МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ (ТУСУР)

КАФЕДРА ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ (ЭП)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР ТУСУР
__________ П.Е. Троян

« ___ » ________ 2017 года

Давыдов В.Н.

СОСТАВЛЕНИЕ МАТРИЦЫ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СИСТЕМЫ КООРДИНАТ ЭЛЕМЕНТОМ ТОЧЕЧНОЙ СИММЕТРИИ

Учебно - методическое пособие к лабораторной работе
по дисциплине «Материалы электронной техники»
для студентов направления
11.03.04 – Электроника и наноэлектроника,
Профиль «Квантовая и оптическая электроника»

ТОМСК – 2017

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ

Для создания элементов электронной техники широко используют электро-технические материалы, находящиеся в различных состояниях: аморфные, поликристаллические, сплавы, кристаллы и т.д. Среди этих состояний кристаллические материалы используют для изготовления прецезионной аппаратуры, высочувствительных резисторов, конденсаторов и других элементов. Применение в электронной технике для изготовления элементов кристаллических веществ различной симметрии позволяет получать элементы, в которых в заданной пропорции сочетаются различные физические свойства выбранного кристалла. Это позволяет создавать элементы с принципиально новыми функциональными возможностями и свойствами.

В этой связи необходимо студенты должны знать основные структурные свойства кристаллического вещества, в которых доминирующая роль принадлежит элементам точечной симметрии.

Целью данной лабораторной работы является изучение студентами основных элементов симметрии кристаллов, их свойств, а также получение навыков математической записи действия элементов симметрии на структуру кристалла путем составления матрицы преобразования системы координат выбранным элементом симметрии.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1. Элементы точечной симметрии в материалах электронной техники

Окружающий нас мир в своем устройстве подчинен многим законам, в частности, подавляющее число объектов материального мира имеют геометрически совершенную, правильную форму. Говорят, что они имеют симметричный вид. Как правило, симметричный вид материального объекта свидетельствует о сложном его внутреннем строении, длительной эволюции. Все возможные симметричные фигуры материального мира могут быть сведены к конечному числу простых геометрических фигур: кубу, пирамиде, тетраэдру и т.д. Для описания симметрии этого набора геометрических фигур используется конечное число элементов симметрии. Рассмотрим их.

Плоскость симметрии (её наличие обозначают символом «m») – это плоскость, которая делит фигуру на две зеркально равные части (рис.1). Плоскость симметрии можно представлять себе как зеркало внутри фигуры. Примером плоскости симметрии является плоскость, делящая яблоко по его сердцевине на две равные части, а также вертикальная плоскость, проходящая посередине через человека с лицевой стороны. Если нормаль к плоскости направлена по оси X (рис.2), то эту плоскость обозначают m_x, если по оси Y, то m_y и т.д. На рисунках плоскость симметрии изображают в виде толстой линии.

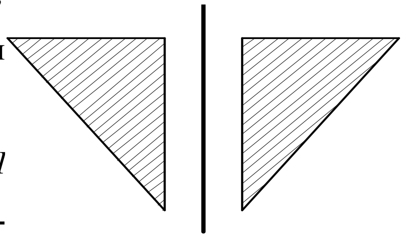

Рис.1.

Центром симметрии (его обозначают латинской буквой 1 и иногда называют центром инверсии) - называется особая точка внутри фигуры, характеризующаяся тем, что любая проведенная через нее прямая встречает одинаковые (говорят «гомологичные») точки по обе стороны от нее и на равных расстояниях (рис.3): A - A', B - B'. Таким образом, действие симметрии центра инверсии - это отражение в точке, в которой он находится. Обычно это геометрический центр фигуры.

