}3m$, т.е. соответствует симметрии тетраэдра, симметрия октаэдрической пустоты также $\bar{4}3m$, что ниже симметрии октаэдра ($m\bar{3}m$). Это является следствием того, что октаэдрическая пустота, помимо атомов серы, координируются еще и атомами цинка, симметрия расположения которых не описывается точечной группой симметрии $m\bar{3}m$.

7.3. При движении вакансии по кристаллу она «обменивается» своим местом с ближайшим атомом, который, перемещаясь, должен пройти через окружение («кольцо») других атомов. Рассмотрим перемещение вакантного узла $[[111]]$ в структуре α -Fe. Описать схему кольца атомов, через которое будет проходить атом по пути к вакантному узлу. Рассчитать размеры пустоты в кольце и расстояние, которое пройдет атом.

Решение. Кристалл α -Fe имеет атомную структуру типа ОЦК с пространственной группой $I\bar{m}3m$. Ближайшим к вакансии $[[111]]$ является атом, находящийся в узле $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right] \right]$. При перемещении в вакантный узел он должен «протиснуться» через два равнобедренных треугольника, вершины которых образованы атомами, расположен-

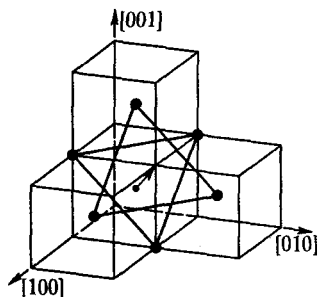


Рис. 7.5.

К решению задачи 7.3

ных равнобедренных треугольника, вершины которых образованы атомами, расположен-

ными в следующих позициях (см. рис.7.5):

$$1) [[110]], [[101]], [[011]]; \quad 2) \left[\left[\begin{array}{ccc} 3 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{array} \right] \right], \left[\left[\begin{array}{ccc} 1 & 3 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{array} \right] \right], \left[\left[\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 3 \\ 2 & 2 & 2 \end{array} \right] \right].$$

При этом он пройдет расстояние в половину пространственной диагонали ячейки, т.е. $\frac{a\sqrt{3}}{2} \sim 0,866a \sim 2,482 \text{ \AA}$ ($a = 2,86645 \text{ \AA}$).

Стороны этих треугольников равны диагоналям граней кубической элементарной ячейки $a\sqrt{2}$, а размер пустоты, через которую пройдет атом, равен $2/3$ высоты треугольника за вычетом атомного радиуса железа:

$$r = a \left(\frac{\sqrt{6}}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4} \right) \approx a \cdot 0,3835 \approx 1,0993 \text{ \AA}.$$

Заметим, что на серединах сторон этих треугольников находятся октаэдрические пустоты структуры α -Fe (см. задачу 7.1).

7.4. Закись железа, химическую формулу которой можно представить в виде Fe_xO , кристаллизуясь в структурном типе NaCl (пространственная группа $O_h^5 = Fm\bar{3}m$, $a \sim 4,30 \text{ \AA}$), имеет плотность $\rho = 5,72 \text{ г/см}^3$. Определить значение величины x и оценить дефектность структуры.

Решение. Для решения задачи воспользуемся известной формулой

$$Z = \frac{\rho (\text{г/см}^3) \cdot V (\text{\AA}^3)}{1,66 \cdot M},$$

где Z — число формульных единиц в элементарной ячейке (в данном случае $Z = 2$), $1,66 M$ — масса одной формульной единицы. Отсюда

$$M = x \cdot A(\text{Fe}) + A(\text{O}) = \frac{\rho \cdot V}{Z \cdot 1,66}.$$

Из этого выражения можно получить формулу для расчета величины x :

$$x = \frac{\rho \cdot V - A(\text{O}) \cdot 1,66 \cdot Z}{A(\text{Fe}) \cdot 1,66 \cdot Z}.$$

В этих выражениях $A(\text{Fe})$ и $A(\text{O})$ — атомные массы железа и кислорода соответственно.

При подстановке числовых значений получаем, что величина x приблизительно равна 0,94. Это означает, что на каждые 100 атомов данного кристалла имеется 6 статистически распределенных вакантных позиций атомов железа. Учитывая, что в элементарной ячейке находится четыре молекулярные единицы, получим, что на 25 элементарных ячеек приходится 1,5 вакансии.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

7.5. Определить число, тип, координаты и симметрию межатомных пустот (междуузлий) и рассчитать их размеры в следующих кристаллах:

- | | |
|---|------------------------------------|
| 1) меди Cu, | 2) алюминия Al, |
| 3) α -вольфрама α -W, | 4) магния Mg, |
| 5) цинка Zn, | 6) алмаза C, |
| 7) кремния Si, | 8) арсенида галлия GaAs, |
| 9) вюрцита ZnS, | 10) каменной соли NaCl, |
| 11) галенита PbS, | 12) флюорита CaF ₂ , |
| 13) хлористого цезия CsCl, | 14) окиси лития Li ₂ O, |
| 15) титаната бария BaTiO ₃ . | |

7.6. Один из атомов ГЦК структуры перескакивает в ближайший к нему вакантный узел. Сколько может быть существенно различных типов «прыжков»? Описать схему кольца из ближайших атомов, через которые атом должен пройти по пути к вакантному узлу. Рассчитать размеры пустоты, соответствующей кольцу.

7.7. В структуре α -W имеется вакантный узел $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right] \right]$. Рассмотреть перемещение ближайшего атома в данную вакансию. Описать схему кольца из ближайших атомов, через которые должен пройти атом по пути к вакантному узлу. Рассчитать размеры пустоты, соответствующей кольцу.

7.8. В элементарной ячейке кристалла меди имеется вакансия $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right] \right]$. Рассмотреть возможности перемещения атомов из занятых позиций в эту вакансию. Описать схему кольца из ближайших атомов, через которое атом должен пройти по пути к вакантному узлу. Рассчитать длину пути, которую пройдет атом и размеры пустоты, соответствующей кольцу.

7.9. Один из атомов в структуре кристалла с гексагональной плотнейшей упаковкой перескакивает в ближайший к нему вакантный узел. Сколько может быть возможных типов прыжков? Для каждого типа прыжка описать схему кольца из ближайших атомов, через которое атом должен пройти по пути к вакантному узлу. Выразить через параметры элементарной ячейки размеры пустоты, соответствующей кольцу.

7.10. В элементарной ячейке кристалла цинка Zn имеется вакансия $\left[\left[\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{4} \right] \right]$. Рассмотреть перемещение в вакантный узел ближайших атомов. Описать схему кольца из ближайших атомов, через которое атом должен пройти по пути к вакантному узлу. Рассчитать размеры пустоты, соответствующей кольцу.

7.11. В элементарной ячейке кристалла магния имеется вакансия $\left[\left[\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{4} \right] \right]$. Рассмотреть перемещение в вакантный узел ближайших атомов. Описать схему кольца из ближайших атомов, через которое атом должен пройти по пути к вакантному узлу. Рассчитать длину пути, который пройдет атом, и размеры пустоты, соответствующей кольцу.

7.12. Описать позиции для междоузельных атомов в структуре алмаза. Описать схему кольца из атомов, через которое должен пройти атом, перемещаясь из одного междоузлия в другое.

7.13. Описать точечную симметрию дефекта Шотки в структуре $NaCl$, состоящего из анионной вакансии и ближайшей к ней катионной вакансии. Определить возможные положения таких дефектов в элементарной ячейке кристалла.

7.14. В структурном типе $\alpha-W$ определить точечную группу симметрии дефекта, состоящего из пары двух ближайших вакантных узлов. Найти возможные положения таких дефектов в элементарной ячейке кристалла.

7.15. В металле с ГЦК структурой образовалась дивакансия, объединяющая два ближайших вакантных узла. Определить точечную симметрию такого дефекта и возможные положения таких дивакансий в элементарной ячейке кристалла.

7.16. Каково соотношение между числом ориентаций некоторого точечного дефекта и кратностью правильных систем точек пространственной группы, которой описывается симметрия атомной структуры данного кристалла?

7.17. Если в кристалле ThO_2 , который относится к структурному типу флюорита (пространственная группа $O_h^5 = Fm\bar{3}m$), введена примесь в виде атома кальция Ca , то ионы Ca^{2+} занимают положения атомов Th^{4+} , а недостаток заряда компенсируется вакансиями ионов O^{2-} . При этом ион Ca^{2+} и вакансия O^{2-} в ближайших позициях (узлах) связаны в пару. Определить число различных ориентаций таких пар в элементарной ячейке кристалла. Найти точечную группу симметрии такого дефекта.

7.18. В структуре кристалла арсенида галлия на 50 элементарных ячеек в среднем приходится 3 вакансии. Как отразить это в химической формуле данного кристалла?

7.19. В структуре арсенида галлия присутствует примесь фосфора, что отражено в химической формуле $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$. Какие предположения можно сделать относительно расположения атомов фосфора в кристалле? На какое количество элементарных ячеек приходится один дефект:

а) при $x = 0,05$, б) при $x = 0,1$?

7.20. Металл содержит 0,1% (атомных) равномерно распределенной примеси замещения. Определить среднее расстояние между примесными атомами в единицах периода ГЦК и ОЦК решеток.

7.2. Дислокации в кристаллах

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

7.21. Определить кристаллографические индексы всех возможных линий единичных краевых дислокаций, скользящих в плоскости (111) гранецентрированной кубической решетки. Указать их векторы Бюргерса.

Решение. Линии дислокаций и их векторы Бюргерса для краевых дислокаций лежат в одной плоскости. В данном случае это плоскость (111) . Следовательно, их индексы должны удовлетворять условию $u + v + w = 0$.

Векторы Бюргерса единичных дислокаций должны быть направлены по кратчайшим трансляциям решетки. В гранецентрированной кубической решетке кратчайшими трансляциями являются двенадцать трансляций $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$, из них в плоскости (111) лежат шесть: $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$, $\frac{1}{2}[0\bar{1}1]$, $\frac{1}{2}[\bar{1}01]$, $\frac{1}{2}[1\bar{1}0]$, $\frac{1}{2}[01\bar{1}]$ и $\frac{1}{2}[10\bar{1}]$. Направления линий краевых дислокаций перпендикулярны векторам Бюргерса. Следовательно, вектор l , параллельный линии дислокации, и вектор Бюргерса b удовлетворяют условию $(l \cdot b) = 0$, или

$$u_l \cdot u_b + v_l \cdot v_b + w_l \cdot w_b = 0.$$

Отсюда непосредственно получаем, что направления линий дислокаций могут иметь следующие индексы:

для векторов Бюргерса $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$ и $\frac{1}{2}[1\bar{1}0]$ — направление $[11\bar{2}]$,

для векторов Бюргерса $\frac{1}{2}[0\bar{1}1]$ и $\frac{1}{2}[01\bar{1}]$ — направление $[\bar{2}11]$,

для векторов Бюргерса $\frac{1}{2}[\bar{1}01]$ и $\frac{1}{2}[10\bar{1}]$ — направление $[1\bar{2}1]$.

7.22. Какие векторы Бюргера определяют в ГЦК решетке устойчивые дислокации, чему равно число эквивалентных дислокаций и какова их мощность? Указать дислокации, устойчивость которых маловероятна и которые могли бы диссоциировать на две полные дислокации с взаимно перпендикулярными векторами Бюргера.

Решение. Устойчивыми являются дислокации с минимальной энергией (мощностью). Это означает, что векторы Бюргера таких дислокаций должны совпадать с кратчайшими трансляциями кристаллической решетки. Для ГЦК решетки такие трансляции направлены по диагоналям граней элементарной ячейки (куба) и равны половине их длины. Следовательно, имеется двенадцать устойчивых дислокаций с

векторами Бюргера $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ и мощностью $\left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2 = \frac{a^2}{4}$. Менее вероятны дислокации с векторами Бюргера $c(100)$ (их мощность равна a^2), или $\langle 111 \rangle$ с мощностью $(a\sqrt{3})^2 = 3a^2$. Дислокации $\langle 100 \rangle$ могут диссоциировать на две дислокации $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$. В этом легко убедиться, заметив, что $a^2 > \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}$. Возможны, например, такие дислокационные реакции:

$$[100] \rightarrow \frac{1}{2}[110] + \frac{1}{2}[1\bar{1}0],$$

$$[010] \rightarrow \frac{1}{2}[110] + \frac{1}{2}[\bar{1}10],$$

$$[001] \rightarrow \frac{1}{2}[011] + \frac{1}{2}[0\bar{1}1].$$

7.23. Дефектом упаковки называются разнообразные нарушения правильности чередования плотноупакованных слоев. Для трехслойной плотнейшей упаковки ... ABCABC ... рассмотрите возможные нарушения чередования плотноупакованных слоев. Записать в буквенных обозначениях:

- а) дефекты упаковки внедрения;
- б) дефекты упаковки вычитания;
- в) образование двойника.

Решение. При образовании дефекта упаковки внедрения в идеальную упаковку вставляется дополнительный слой, например, слой C:



Это приводит к появлению фрагмента, отмеченного квадратной скобкой внизу, соответствующего чередованию слоев в двухслойной упаковке.

Как видно из обозначения слоев буквами g и k , это три слоя. При образовании дефекта упаковки вычитания изымается один слой, как это показано, например, в следующей схеме:



Это опять приводит к прослойке из гексагонально упакованных слоев g . При образовании дефекта упаковки в виде двойника схема имеет вид



Чередование слоев $\dots A B C A B C \dots$ меняется на $\dots S B A C S B A \dots$. Граница двойниковогоания имеет один дефектный слой g .

7.24. Записать все возможные реакции расщепления единичных дислокаций на частичные дислокации Шокли, возможные в плоскости $(1\bar{1}\bar{1})$ гранецентрированной кубической решетки. Реакции записать как в обозначениях Томпсона, так и в кристаллографических индексах. Обосновать энергетическую возможность полученных реакций.

Решение. При рассмотрении разных вариантов дислокационных реакций в кристаллических структурах с ГЦК решеткой принято использовать так называемый тетраэдр Томпсона. Этот тетраэдр позволяет наглядно изображать векторы Бюргерса единичных и частичных дислокаций на четырех плоскостях $\{111\}$. Эти плоскости выбираются так, что они образуют грани тетраэдра. На рис. 7.6 показано положение граней тетраэдра Томпсона и его развертка.

Каждое из ребер тетраэдра соответствует единичной дислокации $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$. Частичные дислокации Шокли, лежащие в плоскостях $\{111\}$,

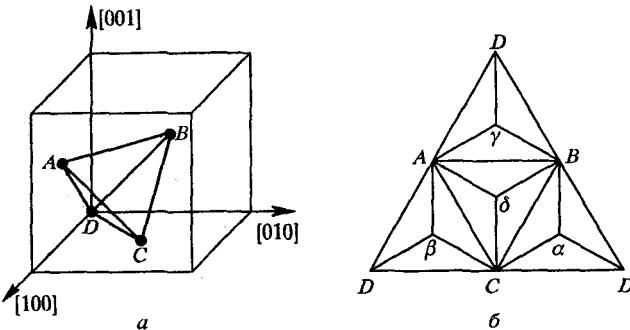


Рис. 7.6. Расположение граней тетраэдра Томпсона (а) и его развертка (б)

обозначаются сочетаниями греческих и латинских букв, соответствующих одному треугольнику. Так, например, в треугольнике ABD таким

дислокациям соответствуют направления γA , γD и γB . Частичные дислокации Франка имеют векторы Бюргерса, перпендикулярные плоскостям $\{111\}$ и, следовательно, обозначаются αA , βB , γC , δD . Развертка тетраэдра Томпсона с кристаллографическими индексами приведена в Приложении 17. Обозначения [] указывают направление соответствующего вектора. Изменение направления в данном обозначении означает изменение знаков у всех индексов на противоположные.

Перейдем теперь к решению сформулированной задачи. Из рис. 7.6 следует, что в плоскости ADC , которая имеет индексы $(\bar{1}11)$, имеются три единичные дислокации: $DA = \frac{1}{2}[101]$, $CA = \frac{1}{2}[0\bar{1}1]$ и $DC = \frac{1}{2}[110]$. Дислокациями Шокли, возможными в данной плоскости, являются $A\beta = \frac{1}{6}[\bar{1}1\bar{2}]$, $C\beta = \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{2}1]$ и $D\beta = \frac{1}{6}[\bar{2}11]$. Отсюда следует, что три возможные реакции расщепления дислокаций выглядят так:

$$\begin{aligned} DA &= D\beta + \beta A, & \frac{1}{2}[101] &= \frac{1}{6}[211] + \frac{1}{6}[1\bar{1}2], \\ CA &= C\beta + \beta A, & \frac{1}{2}[0\bar{1}1] &= \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{2}1] + \frac{1}{6}[1\bar{1}2], \\ DC &= D\beta + \beta C, & \frac{1}{2}[110] &= \frac{1}{6}[211] + \frac{1}{6}[12\bar{1}]. \end{aligned}$$

Все эти реакции энергетически выгодны, так как мощность вектора Бюргерса единичной дислокации равна $\frac{1}{2}a^2$, а сумма мощностей двух дислокаций Шокли равна $\frac{1}{3}a^2$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

7.25. Определить кристаллографические индексы направления линии краевой и винтовой дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{3}[2\bar{1}\bar{1}0]$ в структуре с гексагональной плотнейшей упаковкой.

7.26. Определить кристаллографические индексы линии краевой и винтовой дислокации, а также индексы плоскостей скольжения этих дислокаций в гранцентрированной кубической решетке, если их вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[01\bar{1}]$.

7.27. В структурах с двухслойной гексагональной плотнейшей упаковкой указать векторы Бюргерса единичных дислокаций, указав число эквивалентных дислокаций каждого вида и их мощность. Найти векторы для тех дислокаций, устойчивость которых маловероятна и которые могли бы диссоциировать на две полные дислокации с взаимно перпендикулярными векторами Бюргерса.

7.28. Показать, что для ОЦК решетки устойчивыми являются дислокации с векторами Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. Сколько имеется эквивалентных дислокаций каждого вида и чему равна их мощность? Имеются ли в ОЦК решетке дислокации, устойчивость которых по правилу Франка маловероятна, т.е. такие дислокации, которые могли бы диссоциировать на две полные дислокации с взаимно перпендикулярными векторами Бюргерса?

7.29. В примитивной кубической решетке имеется шесть устойчивых дислокаций с эквивалентными векторами Бюргерса $\langle 100 \rangle$ и мощностью a^2 . Найти векторы Бюргерса тех дислокаций, устойчивость которых по критерию Франка маловероятна и которые могли бы диссоциировать на две полные дислокации с взаимно перпендикулярными векторами.

7.30. Пользуясь правилом Франка, рассмотреть реакцию между устойчивыми полными дислокациями в тетрагональном кристалле с объемноцентрированной решеткой. Как влияет на реакцию отношение параметров элементарной ячейки $\frac{c}{a}$?

7.31. Написать в кристаллографических индексах реакцию расщепления дислокации $\frac{1}{3}[2\bar{1}\bar{1}0]$ на частичные дислокации в плоскости (0001) в структуре с гексагональной плотнейшей упаковкой. Доказать, что такое расщепление энергетически выгодно.

7.32. Написать в кристаллографических индексах реакцию взаимодействия дислокаций $\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0]$ и $\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}20]$ в структуре с гексагональной плотнейшей упаковкой. Доказать, что эта реакция энергетически возможна.

7.33. Найти ошибки в следующих утверждениях:

а) в плоскости $(\bar{1}1\bar{1})$ ГЦК решетки дислокация Франка расщепляется по реакции $\frac{1}{3}[\bar{1}1\bar{1}] = \frac{1}{6}[011] + \frac{1}{6}[\bar{2}11]$;

б) находящаяся в плоскости $(\bar{1}12)$ ОЦК решетки единичная дислокация расщепляется по реакции $\frac{1}{2}[1\bar{1}1] = \frac{1}{6}[1\bar{1}1] + \frac{1}{3}[11\bar{1}]$;

в) находящаяся в плоскости (111) ГЦК решетки дислокация Шокли расщепляется по реакции $\frac{1}{6}[2\bar{1}\bar{1}] = \frac{1}{2}[011] + \frac{1}{3}[111]$.

7.34. Выяснить, какие дефекты упаковки возможны в двухслойной плотнейшей упаковке. Объяснить, почему нельзя получить дефект упаковки за счет изъятия одного плотноупакованного слоя и сближения по направлению нормали к плотноупакованным слоям двух половинок кристалла.

7.35. Вектор Бюргерса винтовой дислокации в кристалле AgCl (структурный тип NaCl) равен $\frac{1}{2}[110]$. Если эта дислокация может одинаково легко скользить по любой кристаллографической плоскости, то по какой из плоскостей произойдет скольжение при приложении растягивающего напряжения, параллельного: а) $[100]$; б) $[111]$?

7.36. Какое минимальное количество дислокаций с векторами Бюргерса, равными наименьшим векторам трансляций решетки, может встретиться в дислокационном узле:

- а) в структуре α -Fe; б) в структуре алмаза;
в) в структуре цинка; г) в структуре CsCl.

7.37. Какая дислокация может образоваться в структуре с гексагональной плотнейшей упаковкой при встрече скользящих дислокаций $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{3}[1\bar{2}10]$ и $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}3]$?

7.38. Доказать, что в структуре с гексагональной плотнейшей упаковкой при встрече скользящих дислокаций с векторами Бюргерса $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{3}[1\bar{2}10]$ и $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}3]$ энергетически выгодно образование дислокаций $\langle 0001 \rangle$.

7.39. Написать по одной возможной реакции образования дислокации с вектором Бюргерса:

- 1) $\mathbf{b}_1 = [010]$; 2) $\mathbf{b}_2 = [100]$; 3) $\mathbf{b}_3 = [001]$

из единичных дислокаций минимальной мощности, скользящих:

- а) в одной узловой плоскости;
б) в разных узловых плоскостях структуры с ОЦК решеткой.
Чему равен угол между вектором Бюргерса и линией образующейся дислокации в случае б)?

7.40. Записать одну из возможных дислокационных реакций для двух дислокаций с векторами Бюргерса $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{2}[1\bar{1}\bar{1}]$ и $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{2}[111]$, движущихся в двух взаимно перпендикулярных плоскостях скольжения типа $\{110\}$ и образующих краевую дислокацию в структуре с ОЦК решеткой. Укажите вектор Бюргерса и индексы линии дислокации.

7.41. Записать одну из возможных дислокационных реакций для двух дислокаций с векторами Бюргерса $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{2}[1\bar{1}\bar{1}]$ и $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{2}[111]$, движущихся в одной плоскости в структуре с ОЦК решеткой.