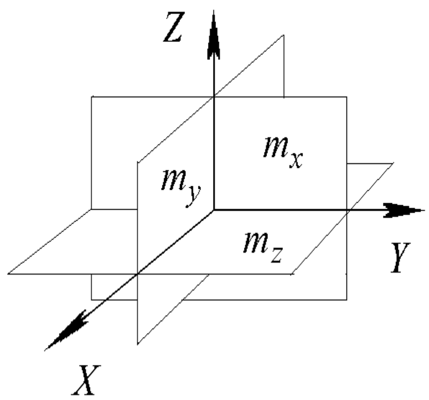

Рис. 2

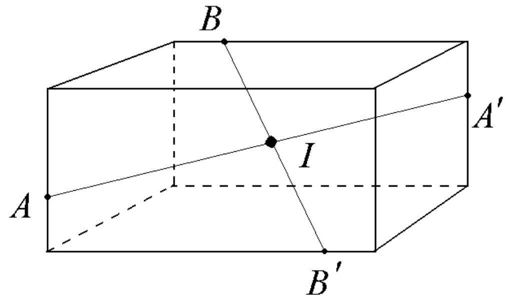

Рис. 3

Ось симметрии *n*-го порядка (её наличие обозначают символом «n») – это прямая линия, при повороте вокруг которой на некоторый угол или несколько углов фигура совмещается сама с собой (рис. 4). Наименьший угол поворота равен: $\alpha=2\pi/n$, всего поворотов у оси n - штук: α, 2α, 3α, ..., $n\alpha$. Примером оси четвертого порядка является ось, проходящая через две противоположные грани куба. В элементах симметрии кристаллов n не может быть равно пяти и быть больше шести. Таким образом, в реальных кристаллах n =1, 2, 3, 4, 6. Доказательством этого является следующее обстоятельство: фигура (в нашем случае элементарная ячейка кристалла) должна быть такой симметрии, чтобы укладывая их рядом, можно было бы плотно заполнить всю плоскость. Если это удастся, то элементарные ячейки такой симметрии будут плотно прилегать друг к другу, образуя механически прочный кристалл. Для этой цели можно применить плоские фигуры: неправильной формы (имеет ось симметрии порядка n =

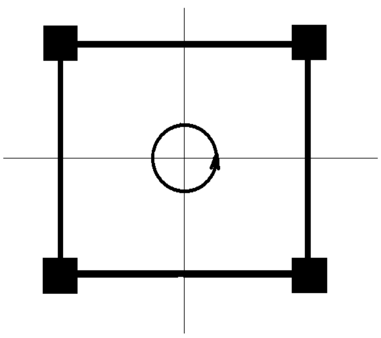

Рис. 4

1), прямоугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 2$), равносторонний треугольник (имеет ось симметрии порядка n=3), квадрат (имеет ось симметрии порядка $n = 4$) и шестиугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 6$). Примером последней ситуации является пчелиный улей, составленный из шестиугольных сот. Но невозможно провести плотную упаковку плоскости пятиугольниками, семиугольниками, восьмиугольниками и т.д. – между отдельными фигурами обязательно будут пустоты. Это утверждение легко проверить, вырезав пятиугольники и складывая их на плоскости до плотного её заполнения. Такового не получится - фигуры не будут прилегать друг к другу без пустот. Отсутствие плотной упаковки между элементарными ячейками кристалла приведет к тому, что ячейки будут слабо связаны друг с другом. Как следствие этого, такой кристалл окажется структурно непрочен, так что любое слабое воздействие разрушит его вплоть до элементарных ячеек.

Вывод о возможных значениях порядка оси симметрии для реальных кристаллов, полученный здесь логическим путем, можно доказать строго математически (см. Учебное пособие по курсу, с. 10). На рис. 4 в качестве демонстрации оси симметрии показана фигура в виде правильного четырехугольника, обладающего осью симметрии четвертого порядка, проходящей через центр фигуры перпендикулярно плоскости рисунка.

На рисунках ось симметрии изображается в виде тонкой сплошной или пунктирной прямой, 6 порождает оси порядка *3* (углы поворота 120^0, 240^0 и 360^0) и *2* (углы поворота 180^0 и 360^0). Другие элементы симметрии также способны образовать новые элементы. Это особенно важно при сочетании нескольких элементов симметрии.

2.2. Свойства элементов точечной симметрии

Перечислим основные свойства элементов точечной симметрии, которые определяют появление дополнительных элементов симметрии при наличии нескольких порождающих элементов т(их называют генераторами группы точечной симметрии).