7.42. Записать одну из возможных дислокационных реакций для двух дислокаций с векторами Бюргерса $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{2}[1\bar{1}\bar{1}]$ и $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{2}[111]$, движущихся в двух плоскостях $\{110\}$ и составляющих между собой угол 60° , в кристалле с объемноцентрированной кубической решеткой. Какой угол будет между линией дислокации и вектором Бюргерса получившейся дислокации?

7.43. В кристалле с ГЦК решеткой прямолинейная дислокация с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[01\bar{1}]$ расположена вдоль направления $[\bar{2}11]$. Может ли эта дислокация совершать поперечное скольжение?

7.44. Записать в символах Томпсона и в кристаллографических индексах реакции расщепления единичной дислокации в ГЦК решетке с вектором Бюргерса DB на дислокации Шокли и доказать, что эти реакции энергетически выгодны.

7.45. Указать индексы плоскостей гранцентрированной кубической решетки, в которых может скользить дислокация, образовавшаяся при объединении частичных дислокаций $A\alpha$ и αB . Каков характер получившейся дислокации? Записать реакции объединения в обозначениях Томпсона и в кристаллографических индексах. Доказать энергетическую выгоду объединения этих дислокаций.

7.46. Дислокация с вектором Бюргерса BD встречает растянутую дислокацию, скользящую в плоскости ADC стандартного тетраэдра Томпсона. В результате образуется единичная дислокация, которая может скользить в плоскости ABC . Записать соответствующие дислокационные реакции и доказать их энергетическую выгоду.

7.47. Записать в символах Томпсона возможные реакции объединения дислокации Франка, находящейся в плоскости $(\bar{1}1\bar{1})$, с дислокациями Шокли и доказать, что эти реакции энергетически выгодны.

7.48. Возможно ли поперечное скольжение растянутой дислокации $A\delta + \delta C$ из плоскости ABC в плоскость ADB тетраэдра Томпсона?

7.49. Может ли дислокация Франка с вектором Бюргерса $\frac{1}{3}[111]$ совершать поперечное скольжение из плоскости (111) в плоскость $(\bar{1}1\bar{1})$ ГЦК решетки?

ОТВЕТЫ

ГЛАВА 1

1.6. 1) Является узловым рядом с индексами $[px, py, pz]$, где p — общий множитель, приводящий x, y, z к целым числам px, py, pz ; 2) не является.

1.7. Данные дробные числа надо привести к общему знаменателю. Числители дробей дают значения индексов.

1.8. При условии, что отношение $(x_2 - x_1) : (y_2 - y_1) : (z_2 - z_1)$ можно привести к отношению целых чисел.

1.9. $[1\ 2\ 0]$.

1.10. $[[2\ 1\ 0]]$, $[[3\ 2\ 0]]$.

1.11. Узлы, индексы которых имеют вид

$$[[u_1 + nu, v_1 + nv, w_1 + nw]], \quad \text{где } n = 1, 2, 3 \dots$$

1.12. Плоскость $(3\ 2\ 2)$, проходящая также через узел $[[0\ 0\ 0]]$.

1.13. Это будет узловая сетка, построенная на узловых рядах $[\bar{1}\ 1\ 0]$ и $[0\ 0\ 1]$ в качестве базисных, т.е. представляющих линейные комбинации указанных узлов.

1.14. $h : k : l = 1/2 : 1/3 : 1 = (3\ 2\ 6)$.

1.15. Плоскость $(0\ 1\ 1)$ стала $(1\ 1\ 1)$, плоскость $(1\ 2\ 1)$ — $(2\ 2\ 1)$, ось x имеет индексы $[1\ 0\ \bar{1}]$.

Примечание: из соотношения индексов плоскостей находится

матрица $\alpha_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ и ей обратная $\beta_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

1.16. Матрицы $\alpha_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ и $\beta_{ij} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

и, соответственно, индексы узлового ряда $[1\ 1\ 1]$ не изменяются, но узел $[[1\ 1\ 1]]$ получит индексы $\left[\left[\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right] \right]$, т.е. новая ячейка будет объемно-

центрированной. Индексы плоскости (111) изменятся на (222), т.е. она будет параллельна новым плоскостям (111), но будет проходить по середине между ними.

1.22. Это возможно лишь для узловых рядов вида $[u\ v\ 0]$ и $[0\ 0\ 1]$, и им соответствуют плоскости с индексами $(u-v/2, v-u/2, 0)$, приведенными к взаимно простым числам, и $(0\ 0\ 1)$ для второго случая.

1.23. $n_1 : n_2 : n_3 = b^2c^2h : a^2c^2k : a^2b^2l$. Совпадает с узловыми рядами в частных случаях: $(1\ 0\ 0) - [1\ 0\ 0]$, $(0\ 1\ 0) - [0\ 1\ 0]$, $(0\ 0\ 1) - [0\ 0\ 1]$.

1.29. $\cos \varphi = 3/(3 + \text{ctg}^2\alpha)^{1/2}(3 + \text{tg}^2\alpha)^{1/2}$.

1.30. $\cos \varphi = 3/[5 + 2(c/a)^2 + 2(a/c)^2]^{1/2}$.

1.31. $h/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$, $k/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$, $l/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$.

1.32. $h/a(h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2)^{1/2}$, $k/b(h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2)^{1/2}$, $l/c(h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2)^{1/2}$.

1.33. $a\sqrt{3}$.

1.34. $\frac{a}{\sqrt{3}}$.

1.35. $A = |R[2\ 1\ 0]| = a\sqrt{3}$, $B = b$, $C = c$, $V_n = 2V_c$, таким образом, ячейка стала центрированной.

1.43. $[1\ 0\ \bar{1}]$.

1.44. Зону образуют плоскости (313), (121) и (101) с осью $[1\ 0\ \bar{1}]$. Плоскость (122) не входит в эту зону.

1.45. $[\bar{1}\ 1\ \bar{2}]$.

1.46. $(0\ 1\ 0)$, $(\bar{1}\ 2\ 1)$, $(\bar{1}\ 1\ 1)$, $(\bar{2}\ 1\ 2) \dots (hk\bar{h})$.

1.47. $(2k\ kl)$.

1.48. Зону образуют плоскости $(\bar{1}\ 1\ 0)$, $(\bar{2}\ 1\ 1)$ и $(\bar{3}\ 1\ 2)$. Ось зоны $[1\ 1\ 1]$.

1.49. Ось зоны $[\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{2}]$. В зону входят плоскости $(hk(h+k)/2)$, например, (132), (513) и т.п.

1.50. 1) $[1\ \bar{5}\ 7]$; 2) $[1\ \bar{1}\ 0]$.

1.51. $(0\ 0\ 1)$.

1.52. $(h\ 0\ l)$.

1.53. Прямоугольная сетка с базисными векторами $\mathbf{H}_1 = \mathbf{b}^*$ и $\mathbf{H}_2 = \mathbf{a}^* - \mathbf{c}^*$ и масштабами $|\mathbf{H}_1| = b^*$ и $|\mathbf{H}_2| = \sqrt{a^{*2} + b^{*2}}$.

1.54. Сетка на базисных векторах $\mathbf{H}_1 = \mathbf{a}^* + \mathbf{c}^*$ и $\mathbf{H}_2 = \mathbf{a}^* + \mathbf{b}^*$ с углом $\alpha = 60^\circ$ и масштабами $|\mathbf{H}_1| = |\mathbf{H}_2| = a^*\sqrt{2}$.

1.55. Прямоугольная сетка с базисными векторами $\mathbf{H}_1 = \mathbf{b}^*$ и $\mathbf{H}_2 = \mathbf{c}^*$.

ГЛАВА 2

Для решения задач 2.5–2.9 целесообразно изобразить на эскизе сечение сферы вписанным многоугольником.

2.5. Вершины вписанного правильного треугольника имеют координаты:

$$1) \varphi = 0^\circ, \rho = 0^\circ; \quad 2) \varphi = 0^\circ, \rho = 120^\circ; \quad 3) \varphi = 180^\circ, \rho = 120^\circ.$$

2.6. Вершины равнобедренного прямоугольного треугольника имеют координаты:

$$1) \varphi = 0^\circ, \rho = 90^\circ; \quad 2) \varphi = 90^\circ, \rho = 90^\circ; \quad 3) \varphi = 270^\circ, \rho = 90^\circ.$$

2.7. Вершины правильного пятиугольника имеют координаты:

$$\begin{aligned} 1) \varphi = 0^\circ, \rho = 90^\circ; \quad 2) \varphi = 72^\circ, \rho = 90^\circ; \\ 3) \varphi = 144^\circ, \rho = 90^\circ; \quad 4) \varphi = 216^\circ, \rho = 90^\circ; \\ 5) \varphi = 288^\circ, \rho = 90^\circ. \end{aligned}$$

2.8. Вершины правильного шестиугольника имеют координаты:

$$\begin{aligned} 1) \varphi = 0^\circ, \rho = 0^\circ; \quad 2) \varphi = 0^\circ, \rho = 60^\circ; \\ 3) \varphi = 0^\circ, \rho = 120^\circ; \quad 4) \varphi = 0^\circ, \rho = 180^\circ; \\ 5) \varphi = 180^\circ, \rho = 120^\circ; \quad 6) \varphi = 180^\circ, \rho = 60^\circ. \end{aligned}$$

2.9. Вершины правильного восьмиугольника имеют координаты:

$$\begin{aligned} 1) \varphi = 0^\circ, \rho = 0^\circ; \quad 2) \varphi = 0^\circ, \rho = 45^\circ; \\ 3) \varphi = 0^\circ, \rho = 90^\circ; \quad 4) \varphi = 0^\circ, \rho = 135^\circ; \\ 5) \varphi = 0^\circ, \rho = 180^\circ; \quad 6) \varphi = 180^\circ, \rho = 135^\circ; \\ 7) \varphi = 180^\circ, \rho = 90^\circ; \quad 8) \varphi = 180^\circ, \rho = 45^\circ. \end{aligned}$$

2.10. Вершины куба лежат на осях симметрии 3-го порядка. Вершины куба имеют координаты:

$$\begin{aligned} 1) \varphi = 0^\circ, \rho = 0^\circ; \quad 2) \varphi = 0^\circ, \rho = 70^\circ 31' 44''; \\ 3) \varphi = 120^\circ, \rho = 70^\circ 31' 44''; \quad 4) \varphi = 240^\circ, \rho = 70^\circ 31' 44''; \\ 5) \varphi = 60^\circ, \rho = 109^\circ 28' 16''; \quad 6) \varphi = 180^\circ, \rho = 109^\circ 28' 16''; \\ 7) \varphi = 300^\circ, \rho = 109^\circ 28' 16''; \quad 8) \varphi = 0^\circ, \rho = 180^\circ. \end{aligned}$$

2.11. Вершины октаэдра имеют координаты:

$$\begin{aligned} 1) \varphi = 0^\circ, \rho = 0^\circ; \quad 2) \varphi = 0^\circ, \rho = 90^\circ; \\ 3) \varphi = 90^\circ, \rho = 90^\circ; \quad 4) \varphi = 180^\circ, \rho = 90^\circ; \\ 5) \varphi = 270^\circ, \rho = 90^\circ; \quad 6) \varphi = 0^\circ, \rho = 180^\circ. \end{aligned}$$

Четыре из шести вершин октаэдра лежат на экваторе.

2.12. Вершины икосаэдра лежат на осях симметрии 5-го порядка икосаэдрического набора осей. Вершины икосаэдра имеют координаты:

- | | |
|--|--|
| 1) $\varphi = 0^\circ, \rho = 0''$; | 2) $\varphi = 0^\circ, \rho = 63^\circ 26' 6''$; |
| 3) $\varphi = 72^\circ, \rho = 63^\circ 26' 6''$; | 4) $\varphi = 144^\circ, \rho = 63^\circ 26' 6''$; |
| 5) $\varphi = 216^\circ, \rho = 63^\circ 26' 6''$; | 6) $\varphi = 288^\circ, \rho = 63^\circ 26' 6''$; |
| 7) $\varphi = 36^\circ, \rho = 116^\circ 33' 54''$; | 8) $\varphi = 108^\circ, \rho = 116^\circ 33' 54''$; |
| 9) $\varphi = 180^\circ, \rho = 116^\circ 33' 54''$; | 10) $\varphi = 252^\circ, \rho = 116^\circ 33' 54''$; |
| 11) $\varphi = 324^\circ, \rho = 116^\circ 33' 54''$; | 12) $\varphi = 0^\circ, \rho = 180^\circ$. |

2.13. Точки, эквивалентные данным, имеют следующие сферические координаты (с погрешностью $\pm 1^\circ$):

- | | |
|--|--|
| 1) $\varphi = 179^\circ, \rho = 30^\circ$; | 2) $\varphi = 13^\circ, \rho = 97^\circ$; |
| 3) $\varphi = 134^\circ, \rho = 104^\circ$; | 4) $\varphi = 37^\circ, \rho = 120^\circ$; |
| 5) $\varphi = 314^\circ, \rho = 110^\circ$; | 6) $\varphi = 264^\circ, \rho = 76^\circ$; |
| 7) $\varphi = 256^\circ, \rho = 34^\circ$; | 8) $\varphi = 92^\circ, \rho = 131^\circ$; |
| 9) $\varphi = 156^\circ, \rho = 68^\circ$; | 10) $\varphi = 247^\circ, \rho = 59^\circ$. |

2.14. Точки, отраженные от заданной плоскости, имеют следующие сферические координаты (с погрешностью $\pm 1^\circ$):

- | | |
|--|--|
| 1) $\varphi = 321^\circ, \rho = 76^\circ$; | 2) $\varphi = 142^\circ, \rho = 42^\circ$; |
| 3) $\varphi = 74^\circ, \rho = 90^\circ$; | 4) $\varphi = 182^\circ, \rho = 79^\circ$; |
| 5) $\varphi = 209^\circ, \rho = 51^\circ$; | 6) $\varphi = 140^\circ, \rho = 138^\circ$; |
| 7) $\varphi = 118^\circ, \rho = 133^\circ$; | 8) $\varphi = 339^\circ, \rho = 67^\circ$; |
| 9) $\varphi = 112^\circ, \rho = 82^\circ$; | 10) $\varphi = 3^\circ, \rho = 118^\circ$. |

2.15. Точки, эквивалентные данным, имеют следующие сферические координаты (с погрешностью $\pm 1^\circ$):

- | | |
|--|--|
| 1) $\varphi_2 = 132^\circ, \rho_2 = 66^\circ$; | $\varphi_3 = 265^\circ, \rho_3 = 17^\circ$; |
| 2) $\varphi_2 = 150^\circ, \rho_2 = 124^\circ$; | $\varphi_3 = 254^\circ, \rho_3 = 77^\circ$; |
| 3) $\varphi_2 = 12^\circ, \rho_2 = 56^\circ$; | $\varphi_3 = 65^\circ, \rho_3 = 68^\circ$; |
| 4) $\varphi_2 = 314^\circ, \rho_2 = 83^\circ$; | $\varphi_3 = 27^\circ, \rho_3 = 112^\circ$; |
| 5) $\varphi_2 = 106^\circ, \rho_2 = 75^\circ$; | $\varphi_3 = 241^\circ, \rho_3 = 16^\circ$. |

2.16. Точки, эквивалентные данным, имеют следующие сферические координаты (с погрешностью $\pm 1^\circ$):

- 1) $\varphi_2 = 120^\circ, \rho_2 = 15^\circ; \quad \varphi_3 = 210^\circ, \rho_3 = 15^\circ;$
 $\varphi_3 = 300^\circ, \rho_4 = 15^\circ;$
- 2) $\varphi_2 = 341^\circ, \rho_2 = 41^\circ; \quad \varphi_3 = 330^\circ, \rho_3 = 120^\circ;$
 $\varphi_3 = 79^\circ, \rho_4 = 139^\circ;$
- 3) $\varphi_2 = 107^\circ, \rho_2 = 91^\circ; \quad \varphi_3 = 159^\circ, \rho_3 = 47^\circ;$
 $\varphi_3 = 358^\circ, \rho_4 = 17^\circ;$
- 4) $\varphi_2 = 65^\circ, \rho_2 = 60^\circ; \quad \varphi_3 = 114^\circ, \rho_3 = 38^\circ;$
 $\varphi_3 = 329^\circ, \rho_4 = 5^\circ;$
- 5) $\varphi_2 = 115^\circ, \rho_2 = 105^\circ; \quad \varphi_3 = 215^\circ, \rho_3 = 131^\circ;$
 $\varphi_3 = 272^\circ, \rho_4 = 61^\circ.$

2.33. Угол между заданными направлениями (лучами) равен:

- 1) $24^\circ,$ 2) $74^\circ,$ 3) $150^\circ,$ 4) $44^\circ,$ 5) $107^\circ,$
 6) $89^\circ,$ 7) $17^\circ,$ 8) $78^\circ,$ 9) $54^\circ,$ 10) $152^\circ.$

2.34. Полюс большого круга имеет следующие сферические координаты:

- 1) $\varphi_{12} = 269^\circ, \rho_{12} = 77^\circ;$ 2) $\varphi_{12} = 64^\circ, \rho_{12} = 53^\circ;$
 3) $\varphi_{12} = 333^\circ, \rho_{12} = 86^\circ;$ 4) $\varphi_{12} = 271^\circ, \rho_{12} = 35^\circ;$
 5) $\varphi_{12} = 50^\circ, \rho_{12} = 78^\circ;$ 6) $\varphi_{12} = 173^\circ, \rho_{12} = 65^\circ;$
 7) $\varphi_{12} = 252^\circ, \rho_{12} = 89^\circ;$ 8) $\varphi_{12} = 141^\circ, \rho_{12} = 83^\circ;$
 9) $\varphi_{12} = 247^\circ, \rho_{12} = 23^\circ;$ 10) $\varphi_{12} = 351^\circ, \rho_{12} = 74^\circ.$

2.36. Угол между заданными дугами равен:

- 1) $20^\circ,$ 2) $123^\circ,$ 3) $121^\circ,$ 4) $132^\circ,$ 5) $66^\circ,$
 6) $51^\circ,$ 7) $23^\circ,$ 8) $72^\circ,$ 9) $116^\circ,$ 10) $124^\circ.$

2.37. Угол между заданными дугами равен:

- 1) $37^\circ,$ 2) $36^\circ,$ 3) $46^\circ,$ 4) $85^\circ,$ 5) $49^\circ,$
 6) $81^\circ,$ 7) $26^\circ,$ 8) $35^\circ,$ 9) $37^\circ,$ 10) $10^\circ.$

2.39. Сферические координаты направления (луча) относительно новой плоскости проекций равны:

- 1) $\varphi'_1 = 52^\circ, \rho'_1 = 93^\circ;$ 2) $\varphi'_1 = 277^\circ, \rho'_1 = 44^\circ;$
 3) $\varphi'_1 = 131^\circ, \rho'_1 = 145^\circ;$ 4) $\varphi'_1 = 89^\circ, \rho'_1 = 65^\circ;$
 5) $\varphi'_1 = 359^\circ, \rho'_1 = 106^\circ;$ 6) $\varphi'_1 = 297^\circ, \rho'_1 = 48^\circ;$
 7) $\varphi'_1 = 109^\circ, \rho'_1 = 109^\circ;$ 8) $\varphi'_1 = 215^\circ, \rho'_1 = 51^\circ;$
 9) $\varphi'_1 = 338^\circ, \rho'_1 = 119^\circ;$ 10) $\varphi'_1 = 249^\circ, \rho'_1 = 32^\circ.$

2.40. Сферические координаты точки относительно новой плоскости проекций равны:

- 1) $\varphi'_1 = 155^\circ$, $\rho'_1 = 91^\circ$; 2) $\varphi'_1 = 36^\circ$, $\rho'_1 = 96^\circ$;
- 3) $\varphi'_1 = 91^\circ$, $\rho'_1 = 35^\circ$; 4) $\varphi'_1 = 174^\circ$, $\rho'_1 = 81^\circ$;
- 5) $\varphi'_1 = 16^\circ$, $\rho'_1 = 128^\circ$; 6) $\varphi'_1 = 183^\circ$, $\rho'_1 = 42^\circ$;
- 7) $\varphi'_1 = 52^\circ$, $\rho'_1 = 99^\circ$; 8) $\varphi'_1 = 283^\circ$, $\rho'_1 = 130^\circ$;
- 9) $\varphi'_1 = 294^\circ$, $\rho'_1 = 47^\circ$; 10) $\varphi'_1 = 54^\circ$, $\rho'_1 = 45^\circ$.

2.41. Сферические координаты точки, диаметрально противоположной заданной, имеют следующие координаты:

- 1) $\varphi_B = 218^\circ$, $\rho_B = 124^\circ$; 2) $\varphi_B = 106^\circ$, $\rho_B = 48^\circ$;
- 3) $\varphi_B = 225^\circ$, $\rho_B = 166^\circ$; 4) $\varphi_B = 142^\circ$, $\rho_B = 98^\circ$;
- 5) $\varphi_B = 354^\circ$, $\rho_B = 65^\circ$; 6) $\varphi_B = 25^\circ$, $\rho_B = 133^\circ$;
- 7) $\varphi_B = 34^\circ$, $\rho_B = 34^\circ$; 8) $\varphi_B = 208^\circ$, $\rho_B = 112^\circ$;
- 9) $\varphi_B = 333^\circ$, $\rho_B = 22^\circ$; 10) $\varphi_B = 166^\circ$, $\rho_B = 109^\circ$.

2.42. Долгота выхода поворотной оси φ_0 и угол поворота ω имеют следующие значения:

- 1) $\varphi_0 = 45^\circ$, $\omega = 90^\circ$;
- 2) $\varphi_0 = 120^\circ$, $\omega = 60^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 15^\circ$, $\omega = 54^\circ$;
- 4) $\varphi_0 = 150^\circ$, $\omega = 36^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 90^\circ$, $\omega = 120^\circ$.

2.43. Сферические координаты полюса имеют следующие значения:

- 1) $\varphi_0 = 30^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$; 2) $\varphi_0 = 120^\circ$, $\rho_0 = 54^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 60^\circ$, $\rho_0 = 36^\circ$; 4) $\varphi_0 = 15^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 72^\circ$, $\rho_0 = 30^\circ$; 6) $\varphi_0 = 15^\circ$, $\rho_0 = 60^\circ$;
- 7) $\varphi_0 = 150^\circ$, $\rho_0 = 72^\circ$; 8) $\varphi_0 = 0^\circ$, $\rho_0 = 54^\circ$;
- 9) $\varphi_0 = 324^\circ$, $\rho_0 = 72^\circ$; 10) $\varphi_0 = 108^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$.

2.44. Сферические координаты выхода оси 2-го порядка:

- 1) $\varphi_0 = 36^\circ$, $\rho_0 = 12^\circ$; 2) $\varphi_0 = 108^\circ$, $\rho_0 = 30^\circ$;
- 3) $\varphi_0 = 90^\circ$, $\rho_0 = 72^\circ$; 4) $\varphi_0 = 104^\circ$, $\rho_0 = 60^\circ$;
- 5) $\varphi_0 = 45^\circ$, $\rho_0 = 45^\circ$; 6) $\varphi_0 = 60^\circ$, $\rho_0 = 15^\circ$;
- 7) $\varphi_0 = 270^\circ$, $\rho_0 = 54^\circ$; 8) $\varphi_0 = 210^\circ$, $\rho_0 = 36^\circ$;
- 9) $\varphi_0 = 108^\circ$, $\rho_0 = 75^\circ$; 10) $\varphi_0 = 180^\circ$, $\rho_0 = 12^\circ$.

2.45. Сферические координаты выхода оси φ_C , ρ_C и угол поворота имеют следующие значения:

- 1) $\varphi_C = 66^\circ$, $\rho_C = 47^\circ$, $\omega = 30^\circ$;
- 2) $\varphi_C = 75^\circ$, $\rho_C = 83^\circ$, $\omega = 72^\circ$;
- 3) $\varphi_C = 49^\circ$, $\rho_C = 79^\circ$, $\omega = 45^\circ$;
- 4) $\varphi_C = 45^\circ$, $\rho_C = 72^\circ$, $\omega = 42^\circ$;
- 5) $\varphi_C = 30^\circ$, $\rho_C = 60^\circ$, $\omega = 71^\circ$.

2.46. Сферические координаты точек, симметрично эквивалентных исходной относительно поворотов вокруг заданной оси, имеют следующие значения:

- 1) $\varphi_2 = 35^\circ$, $\rho_2 = 49^\circ$; $\varphi_3 = 78^\circ$, $\rho_3 = 62^\circ$;
 $\varphi_4 = 116^\circ$, $\rho_4 = 38^\circ$;
- 2) $\varphi_2 = 65^\circ$, $\rho_2 = 84^\circ$; $\varphi_3 = 129^\circ$, $\rho_3 = 99^\circ$;
 $\varphi_4 = 173^\circ$, $\rho_4 = 48^\circ$;
- 3) $\varphi_2 = 109^\circ$, $\rho_2 = 90^\circ$; $\varphi_3 = 170^\circ$, $\rho_3 = 47^\circ$;
 $\varphi_4 = 334^\circ$, $\rho_4 = 22^\circ$;
- 4) $\varphi_2 = 155^\circ$, $\rho_2 = 91^\circ$; $\varphi_3 = 244^\circ$, $\rho_3 = 95^\circ$;
 $\varphi_4 = 331^\circ$, $\rho_4 = 74^\circ$;
- 5) $\varphi_2 = 113^\circ$, $\rho_2 = 108^\circ$; $\varphi_3 = 218^\circ$, $\rho_3 = 139^\circ$;
 $\varphi_4 = 262^\circ$, $\rho_4 = 62^\circ$.

ГЛАВА 3

3.3. Циклическая группа 4-го порядка с подгруппой 2-го порядка.

3.4. Не абелева группа 8-го порядка, две подгруппы 4-го порядка, пять подгрупп 2-го порядка.

3.5. 1) Да; 2) нет; 3) да; 4) да; 5) да; 6) да.

3.6. 1) Да; 2) да; 3) да.

3.7. 1) Да; 2) нет.

3.8. 1) Группа 2-го порядка;

2) группа 4-го порядка, подгруппа 2-го порядка;

3) группа 3-го порядка;

4) группа 6-го порядка, подгруппы 3-го и 2-го порядков.

3.9. 1) Группа 4-го порядка с тремя подгруппами 2-го порядка;

2) группа 4-го порядка с тремя подгруппами 2-го порядка;

3) группа 8-го порядка с двумя подгруппами 4-го порядка и тремя подгруппами 2-го порядка.

- 3.11.** 1) Изоморфные группы 4-го порядка;
 2) изоморфные группы 3-го порядка;
 3) изоморфные группы 2-го порядка;
 4) не изоморфны $A_1^3 = e$, $A_1^2 = e$.
- 3.12.** Изоморфные группы 4-го порядка.
- 3.13.** 1) Группа 4-го порядка, три подгруппы 2-го порядка;
 2) группа 8-го порядка, две подгруппы 4-го порядка, четыре группы 2-го порядка.
- 3.14.** а) 90° , 180° , 270° , $360^\circ = e$, изоморфна задаче 3.8(2);
 б) 120° , 240° , $360^\circ = e$, изоморфна задаче 3.8(3);
 в) 60° , 120° , 180° , 240° , 300° , $360^\circ = e$, изоморфна задаче 3.8(4).
- 3.15.** Генератор группы должен быть поворотом $360^\circ/n$, где n — любое целое число, n определяет порядок циклической группы.
- 3.25.** 1) Ось шестого порядка, шесть осей второго порядка, семь плоскостей симметрии и центр инверсии.
 2) Три оси второго порядка, три плоскости симметрии и центр инверсии.
 3) Ось третьего порядка, три оси второго порядка и четыре плоскости симметрии.
 4) Ось второго порядка и две плоскости симметрии.
 5) Три оси второго порядка, три плоскости симметрии и центр инверсии.
 6) Три оси второго порядка, три плоскости симметрии и центр инверсии.
- 3.26.** 1) Инверсионную ось третьего порядка, три оси второго порядка, три плоскости симметрии и центр инверсии.
 2) Ось четвертого порядка, четыре оси второго порядка, пять плоскостей симметрии и центр инверсии.
 3) Ось второго порядка и две плоскости.
 4) Инверсионная ось пятого порядка, пять плоскостей симметрии и центр инверсии.
 5) Ось третьего порядка и три плоскости симметрии.
 6) Четыре оси третьего порядка, три оси второго порядка и шесть плоскостей симметрии.
 7) Ось четвертого порядка и четыре плоскости симметрии.
 8) Ось третьего порядка и четыре плоскости симметрии.

- 3.27.** 1) Четыре оси третьего порядка, три оси второго порядка и шесть плоскостей симметрии.
 2) Три оси четвертого порядка, четыре оси третьего порядка, шесть осей второго порядка, девять плоскостей симметрии и центр инверсии.
 3) Три оси четвертого порядка, четыре оси третьего порядка, шесть осей второго порядка, девять плоскостей симметрии и центр инверсии.
 4) Ось третьего порядка, три оси второго порядка и четыре плоскости симметрии.
 5) Ось четвертого порядка, четыре оси второго порядка, пять плоскостей симметрии и центр инверсии.
 6) Ось шестого порядка, шесть осей второго порядка, семь плоскостей симметрии и центр инверсии.
 7) Ось четвертого порядка и четыре плоскости симметрии.
 8) Ось третьего порядка и три плоскости симметрии.

3.28. Действия сложных осей симметрии можно заменить простыми элементами симметрии:

- 1) поворотной осью третьего порядка и центром инверсии;
- 2) поворотной осью третьего порядка и плоскостью симметрии, перпендикулярной оси;
- 3) поворотной осью шестого порядка и центром инверсии;
- 4) поворотной осью шестого порядка и плоскостью симметрии, перпендикулярной оси.

3.35. 1) $e, \bar{1}, 2_1, 2_2, 2_3, 2_4, 2_5, 2_6, m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6, m_7,$

$$6^1, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5;$$

2) $e, \bar{1}, 2_1, 2_2, 2_3, m_1, m_2, m_3;$

3) $e, 3^1, 3^2, 2_1, 2_2, 2_3, m_1, m_2, m_3, m_4;$

4) $e, 2, m_1, m_2.$

3.36. 1) $\bar{1};$ 2) $2_z;$ 3) $e;$ 4) $e;$ 5) $\bar{1};$

6) $2;$ 7) $\overset{\circ}{4}^{-1};$ 8) $m_2;$ 9) $6^1;$ 10) $\bar{6}^1.$

3.37. 1) $3;$ 3) $\bar{3};$ 4) $4;$ 5) $\overset{\circ}{4};$ 7) $\bar{6};$ 8) $6.$

3.38. 1) $\overset{\circ}{2};$ 2) $\overset{\circ}{6}^3;$ 3) $\overset{\circ}{6}^1;$ 4) $\overset{\circ}{4}^{-1};$ 5) $\overset{\circ}{3}^1.$

- 3.39. 1) $\bar{2}$; 2) $\bar{6}^{-1}$; 3) $\bar{4}^{-1}$;
4) $\bar{1}$; 5) $\bar{3}^1$.

- 3.40. 1) $6^3 = 2$; 2) $\bar{6}^3 = m = \bar{2} = \bar{1}$; 3) $\bar{6}^3 = \bar{2} = \bar{1}$.

- 3.41. 1) $\bar{1}$; 2) 2_x ; 3) m_z ;
4) 4_z^{-1} ; 5) 4^1 .

3.45. Матрицы операций симметрии приведены в Приложениях 3 и 4. В задачах 1-7, 14, 15, 17-20, 23, 24, 27-30 операции первого рода. В задачах 8-13, 16, 21, 22, 25, 26 операции второго рода.

3.46. Матрицы операций симметрии приведены в Приложениях 3 и 4. Операции симметрии:

- 1) $\bar{1}$; 2) m_x ; 3) 2_x ; 4) 4_z^1 ; 5) $\bar{4}_z^1$; 6) 2_z ;
7) 4_z^1 ; 8) 2_y ; 9) $\bar{4}_z^{-1}$; 10) m_{xy} ; 11) 2_{xy} ; 12) 2_x ;
13) m_{xy} ; 14) $\bar{6}_z^{-1}$; 15) m_y ; 16) 2_u ; 17) $\bar{3}_z^{-1}$; 18) m_{yu} ;
19) 2_{xy} ; 20) 2_{xu} ; 21) $\bar{6}_z^1$; 22) 2_{xy} ; 23) m_u ; 24) $\bar{3}_{xy}^{-1}$;
25) 3_{xy}^1 ; 26) $\bar{4}_x^{-1}$; 27) 3_{xy}^{-1} ; 28) 3_{xy}^1 ; 29) 2_{xy} ; 30) $\bar{3}_{xy}^{-1}$.

3.47. Соотношения выполняются в задачах 1-5.

- 3.48. 1) $x, -y, z$; 2) $-x, -y, z$; 3) $z, -y, x$;
4) $-x, z, y$; 5) $x, z, -y$; 6) $-z, y, x$;
7) $y, -x, z$; 8) $-y, x, z$; 9) $y, -x, -z$;
10) $-y, x - y, z$; 11) $x - y, x, -z$; 12) $y, y - x, z$;
13) $-y, x - y, -z$; 14) $y - x, -x, -z$; 15) y, z, x .

- 3.49. 1) $(h \bar{k} l)$; 2) $(\bar{h} \bar{k} l)$; 3) $(l \bar{k} h)$; 4) $(\bar{h} l k)$;
5) $(h l \bar{k})$; 6) $(\bar{l} k h)$; 7) $(k \bar{h} l)$; 8) $(\bar{k} h l)$;
9) $(k \bar{h} \bar{l})$; 10) $(\bar{k} h - k l)$; 11) $(h - k h \bar{l})$;
12) $(k k - h l)$; 13) $(\bar{k} h - k \bar{l})$; 14) $(k - h \bar{h} \bar{l})$; 15) $(k l h)$;

- 3.50. 1) 2_z ; 2) 2_{xy} ; 3) m_z ; 4) m_{xy} ; 5) m_{xy} ;
6) 4_z^1 ; 7) 4_z^{-1} ; 8) 3_z^1 ; 9) 6_z^1 ; 10) 3_{xyz}^1 .

3.56. Полные стереографические проекции точечных групп симметрии приведены в Приложении 6:

- 1) $C_{2h} = \frac{2}{m}$; 2) $C_{2v} = mm2$; 3) $D_{2h} = mmm$;
 4) $D_2 = 222$; 5) $D_3 = 32$; 6) $C_{3v} = 3m$;
 7) $D_{3d} = \bar{3}m$; 8) $D_{3d} = \bar{3}m$; 9) $D_3 = 32$;
 10) $D_4 = 422$; 11) $C_{4v} = 4mm$; 12) $C_{4h} = \frac{4}{m}$;
 13) $D_{4h} = \frac{4}{m}mm$; 14) $D_{2d} = \bar{4}2m$; 15) $D_{2d} = \bar{4}2m$;
 16) $D_6 = 622$; 17) $C_{6v} = 6mm$; 18) $D_{6h} = \frac{6}{m}mm$;
 19) $D_{3h} = \bar{6}m2$; 20) $D_{3h} = \bar{6}m2$; 21) $T = 23$;
 22) $T_h = m3$; 23) $O = 432$; 24) $O = 432$;
 25) $T_d = \bar{4}3m$; 26) $O_h = m3m$; 27) $O_h = m3m$.

3.57. Стереографические проекции точечных групп симметрии приведены в Приложении 6:

- 1) $C_{2h} = \frac{2}{m}$; 2) $C_{2v} = mm2$; 3) $D_2 = 222$;
 4) $D_{2h} = mmm$; 5) $C_{4h} = \frac{4}{m}$; 6) $D_4 = 422$;
 7) $C_{4v} = 4mm$; 8) $D_{4h} = \frac{4}{m}mm$; 9) $D_{4h} = \frac{4}{m}mm$;
 10) $D_{2d} = \bar{4}2m$; 11) $D_{2d} = \bar{4}2m$; 12) $D_3 = 32$;
 13) $C_{3v} = 3m$; 14) $D_{3d} = \bar{3}m$; 15) $D_6 = 622$;
 16) $C_{6v} = 6mm$; 17) $D_{6h} = \frac{6}{m}mm$; 18) $D_{6h} = \frac{6}{m}mm$;
 19) $D_{3h} = \bar{6}m2$; 20) $D_{3h} = \bar{6}m2$.

3.58. Стереографические проекции точечных групп симметрии данной задачи можно найти в Приложении 6:

- 3.59.** 1) 422; 2) mmm ; 3) $\frac{6}{m}mm$;
 4) $3m$; 5) $m3m$.

3.60. 1) $C_{3v} = 3m$, $C_{3h} = \bar{6}$, $D_{3h} = \bar{6}m2$;

2) $C_{4v} = 4mm$, $C_{4h} = \frac{4}{m}$, $D_{4h} = \frac{4}{m}mm$;

3) $C_{6v} = 6mm$, $C_{6h} = \frac{6}{m}$, $D_{6h} = \frac{6}{m}mm$;

4) $T = 23$, $T_h = m3$, $T_d = \bar{4}3m$.

3.61. 1) $\bar{1} = C_i$, $\bar{3} = C_{3i}$, $\bar{4} = S_4$, $\bar{6} = C_{3h}$;

2) $\bar{3}m = D_{3d}$, $\bar{4}2m = D_{2d}$, $\bar{6}m2 = D_{3h}$, $\bar{4}3m = T_d$.

3.62. 1) $L_2 = C_2 = 2$, $P = C_s = m$, $L_2PC = C_{2h} = \frac{2}{m}$;

2) $3L_2 = D_2 = 222$, $L_22P = C_{2v} = mm2$,

$3L_23PC = D_{2h} = mmm$;

3) $L_4 = C_4 = 4$, $L_4PC = C_{4h} = \frac{4}{m}$, $L_44L_2 = D_4 = 422$,

$L_44P = C_{4v} = 4mm$, $\bar{L}_4 = S_4 = \bar{4}$, $\bar{L}_42L_22P = D_{2d} = \bar{4}2m$;

4) $L_3 = C_3 = 3$, $\bar{L}_3C = C_{3i} = \bar{3}$, $L_33L_2 = D_3 = 32$,

$L_33P = C_{3v} = 3m$, $\bar{L}_33L_23PC = D_{3d} = \bar{3}m$;

5) $L_6 = C_6 = 6$, $L_6PC = C_{6h} = \frac{6}{m}$, $L_66L_2 = D_6 = 622$,

$L_66P = C_{6v} = 6mm$, $L_66L_27PC = D_{6h} = \frac{6}{m}mm$,

$L_3P = C_{3h} = \bar{6}$, $L_33L_24P = D_{3h} = \bar{6}m2$;

6) $3L_24L_3 = T = 23$, $3L_24L_33PC = T_h = m3$,

$3L_44L_36L_2 = O = 432$, $3\bar{L}_44L_36P = T_d = \bar{4}3m$,

$3L_44L_36L_29PC = O_h = m3m$.

3.63.

1-3) mmm ; 4-6) $\frac{4}{m}mm$; 7-8) $m3m$; 9) $\bar{4}3m$; 10) $\frac{6}{m}mm$.

3.64. 1) 222:

e	2_x	2_y	2_z
2_x	e	2_z	2_y
2_y	2_z	e	2_x
2_z	2_y	2_x	e

2) mmm :

e	m_x	m_y	m_z	2_x	2_y	2_z	$\bar{1}$
m_x	e	2_z	2_y	$\bar{1}$	m_z	m_y	2_x
m_y	2_z	e	2_x	m_z	$\bar{1}$	m_x	2_y
m_z	2_y	2_x	e	m_y	m_x	$\bar{1}$	2_z
2_x	$\bar{1}$	m_z	m_y	e	2_z	2_y	m_x
2_y	m_z	$\bar{1}$	m_x	2_z	e	2_x	m_y
2_z	m_y	m_x	$\bar{1}$	2_y	2_x	e	m_z
$\bar{1}$	2_x	2_y	2_z	m_x	m_y	m_z	e

3) $\frac{4}{m}$:

e	4^1	2	4^{-1}	m	$\overset{\circ}{4}^1$	$\bar{1}$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$
4^{-1}	e	4^1	2	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{4}^1$	$\bar{1}$
2	4^{-1}	e	4^1	$\bar{1}$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{4}^1$
4^1	2	$\bar{4}^1$	e	$\overset{\circ}{4}^1$	$\bar{1}$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	m
m	$\overset{\circ}{4}^1$	$\bar{1}$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	e	4^1	2	4^{-1}
$\overset{\circ}{4}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{4}^1$	$\bar{1}$	4^{-1}	e	4^1	2
$\bar{1}$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{4}^1$	2	4^{-1}	e	4^1
$\overset{\circ}{4}^1$	$\bar{1}$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	m	4^1	2	4^{-1}	e

4) 32:

e	3^1	3^{-1}	2_1	2_2	2_3
3^{-1}	e	3^1	2_2	2_3	2_1
3^1	3^{-1}	e	2_3	2_1	2_2
2_1	2_2	2_3	e	3^1	3^{-1}
2_2	2_3	2_1	3^{-1}	e	3^1
2_3	2_1	2_2	3^1	3^{-1}	e

5) $\frac{6}{m}$:

e	6^1	3^1	2	3^{-1}	6^{-1}	m	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$
6^{-1}	e	6^1	3^1	2	3^{-1}	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	$\bar{6}^1$
3^{-1}	6^{-1}	e	6^1	3^1	2	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$
2	3^{-1}	6^{-1}	e	6^1	3^1	$\bar{1}$	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$
3^1	2	3^{-1}	6^{-1}	e	6^1	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{6}^1$
6^1	3^1	2	3^{-1}	6^{-1}	e	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m
m	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	e	6^1	3^1	2	3^{-1}	6^{-1}
$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	3^{-1}	6^{-1}	e	6^1	3^1	2	$\bar{6}^1$
$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	3^{-1}	6^{-1}	e	6^1	3^1	2
$\bar{1}$	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	2	3^{-1}	6^{-1}	e	6^1	3^1
$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	m	$\overset{\circ}{6}^1$	3^1	2	3^{-1}	6^{-1}	e	6^1
$\overset{\circ}{6}^1$	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{1}$	$\bar{6}^1$	$\overset{\circ}{6}^{-1}$	e	6^1	3^1	2	3^{-1}	6^{-1}	e

3.65. 1) $G = \{e, \overset{\circ}{4}^1, \overset{\circ}{4}^2 = 2, \overset{\circ}{4}^3 = 4^{-1}\};$

2) $G = \{e, \overset{\circ}{4}^1, \overset{\circ}{4}^2 = 2, \overset{\circ}{4}^3 = 4^{-1}, m_1, m_2, 2_1, 2_2\};$

3) $G = \{e, 3^1, 3^2 = 3^{-1}, 2_1, 2_2, 2_3\};$

4) $G = \{e, m, 3^1, 3^2 = 3^{-1}, \overset{\circ}{3}^1, \overset{\circ}{3}^2 = 3^{-1}\};$

5) $G = \{e, \overset{\circ}{6}^1, \overset{\circ}{6}^2 = 3^1, \overset{\circ}{6}^3 = \bar{1}, \overset{\circ}{6}^4 = 3^{-1}, \overset{\circ}{6}^5 = \overset{\circ}{6}^{-1}\};$

6) $G = \{e, 3_1^1, 3_1^2, 3_2^1, 3_2^2, 3_3^1, 3_3^2, 3_4^1, 3_4^2, 2_x, 2_y, 2_z\}.$

3.66. Порядок точечных групп: $D_{2h} - 8, D_{3h} - 12, D_{2d} - 8, D_{3d} - 12, D_{4h} - 16, D_{6h} - 24.$

3.67. Точечные группы симметрии, являющиеся подгруппами точечной группы:

- 1) 2 и 1 для 222;
- 2) $mm2$, 222, $\frac{2}{m}$, m , 2, $\bar{1}$, 1 для mmm ;
- 3) $\bar{3}$, $3m$, 32, 3, $\frac{2}{m}$, 2, m , $\bar{1}$, 1 для $\bar{3}m$;
- 4) $\bar{4}2m$, 422, $4mm$, $\frac{4}{m}$, mmm , $mm2$, 222, $\bar{4}$, 4, $\frac{2}{m}$, m , 2, $\bar{1}$, 1 для $\frac{4}{m}mm$;
- 5) 3, 222, 2, 1 для 23.

3.68. Точечные группы симметрии входят как подгруппы:

- 1) $D_3 = 32$ в группы $\bar{3}m$, 432, $\bar{6}m2$, 622, $\frac{6}{m}mm$, $m3m$;
- 2) $C_6 = 6$ в группы $\frac{6}{m}$, $6mm$, 622, $\frac{6}{m}mm$;
- 3) $S_4 = \bar{4}$ в группы $\frac{4}{m}$, $\frac{4}{m}mm$, $\bar{4}2m$, $\bar{4}3m$, $m3m$;
- 4) $D_{2h} = mmm$ в группы $\frac{6}{m}mm$, $\frac{4}{m}mm$, $m3$, $m3m$;
- 5) $T = 23$ в группы 432, $\bar{4}3m$, $m3$, $m3m$.