1. Линия пересечения двух плоскостей симметрии является осью симметрии с углом поворота α в два раза большим, чем угол между плоскостями. Доказательство этого свойства сводится к геометрическому построению двух пересекающихся плоскостей и рассмотрению преобразования ими объекта.

2. Точка пересечения оси симметрии четного (второго) порядка с перпендикулярной к ней плоскостью симметрии есть центр симметрии (это сочетание элементов обозначают как n/m, а в рассматриваемом случае $2/m$).

3. Если вдоль оси симметрии n-того порядка проходит плоскость симметрии, то таких плоскостей в фигуре имеется n - штук (это сочетание элементов обозначают как nm).

4. Равнодействующая двух пересекающихся осей симметрии является третья ось, проходящая точку их пересечения и необязательно перпендикулярно им.

5. Если перпендикулярно к оси симметрии n -того порядка проходит ось симметрии второго порядка, то имеется n осей второго порядка, перпендикулярных оси n -того порядка.

Данные свойства могут быть доказаны как геометрическими построениями, так и на основе матричного представления элементов симметрии, о котором речь пойдет ниже.

Следует отметить, что приведённые выше свойства остаются справедливыми при замене в них местами причин и следствий. Так, второе свойство можно прочитать следующим образом: наличие на оси симметрии второго порядка центра инверсии означает, что в этом наборе элементов симметрии должна быть также плоскость симметрии, проходящая через центр и перпендикулярная оси симметрии. Другой вариант второго свойства: если на плоскости симметрии имеется центр инверсии, то в этом наборе элементов симметрии должна также быть ось симметрии второго порядка, проходящая через центр симметрии перпендикулярно плоскости симметрии. Аналогичным образом можно поступать и с другими четырьмя свойствами.

2.3. Стереографическая проекция элементов симметрии

Для того, чтобы лучше уяснить излагаемый ниже материал, рассмотрим следующую ситуацию. Предположим, что Вам необходимо рассказать сослуживцам о том, какой сложный и в то же время красивый многогранник (или симметричную геометрическую фигуру) Вам удалось видеть. Рисовать её на бумаге, чтобы коллеги поняли о чем идет речь – сложно, долго да и не всегда возможно. Как быть в подобной ситуации? Для того, чтобы точно передать симметрию геометрического многогранника, который может быть в частности и кристаллом, необходим свой набор символов, свой язык (ведь никого не удивляет, что для передачи на бумаге музыкального произведения изобретён свой язык: нотная грамота). Отдельные элементы описания симметрии фигур («ноты») - плоскости симметрии, оси симметрии, центр инверсии, уже рассматривались. Осталось научиться с их помощью изображать всю геометрическую фигуру (в нашем примере: как из нот - элементов симметрии составить описание фигуры). Таким описанием является стереографическая проекция геометрической фигуры.

Стереографическая проекция применяется для изображения элементов симметрии геометрических фигур, в частности, симметрии кристаллов. Ее строят следующим образом. Рассматриваемый многогранник мысленно помещается в центр прозрачной сферы такого радиуса, чтобы в неё поместилась вся фигура. Затем из центра многогранника к каждой грани восстанавливается перпендикуляр (нормаль к грани), который продолжают до его пересечения со сферой. Точку пересечения перпендикуляра и сферы называют **полюсной точкой**. Если проделать описанную процедуру получения точек пересечения, то в итоге наш многогранник оказывается скопирован на сферу. Полученные полюсные точки, а точнее перпендикуляры, исходящие из центра сферы, и их положение на сфере проекций полностью передают информацию о симметрийных свойствах рассматриваемого многогранника. Но рисовать систему полюсных точек или набора линий, пересекающихся в центре сферы, также ненаглядно как и рисовать самую фигуру – человеческое воображение плохо работает с пространственными фигурами, но значительно лучше с плоскостными, т.е. нарисованными на плоскости.