3.69. $C_1 = 1$.

3.70. $\frac{6}{m}mm$ и $m3m$.

3.71. В этих группах появляются некристаллографические зеркальные оси восьмого и двенадцатого порядков.

3.72. 1) D_2 превратится в группу D_{2h} , $D_4 - D_{4h}$, $D_3 - D_{3d}$,

$$D_6 - D_{6h};$$

2) C_2 превратится в группу C_{2h} , $C_3 - C_{3i}$, $C_4 - C_{4h}$,

$$C_6 - C_{6h};$$

3) C_{2v} превратится в группу D_{2h} , $C_{3v} - D_{3d}$, $C_{4v} - D_{4h}$,

$$C_{6v} - D_{6h};$$

4) D_{2d} превратится в группу D_{4h} , $D_{3d} - D_{3d}$, $D_{3h} - D_{6h}$;

5) 23 превратится в группу $m3$, 432 - $m3m$.

3.73. 1) mmm ; 2) $6mm$; 3) mmm ; 4) $\bar{4}2m$; 5) $\frac{4}{m}mm$;

6) $\bar{6}m2$; 7) $\bar{6}2m$; 8) $\bar{3}m$; 9) $\frac{4}{m}mm$.

- 3.77.** 1) Общая форма — диэдр осевой или сфеноид;
 2) частная форма — пинакоид;
 3) частная форма — моноэдр.

- 3.78.** 1) Общая форма — тригональная пирамида;
 2) частная форма — тригональная призма;
 3) частная форма — моноэдр.

3.79. Частные формы: тетрагональные бипирамиды $\{hhl\}$ и $\{h0l\}$; тетрагональные призмы $\{h k 0\}$, $\{110\}$ и $\{100\}$.

3.80. Общие формы в группах:

- C_n — n -гональная пирамида,
 C_{nv} — ди- n -гональная пирамида,
 C_{nh} — n -гональная бипирамида,
 D_n — n -гональный трапецоэдр,
 D_{nh} — ди- n -гональная бипирамида,
 D_{nd} — n -гональный скаленоэдр,
 S_2 — пинакоид,
 S_4 — тетрагональный тетраэдр,
 S_6 — ромбоэдр.

- 3.81.** 1) В группах C_3 и C_{3v} ;
 2) в группах C_{3h} , D_3 и D_{3h} ;
 3) в группе C_{3v} ;
 4) в группе D_{3h} .

3.82. В группе D_2 — ромбический тетраэдр, в группах D_{2d} и S_4 — тетрагональный тетраэдр, в группах T и T_d — тетраэдр.

3.83. Скаленоэдр является общей формой в группах D_{2d} и D_{3d} .

3.84. Ромбический тетраэдр можно назвать дигональным трапецоэдром.

3.85. Ромбическая призма имеет второе название — дигональная бипирамида.

3.86. В группах D_n .

3.87. Для определения левой и правой энантиоморфных форм трапецоэдра фиксируют положение большей из неравных сторон трапеции и, если она слева, то форму считают левой, если справа — правой.

3.88. Тетрагональная бипирамида может быть общей или частной формой в группе C_{4h} и частной в группах D_4 , D_{4h} и D_{2d} .

3.89. Гексагональная пирамида может быть общей или частной формой в группе C_6 и частной формой в группах C_{3v} и C_{6v} .

3.90. Ромбоэдр является общей формой в группе C_{3i} и частной формой в группах D_3 и D_{3d} .

3.91. В группе S_4 общая форма — тетрагональный тетраэдр. Эта форма будет частной в группе D_{2d} .

3.92. Диэдр осевой имеет в качестве элемента симметрии поворотную ось второго порядка, а диэдр бесосный — плоскость симметрии.

3.93. Общая форма в группе T — пентагонритетраэдр, в T_h — ди-додекаэдр, в T_d — гексатетраэдр, в O — пентагонтриоктаэдр, в O_h — гексаоктаэдр.

3.94. Тетраэдр является частной формой в группах T и T_d , октаэдр — в T_h , O и O_h .

3.95. Различить кубы можно по штриховке граней.

3.96. Грани куба имеют в группе T симметрию C_2 , в группах T_h и T_d — C_{2v} , в группе O — C_4 и в группе O_h — C_{4v} .

3.97. 1) Необходимо потянуть за вершины пирамид так, чтобы треугольные грани соседних пирамид слились в одну грань в виде ромба. Например, грани $(hk0)$ и $(kh0)$ пирамидального куба перейдут в грань (110) ромбододекаэдра;

2) аналогично случаю (1). Например, грани $(11l)$ и $(11\bar{l})$ пирамидального октаэдра перейдут в грань (110) ромбододекаэдра.

3.98. 1) Промежуточной формой между октаэдром и кубом является тетрагонтриоктаэдр;

2) между октаэдром и ромбододекаэдром — пирамидальный октаэдр (тригонтриоктаэдр);

3) между кубом и ромбододекаэдром — пирамидальный куб (тетрагексаэдр).

3.101. Многогранник, образованный только пинакоидами, можно получить в группах C_i , C_{2h} , D_2 и D_{2h} .

3.102. Во всех кубических группах будут только закрытые простые формы.

3.103. Только открытые простые формы могут быть в группах: C_1 — моноэдр; C_2 — диэдр; C_3 — тригональная пирамида, тригональная призма и моноэдр; C_4 — тетрагональная пирамида, тетрагональная призма и моноэдр; C_6 — гексагональная пирамида, гексагональная призма и моноэдр; C_i — пинакоид; C_{2h} — ромбическая призма и пинакоид; C_s — диэдр, пинакоид и моноэдр; C_{2v} — ромбическая пирамида, ромбическая призма, пинакоид и моноэдр; C_{3v} , C_{4v} и C_{6v} — ди- n -гональные пирамиды и призмы, n -гональные пирамиды и призмы и моноэдр.

3.104. В ромбической сингонии есть закрытые формы в группе D_2 — ромбический тетраэдр и в группе D_{2h} — ромбическая бипирамида.

3.105. См. рис. 1.

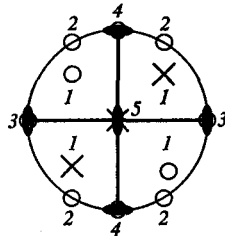


Рис.1. Ответ к задаче 3.105: 1 — ромбический тетраэдр, 2 — ромбическая призма, 3 — пинакоид, 4 — пинакоид, 5 — пинакоид

3.106. См. рис. 2.

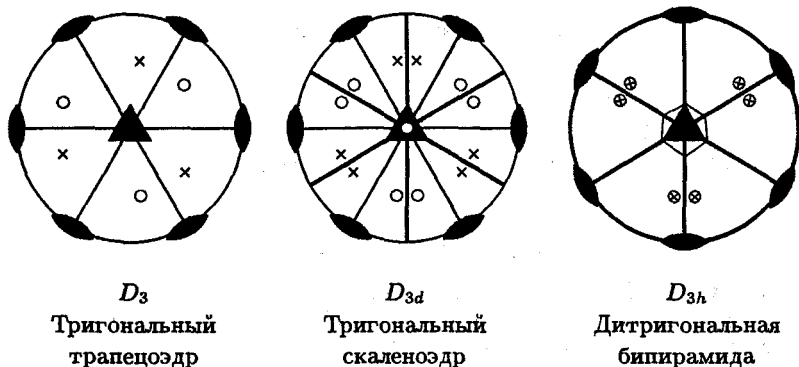


Рис. 2. Ответ к задаче 3.106

3.107. См. рис. 3.

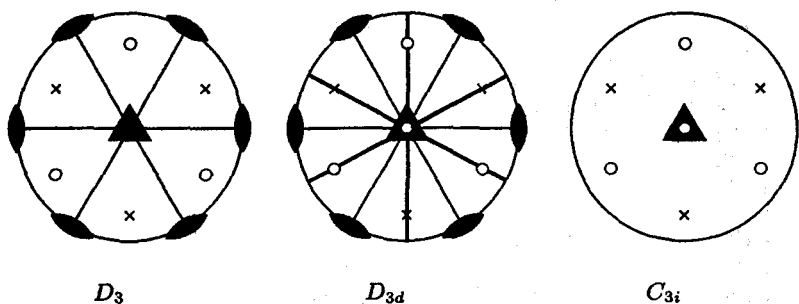


Рис. 3. Ответ к задаче 3.107

3.108. Общая форма в группе C_{4h} — тетрагональная бипирамида — имеет грани типа $\{hkl\}$. Индексы граней: (hkl) , $(\bar{h}kl)$, (khl) , $(\bar{k}hl)$, $(hk\bar{l})$, $(\bar{h}k\bar{l})$, $(k\bar{h}\bar{l})$, $(\bar{k}h\bar{l})$.

3.109. Частная форма в группе D_4 — тетрагональная бипирамида с гранями типа $\{101\}$ — имеет индексы граней: (101) , $(\bar{1}01)$, (011) , $(0\bar{1}1)$, $(10\bar{1})$, $(\bar{1}0\bar{1})$, $(01\bar{1})$, $(0\bar{1}\bar{1})$.

3.110. 1) Индексы граней гексагональной бипирамиды $\{10\bar{1}1\}$:
 $(10\bar{1}1)$, $(01\bar{1}1)$, $(\bar{1}011)$, $(\bar{1}101)$, $(0\bar{1}11)$, $(1\bar{1}01)$, $(10\bar{1}\bar{1})$,
 $(01\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}01\bar{1})$, $(\bar{1}10\bar{1})$, $(0\bar{1}1\bar{1})$, $(1\bar{1}0\bar{1})$;

2) Индексы граней гексагональной бипирамиды $\{10\bar{2}1\}$:
 $(11\bar{2}1)$, $(\bar{1}\bar{1}21)$, $(1\bar{2}11)$, $(\bar{1}2\bar{1}1)$, $(2\bar{1}\bar{1}1)$, $(\bar{2}111)$, $(11\bar{2}\bar{1})$,
 $(\bar{1}\bar{1}2\bar{1})$, $(1\bar{2}1\bar{1})$, $(\bar{1}2\bar{1}\bar{1})$, $(2\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{2}11\bar{1})$.

- 3.111. 1) Тригональная призма $\{hk\bar{i}0\}$ имеет грани: $(hk\bar{i}0)$, $(k\bar{i}h0)$, $(\bar{i}hk0)$, где $i = (h + k)$;
 2) тригональная призма $\{11\bar{2}0\}$ имеет грани: $(11\bar{2}0)$, $(1\bar{2}10)$, $(\bar{2}110)$;
 3) тригональная призма $\{10\bar{1}0\}$ имеет грани: $(10\bar{1}0)$, $(0\bar{1}10)$, $(\bar{1}100)$.
- 3.112. 1) C_{2v} ; 2) D_2 ; 3) C_{4v} ; 4) D_{2d} ; 5) D_{4h} ; 6) D_{4h} ;
 7) C_{3v} ; 8) C_{3v} ; 9) D_{3d} ; 10) D_3 ; 11) D_6 ; 12) C_{6v} ;
 13) D_{3h} ; 14) O_h ; 15) T ; 16) T_h ; 17) T_d ; 18) O .
- 3.113. 1–3, 7) Две; 4–6, 8, 9) Одна.
- 3.115. 1) C_2 ; 2) C_1 ; 3) C_3 ; 4) C_1 ; 5) C_1 ; 6) C_1 .
- 3.116. 1) C_{2v} ; 2) C_2 ; 3) C_s ; 4) C_s .
- 3.117. Вдоль $[001]$.
- 3.118. 1) $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$; 2) $[100]$, $[010]$, $[001]$;
 3) $[h11]$, $[h\bar{1}1]$, $[1k1]$, $[\bar{1}k1]$, $[11l]$, $[\bar{1}1l]$; 4) $[hkl]$.
- 3.119. 1) C_{4v} ; 2) C_{3v} ; 3) C_s .
- 3.120. 1) D_4 ; 2) D_2 ; 3) C_3 ; 4) C_2 ; 5) C_1 .
- 3.121. 1) C_3 ; 2) C_2 .
- 3.122. C_1 ; C_2 ; C_1 ; C_4 ; C_2 ; C_s ; C_{2v} ; C_s ; C_{4v} ; C_{2v} .
- 3.123. 1) C_{4h} ; 2) C_1 ; 3) C_{2h} .
- 3.124. 1) C_2 ; 2) C_1 ; 3) C_1 .
- 3.125. C_{nh} .
- 3.126. C_n и C_{nv} .
- 3.127. C_{4v} .
- 3.128. Перпендикулярно $[111]$.
- 3.129. 1) C_s ; 2) C_s ; 3) C_2 ; 4) C_s ; 5) C_1 ; 6) C_1 ; 7) C_1 .
- 3.130. $C_1[uvw]$, $C_s[uv0]$, C_n и C_{nv} ($n = 2, 3, 4, 6$) $[001]$.
- 3.131. $[001]$.
- 3.132. 1) $[210]$, $[120]$, $[\bar{1}10]$;
 2) $[uv0]$ (кроме указанных в п. 1), $[21l]$, $[12l]$, $[\bar{1}1l]$, $[\bar{2}\bar{1}l]$, $[\bar{1}\bar{2}l]$, $[1\bar{1}l]$.
- 3.133. 1) $C_3 = 3$; 2) $C_s = m$.
- 3.134. $S_4 = 4$; $D_{2d} = 42m$.
- 3.135. 1) $(0, 0, P_3)$; 2) $(P_1, 0, P_3)$; 3) $(0, 0, P_3)$.
- 3.136. 1) C_n и C_{nv} ($n = 2, 3, 4, 6$); 2) $C_s = m$; 3) $C_1 = 1$.
- 3.137. Кроме $S_4 = 4$; $D_{2d} = 42m$.
- 3.138. 1) Нет; 2) $[100]$, $[210]$.

ГЛАВА 4

- 4.4. 1) P ; 2) P ; 3) I ; 4) I ; 5) P .
 4.5. 1) P ; 2) I ; 3) C ; 4) B ; 5) P .
 4.6. 1) A ; 2) P ; 3) B ; 4) P ; 5) I .

4.7. 1) *P*; 2) *P*; 3) *R*; 4) *R*; 5) *P*.

4.8. 1) *P*; 2) *I*; 3) *F*; 4) *P*; 5) *I*.

4.9. 1) *P*; 2) *I*.

4.10. *P*.

4.11. *B*.

$$4.13. \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$4.14. \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, C \text{ — центрированная решетка.}$$

$$4.15. \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

4.16. $P\bar{3}m$.

4.20. $\{e|\varphi\mathbf{R}\}$, $\varphi\mathbf{R}$ — трансляция.

4.21. 1) $\{e|0\}$, $\{2_z|0\}$;

2) $\{e|0\}$, $\{2_z|0\}$, $\{m_x|0\}$, $\{m_y|0\}$;

3) $\{e|0\}$, $\{2_z|0\}$, $\{m_z|0\}$, $\{\bar{1}|0\}$;

4) $\{e|0\}$, $\{4_z^1|0\}$, $\{4_z^2|0\}$, $\{4_z^3|0\}$, $\{m_x|0\}$, $\{m_y|0\}$, $\{m_{xy}|0\}$, $\{m_{\bar{x}y}|0\}$;

5) $\{e|0\}$, $\{2_x|0\}$, $\{2_y|0\}$, $\{2_z|0\}$;

6) $\{e|0\}$, $\{\bar{6}^1|0\}$, $\{\bar{6}^2 = 3^1|0\}$, $\{\bar{6}^3 = m_z|0\}$, $\{\bar{6}^4 = 3^2|0\}$, $\{\bar{6}^5|0\}$.

4.22. 1)

$\{e 0\}$	$\{2_z 0\}$	$\{m_x 0\}$	$\{m_y 0\}$
$\{2_z 0\}$	$\{e 0\}$	$\{m_y 0\}$	$\{m_x 0\}$
$\{m_x 0\}$	$\{m_y 0\}$	$\{e 0\}$	$\{2_z 0\}$
$\{m_y 0\}$	$\{m_x 0\}$	$\{2_z 0\}$	$\{e 0\}$

2)

$\{e 0\}$	$\{2_z 0\}$	$\{m_z 0\}$	$\{\bar{1} 0\}$
$\{2_z 0\}$	$\{e 0\}$	$\{\bar{1} 0\}$	$\{m_z 0\}$
$\{m_z 0\}$	$\{\bar{1} 0\}$	$\{e 0\}$	$\{2_z 0\}$
$\{\bar{1} 0\}$	$\{m_z 0\}$	$\{2_z 0\}$	$\{e 0\}$

3)

$\{e 0\}$	$\{\bar{4}^1 0\}$	$\{\bar{4}^2 0\}$	$\{\bar{4}^3 0\}$
$\{\bar{4}^1 0\}$	$\{\bar{4}^2 0\}$	$\{\bar{4}^3 0\}$	$\{e 0\}$
$\{\bar{4}^2 0\}$	$\{\bar{4}^3 0\}$	$\{e 0\}$	$\{\bar{4}^1 0\}$
$\{\bar{4}^3 0\}$	$\{e 0\}$	$\{\bar{4}^1 0\}$	$\{\bar{4}^2 0\}$

4.23. 1) $\{4_z^1|a+c\}$; 2) $\{8_z^1|c\}$; 3) $\{2_z|c\}$;

4) $\{2_z|a\}$; 5) $\{2_z|d\sqrt{2}/2_{\perp} + d\sqrt{2}/2_{\parallel}\}$.

4.24. 1) $\{\varphi_{ij}|t\}$, где $\varphi_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $t = \begin{pmatrix} 6 \\ 3 \end{pmatrix}$, трансляция $t = 6i + 3j$;

2) $\{\varphi_{ij}|t\}$, где $\varphi_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $t = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$, плоскость m_{xy} , смещенная от начала на вектор $r = 2,5i + 1j$;

3) $\{\varphi_{ij}|t\}$, где $\varphi_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $t = \begin{pmatrix} 8 \\ 0 \end{pmatrix}$, поворот 4^1 , ось смещена от начала на вектор $r = 4i + 4j$.

4.25.

1) $\left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 8 \\ 8 \end{pmatrix} \right\} = \{m_{xy}|8i + 8j\}$, $a'(8, 8)$, $b'(11, 9)$, $c'(9, 12)$;

2) $\left\{ \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} \right\} = \{4^1|5i + 6j\}$, $a'(5, 6)$, $b'(2, 7)$, $c'(4, 10)$;

3) $\left\{ \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 6 \\ 5 \end{pmatrix} \right\} = \{m_x|6i + 5j\}$, $a'(6, 5)$, $b'(5, 8)$, $c'(2, 8)$;

4) $\left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 11 \\ 5 \end{pmatrix} \right\} = \{m_{xy}|11i + 5j\}$, $a'(11, 5)$, $b'(14, 6)$, $c'(12, 9)$;

5) $\left\{ \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 14 \\ 3 \end{pmatrix} \right\} = \{4^1|14i + 3j\}$, $a'(14, 3)$, $b'(11, 4)$, $c'(13, 7)$;

6) $\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 5 \\ 10 \end{pmatrix} \right\} = \{m_y|5i + 10j\}$, $a'(5, 10)$, $b'(6, 7)$, $c'(9, 9)$.

4.26. 1) $\{m_z|c/2\} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix} \right\}$;

$$2) \{m_z | c\} = \left\{ \left(\begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{array} \right) \middle| \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right) \right\};$$

$$3) \{2_y | b/2 + c\} = \left\{ \left(\begin{array}{ccc} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{array} \right) \middle| \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{array} \right) \right\};$$

$$4) \{4_y^1 | -a + b/2\} = \left\{ \left(\begin{array}{cc} 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 \end{array} \right) \middle| \left(\begin{array}{c} -1/2 \\ 1/2 \end{array} \right) \right\};$$

$$5) \{\bar{1} | b + c\} = \left\{ \left(\begin{array}{ccc} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{array} \right) \middle| \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right) \right\}.$$

4.27. $a(1/2, 0, 1/2)$, $b(0, 0, 1/2)$, $c(0, 1/2, 1/2)$, $\bar{1} - (1/4, 1/4, 1/4)$.

4.33. 1) b_x ; 2) a_z ; 3) c_y ; 4) c_x ; 5) c_x .

4.34. $b_x \rightarrow a_y$ и $a_y \rightarrow b_x$.

4.35. 1) 4_{1z}^1 ; 2) $n_x(a/4)$; 3) m_{xy} ; 4) 2_x ; 5) m_x .

4.36. 1) $1/2 - x$, $1/2 + y$, z ; 2) \bar{y} , $x - y$, $1/3 + z$; 3) $\bar{x}\bar{y}z$;

4) $yx\bar{z}$; 5) $y - x$, \bar{x} , $1/3 + z$.

4.37. 1) $2_x(c/4)$; 2) 4_{2z}^1 ; 3) $2_y(a/4)$;

4) m_y ; 5) $\bar{1}$; 6) $\bar{1}[(b + c - a)/4]$;

7) $2_{1z}(-b/4)$; 8) 2_{1x} ; 9) $2_{1y}[(c - a)/4]$;

10) $2_z[(b - a)/4]$; 11) $2_{1x}(-b/4)$; 12) $2_{1z}(a/4)$;

13) 2_x ; 14) $\bar{1}[(c - a)/4]$; 15) $2_y(-a/4)$.

4.38. 1) I ; 2) I ; 3) A ; 4) I ; 5) B .

4.39. F .

4.44. 1) $C_{2v}^9 = Pna2_1$; 2) $C_{2v}^3 = Pcc2$; 3) $D_{2h}^{15} = Pbca$;

4) $C_{2h}^6 = B11\frac{2}{b}$; 5) $C_{4v}^3 = P4_2cm$; 6) $D_{2d}^1 = P\bar{4}2m$;

7) $D_4^1 = P422$; 8) $C_{3v}^4 = P31c$; 9) $C_{6v}^1 = P6mm$;

10) $C_{2h}^4 = P11\frac{2}{b}$; 11) $C_{2h}^3 = B11\frac{2}{m}$.