Для дальнейшего упрощения полученной информации о фигуре пространственное представление преобразуют в плоскостное: систему полюсных точек со сферы переносят на плоскость. Наиболее удобное положение этой плоскости - экваториальное. Перенос полюсных точек на плоскость проекций проводят следующим образом. Если необходимо получить стереографическую проекцию линии *AO* (см. рис.5), соединяют полюсную точку *A* с южным полюсом сферы проекций. Точка пересечения линии *AS* с экваториальной плоскостью *Q* – точка

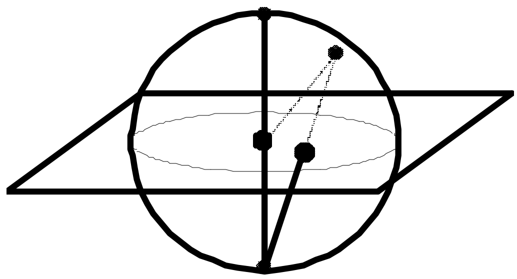

Рис.5

a и есть стереографическая проекция направления *OA*. Здесь наклонные направления, расположенные в верхней части сферы, проецируются внутри круга проекций. Если же направление выходит из нижней части сферы, то проекцию изображают не точкой, а крестиком, тем самым указывая на ее обратный знак по направлению. Вертикальная линия в стереографической проекции выглядит как точка в центре круга, а горизонтальная - как две точки на окружности экватора. Окружность, проведенная на сфере, на стереографической проекции выглядит как окружность, эллипсоид или прямая линия в зависимости от её положения в пространстве: параллельна плоскости проекций, под острым углом или перпендикулярно её, соответственно.

Если грань, перпендикуляр от которой дал рассматриваемую полюсную точку, имеет ось симметрии, то изображение соответствующей полюсной точки на плоскости проекций рисуют в виде многогранника с числом углов, равным порядку оси симметрии. Так, ось симметрии второго порядка изображают в виде зерна (чечевицы), ось симметрии третьего порядка - в виде треугольника, а ось симметрии четвертого порядка - четырехугольника. Плоскость симметрии изображается на плоскости проекций в виде жирной прямой линии (если плоскость перпендикулярна плоскости проекций) или в виде окружности, эллипса, если угол между ней и плоскостью проекций меньше 90^0. Впрочем, об обозначениях элементов симметрии мы уже говорили.

На стереографической проекции не искажаются угловые соотношения. По этой причине при построении стереографической проекции форма геометрической фигуры передается точно и полностью. Стереографические проекции всех классов симметрии кристаллов приведены в конце учебно-методического пособия в таблице 2.

Рассмотрим конкретные примеры стереографических проекций кристаллов различных симметрий кубической сингонии. На рис.6 приведена стереографическая проекция точечной группы $\bar{4}32$. Здесь пунктирная окружность - след от сферы проекций на экваториальную плоскость; *X, Y, Z* - оси кристаллографической системы координат; X_1 X_2 X_3 - оси кристаллофизической системы координат. В кубической сингонии они совпадают. По оси X_3 направлена ось инверсионная симметрии четвертого порядка, на что указывает светлый четырехугольник в центре фигуры. Инверсионные оси четвертого порядка находятся также на координатных осях X_1 и X_2 (светлые четырехугольники находятся на вертикальной и горизонтальной осях). Сплошными линиями на рисунке показаны плоскости симметрии, которые в данном случае направлены по диагоналям между осями координат X_1 и X_2 (две прямые линии), а также по плоскостям, проходящим через оси X_1 и X_2 и диагоналям противоположных граней куба (на рисунке это два пересекающихся эллипса). В данной фигуре имеются также оси симметрии третьего порядка, которые расположены по пространственным диагоналям куба и которые на рисунке показаны как зачерненные треугольники на пересечении плоскостей симметрии. Эти точки пересечения являются углами куба. Указанные оси симметрии третьего порядка являются обычными (или «прямыми»), т.к. треугольники зачернены.