4.45. $Pmnb = \left(\begin{array}{ccc} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{array} \right)$; $Pcmn = \left(\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{array} \right)$;

$Pnam = \left(\begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array} \right)$; $Pmcn = \left(\begin{array}{ccc} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{array} \right)$; $Pbnm = \left(\begin{array}{ccc} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{array} \right)$.

$$4.46. Pcnb = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; Pnab = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$Pcan = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; Pbna = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; Pnca = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

4.47. Различаются ориентацией центрирующей трансляции по отношению к плоскости симметрии.

$$4.48. 1) B11 \frac{2(2_1)}{b(n)}; \quad 2) Cm(b)c(n)2_1(2_1); \quad 3) P \frac{2_1}{n} \frac{2_1}{m} \frac{2_1}{a};$$

$$4) C \frac{2(2_1)}{m(b)} \frac{2(2_1)}{c(n)} \frac{2_1(2_1)}{a(\equiv b)}; \quad 5) I4(4_2)c(a \equiv b)m(c).$$

4.49. 1) c ; 2) a ; 3) b ; 4) m ; 5) m .

4.50. 1) $B \frac{2}{b}$; 2) Aba ; 3) $Pnma$; 4) PA_2mc ; $P6$.

ГЛАВА 5

$$5.4. 1) \alpha_{ij}(5^2) = \alpha_{ij}(\bar{5}^2) = \alpha_{ij}(\overset{\circ}{5}^2) = \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 \\ -\sin 2\varphi & \cos 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\varphi = \frac{2\pi}{5} = 72^\circ;$$

$$2) \alpha_{ij}(5^3) = \begin{pmatrix} \cos 3\varphi & \sin 3\varphi & 0 \\ -\sin 3\varphi & \cos 3\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_{ij}(\bar{5}^3) = \begin{pmatrix} -\cos 3\varphi & -\sin 3\varphi & 0 \\ \sin 3\varphi & -\cos 3\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_{ij}(\overset{\circ}{5}^3) = \begin{pmatrix} \cos 3\varphi & \sin 3\varphi & 0 \\ -\sin 3\varphi & \cos 3\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \varphi = \frac{2\pi}{5} = 72^\circ;$$

$$3) \alpha_{ij}(7^1) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_{ij}(\bar{7}^1) = \begin{pmatrix} -\cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & -\cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_{ij}(\overset{\circ}{7}^1) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \varphi = \frac{2\pi}{7} \approx 51,43^\circ;$$

$$4) \alpha_{ij}(m_x) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_{ij}(m_y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_{ij}(m_{\bar{x}y}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_{ij}(m_{xy}) = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$5) \alpha_{ij}(2_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}, \quad \alpha_{ij}(2_y) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix},$$

$$\alpha_{ij}(2_{xy}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}, \quad \alpha_{ij}(2_{\bar{x}y}) = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}.$$

$$5.5. 1) \bar{5}^1 = \overset{\circ}{10}^7, \bar{5}^2 = \overset{\circ}{10}^4 = 5^2; \quad 2) \bar{5}^3 = \overset{\circ}{10}^1, \bar{5}^4 = \overset{\circ}{10}^8 = 5^4;$$

$$3) \bar{7}^4 = \overset{\circ}{14}^8 = 7^4, \bar{7}^5 = \overset{\circ}{14}^3; \quad 4) \bar{8}^2 = \overset{\circ}{8}^2 = 8^2 = 4^1, \bar{8}^3 = \overset{\circ}{8}^7;$$

$$5) \bar{10}^2 = \overset{\circ}{5}^6 = 10^2 = 5^1, \bar{10}^3 = \overset{\circ}{5}^9.$$

$$5.6. 1) \bar{5}^1 = \bar{10}^7, \bar{5}^4 = \bar{10}^8 = 5^4; \quad 2) \bar{5}^2 = \bar{10}^4 = 5^2, \bar{5}^3 = \bar{10}^1;$$

$$3) \bar{7}^4 = \bar{14}^8 = 7^4, \bar{7}^5 = \bar{14}^3; \quad 4) \bar{8}^2 = \bar{8}^2 = 8^2 = 4^1, \bar{8}^3 = \bar{8}^7;$$

$$5) \bar{10}^2 = \bar{5}^6 = 5^1, \bar{10}^3 = \bar{5}^9.$$

$$5.8. 1) C_{5v} = 5m, 10\text{-й порядок}; \quad 2) D_{12} = 12.2, 24\text{-й порядок};$$

$$3) D_{5d} = \bar{5}m, 20\text{-й порядок}; \quad 4) D_{9d} = \bar{9}m, 36\text{-й порядок};$$

$$5) D_{8h} = \frac{8}{m}mm, 32\text{-й порядок}; \quad 6) D_{5h} = \bar{10}2m, 20\text{-й порядок};$$

$$7) D_{5h} = \bar{10}2m, 20\text{-й порядок}; \quad 8) D_{9h} = \bar{18}2m, 36\text{-й порядок};$$

$$9) D_{5h} = \bar{10}2m, 20\text{-й порядок}; \quad 10) D_{8h} = \frac{8}{m}mm, 32\text{-й порядок};$$

$$11) D_{9d} = \bar{9}m, 36\text{-й порядок}; \quad 12) D_{4d} = \bar{8}2m, 16\text{-й порядок};$$

$$13) D_7 = 72, 14\text{-й порядок}; \quad 14) D_{15h} = \bar{30}2m, 60\text{-й порядок};$$

$$15) D_{18h} = \frac{18}{m}mm, 72\text{-й порядок}.$$

- 5.11. 1) $D_{5d} = \bar{5}m$, 20-й порядок; 2) $D_{5h} = \overline{10}2m$, 20-й порядок;
 3) $D_7 = 72$, 14-й порядок; 4) $D_{9h} = \overline{18}2m$, 36-й порядок;
 5) $D_{9d} = \bar{9}m$, 36-й порядок; 6) $D_{4d} = \overline{8}2m$, 16-й порядок;
 7) $C_{12h} = \frac{12}{m}$, 24-й порядок; 8) $C_{7i} = \bar{7}$, 14-й порядок;
 9) $D_{7h} = \overline{14}2m$, 28-й порядок; 10) $D_{10} = 10.22$, 20-й порядок;
 11) $D_{8h} = \frac{8}{m}mm$, 32-й порядок; 12) $S_{12} = \overline{12}$, 12-й порядок.
- 5.12. 1. а) $D_{12} = 12.22$, б) $D_{10} = 10.22$, в) $D_{18} = 18.22$;
 2. а) $C_{18v} = 18mm$, б) $C_{5v} = 5m$, в) $C_{8v} = 8mm$;
 3. а) $D_{12h} = \frac{12}{m}mm$, б) $D_{10h} = \frac{10}{m}mm$, в) $D_{18h} = \frac{18}{m}mm$;
 4. а) $D_{18h} = \frac{18}{m}mm$, б) $D_{5d} = \bar{5}m$, в) $D_{8h} = \frac{8}{m}mm$;
 5. а) $D_{6d} = \overline{12}2m$, б) $D_{9h} = \overline{18}2m$, в) $D_{4d} = \overline{8}2m$.
 6. а) $D_{12h} = \frac{12}{m}mm$; б) $D_{18h} = \frac{18}{m}mm$; в) $D_{8h} = \frac{8}{m}mm$.

5.23. $37^\circ 22' 39''$.

5.24. $20^\circ 54' 19''$.

5.25. $\alpha_{33} = 41^\circ 48' 37''$, $\sin(\alpha_{33}) = 2/3$.

5.26. Среди элементов симметрии точечных групп Y и Y_h присутствуют 15 осей 2-го порядка. Каждая ось 2-го порядка расположена перпендикулярно двум другим осям 2-го порядка. Кроме того, каждая ось образует углы 36° с 4-мя другими осями 2-го порядка, углы 60° с другими 4-мя осями 2-го порядка и углы 72° с остальными 4-мя осями 2-го порядка.

5.27. В точечной группе симметрии Y_h перпендикулярно каждой зеркальной плоскости расположена ось 2-го порядка. Искомый угол равен наименьшему углу между осями 2-го порядка в этой группе, т.е. 36° .

5.28. а) группа Y содержит 6 подгрупп C_5 и 6 подгрупп D_5 ;

б) группа Y содержит 10 подгрупп C_3 , 10 подгрупп D_3 и 5 подгрупп T .

5.29. а) Группа Y_h содержит 6 подгрупп C_5 , 6 подгрупп C_{5i} , 6 подгрупп C_{5v} , 6 подгрупп D_5 , 6 подгрупп D_{5d} ;

б) группа Y_h содержит 10 подгрупп C_3 , 10 подгрупп C_{3v} , 10 подгрупп C_{3i} , 10 подгрупп D_3 , 10 подгрупп D_{3d} , 5 подгрупп T и 5 подгрупп T_h .

5.37.

$$\text{а) } \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1/\tau & -\tau \\ 1/\tau & \tau & 1 \\ \tau & -1 & 1/\tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1/\tau & \tau & -1 \\ \tau & 1 & 1/\tau \\ 1 & -1/\tau & -\tau \end{bmatrix};$$

$$\frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1/\tau & \tau & 1 \\ \tau & 1 & -1/\tau \\ -1 & 1/\tau & -\tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1/\tau & \tau \\ 1/\tau & \tau & -1 \\ -\tau & 1 & 1/\tau \end{bmatrix};$$

$$\text{б) } \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1/\tau & \tau & -1 \\ -\tau & 1 & 1/\tau \\ 1 & 1/\tau & \tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -\tau & 1 & -1/\tau \\ -1 & -1/\tau & \tau \\ 1/\tau & \tau & 1 \end{bmatrix};$$

$$\frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -\tau & -1 & 1/\tau \\ 1 & -1/\tau & \tau \\ -1/\tau & \tau & 1 \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1/\tau & -\tau & 1 \\ \tau & 1 & 1/\tau \\ -1 & 1/\tau & \tau \end{bmatrix};$$

$$\text{в) } \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} \tau & 1 & 1/\tau \\ -1 & 1/\tau & \tau \\ 1/\tau & -\tau & 1 \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1/\tau & \tau \\ -1/\tau & -\tau & 1 \\ \tau & -1 & -1/\tau \end{bmatrix};$$

$$\frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -1/\tau & \tau \\ 1/\tau & -\tau & -1 \\ \tau & 1 & -1/\tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} \tau & -1 & 1/\tau \\ 1 & 1/\tau & -\tau \\ 1/\tau & \tau & 1 \end{bmatrix};$$

$$\text{г) } \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -1/\tau & -\tau \\ -1/\tau & \tau & -1 \\ \tau & 1 & 1/\tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1/\tau & -\tau & -1 \\ -\tau & 1 & -1/\tau \\ 1 & 1/\tau & -\tau \end{bmatrix};$$

$$\frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1/\tau & -\tau & 1 \\ -\tau & 1 & 1/\tau \\ -1 & -1/\tau & -\tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -1/\tau & \tau \\ -1/\tau & \tau & 1 \\ -\tau & -1 & 1/\tau \end{bmatrix};$$

$$\text{д) } \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1/\tau & \tau & 1 \\ -\tau & 1 & -1/\tau \\ -1 & -1/\tau & \tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -\tau & 1 & 1/\tau \\ -1 & -1/\tau & -\tau \\ -1/\tau & -\tau & 1 \end{bmatrix};$$

$$\frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -\tau & -1 & -1/\tau \\ 1 & -1/\tau & -\tau \\ 1/\tau & -\tau & 1 \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1/\tau & -\tau & -1 \\ \tau & 1 & -1/\tau \\ 1 & -1/\tau & \tau \end{bmatrix};$$

$$\text{е) } \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} \tau & -1 & -1/\tau \\ 1 & 1/\tau & \tau \\ -1/\tau & -\tau & 1 \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -1/\tau & -\tau \\ 1/\tau & -\tau & 1 \\ -\tau & -1 & -1/\tau \end{bmatrix};$$

$$\frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1/\tau & -\tau \\ -1/\tau & -\tau & -1 \\ -\tau & 1 & -1/\tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} \tau & 1 & -1/\tau \\ -1 & 1/\tau & -\tau \\ -1/\tau & \tau & 1 \end{bmatrix}.$$

5.38.

$$\text{а) } \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 1/\tau & -\tau \\ -1/\tau & \tau & 1 \\ \tau & 1 & -1/\tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & -1/\tau & \tau \\ 1/\tau & \tau & 1 \\ -\tau & 1 & -1/\tau \end{bmatrix};$$

$$\begin{aligned}
 \text{б)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1/\tau & \tau & 1 \\ -\tau & -1 & 1/\tau \\ 1 & -1/\tau & \tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1/\tau & -\tau & 1 \\ \tau & -1 & -1/\tau \\ 1 & 1/\tau & \tau \end{bmatrix}; \\
 \text{в)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} \tau & -1 & 1/\tau \\ -1 & -1/\tau & \tau \\ -1/\tau & -\tau & -1 \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} \tau & -1 & -1/\tau \\ -1 & -1/\tau & -\tau \\ 1/\tau & \tau & -1 \end{bmatrix}; \\
 \text{г)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & -1/\tau & -\tau \\ 1/\tau & \tau & -1 \\ \tau & -1 & -1/\tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 1/\tau & \tau \\ -1/\tau & \tau & -1 \\ -\tau & -1 & -1/\tau \end{bmatrix}; \\
 \text{д)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1/\tau & \tau & -1 \\ -\tau & -1 & -1/\tau \\ -1 & 1/\tau & \tau \end{bmatrix}; \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1/\tau & -\tau & -1 \\ \tau & -1 & 1/\tau \\ -1 & -1/\tau & \tau \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

5.39.

$$\begin{aligned}
 \text{а)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} \tau & 1 & -1/\tau \\ 1 & -1/\tau & \tau \\ 1/\tau & -\tau & -1 \end{bmatrix}; \quad \text{б)} \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -\tau & -1 & -1/\tau \\ 1 & 1/\tau & \tau \\ -1/\tau & \tau & -1 \end{bmatrix}; \\
 \text{в)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -\tau & -1 & 1/\tau \\ -1 & 1/\tau & -\tau \\ 1/\tau & -\tau & -1 \end{bmatrix}; \quad \text{г)} \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -\tau & 1 & -1/\tau \\ 1 & 1/\tau & -\tau \\ -1/\tau & -\tau & -1 \end{bmatrix}; \\
 \text{д)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 1/\tau & \tau \\ 1/\tau & -\tau & 1 \\ \tau & 1 & 1/\tau \end{bmatrix}; \quad \text{е)} \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & -1/\tau & -\tau \\ -1/\tau & -\tau & 1 \\ -\tau & 1 & 1/\tau \end{bmatrix}; \\
 \text{ж)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & -1/\tau & \tau \\ -1/\tau & -\tau & -1 \\ \tau & -1 & 1/\tau \end{bmatrix}; \quad \text{з)} \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 1/\tau & -\tau \\ 1/\tau & -\tau & -1 \\ -\tau & -1 & 1/\tau \end{bmatrix}; \\
 \text{и)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1/\tau & \tau & 1 \\ \tau & -1 & 1/\tau \\ 1 & 1/\tau & -\tau \end{bmatrix}; \quad \text{к)} \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1/\tau & -\tau & -1 \\ -\tau & -1 & 1/\tau \\ -1 & 1/\tau & -\tau \end{bmatrix}; \\
 \text{л)} \quad & \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1/\tau & -\tau & 1 \\ -\tau & -1 & -1/\tau \\ 1 & -1/\tau & -\tau \end{bmatrix}; \quad \text{м)} \quad \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1/\tau & \tau & -1 \\ \tau & -1 & -1/\tau \\ -1 & -1/\tau & -\tau \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

5.40. В точечной группе Y грани многогранников имеют следующую симметрию: а) правильный пентагон-додекаэдр — C_5 ; б) икосаэдр — C_3 ; в) ромбический триаконтаэдр — C_2 ; г) пирамидальный додекаэдр — C_1 ; д) пирамидальный икосаэдр — C_1 ; е) триаксис-икосаэдр — C_1 ; ж) пентагон-изоэдр — C_1 .

5.41. В точечной группе Y_h грани многогранников имеют следующую симметрию: а) правильный пентагон-додекаэдр — C_{5v} ; б) икосаэдр — C_{3v} ; в) ромбический триаконтаэдр — C_{2v} ; г) пирамидальный додекаэдр — C_S ; д) пирамидальный икосаэдр — C_S ; е) триаксис-икосаэдр — C_S ; ж) гексаксис-икосаэдр — C_1 .

5.42. а) $63^\circ 26' 6''$; б) 36° .

5.43. Вершины правильного пентагон-додекаэдра имеют следующие координаты:

- 1) $x = 0, \quad y = 0, \quad z = 1;$ 2) $x = \frac{2}{3}, \quad y = 0, \quad z = \frac{\sqrt{5}}{3};$
 3) $x = -1/3, \quad y = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad z = \frac{\sqrt{5}}{3};$ 4) $x = -\frac{1}{3}, \quad y = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad z = \frac{\sqrt{5}}{3};$
 5) $x = \frac{\sqrt{5}}{3}, \quad y = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad z = \frac{1}{3};$ 6) $x = \frac{\sqrt{5}}{3}, \quad y = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad z = \frac{1}{3};$
 7) $x = -\frac{\tau^2}{3}, \quad y = \frac{1}{(\tau\sqrt{3})}, \quad z = \frac{1}{3};$ 8) $x = \frac{1}{(3\tau^2)}, \quad y = \tau\sqrt{3}, \quad z = \frac{1}{3};$
 9) $x = \frac{1}{(3\tau^2)}, \quad y = -\tau\sqrt{3}, \quad z = \frac{1}{3};$ 10) $x = -\frac{\tau^2}{3}, \quad y = -\frac{1}{(\tau\sqrt{3})}, \quad z = \frac{1}{3};$
 11) $x = 0, \quad y = 0, \quad z = -1;$ 12) $x = -\frac{2}{3}, \quad y = 0, \quad z = -\frac{\sqrt{5}}{3};$
 13) $x = \frac{1}{3}, \quad y = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad z = -\frac{\sqrt{5}}{3};$ 14) $x = \frac{1}{3}, \quad y = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad z = -\frac{\sqrt{5}}{3};$
 15) $x = -\frac{\sqrt{5}}{3}, \quad y = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad z = -\frac{1}{3};$ 16) $x = -\frac{\sqrt{5}}{3}, \quad y = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad z = -\frac{1}{3};$
 17) $x = \frac{\tau^2}{3}, \quad y = -\frac{1}{(\tau\sqrt{3})}, \quad z = -\frac{1}{3};$ 18) $x = -\frac{1}{(3\tau^2)}, \quad y = -\tau\sqrt{3}, \quad z = -\frac{1}{3};$
 19) $x = -\frac{1}{(3\tau^2)}, \quad y = \tau\sqrt{3}, \quad z = -\frac{1}{3};$ 20) $x = \frac{\tau^2}{3}, \quad y = \frac{1}{(\tau\sqrt{3})}, \quad z = -\frac{1}{3}.$

5.47.

- 1) $\frac{2}{m'}\{e, 2, m', \bar{1}'\};$
 2) $mm'2'\{e, 2', m_1, m_2\};$
 3) $2'2'2\{e, 2'_1, 2'_2, 2_1\};$
 4) $\frac{2'2'2}{m m m'}\{e, m_1, m_2, m'_1, 2'_1, 2'_2, 2_1, \bar{1}'\};$
 5) $\frac{4'}{m'}\{e, (4')^1, 2, (4')^3, m', \overset{\circ}{4}^1, \bar{1}', \overset{\circ}{4}^3\};$
 6) $42'2'\{e, 4^1, 4^2, 4^3, 2'_1, 2'_2, 2'_3, 2'_4\};$
 7) $4m'm'\{e, m'_1, m'_2, m'_3, m'_4, 4^1, 4^2, 4^3\};$
 8) $\frac{4'2'2'}{m m m}\{e, 4^1, 2, 4^3, m'_1, m'_2, m'_3, m'_4, m_1, 2'_1, 2'_2, 2'_3, 2'_4, \bar{1}', \overset{\circ}{4}^1, \overset{\circ}{4}^3\};$
 9) $\frac{4'2'2'}{m' m' m'}\{e, (4')^1, 2_1, (4')^3, m'_1, m'_2, m'_3, m_1, m_2, 2_3, 2_4, 2'_1, 2'_2, \bar{1}', \overset{\circ}{4}^1, \overset{\circ}{4}^3\};$
 10) $\bar{4}2'm'\{e, m'_1, m'_2, 2'_1, 2'_2, \overset{\circ}{4}^1, 2, \overset{\circ}{4}^3\};$
 11) $\bar{4}2'm\{e, m_1, m_2, 2'_1, 2'_2, (\overset{\circ}{4}')^1, 2, (\overset{\circ}{4}')^3\};$

- 12) $32' \{e, 2'_1, 2'_2, 2'_3, 3^1, 3^2\}$;
 13) $3m' \{e, m'_1, m'_2, m'_3, 3^1, 3^2\}$;
 14) $\bar{3}'m' \{e, m'_1, m'_2, m'_3, 2'_1, 2'_2, 2'_3, (\bar{6}')^1, 3^1, \bar{1}', 3^2, (\bar{6}')^5\}$;
 15) $6'22' \{e, 2'_1, 2'_2, 2'_3, 2_1, 2_2, 2_3, (6')^1, 3^1, 2'_4, 3^2, (6')^5\}$;
 16) $6'mm' \{e, m'_1, m'_2, m'_3, m_1, m_2, m_3, (6')^1, 3^1, 2', 3^2, (6')^5\}$;
 17) $\frac{6}{m'} \frac{2}{m'} \frac{2}{m'} \{e, 6^1, 3^1, 2_1, 3^2, 6^5, m'_1, m'_2, m'_3, m'_4, m'_5, m'_6, m'_7, 2_2, 2_3, 2_4, 2_5, 2_6, 2_7, (\bar{6}')^1, (\bar{3}')^1, \bar{1}', (\bar{3}')^5, (\bar{6}')^5\}$;
 18) $\frac{6}{m'} \frac{2'}{m} \frac{2'}{m} \{e, 6^1, 3^1, 2_1, 3^2, 6^5, m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6, m'_1, 2'_1, 2'_2, 2'_3, 2'_4, 2'_5, 2'_6, (\bar{6}')^1, (\bar{3}')^1, \bar{1}', (\bar{3}')^5, (\bar{6}')^5\}$;
 19) $\bar{6}m2' \{e, m_1, m_2, m_3, m'_1, 2'_1, 2'_2, 2'_3, 3^1, 3^2, (\bar{3}')^1, (\bar{3}')^5\}$;
 20) $3m1' \{e, m_1, m_2, m_3, 3^1, 3^2, 1', m'_1, m'_2, m'_3, (3')^1, (3')^2\}$;
 21) $6mm1' \{e, 6^1, 3^1, 2, 3^2, 6^5, m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6, 1', (6')^1, (3')^1, 2', (3')^2, (6')^5, m'_1, m'_2, m'_3, m'_4, m'_5, m'_6\}$;
 22) $\bar{4}2m1' \{e, m_1, m_2, 2_1, 2_2, \bar{4}^1, 2_3, \bar{4}^3, 1', m'_1, m'_2, 2'_1, 2'_2, (\bar{4}')^1, 2'_3, (\bar{4}')^3\}$;
 23) $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} 1' \{e, 4^1, 2_1, 4^3, m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, 2_2, 2_3, 2_4, 2_5, \bar{1}, \bar{4}^1, \bar{4}^3, 1', (\bar{4}')^1, 2'_1, (\bar{4}')^3, m'_1, m'_2, m'_3, m'_4, m'_5, 2'_2, 2'_3, 2'_4, 2'_5, \bar{1}', (\bar{4}')^1, (\bar{4}')^3\}$;
 24) $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} 1' \{e, 4^1, 2_1, 4^3, m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, 2_2, 2_3, 2_4, 2_5, \bar{1}, \bar{4}^1, \bar{4}^3, 1', (\bar{4}')^1, 2'_1, (\bar{4}')^3, m'_1, m'_2, m'_3, m'_4, m'_5, 2'_2, 2'_3, 2'_4, 2'_5, \bar{1}', (\bar{4}')^1, (\bar{4}')^3\}$;
 25) $\bar{4}2m1' \{e, m_1, m_2, 2_1, 2_2, \bar{4}^1, 2_3, \bar{4}^3, 1', m'_1, m'_2, 2'_1, 2'_2, (\bar{4}')^1, 2'_3, (\bar{4}')^3\}$.

5.48. Тривиальные подгруппы не указаны:

- 1) $2, 2'$;
- 2) $\bar{1}, 2, m', \frac{2}{m'}, 222, m'm'2$;
- 3) $\bar{1}, 2, m', \frac{2}{m'}, 31', \bar{6}'$;
- 4) $\bar{1}, 2, 2', m, m', \frac{2}{m}, \frac{2'}{m'}, mm'2, \bar{4}', 4', \frac{4'}{m}, 4'22'$;
- 5) $1', 2, 2', 3, 3', 222, 2221', 2'2'2$.

- 5.49. 1) $\frac{2}{m'}$; 2) $m'm'2$; 3) $\frac{2' 2' 2}{m m m}$; 4) $2'2'2$; 5) $32'$;
 6) $\bar{6}m21'$; 7) $\bar{3}m'$; 8) $\bar{3}'m'$; 9) $32'$; 10) $42'2'$;
 11) $4mm'$; 12) $\frac{4'}{m}$; 13) $\frac{4 2' 2'}{m' m m}$; 14) $\bar{4}2'm'$; 15) $\bar{4}'2m'$;
 16) $62'2'$; 17) $6'mm'$; 18) $\frac{6 2' 2'}{m m' m'}$; 19) $\bar{6}'m2'$; 20) $\bar{6}m'2'$;
 21) $231'$; 22) $\frac{2}{m'}\bar{3}'$; 23) $4'32'$; 24) $4'321'$; 25) $\bar{4}3m1'$;
 26) $4321'$; 27) $4'32'$.

ГЛАВА 6

6.3. Упаковка кругов:

- 1) если заполнены все пустоты, то симметрия не изменится;
- 2) если заполнена половина пустот, то симметрия понизится до $p3m1$.

Упаковка эллипсов:

- 1) если заполнены все пустоты, то симметрия не изменится;
- 2) если заполнена одна пустота, то симметрия pm ;
- 3) если заполнены две пустоты, то симметрия pm или sm в зависимости от расположения заполненных пустот.

6.4. stm .

6.5. 1) $D_{4h} = F \frac{4}{m} mm$; 2) $D_{3d} = R\bar{3}m$;

3) $D_{2h} = Immm$; 4) $C_{2h} = B \frac{2}{m}$.

6.6. 1) $D_{6h} = P \frac{6_3}{m} mc$; 2) $D_{2h} = Cmmm$.

6.7. 1) Нет; 2) да.

6.8. $P3m$.

6.9. $k = \frac{4\pi nr^3}{3V_0}$, где r — радиус шара, V_0 — объем элементарной ячейки, n — число шаров в элементарной ячейке.

6.10. 1) $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$; 2) $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$;

3) $\frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0,68$; 4) $\frac{\pi}{6} = 0,52$.

6.11. 1) 6, октаэдр; 2) 8, куб.

6.12. $\frac{\pi\sqrt{3}}{16} = 0,34$.

6.13. 1) Тетраэдрические пустоты: $r/R = 0,225$, где r — радиус шара, расположенного в пустоте, $k = \frac{\sqrt{2}\pi(2 \cdot 0,225^3 + 1)}{6} = 0,76$;

2) октаэдрические пустоты:

$$\frac{r}{R} = 0,414, \quad k = \frac{\sqrt{2}\pi(2 \cdot 0,414^3 + 1)}{6} = 0,79.$$

6.14. 1) Тетраэдрические пустоты: $r/R = 0,225$, где r — радиус шара,

расположенного в пустоте, $k = \frac{\sqrt{2}\pi(2 \cdot 0,225^3 + 1)}{6} = 0,76$;

2) октаэдрические пустоты:

$$\frac{r}{R} = 0,414, \quad k = \frac{\sqrt{2}\pi(2 \cdot 0,414^3 + 1)}{6} = 0,79.$$

6.15. 1) $P6_3mc$. Шары в $1/3, 2/3, 0; 2/3, 1/3, 1/2$; заполненные пустоты $1/3, 2/3, 3/8; 2/3, 1/3, 7/8$; незаполненные пустоты $1/3, 2/3, 1/8; 2/3, 1/3, 5/8$; тип вюрцита;

2) $P\bar{6}m2$. Шары в $1/3, 2/3, 0; 2/3, 1/3, 1/2$; заполненные пустоты $1/3, 2/3, 1/8; 1/3, 2/3, 3/8$; незаполненные пустоты $2/3, 1/3, 7/8; 2/3, 1/3, 5/8$.

6.16. 1) Заполнены все октаэдрические — $P\frac{6_3}{m}mc$;

2) заполнены все тетраэдрические — $P\frac{6_3}{m}mc$;

3) заполнена половина октаэдрических — $P\bar{3}m$;

4) заполнена половина тетраэдрических — $P6_3mc, P\bar{6}m2$.

6.17. 1) $\bar{6}m2, \bar{3}m, 3m$; 2) $m\bar{3}m, m3m, \bar{4}3m$.

6.18. Начало координат выбрано в центре шара, d — диаметр шара, координаты вершин:

1) гексагональный кубооктаэдр: $\left(\frac{1}{3}d, \frac{2}{3}d, -\frac{\sqrt{3}}{2}d\right); \left(\frac{1}{3}d, -\frac{1}{3}d, -\frac{\sqrt{3}}{2}d\right);$
 $\left(-\frac{2}{3}d, -\frac{1}{3}d, -\frac{\sqrt{3}}{2}d\right); (0, d, 0); (d, d, 0); (d, 0, 0); (0, -d, 0); (-d, -d, 0);$
 $(-d, 0, 0); \left(\frac{1}{3}d, \frac{2}{3}d, \frac{\sqrt{3}}{2}d\right); \left(\frac{1}{3}d, -\frac{1}{3}d, \frac{\sqrt{3}}{2}d\right); \left(-\frac{2}{3}d, -\frac{1}{3}d, \frac{\sqrt{3}}{2}d\right);$
 2) кубический кубооктаэдр: $\left(\frac{1}{3}d, \frac{2}{3}d, -\frac{\sqrt{3}}{2}d\right); \left(\frac{1}{3}d, -\frac{1}{3}d, -\frac{\sqrt{3}}{2}d\right);$

$$\left(-\frac{2}{3}d, -\frac{1}{3}d, -\frac{\sqrt{3}}{2}d\right); (0, d, 0); (d, d, 0); (d, 0, 0); (0, -d, 0); (-d, -d, 0);$$

$$(-d, 0, 0); \left(\frac{2}{3}d, \frac{1}{3}d, \frac{\sqrt{3}}{2}d\right); \left(-\frac{1}{3}d, -\frac{2}{3}d, \frac{\sqrt{3}}{2}d\right); \left(-\frac{1}{3}d, \frac{1}{3}d, \frac{\sqrt{3}}{2}d\right).$$

6.20. Тип сфалерита, если образуют упаковку атомы А, а атомы Х лежат в половине тетраэдрических пустот.

6.21. Тип NiAs, гранецентрированная плотнейшая упаковка, заняты все октаэдрические пустоты, упаковку образуют атомы Х.

6.22. 1) $m3m$, $m3m$, $\bar{4}3m$; 2) $3m$, $3m$, $3m$;

3) $\bar{4}3m$, $\bar{4}3m$, $\bar{4}3m$; 4) $\bar{4}3m$, $\bar{4}3m$, $\bar{4}3m$;

5) $\bar{6}m2$, $\bar{3}m$, $3m$; 6) $m3m$, $\bar{4}2m$, $\frac{4}{m}mm$ (искаженные).

6.23. $I\frac{4}{m}mm$, Ва — в 2(a) 0, 0, 0; О — в 4(e) 0, 0, z.

6.24. $R\bar{3}m$, Na — в 3(a) 0, 0, 0; H — в 3(b) 0, 0, 1/2; F — в 6(c) 0, 0, z.

6.25. а) Fe — в 4(a) $\bar{3}$ 0, 0, 0; S — в 8(c) 3 x, x, x; б) $Fm3m$.

6.26. Антифлюорит, $Fm3m$, Z = 4, Li — в 8(c), O — в 4(a).

6.27. 4.

6.28. 1) $Fd3m$, Na — в 8(a) $\bar{4}3m$ 0, 0, 0; 1/4, 1/4, 1/4;

Tl — в 8(b) $\bar{4}3m$ 1/2, 1/2, 1/2; 3/4, 3/4, 3/4;

2) α -W.

6.29. Тип NiAs, Ti — в 0, 0, 0; 0, 0, 1/2; As — в 1/3, 2/3, 1/4; 2/3, 1/3, 3/4.

6.30. Be — в 4(a), Cl — в 8(j).

6.31. 3,24 Å; 3,74 Å; 3,74 Å.

6.32. 3,02 Å; 4,94 Å; 3,49 Å.

6.33. 2,85 Å; 2,26 Å; 3,34 Å.

6.34. 3,039 Å.

6.36. Mn — октаэдр; Sb — тригональная призма.

6.37. Октаэдры.

6.38. Ti — mmm ; O — $mm2$.

6.39. $P\bar{4}2_1c$, Z = 2($\bar{4}$).

6.40. Cu — $\bar{1}$, O — 2.

6.41. $I\bar{4}2d$.

6.42. $P\frac{4}{n}mm$, Z = 2, OH — в 2(c) $4mm$ 0, 1/2, z; 1/2, 0, -z; z = 1/4;

Li — в 2(a) $\bar{4}2m$ 0, 0, 0; 1/2, 1/2, 0.

6.43. $Pm3m$, Z = 1, Ti — в 1(a) $m3m$, Ca — в 1(b) $m3m$, O —

в 3(d) $\frac{4}{m}mm$.

6.44. Pt — в 2(c) 0, 1/2, 0; S — в 2(e) 0, 0, 1/4.

6.45. $I \frac{4}{m} m m, 4.$

6.47. $I\bar{4}m2, I\bar{4}2m, P4mm, P4bm, P4_2cm, P4_2nm, P4_2mc, I4mm, P\bar{4}m2, P\bar{4}2m, P\bar{4}21m.$

6.48. Транс-конфигурация.

6.49. $I222, Immm, Im\bar{m}2.$

6.50. $R = \frac{\sqrt{2}}{4} a; 1,28 \text{ \AA}, 1,44 \text{ \AA}, 1,43 \text{ \AA}.$

6.51. $\rho = 1,66 \cdot m \cdot n/V, \text{ г/см}^3, m$ — относительная атомная масса, n — число атомов в ячейке, V — объем ячейки. $\text{Cu} — 8,93 \text{ г/см}^3, \text{Al} — 2,70 \text{ г/см}^3, \text{Mg} — 1,73 \text{ г/см}^3, \text{W} — 19,25 \text{ г/см}^3.$

ГЛАВА 7

7.5. 1) 4 октаэдрические пустоты в позициях: $\frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ с симметрией $m\bar{3}m, r_0 = a \cdot \frac{2 - \sqrt{2}}{4} = 0,1465 \cdot a = 0,5296 \text{ \AA}.$

8 тетраэдрических пустот в позициях: $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$

с симметрией $\bar{4}3m, r_T = a \cdot \frac{\sqrt{3} - \sqrt{2}}{4} = 0,07946 \cdot a = 0,2872 \text{ \AA}.$

2) Число, тип, координаты, симметрию см. ответ 7.5(1), $r_0 = 0,5933 \text{ \AA}, r_T = 0,3218 \text{ \AA}.$

3) Число, тип, координаты, симметрию см. решение задачи 7.1, $r'_0 = 0,8676 \text{ \AA}, r''_0 = 0,2121 \text{ \AA}, r_T = 0,3988 \text{ \AA}.$

4) Две «октаэдрические» (ромбоэдры, усеченные пинакоидом) пустоты с симметрией $\bar{3}m, в позициях 000; 0, 0, \frac{1}{2}, r_0 = \sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{16}} - \frac{a}{2} = 0,6638 \text{ \AA}.$

Четыре «тетраэдрические» (тригональные пирамиды) пустоты с симметрией $3m, в позициях \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z; \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \bar{z}; \frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2} + z; \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2} - z;$

где $z \cong \frac{5}{8}, r_0 = \frac{3}{8}c - \frac{a}{2} = 0,4066 \text{ \AA}.$

5) Число, тип, координаты, симметрию см. ответ к задаче 7.5(4), $r_0 = 0,6416 \text{ \AA}, r_T = 0,5228 \text{ \AA}.$

6) Восемь тетраэдрических пустот с симметрией $\bar{4}3m, в позициях \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, r_T = \frac{a\sqrt{3}}{8} = 0,2165a = 0,7722 \text{ \AA}.$

7) Число, тип, координаты и симметрию см. ответ 7.5(6), $r_T = 1,1758 \text{ \AA}$.

8) Число, тип, координаты и симметрию см. решение задачи 7.2, $r_0 = 0,8277 \text{ \AA}$, $r_T = 0,4492 \text{ \AA}$.

9) Две «октаэдрические» (две тригональные пирамиды, усеченные моноэдрами) пустоты с симметрией $3m$, в позициях $0, 0, \frac{1}{4}$; $0, 0, \frac{3}{4}$,
 $r_0 = \sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{16}} - \frac{a}{2} = 0,7908 \text{ \AA}$.

Две «тетраэдрические» (тригональная пирамида) пустоты с симметрией $3m$, в позициях $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{5}{8}; \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$; $r_T = \frac{3}{8}c - \frac{a}{2} = 0,4328 \text{ \AA}$.

10) Восемь тетраэдрических пустот с симметрией $\bar{4}3m$, в позициях
 $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4};$
 $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$; $r_T = a \cdot \frac{\sqrt{3} - \sqrt{2}}{4} = 0,07946a = 0,4482 \text{ \AA}$.

11) Число, тип, координаты и симметрию см. ответ 7.5(10), $r_T = 0,4716 \text{ \AA}$.

12) Четыре кубических пустоты с симметрией $m3m$ в позициях $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$, $r_K = a \cdot \frac{\sqrt{3}}{4} - R_F$.

13) 3 пустоты в виде тетрагональной бипирамиды с симметрией $\frac{4}{m}mm$, в позициях $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$. В вершинах бипирамиды находятся атомы Cs, размер пустоты в этом направлении $r' = \frac{a}{2} - R_{Cs}$, в квадратном основании бипирамиды — атомы Cl с размером пустоты $r'' = a \frac{\sqrt{2}}{2} - R_{Cl}$.

3 пустоты в виде тетрагональной бипирамиды с симметрией $\frac{4}{m}mm$, в позициях $\frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$. В вершинах бипирамиды находятся атомы Cl и размер пустоты $r' = \frac{a}{2} - R_{Cl}$, в квадратном основании бипирамиды — атомы Cs и размер пустоты $r'' = a \frac{\sqrt{2}}{2} - R_{Cs}$;

12 «тетраэдрических» (два диэдра с ребрами Cs-Cs и Cl-Cl) с симметрией $mm2$ в позициях $x, \frac{1}{2}, 0; 0, x, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, x; x, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, x, 0; 0, \frac{1}{2}, x; \bar{x}, \frac{1}{2}, 0; 0, \bar{x}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \bar{x}; \bar{x}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \bar{x}, 0; 0, \frac{1}{2}, \bar{x}$; где $x = \frac{1}{4}$,
 $r'_T = a \frac{\sqrt{5}}{4} - R_{Cl}$, $r''_T = a \frac{\sqrt{5}}{4} - R_{Cs}$.

14) Четыре октаэдрические пустоты с симметрией $m\bar{3}m$ в позициях: $\frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$, $r_0 = a \cdot \frac{2 - \sqrt{2}}{4} = 0,1465a = 0,678 \text{ \AA}$.

15) 3 «октаэдрические» пустоты (тетрагональная бипирамида) с симметрией $\frac{4}{m}mm$, в позициях $\frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$. В вершинах бипирамиды находятся атомы Ва, размер пустоты $r' = \frac{a}{2} - R_{\text{Ва}}$. Квадратное основание составляют атомы О, а размер пустоты $r'' = a \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} - R_{\text{О}}$.

8 «тетраэдрических» (тригональная пирамида) пустот с симметрией $3m$ в позициях $x, x, x; x, \bar{x}, \bar{x}; \bar{x}, x, \bar{x}; \bar{x}, \bar{x}, x; \bar{x}, \bar{x}, \bar{x}; \bar{x}, x, x; x, \bar{x}, x; x, x, \bar{x}$; где $x = \frac{1}{4}$. В вершинах пирамиды находятся атомы Ва, а

основание составлено из атомов О. Размеры пустоты $r'_T = a \frac{\sqrt{3}}{4} - R_{\text{Ва}}$.
 $r_T = a \frac{\sqrt{3}}{4} - R_{\text{О}}$.

7.6. Один тип. Атом должен пройти через прямоугольник со сторонами: $a \frac{\sqrt{2}}{2}$ и a . Длина пути $a \frac{\sqrt{2}}{2}$. Размер «кольца» $r = a \frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4}$.

7.7. См. решение задачи 7.3 при обратном направлении движения. Длина пути $l = 0,866a = 2,741 \text{ \AA}$. Размер «дырки» в треугольнике $r = 0,3835a = 1,2138 \text{ \AA}$.

7.8. Равновероятная возможность перемещения из всех 12 ближайших соседей с длиной пути $l = a \frac{\sqrt{2}}{2} = 2,556 \text{ \AA}$. Размер «дырки» в прямоугольном «кольце» $r = 0,2588a = 0,9356 \text{ \AA}$.

7.9. Два различных типа прыжков. Для перемещения по слою упаковки длина пути равна a и атом должен пройти через четырехугольник, размеры которого по вертикали равны $c = a \frac{2\sqrt{6}}{3}$, а по горизонтали $a\sqrt{3}$.

Второй тип перемещения между слоями, длина пути также равна a , но без помех.

7.10. Перемещаться может любой из 6 соседних по слою атомов, стоящих на расстоянии a , пройдя при этом кольцо — четырехугольник, размеры диагоналей которого $c = 4,9469 \text{ \AA}$, $a\sqrt{3} = 4,6152 \text{ \AA}$.

7.11. См. решение задач 7.9 и 7.10. $c = 5,2102 \text{ \AA}$, $a\sqrt{3} = 5,3569 \text{ \AA}$.

7.12. Междоузельные позиции см. ответы к задаче 7.5(6). Расстояния между ближайшими междоузлиями $l = a \frac{\sqrt{3}}{4} = 0,433a = 1,544 \text{ \AA}$. Пере-

мещающаяся из междоузлий атомы пройдут через равносторонний

треугольник из атомов углерода с размером сторон $a \frac{\sqrt{2}}{2} = 2,522 \text{ \AA}$. Размер «дырки» в треугольнике $r = a \left(\frac{\sqrt{6}}{6} - \frac{\sqrt{3}}{8} \right) = 0,1917a = 0,6837 \text{ \AA}$.

7.13. 24-кратная позиция с симметрией $4m\bar{3}$ и координатами:

$\frac{1}{4}, 0, 0; 0, \frac{1}{4}, 0; 0, 0, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, 0, 0; 0, \frac{3}{4}, 0; 0, 0, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2};$
 $0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, 0, \frac{1}{2};$
 $\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}; \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}.$

7.14. 8-кратная позиция с симметрией $\bar{3}m$ и координатами:

$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}.$

7.15. 24-кратная позиция с симметрией $m\bar{3}m$ и координатами:

$0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0; 0, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0; 0, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; 0, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4};$
 $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}; 0, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, 0, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4};$
 $\frac{1}{4}, 0, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0; \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0.$

7.16. Число ориентаций равно отношению кратности точечной группы симметрии к кратности точечной группы симметрии позиции в пространственной группе.

7.17. Дефект размещается в 32-кратной позиции с симметрией $3m$ и координатами x, x, x ($x = \frac{1}{8}$) и имеет 8 различных ориентаций.

7.18. $\text{Ga}_{0,985}\text{As}$.

7.19. а) 5; б) 2,5.

7.20. ГЦК — $6,3a$, ОЦК — $7,94a$.

7.25. l винтовой дислокации $[2\bar{1}\bar{1}0]$, l краевой дислокации $[01\bar{1}0]$.

7.26. Винтовая дислокация $l = [00\bar{1}]$ (hkk), краевая дислокация $l = [\bar{2}11]$ (111).

7.27. 6 дислокаций $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ с мощностью a^2 ;

2 дислокации $\langle 0001 \rangle$ с мощностью c^2 ;

6 дислокаций $\frac{1}{3}\langle \bar{1}2\bar{1}3 \rangle$ с мощностью $a^2 + c^2$.

Диссоциируют дислокации $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle = \langle 0001 \rangle + \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$.

7.28. 8 дислокаций $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ с мощностью $\frac{3}{4}a^2$;
6 дислокаций $\langle 100 \rangle$ с мощностью a^2 ; нет.

7.29. $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$.