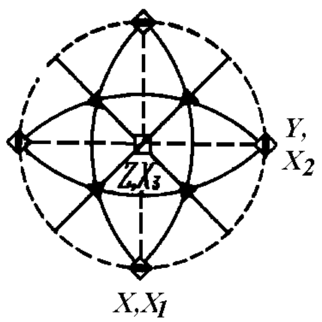

Рис. 6

В точечной группе $m3m$ (рис.7) количество элементов симметрии значительно больше. По осям координат направлены оси симметрии четвертого порядка - они отмечены зачерненным четырехугольником. Имеются четыре оси симметрии третьего порядка, совпадающие с пространственны-

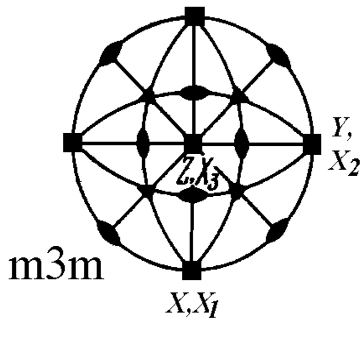

Рис. 7

ми диагоналями куба. Оси симметрии второго порядка проходят через середины противоположных ребер куба и их число равно числу ребер, деленное на два, т.е. шести. Эти оси отмечены на рис.7 чечевицеобразными фигурами. В данной группе симметрии есть плоскости симметрии. Первая буква *m* в международном символе группы (***m***3*m*) указывает на плоскости, расположенные в координатных плоскостях: X_1OX_3, X_1OX_2 и X_2OX_3 и показанные на рис. 7 толстыми линиями по осям X_1, X_2 и в виде окружности для случая плоскости X_1OX_2. Вторая буква *m* в символе группы (*m*3***m***) указывает на наличие плоскостей симметрии, расположенных по диагоналям в координатных плоскостях. Эти плоскости на стереографической проекции дают толстые линии, проходящие по диагоналям между осями X_1, X_2 , а также вертикальный и горизонтальный эллипс в центре рис.7, для плоскостей, проходящих через верхнее правое (левое) ребро куба и нижнее левое (правое) ребро через центр фигуры.

При рассмотрении элементов симметрии кристаллов низшей или средней категории необходимо иметь перед собой таблицу формирования международного символа группы (см. Учебное пособие по курсу, с.14). Согласно ей по символу группы можно воспроизвести все порождающие её элементы симметрии. Затем поочерёдно применяя свойства элементов симметрии, восстановить остальные элементы рассматриваемой группы.

При рассмотрении действия плоскости симметрии и оси симметрии второго порядка можно заметить большое сходство в их действии, если ось симметрии лежит в плоскости симметрии. Однако, в действительности их действия различны. Наиболее отчетливо различие в их действии можно видеть, если рассмотреть преобразование сложного объекта обоими элементами симметрии, например, двухцветного объекта плоскостью симметрии *m* и лежащей в геометрической плоскости Q осью симметрии с $n = 2$ (рис.8).

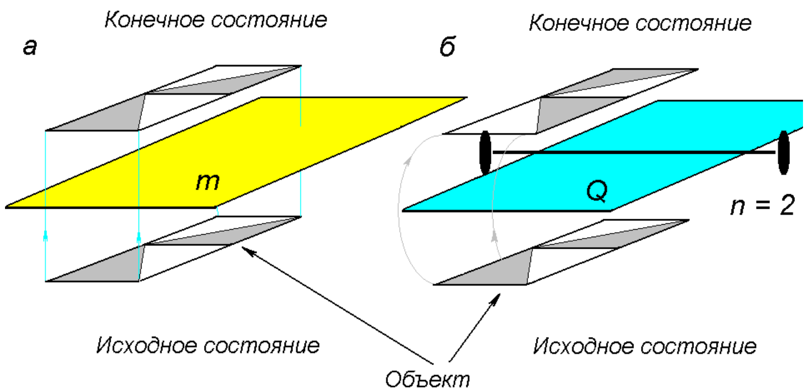

Рис.8

Инверсионной осью симметрии *n* - того порядка (обозначают как ось симметрии с чертой сверху, которая указывает на наличие центра симметрии - $\bar{n}$) называется ось симметрии *n* - того порядка с расположенным на ней центром инверсии. Являясь комбинацией двух элементов симметрии, для осей симметрии третьего, четвертого и шестого порядков инверсионная ось дает преобразования, которые невозможно получить другими элементами симметрии или их сочетаниями. По этой причине инверсионная ось выделена в отдельный элемент симметрии.

Элемент симметрии может породить несколько операций симметрии: ось симметрии третьего порядка - повороты на углы 120^0, 240^0 и 360^0; ось 6 - на 60^0, 120^0, 180^0, 240^0, 360^0. Таким образом, ось 6 порождает оси порядка 3 (углы поворота 120^0, 240^0 и 360^0) и 2 (углы поворота 180^0 и 360^0). Образование новых элементов симметрии особенно важно при сочетании нескольких элементов.

2.4. Матричное представление элементов симметрии

Операции симметрии могут быть описаны аналитически как преобразования системы координат. Это обусловлено тем, что при вращении или отражении какого - либо объекта есть две основные возможности описания совершённого действия: либо перевести объект в новое положение в исходной системе координат (при неподвижном наблюдателе фигуры), либо оставить объект неподвижным, а переместить наблюдателя этой фигуры, т.е. переместить систему координат. При первом подходе требуется записать математические выражения, описывающие перемещение каждой точки объекта в новое положение. В этом случае требуется также знание координат каждой точки объекта, что очень громоздко и требует больших затрат сил. Поэтому второй путь оказывается предпочтительнее, т.к. он технически проще и к тому же позволяет воспользоваться уже имеющимися методами аналитической геометрии. В этом случае точку, остающуюся неподвижной, выбирают за начало координат ортогональной системы $X_1\ X_2\ X_3$. Тогда действие любой операции точечной симметрии будет представлять собой перевод осей координат $X_1\ X_2\ X_3$ в новые ортогональные положения $X_1'\ X_2'\ X_3'$. Углы между новыми ($X_1'\ X_2'\ X_3'$) и старыми ($X_1\ X_2\ X_3$) осями определяются таблицей направляющих косинусов, которая и представляет собой матрицу преобразования координат.

Таблица косинусов

	X_1	X_2	X_3
X_1'	C_{11}	C_{12}	C_{13}
X_2'	C_{21}	C_{22}	C_{23}
X_3'	C_{31}	C_{32}	C_{33}

$$X_i' = C_{i1}X_1 + C_{i2}X_2 + C_{i3}X_3\ . \qquad (1)$$

Первый индекс в символе C_{ij} (i, j=1, 2, 3) относится к новым осям, а второй к старым. Для того, чтобы показать, что C_{ij} являются косинусами углов между новыми и старыми координатными осями, заменим в выражении (1) оси координат ортами по соответствующим осям и умножим полученное выражение скалярно на орт старой системы X_3 - $\overline{e_3}$ и рассмотрим полученный результат справа налево.

$$\left(\overline{e_i}' \cdot \overline{e_3}\right) = C_{i1}\left(\overline{e_1} \cdot \overline{e_3}\right) + C_{i2}\left(\overline{e_2} \cdot \overline{e_3}\right) + C_{i3}\left(\overline{e_3} \cdot \overline{e_3}\right). \qquad (2)$$

Скалярное произведение орта $\overline{e_3}$ на самого себя даст единицу, т.к. модуль орта равен единице и косинус угла равен 1. Далее, скалярное произведение орта $\overline{e_3}$ на орт $\overline{e_2}$ дает ноль, т.к. орты перпендикулярны друг другу, а косинус прямого угла равен нулю. По этой же причине будет равно нулю и первое слагаемое правой части выражения (2). Поэтому будем иметь

$$\left(\overline{e_i}' \cdot \overline{e_3}\right) = \left|\overline{e_i}'\right| \cdot \left|\overline{e_3}\right| \cdot cos\left(\overline{e_i}', \overline{e_3}\right) = 1 \cdot 1 \cdot cos\left(\overline{e_i}', \overline{e_3}\right) = C_{i3}. \qquad (3)$$

Так, C_{23} - это косинус угла между осями $X_2{}'$ и X_3. Угол поворота считается положительным, если при наблюдении из положительного конца оси в направлении к началу координат поворот от старой оси к новой происходит против часовой стрелки. В итоге матрица преобразования системы координат будет иметь вид:

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{1'1} & C_{1'2} & C_{1'3} \\ C_{2'1} & C_{2'2} & C_{2'3} \\ C_{3'1} & C_{3'2} & C_{3'3} \end{pmatrix}.$$

Проверить правильность составления матрицы можно, вычислив её определитель - он должен быть равен ± 1. Для преобразований первого рода (это повороты вокруг осей симметрии любого порядка, когда правая система координат остается правой, а левая - левой), определитель матрицы преобразования системы координат равен «+1», а для преобразования второго рода (это отражения в плоскости, в центре инверсии и инверсионные повороты) - «-1».