7.31. $\frac{1}{3}[2\bar{1}\bar{1}0] = \frac{1}{3}[2110] + \frac{1}{3}[1\bar{1}00]$; $a^2 > \frac{2}{3}a^2$.

7.32. $\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0] + \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}20] = \frac{1}{3}[\bar{2}110]$; $2a^2 > a^2$.

7.33. а) Реакция противоречит правилу Франка $\frac{a^2}{3} < \frac{a^2}{2}$;

б) дислокация $[1\bar{1}1]$ не находится в плоскости $(\bar{1}12)$;

в) реакция противоречит правилу Франка $\frac{a^2}{6} < \frac{5a^2}{6}$.

7.34. Внедрение $ABACABAB$; вычитание $ABABBA$ невоз-
гжкжкжжж

можно.

7.35. а) $(1\bar{1}0)$; б) (001) .

7.36. а) 4; б) 3; в) 3; г) 4.

7.37. $\mathbf{b} = [0001]$.

7.38. $2a^2 + c^2 > c^2$.

7.39.

$$1. \text{ а) } \frac{1}{2}[11\bar{1}]_{(101)} + \frac{1}{2}[\bar{1}11]_{(101)} = [010]_{(101)} \quad \mathbf{l} = [10\bar{1}], \quad \alpha = 90^\circ;$$

$$\frac{1}{2}[11\bar{1}]_{(110)} + \frac{1}{2}[\bar{1}11]_{(110)} = [010]_{(100)} \quad \mathbf{l} = [100], \quad \alpha = 90^\circ;$$

$$\text{б) } \frac{1}{2}[11\bar{1}]_{(\bar{1}10)} + \frac{1}{2}[\bar{1}11]_{(101)} = [010]_{(10\bar{1})} \quad \mathbf{l} = [100], \quad \cos \alpha = \frac{\sqrt{3}}{3}.$$

$$2. \text{ а) } \frac{1}{2}[11\bar{1}]_{(011)} + \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}1]_{(110)} = [100]_{(011)} \quad \mathbf{l} = [0\bar{1}1], \quad \alpha = 90^\circ;$$

$$\frac{1}{2}[111]_{(\bar{1}01)} + \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]_{(101)} = [100]_{(001)} \quad \mathbf{l} = [010], \quad \alpha = 90^\circ;$$

$$\text{б) } \frac{1}{2}[111]_{(\bar{1}01)} + \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]_{(0\bar{1}1)} = [100]_{(0\bar{1}1)} \quad \mathbf{l} = [111], \quad \cos \alpha = \frac{\sqrt{3}}{3}.$$

$$3. \text{ а) } \frac{1}{2}[111]_{(\bar{1}10)} + \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}1]_{(\bar{1}10)} = [001]_{(\bar{1}10)} \quad \mathbf{l} = [110], \quad \alpha = 90^\circ;$$

$$\frac{1}{2}[111]_{(\bar{1}01)} + \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}1]_{(101)} = [001]_{(100)} \quad \mathbf{l} = [0\bar{1}0], \quad \alpha = 90^\circ;$$

$$\text{б) } \frac{1}{2}[111]_{(0\bar{1}1)} + \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}1]_{(\bar{1}10)} = [001]_{\bar{1}10} \quad \mathbf{l} = [111], \quad \cos \alpha = \frac{\sqrt{3}}{3}.$$

$$7.40. \frac{1}{2} [1\bar{1}\bar{1}]_{(110)} + \frac{1}{2} [111]_{(\bar{1}10)} = [100]_{(010)} \quad \mathbf{l} = [001].$$

$$7.41. \frac{1}{2} [1\bar{1}\bar{1}]_{(0\bar{1}1)} + \frac{1}{2} [111]_{(0\bar{1}1)} = [100]_{(0,\bar{1}1)} \quad \mathbf{l} = [011].$$

$$7.42. \frac{1}{2} [1\bar{1}\bar{1}]_{(\bar{1}10)} + \frac{1}{2} [111]_{(0\bar{1}1)} = [100]_{0\bar{1}1)} \quad \mathbf{l} = [111],$$

$$\cos \alpha = \frac{\sqrt{3}}{3}.$$

7.43. Нет, так как $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{l}) = 0$.

$$7.44. DB = D\gamma + \gamma B, \quad \frac{1}{2} [011] = \frac{1}{6} [112] + \frac{1}{6} [\bar{1}21];$$

$$DB = D\alpha + \alpha B, \quad \frac{1}{2} [011] = \frac{1}{6} [112] + \frac{1}{6} [\bar{1}12].$$

7.45. В плоскостях $(\bar{1}\bar{1}1)$ и (111) . $A\alpha + \alpha B = AB, \frac{1}{3} [\bar{1}1\bar{1}] + \frac{1}{6} [\bar{1}12] = \frac{1}{2} [\bar{1}10]$. Объединились частичные дислокации Франка и Шокли.

$$7.46. BD + D\beta + \beta C = BC, \quad \frac{1}{2} [0\bar{1}\bar{1}] + \frac{1}{6} [211] + \frac{1}{6} [12\bar{1}] = \frac{1}{2} [101];$$

$$BD + D\beta + \beta A = BA, \quad \frac{1}{2} [0\bar{1}\bar{1}] + \frac{1}{6} [211] + \frac{1}{6} [1\bar{1}2] = \frac{1}{2} [1\bar{1}0],$$

$$\frac{5a^2}{6} > \frac{a^2}{2}.$$

$$7.47. A\alpha + \alpha B = AB; A\alpha + \alpha D = AD; A\alpha + \alpha C = AC; \frac{a^2}{2} + \frac{a^2}{6} > \frac{a^2}{2}.$$

7.48. Невозможно, поскольку результирующая дислокация AC не лежит в плоскости ADB .

7.49. Не может, так как дислокация является краевой.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

РАСЧЕТНЫЕ ФОРМУЛЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Триклинная сингония: $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

$$V = abc(1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{1/2}$$

$$a^* = \frac{[bc]}{(a[bc])} = bc \frac{\sin \alpha}{V} = \frac{1}{a \sin \gamma \sin \beta^*} = \frac{1}{a \sin \gamma^* \sin \beta}$$

$$b^* = \frac{[ca]}{(a[bc])} = ac \frac{\sin \beta}{V} = \frac{1}{b \sin \alpha \sin \gamma^*} = \frac{1}{b \sin \alpha^* \sin \gamma}$$

$$c^* = \frac{[ab]}{(a[bc])} = ab \frac{\sin \gamma}{V} = \frac{1}{c \sin \alpha \sin \beta^*} = \frac{1}{c \sin \alpha^* \sin \beta}$$

$$\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{c \sin \beta \sin \gamma}$$

$$\cos \beta^* = \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{c \sin \gamma \sin \alpha}$$

$$\cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{c \sin \alpha \sin \beta}$$

$$H_{hkl}^2 = \frac{1}{d_{hkl}^2} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos \gamma^* + \\ + 2klb^* c^* \cos \alpha^* + 2hla^* c^* \cos \beta^*$$

$$R_{uvw}^2 = u^2 a^2 + v^2 b^2 + w^2 c^2 + 2uvab \cos \gamma + 2vubc \cos \alpha + 2uwac \cos \beta$$

$$r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 a^2 + (y_i - y_j)^2 b^2 + (z_i - z_j)^2 c^2 + \\ + 2(x_i - x_j)(y_i - y_j)ab \cos \gamma + 2(x_i - x_j)(z_i - z_j)ac \cos \beta + \\ + 2(y_i - y_j)(z_i - z_j)bc \cos \alpha$$

$$\begin{aligned} \cos(\widehat{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2}) &= \frac{(\mathbf{R}_1 \cdot \mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} = \\ &= \frac{1}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} [u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + w_1 w_2 c^2 + (u_1 v_2 + u_2 v_1) ab \cos \gamma + \\ &\quad + (u_1 w_2 + u_2 w_1) ac \cos \beta + (v_1 w_2 + v_2 w_1) bc \cos \alpha] \end{aligned}$$

$$\cos(\widehat{\mathbf{R} \mathbf{H}}) = \frac{(hu + kv + lw)}{|\mathbf{R}||\mathbf{H}|}$$

Моноклинная сингония: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$

$$V = abc \sin \gamma, \quad a^* = \frac{1}{a \sin \gamma}, \quad b^* = \frac{1}{b \sin \gamma}, \quad c^* = \frac{1}{c}, \quad \gamma^* = 180^\circ - \gamma$$

$$H_{hkl}^2 = \frac{1}{d_{hkl}^2} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos \gamma^*$$

$$R_{uvw}^2 = u^2 a^2 + v^2 b^2 + w^2 c^2 + 2uvab \cos \gamma$$

$$\begin{aligned} r_{ij}^2 &= (x_i - x_j)^2 a^2 + (y_i - y_j)^2 b^2 + \\ &\quad + (z_i - z_j)^2 c^2 + 2(x_i - x_j)(y_i - y_j) ab \cos \gamma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cos(\widehat{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2}) &= \frac{(\mathbf{R}_1 \cdot \mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} = \\ &= \frac{1}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} [u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + w_1 w_2 c^2 + (u_1 v_2 + u_2 v_1) ab \cos \gamma] \end{aligned}$$

Ромбическая сингония: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$V = abc, \quad a^* = 1/a, \quad b^* = 1/b, \quad c^* = 1/c, \quad \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$$

$$H_{hkl}^2 = 1/d_{hkl}^2 = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} = h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2$$

$$R_{uvw}^2 = u^2 a^2 + v^2 a^2 + w^2 c^2$$

$$r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 a^2 + (y_i - y_j)^2 b^2 + (z_i - z_j)^2 c^2$$

$$\cos(\widehat{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2}) = \frac{(\mathbf{R}_1 \cdot \mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} = \frac{1}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} [u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + w_1 w_2 c^2]$$

Тетрагональная сингония: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$V = a^2 c, \quad a^* = b^* = 1/a, \quad c^* = 1/c, \quad \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$$

$$H_{hkl}^2 = 1/d_{hkl}^2 = h^2 a^{*2} + k^2 a^{*2} + l^2 c^{*2} = (h^2 + k^2)/a^2 + l^2/c^2$$

$$R_{uvw}^2 = u^2 a^2 + v^2 a^2 + w^2 c^2 = (u^2 + v^2)a^2 + w^2 c^2$$

$$r_{ij}^2 = [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]a^2 + (z_i - z_j)^2 c^2$$

$$\cos(\widehat{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2}) = \frac{(\mathbf{R}_1 \cdot \mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} = \frac{1}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} [u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 a^2 + w_1 w_2 c^2]$$

Гексагональная сингония: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$

$$V = \frac{a^2 c^2 \sqrt{3}}{2}, \quad a^* = b^* = \frac{2}{a\sqrt{3}}, \quad c^* = \frac{1}{c}, \quad \gamma^* = 60^\circ$$

$$H_{hkl}^2 = \frac{1}{d_{hkl}^2} = (h^2 + k^2 + hk)a^{*2} + l^2 c^{*2} = \frac{4(h^2 + k^2 + hk)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$R_{uvw}^2 = (u^2 + v^2 - uv)a^2 + w^2 c^2$$

$$r_{ij}^2 = [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 - (x_i - x_j)(y_i - y_j)]a^2 + (z_i - z_j)^2 c^2$$

$$\begin{aligned} \cos(\widehat{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2}) &= \frac{(\mathbf{R}_1 \cdot \mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} = \\ &= \frac{1}{|\mathbf{R}_1| \cdot |\mathbf{R}_2|} \left\{ [u_1 u_2 + v_1 v_2 - \frac{1}{2}(u_1 v_2 + u_2 v_1)] a^2 + w_1 w_2 c^2 \right\} \end{aligned}$$

Кубическая сингония: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$V = a^3, \quad a^* = b^* = c^* = 1/a, \quad \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$$

$$H_{hkl}^2 = 1/d_{hkl}^2 = (h^2 + k^2 + l^2)a^{*2} = (h^2 + k^2 + l^2)/a^2$$

$$R_{uvw}^2 = (u^2 + v^2 + w^2)a^2$$

$$r_{ij}^2 = [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]a^2$$

$$\cos(\widehat{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2}) = \frac{(\mathbf{R}_1 \cdot \mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1||\mathbf{R}_2|} = \frac{(u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2)}{[(u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)(u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)]^{1/2}}$$

$$\cos(\widehat{\mathbf{H} \mathbf{R}}) = \frac{(hu + kv + lw)}{[(h^2 + k^2 + l^2)(u^2 + v^2 + w^2)]^{1/2}}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

МАТРИЦЫ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ОСЕЙ ЯЧЕЙКИ, ИНДЕКСОВ ПЛОСКОСТЕЙ И КООРДИНАТ ТОЧКИ

$$\begin{array}{l}
 H, \mathbf{A} = \\
 K, \mathbf{B} = \\
 L, \mathbf{C} =
 \end{array}
 \begin{array}{ccc}
 h & k & l \\
 \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} \\
 \hline
 \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\
 \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\
 \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \\
 \hline
 \parallel & \parallel & \parallel \\
 \mathbf{a}^* & \mathbf{b}^* & \mathbf{c}^* \\
 x & y & z
 \end{array}
 \begin{array}{l}
 \mathbf{A}^*, X \\
 \mathbf{B}^*, Y \\
 \mathbf{C}^*, Z
 \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 h, \mathbf{a} = \\
 k, \mathbf{b} = \\
 l, \mathbf{c} =
 \end{array}
 \begin{array}{ccc}
 H & K & L \\
 \mathbf{A} & \mathbf{B} & \mathbf{C} \\
 \hline
 \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\
 \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} \\
 \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} \\
 \hline
 \parallel & \parallel & \parallel \\
 \mathbf{A}^* & \mathbf{B}^* & \mathbf{C}^* \\
 X & Y & Z
 \end{array}
 \begin{array}{l}
 \mathbf{a}^*, x \\
 \mathbf{b}^*, y \\
 \mathbf{c}^*, z
 \end{array}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

**МАТРИЦЫ ОПЕРАЦИЙ СИММЕТРИИ
ТОЧЕЧНОЙ ГРУППЫ O_h**

1	$\bar{1}$	2_x
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
2_y	2_z	2_{xy}
$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$2_{x\bar{y}}$	2_{xz}	$2_{x\bar{z}}$
$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
2_{yz}	$2_{y\bar{z}}$	m_x
$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
m_y	m_z	m_{xy}
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
$m_{x\bar{y}}$	m_{xz}	$m_{x\bar{z}}$
$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
m_{yz}	$m_{y\bar{z}}$	4_x
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$

$$\begin{array}{ccc} 4_x^{-1} & \bar{4}_x & \bar{4}_x^{-1} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} 4_y & 4_y^{-1} & \bar{4}_y \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} \bar{4}_y^{-1} & 4_z & 4_z^{-1} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} \bar{4}_z & \bar{4}_z^{-1} & 3_{xyz} \\ \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} 3_{xyz}^{-1} & \bar{3}_{xyz} & \bar{3}_{xyz}^{-1} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} 3_{xyz} & 3_{xyz}^{-1} & \bar{3}_{xyz} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} \bar{3}_{xyz}^{-1} & 3_{xyz} & 3_{xyz}^{-1} \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

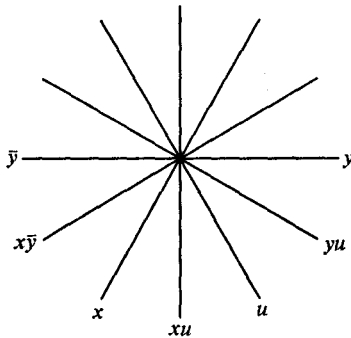
$$\begin{array}{ccc} \bar{3}_{xyz} & \bar{3}_{xyz}^{-1} & 3_{xyz} \\ \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} 3_{xyz}^{-1} & \bar{3}_{xyz} & \bar{3}_{xyz}^{-1} \\ \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

**МАТРИЦЫ ОПЕРАЦИЙ СИММЕТРИИ
ТОЧЕЧНОЙ ГРУППЫ D_{6h}**

1 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\bar{1}$ $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	2_x $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
2_y $\begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	2_u $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	2_z $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
$2_{x\bar{y}}$ $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	2_{xu} $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	2_{yu} $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
m_x $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	m_y $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	m_u $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
m_z $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$m_{x\bar{y}}$ $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	m_{xu} $\begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
m_{yu} $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	3_z $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	3_z^{-1} $\begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
$\bar{3}_z$ $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\bar{3}_z^{-1}$ $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	6_z $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
6_z^{-1} $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\bar{6}_z$ $\begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\bar{6}_z^{-1}$ $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Примечания к Приложениям 3 и 4. Операции симметрии обозначают через элементы симметрии. Операция поворота обозначается цифрой, соответствующей порядку оси симметрии, операция отражения в плоскости — символом m и операция инверсии в точке — символом $\bar{1}$. Подстрочный индекс у оси симметрии указывает направление, вдоль которого идет эта ось. Одна буква соответствует направлению оси кристаллографической системы координат, две буквы — диагонали квадранта, три буквы — диагонали октанта. Отрицательное направление координатной оси отмечается чертой над буквой. Надстрочный индекс определяет порядок операции симметрии. Например, 2_x , $2_{x\bar{y}}$, $3_{x\bar{y}z}^1$, 6^2 , 4^{-1} . Подстрочный индекс у плоскости симметрии (m_x , m_{xy}) определяет направление, вдоль которого идет нормаль к этой плоскости. Обозначение направлений в плоскости xu для гексагональных групп показано на рисунке



ПРИЛОЖЕНИЕ 5

32 ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

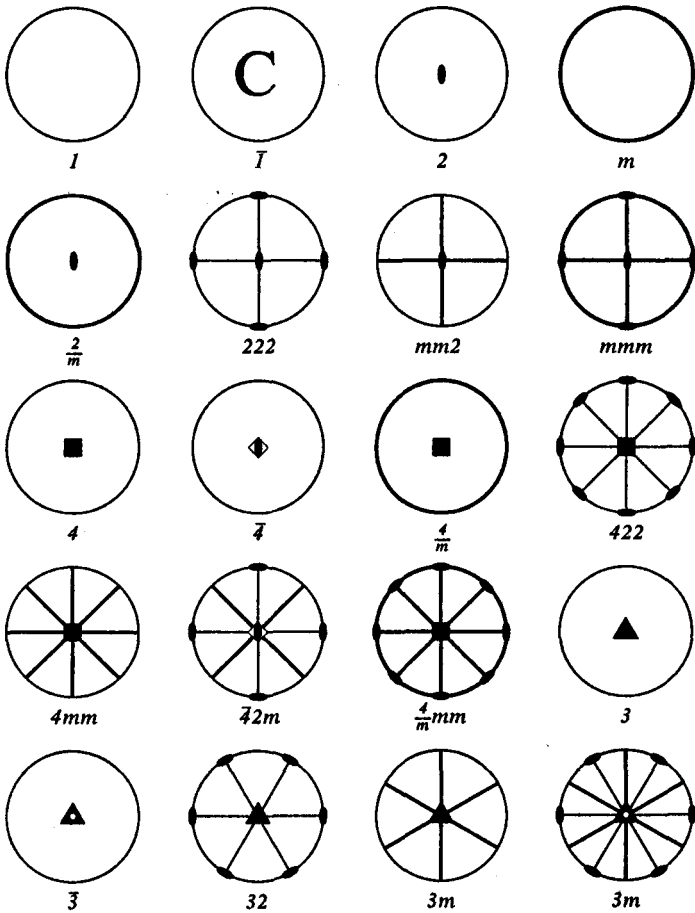
№	Сингония	Обозначения			Порядок группы
		по Шенфлису	по Герману-Могену	по Браве	
1	Триклинная	C_1	1	L_1	1
2		C_i	$\bar{1}$	C	2
3	Моноклиная	C_2	2	L_2	2
4		C_s	m	P	2
5		C_{2h}	$2/m$	L_2PC	4
6	Ромбическая	D_2	222	$3L_2$	4
7		C_{2v}	$mm2$	L_22P	4
8		D_{2h}	mmm	$3L_23PC$	8
9	Тетрагональная	C_4	4	L_4	4
10		C_{4h}	$4/m$	L_4PC	8
11		D_4	422	L_44L_2	8
12		C_{4v}	4mm	L_44P	8
13		D_{4h}	$4/mmm$	L_44L_25PC	16
14		S_4	$\bar{4}$	L_{4i}	4
15		D_{2d}	$\bar{4}2m$	$L_{4i}2L_22P$	8
16	Тригональная	C_3	3	L_3	3
17		C_{3i}	$\bar{3}$	$L_{3i}C$	6
18		D_3	32	L_33L_2	6
19		C_{3v}	3m	L_33P	6
20		D_{3d}	$\bar{3}m2$	$L_{3i}3L_23PC$	12

ПРИЛОЖЕНИЕ 5 (окончание)

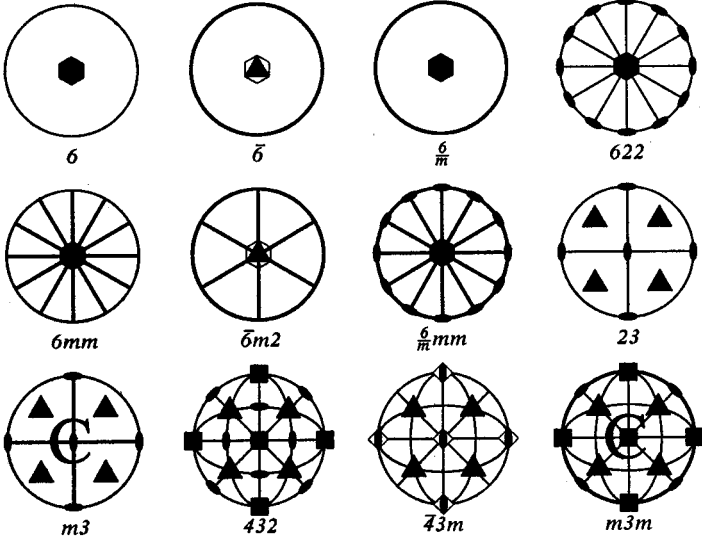
№	Сингония	Обозначения			Порядок группы
		по Шенфлису	по Герману-Могену	по Бравэ	
21	Гексагональная	C_6	6	L_6	6
22		C_{6h}	6/m	L_6	12
23		D_6	622	L_66L_2	12
24		C_{6v}	6mm	L_66P	12
25		D_{6h}	6/mmm	L_66L_27PC	24
26		C_{3h}	$\bar{6}$	L_3P	6
27		D_{3h}	$\bar{6}m2$	L_33L_24P	12
28		Кубическая	T	23	$3L_24L_3$
29	T_h		m3	$3L_24L_33PC$	24
30	O		432	$3L_44L_36L_2$	24
31	T_d		$\bar{4}3m$	$3L_4i4L_36P$	24
32	O_h		m3m	$3L_44L_36L_29PC$	48

ПРИЛОЖЕНИЕ 6

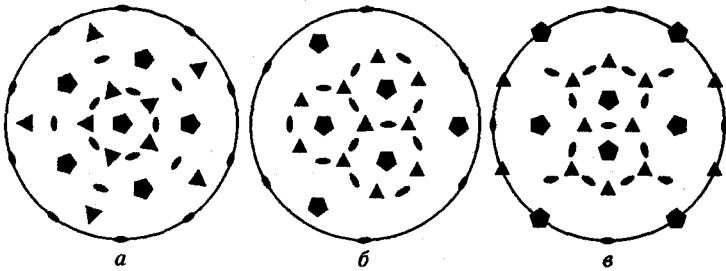
СТЕРЕОГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЕКЦИИ 32 ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП СИММЕТРИИ



ПРИЛОЖЕНИЕ 6 (окончание)

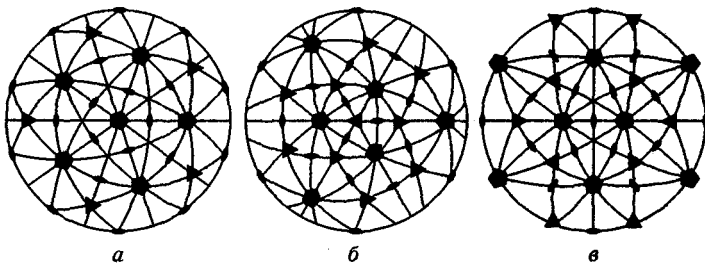


ИКОСАЭДРИЧЕСКИЕ ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ Y и Y_h



Группа Y

Плоскость проекции перпендикулярна оси 5-го порядка (a),
оси 3-го порядка (b) и оси 2-го порядка (c)

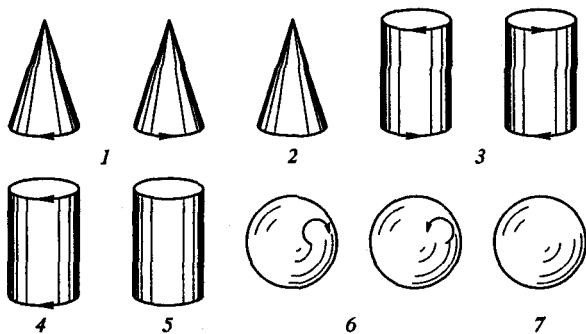


Группа Y_h

Плоскость проекции перпендикулярна оси 5-го порядка (a),
оси 3-го порядка (b) и оси 2-го порядка (c)

**ПРЕДЕЛЬНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ (ГРУППЫ КЮРИ)
И ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ФИГУРЫ ИХ СИМВОЛИЗИРУЮЩИЕ**

- 1) $C_\infty = \infty$, правая и левая; 2) $C_{\infty v} = \infty m$; 3) $D_\infty = \infty 2$, правая и левая; 4) $C_{\infty h} = \frac{\infty}{m}$; 5) $D_{\infty h} = \frac{\infty}{m} m$; 6) $R = \frac{\infty}{\infty}$, правая и левая; 7) $R_i = \frac{\infty}{\infty} m$.



Симметрия некоторых физических воздействий

Однородное механическое растяжение (сжатие) — $D_{\infty h}$

Однородное электрическое поле — $C_{\infty v}$

Спонтанная поляризация — $C_{\infty v}$

































Пирозлектрический эффект — $C_{\infty v}$

Поле силы тяжести — $C_{\infty v}$

Однородное магнитное поле — $C_{\infty h}$
















Вращение плоскости поляризации в анизотропной среде — D_∞

ПРОСТЫЕ ОБЩИЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ

Моноклин- триклинная	C_1  Моноэдр (педион)	C_i  Пинакоид	C_2  Диэдр осевой	C_s  Диэдр плоский	C_{2h}  Призма		
Ромбическая			D_2  Тетраэдр	C_{2v}  Пирамида	D_{2h}  Бипирамида		
Тригональная	C_3  Пирамида	C_{3i}  Ромбоэдр	D_3  Трапецоэдр	C_{3v}  Дитриг. пир.	D_{3d}  Скаленоэдр		
Тетрагональная	C_4  Пирамида	C_{4h}  Бипирамида	D_4  Трапецоэдр	C_{4v}  Дитетр. пир.	D_{4h}  Дитетр. бипирамида	S_4  Тетраэдр	D_{2d}  Скаленоэдр
Гексагональная	C_6  Пирамида	C_{6h}  Бипирамида	D_6  Трапецоэдр	D_{6v}  Дигекс. пир.	D_{6h}  Дигекс. бипирамида	C_{3h}  Триг. бипир.	D_{3h}  Дитриг. бипирамида
Кубическая	T  Пентагон- тригетр.	T_h  Дидо- декаэдр	O  Пентагон- триокт.	T_d  Гекса- тетраэдр	O_h  Гекса- октаэдр		

ПРИЛОЖЕНИЕ 10

**ПРОСТЫЕ ОБЩИЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ
РОМБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ**

Группы	Индексы				
	$\{hkl\}$	$\{hk0\}$ и $\{00l\}$	$\{h0l\}$ и $\{010\}$	$\{0kl\}$ и $\{100\}$	$\{001\}$ $\{010\}$ и $\{100\}$
D_{2h}					
D_2					
C_{2v}					































ПРИЛОЖЕНИЕ 11

**ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ
ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СИМГОНИИ**

Группы	Индексы					
	{hkl}	{hhl}	{h0l}	{hk0}	{110}	{100}
D_{4h}						
C_{4h}						
D_4						
D_{2d}						
S_4						
C_{4v}						
C_4						

ПРИЛОЖЕНИЕ 12

ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ
ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИМГОНИИ




































Группы	Индексы					
	$\{hk\bar{l}\}$	$\{h0\bar{h}l\}$	$\{hh\bar{2}hl\}$	$\{hk\bar{0}\}$	$\{10\bar{1}0\}$	$\{11\bar{2}0\}$
D_{3d}						
C_{3i}						
D_3						
C_{3v}						
C_3						

**ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ
ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ**

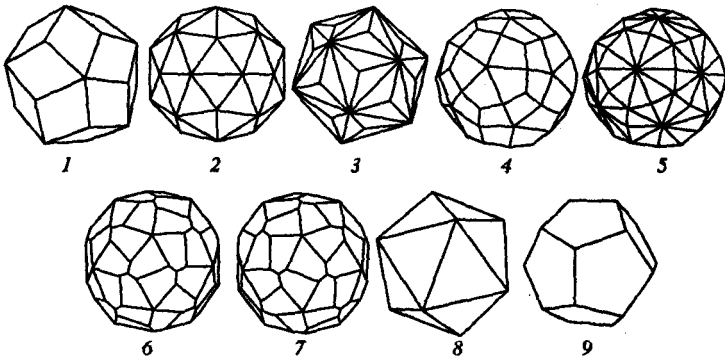
Группы	Индексы					
	$\{hk\bar{l}\}$	$\{h0\bar{l}\}$	$\{hh\bar{2}l\}$	$\{hk\bar{0}\}$	$\{10\bar{1}0\}$	$\{11\bar{2}0\}$
D_{6h}						
C_{6h}						
D_6						
D_{3h}						
C_{3h}						
C_{6v}						
C_6						

ПРИЛОЖЕНИЕ 14

ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

Группы	Индексы						
	$\{hkl\}$	$\{hkk\}$	$\{hhl\}$	$\{111\}$	$\{hko\}$	$\{110\}$	$\{100\}$
O_h							
O							
T_h							
T_d							
T							

ИКОСАЭДРИЧЕСКИЕ ПРОСТЫЕ ФОРМЫ

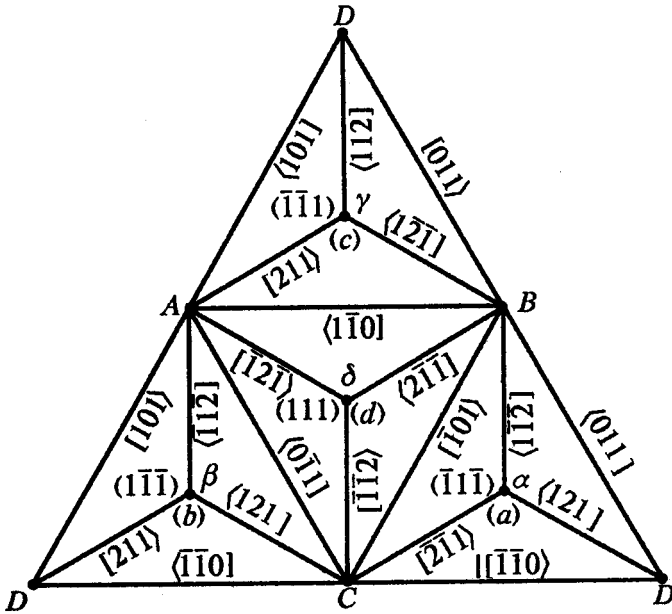


1 — ромбический триаконтаэдр; 2 — пирамидальный додекаэдр;
 3 — пирамидальный икосаэдр; 4 — триаксис-икосаэдр;
 5 — гексаксис-икосаэдр; 6, 7 — энантиоморфные пентагональные
 пентагон-изоэдры (левый и правый); 8 — икосаэдр; 9 — правильный
 пентагон-додекаэдр

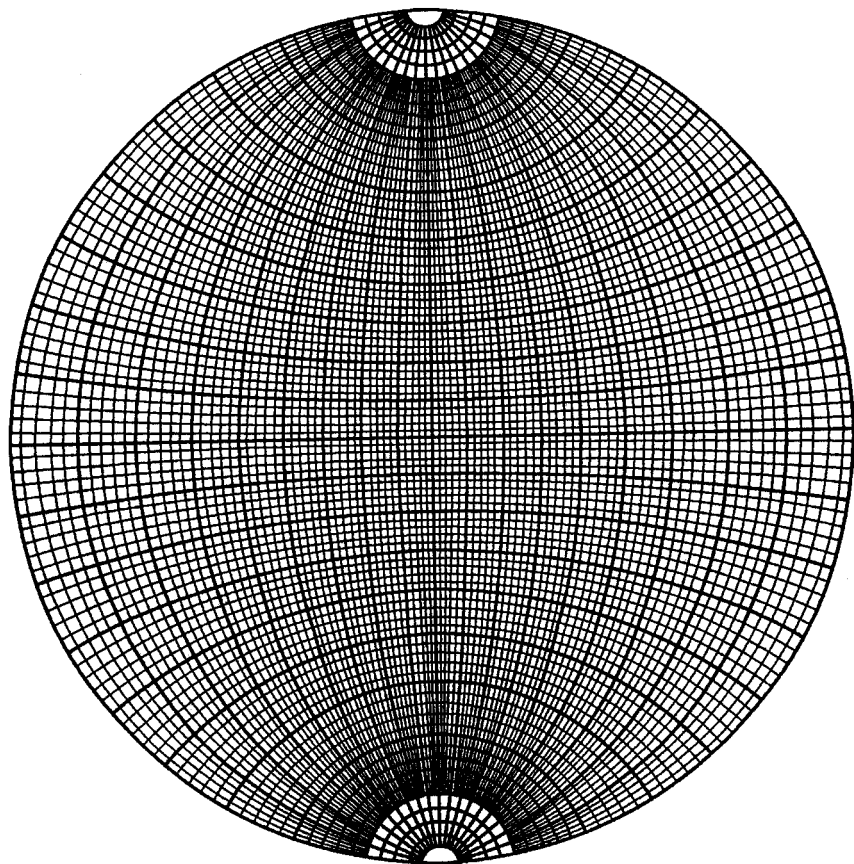
**КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
НЕКОТОРЫХ ВЕЩЕСТВ**

Вещество	Пространственная группа	Число формульных единиц	Параметры элементарной ячейки, Å
Al	$O_h^5 = Fm\bar{3}m$	4	$a = 4,0495$
Cu	$O_h^5 = Fm\bar{3}m$	4	$a = 3,6147$
Mg	$D_{6h}^4 = P\bar{6}_3mc$	2	$a = 3,0928$ $c = 5,21023$
Zn	$D_{6h}^4 = P\bar{6}_3mc$	2	$a = 2,6646$ $c = 4,9469$
α -W	$O_h^9 = Im\bar{3}m$	2	$a = 3,1651$
α -Fe	$O_h^9 = Im\bar{3}m$	2	$a = 2,8664$
Si	$O_h^7 = Fd\bar{3}m$	8	$a = 5,4308$
GaAs	$T_d^2 = F\bar{4}3m$	4	$a = 5,6534$
ZnS	$T_d^2 = F\bar{4}3m$	4	$a = 5,406$
ZnS	$C_{6v}^4 = P6_3mc$	2	$a = 3,811$ $c = 6,234$
NaCl	$O_h^5 = Fm\bar{3}m$	4	$a = 5,6403$
CsCl	$O_h^1 = Pm\bar{3}m$	4	$a = 4,118$
CaF ₂	$O_h^5 = Fm\bar{3}m$	4	$a = 5,4629$
Li ₂ O	$O_h^5 = Fm\bar{3}m$	4	$a = 4,628$
BaTiO ₃	$O_h^1 = Pm\bar{3}m$	1	$a = 3,992$
PbS	$O_h^5 = Fm\bar{3}m$	4	$a = 5,935$
C	$O_h^7 = Fd\bar{3}m$	8	$a = 3,5667$

РАЗВЕРТКА ТЕТРАЭДРА ТОМПСОНА



СЕТКА ВУЛЬФА



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белов Н. В. Очерки по структурной кристаллографии и федоровским группам. — М.: Наука, 1986. 278 с.
2. Белов Н. В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. — М.: Изд-во АН СССР, 1947. 237 с.
3. Вайнштейн Б. К. Современная кристаллография. Т.1. — М.: Наука, 1979. 383 с.
4. Вайнштейн Б. К., Фридкин В. М., Инденбом В. Л. Современная кристаллография. Т.2. — М.: Наука, 1979. 355 с.
5. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П. Теория симметрии кристаллов. — М.: ГЕОС, 2000. 410 с.
6. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П., Загальская Ю. Г. Кристаллография. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1973. 163 с.
7. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П. Геометрическая кристаллография. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1973. 163 с.
8. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П. Геометрическая кристаллография. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1976. 241 с.
9. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П., Егоров-Тисменко Ю. К. Геометрическая кристаллография. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. 186 с.
10. Задачи по физике твердого тела / Под ред. Г. Дж. Голдсмита — М.: Наука, 1976. 432 с.
11. Зоркий П. М. Симметрия молекул и кристаллических структур. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. 232 с.
12. Зоркий П. М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1981. 39 с.
13. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. — М.: Мир, 1974. 496 с.
14. Костов И. Кристаллография. — М.: Мир, 1965. 528 с.
15. Новиков И. И., Розин К. М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. — М.: Metallurgia, 1990. 336 с.
16. Павлов П. В., Хохлов А. Ф. Физика твердого тела. — М.: Высшая школа, 2000. 494 с.
17. Переломова Н. В., Тагиева М. М. Задачник по кристаллофизике. — М.: Наука, 1982. 288 с.
18. Попов Г. М., Шафрановский И. И. Кристаллография. — М.: Высшая школа, 1972. 356 с.
19. Розенфельд Б. А., Сергеева Н. Д. Стереографическая проекция. — М.: Наука, 1973. 133 с.
20. Розин К. М., Гусев Э. Б. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. — М.: Metallurgia, 1982. 168 с.
21. Розин К. М., Гусев Э. Б. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. — М.: Metallurgia, 1985. 168 с.
22. Урусов В. С. Теоретическая кристаллохимия. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987. 275 с.
23. Чупрунов Е. В., Хохлов А. Ф., Фаддеев М. А. Кристаллография. — М.: Изд-во физ.-мат. лит., 2000. 496 с.
24. International Tables for X-Ray Crystallography. Vol.1. — Kynoch Press, 1952. 558 p.

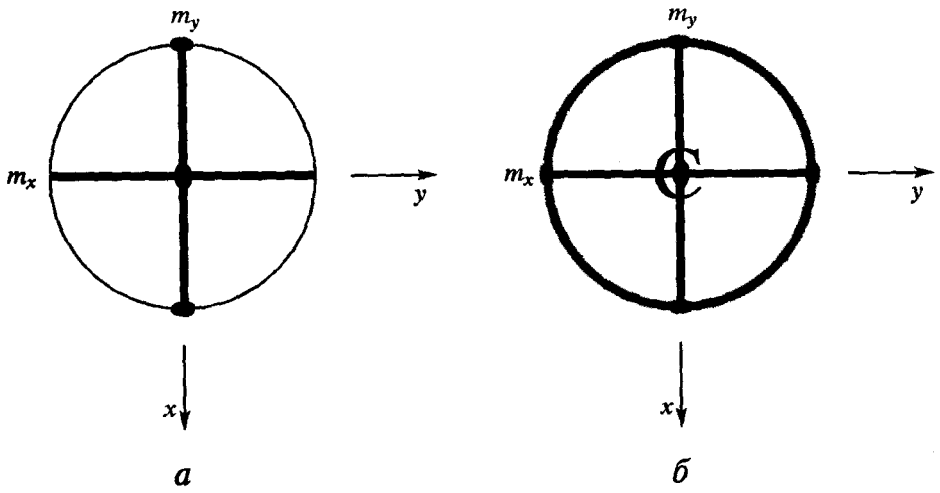


Рис. 5.10. К странице 113

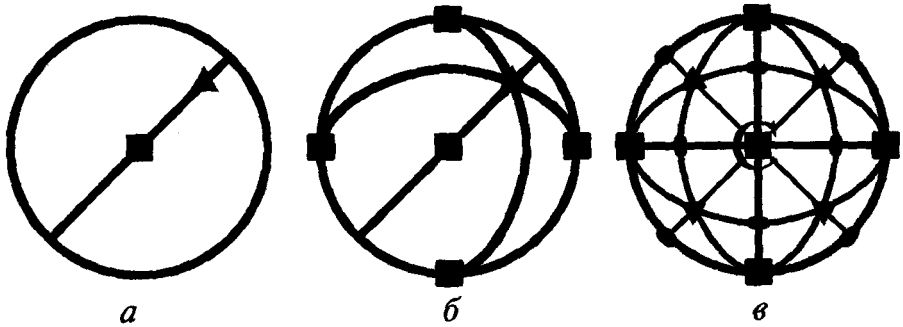


Рис. 5.11. К странице 114

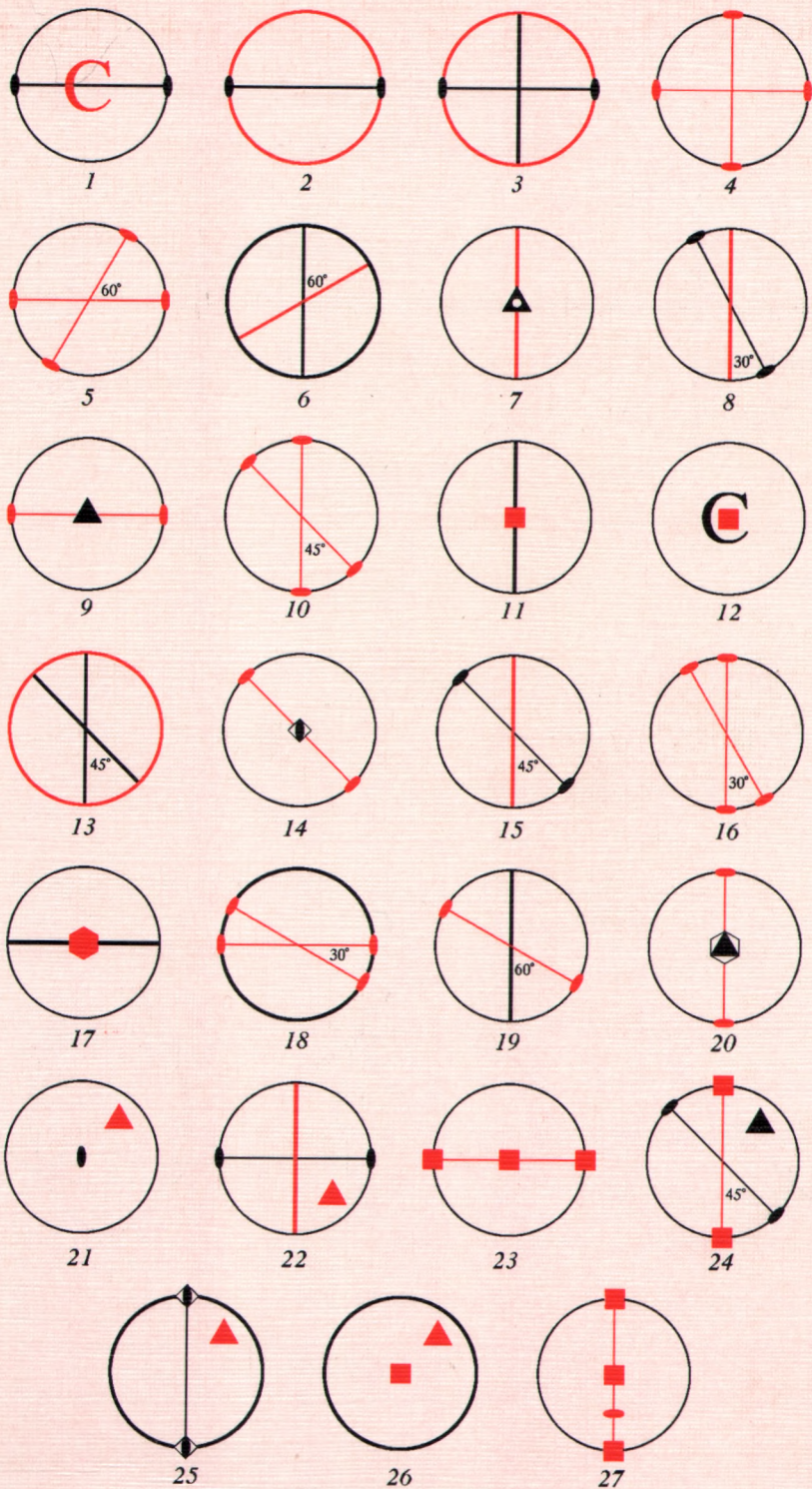


Рис. 5.12. К страницам 117–118