Обратное преобразование – переход от новой системы координат ($X_1{}' X_2{}' X_3{}'$) к старой ($X_1 X_2 X_3$) осуществляется с помощью преобразования

$$\overline{e}_k = C_{i'k} \cdot \overline{e}_i{}'$$

характеризуется матрицей, которая является обратной к матрице косинусов и транспонирована по отношению к ней:

$$C_{i'k} C_{kj'} = \delta_{i'j'} .$$

Такие матрицы называют **ортогональными**. Квадрат их определителя равен

$$\Delta = \det\left\|C_{i'k}\right\| = \pm 1 .$$

Результат последовательного произведения двух ортогональных преобразований: $\bar{e}_i \to \bar{e}_{i'} \to \bar{e}_{i''}$, можно записать в виде: $\bar{e}_{i''} = C_{i''k}\bar{e}_k$, причем матрица $C_{i''k}$ выражается через матрицы первого $C_{j'k}$ и второго преобразования $C_{i''j'}$ следующим образом:

$$C_{i''k} = C_{i''j'}C_{j'k}, \tag{4}$$

т.е. матрица, соответствующая преобразованию, проводимому раньше, ставится справа. Подчеркнем, что матрицы обеих преобразований составляются из одной исходной системы координат, которую принято брать правой. Некоммутативность матричного преобразования отражает некоммутативность ортогональных преобразований.

2.5. Вопросы для самостоятельной проверки знаний

1. Какие элементы точечной симметрии существуют? Перечислите их.
2. Опишите принцип действия каждого элемента симметрии.
3. Перечислите свойства элементов симметрии и правила их использования..
4. Почему элементы симметрии называют точечными?
5. Что такое стереографическая проекция элементов симметрии кристалла?
6. Опишите последовательность действий по получению стереографической проекции кристаллического многогранника.
7. Как ориентирована плоскость проекций относительно полюсов сферы проекций?
8. Почему для математического описания действия элемента точечной симметрии используют преобразование системы координат?
9. Опишите последовательность действий по получению матрицы преобразования какого-либо элемента точечной симметрии.
10. Каков геометрический смысл компонент матрицы преобразования элемента точечной симметрии?

3. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

3.1. Задание к лабораторной работе

3.1.1. Получите у преподавателя задание на лабораторную работу в виде перечисления последовательности применения к кристаллу нескольких элементов симметрии.

3.1.2. Составьте схему расчета результирующего преобразования кристалла с использованием матриц преобразования для действия каждого элемента симметрии из задания.

3.1.3. Получите матрицу преобразования системы корлинат каждого элемента симметрии из задания на лабораторную работу.

3.1.4. Получите матрицу результирующего преобразования симметрии кристалла путем перемножения матриц отдельных элементов симметрии в соответствии с выражением (4).

3.1.5. Составьте отчет о проделанной работе.

3.2. Схема получения матрицы отдельным элементом симметрии

Все задачи по определению матрицы преобразования системы координат, вызванного действием какого-либо элемента симметрии, сводятся к вычислению косинусов углов между новыми координатными осями и старыми. Работа по вычислению косинусов сильно упрощается, если нарисовать рисунок с изображением старой и новой систем координат и указать углы между ними. Затем записывать матрицу построчно: первая строка - это косинусы углов между осью X_1' и осями X_1 (первый элемент строки), X_2 (второй элемент строки) и X_3 (третий элемент строки). Вторая строка - косинусы углов между осью X_2' и осями X_1 (первый элемент строки), X_2 (второй элемент строки) и X_3 (третий элемент строки). Третья строка - косинусы углов между осью X_3' и осями X_1 (первый элемент строки), X_2 (второй элемент строки) и X_3 (третий элемент строки). Рассмотрим это на конкретном примере.

Пусть требуется записать матрицы преобразования для элементов симметрии, входящих в точечную группу *mmm*. Точечная группа *mmm* описывает симметрию элементарной ячейки кристаллов ромбической сингонии. Геометрической фигурой, имеющей такую группу симметрии, является прямоугольный параллелепипед (например, кирпич). Согласно правилам составления международного символа этой сингонии в кристалле имеется три плоскости симметрии, лежащие в координатных плоскостях. Другие элементы симметрии, входящие в данную группу, можно выявить, применяя пять свойств элементов симметрии. По первому свойству линия пересечения двух плоскостей - это ось симметрии с двойным углом: $90^0 \cdot 2 = 180^0$, т.е. это оси второго порядка. По второму свойству пересечение оси порядка 2 перпендикулярно (обозначим это состояние символом « $\perp$ ») плоскости симметрии *m* дает центр инверсии. Третье и четвертое свойства дополнительных элементов не дают.

Итак, имеем: 3 плоскости симметрии, 3 оси порядка 2 и центр симметрии *I*, т.е. 3 отражения в плоскости, 3 поворота на 180^0 и центр инверсии, а также поворот на 360^0 - поворот вокруг осей X_i (i = 1, 2, 3).

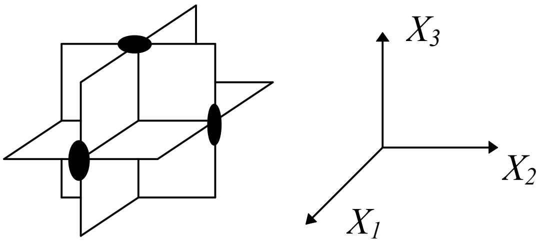

Рис. 9

Рассмотрим операцию отражения в плоскости в плоскости $X_1O\,X_2$ (или, сокращенно: $m \perp X_3$) (рис.9). В этом случае ось X_3 , отразившись в зеркале, сменит свое направление на обратное. Две другие же оси лежат в плоскости симметрии (в плоскости зеркала) и потому никак не изменят свою ориентацию. Эта ситуация с расположением осей координат новой и старой систем математически описывается следующим образом:

$$X_1{}' = X_1,\ X_2{}' = X_2,\ X_3{}' = -X_3.$$

Это можно записать в развернутом виде

$$X_1{}' = 1\cdot X_1 + 0\cdot X_2 + 0\cdot X_3,$$
$$X_2{}' = 0\cdot X_1 + 1\cdot X_2 + 0\cdot X_3,$$
$$X_3{}' = 0\cdot X_1 + 0\cdot X_2 - 1\cdot X_3.$$

В результате матрица преобразования системы координат плоскостью симметрии, перпендикулярной оси X_3 запишется в виде:

$$C_{ij}(m \perp X_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

4. ТРЕБОВАНИЯ К СОДЕРЖАНИЮ И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА

1. Отчет по лабораторной работе должен содержать следующие разделы:
   - цель лабораторной работы,
   - теоретическая часть,
   - описание расчетной части лабораторной работы,
   - конкретные данные на выполнение лабораторной работы,
   - полученные расчетные результаты в виде матриц преобразования,
   - объяснение полученных результатов на основе симметрии кристалла.
2. Отчет должен быть набран в редакторе Word и представлен в скрепленном виде. Схемы и графики выполнены в графическом редакторе и вставлены в текст отчета. Рекомендуемые параметры для набора текста: шрифт Arial – 12, поля со всех сторон по 2 см, полуторный интервал между строк.
3. В случае выполнения работы несколькими студентами в конце отчета должно быть указано конкретное участие каждого в выполнении работы.
4. В соответствии с рейтинговой системой качество выполнения лабораторной работы и оформления отчета оценивается в баллах, которые суммируются с баллами по контрольным работам.

5. ЛИТЕРАТУРА

1. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М: Наука, 1979. - 640с.

2. Най Дж. Физические свойства кристаллов. - М.: Мир, - 1967. - 388с.

3. Давыдов В.Н. Материалы электронной техники и методы их анализа. Томск, ТУСУР, 2013. - 132 с.