

# FIZYKA OŚRODKÓW CIĄGŁYCH

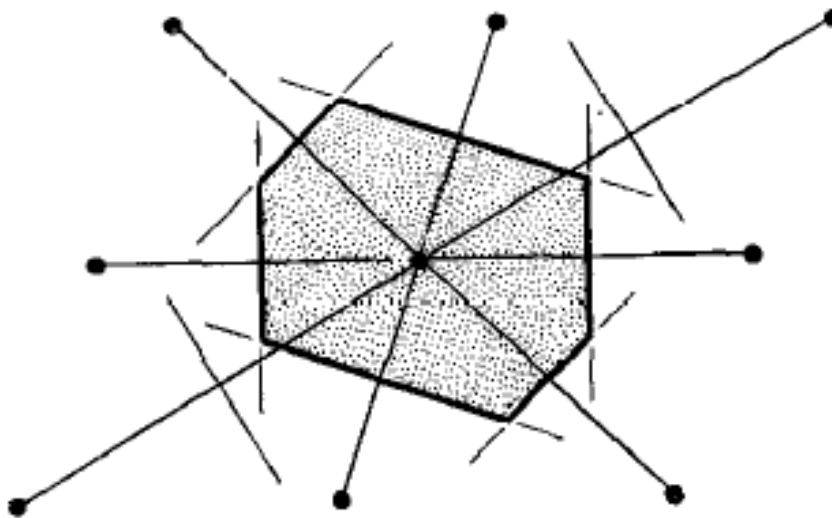
Vitalii Dugaev

*Katedra Fizyki i Inżynierii Medycznej  
Politechnika Rzeszowska*

---

Semestr zimowy, rok 2017/2018



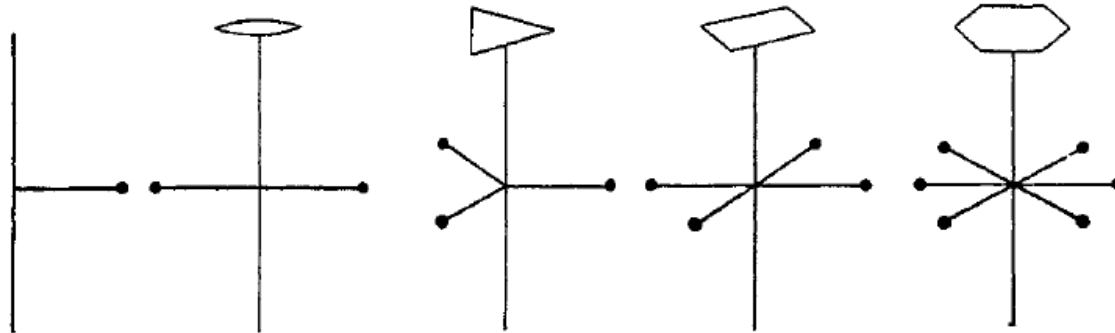


Komórka prosta Wignera-Seitza

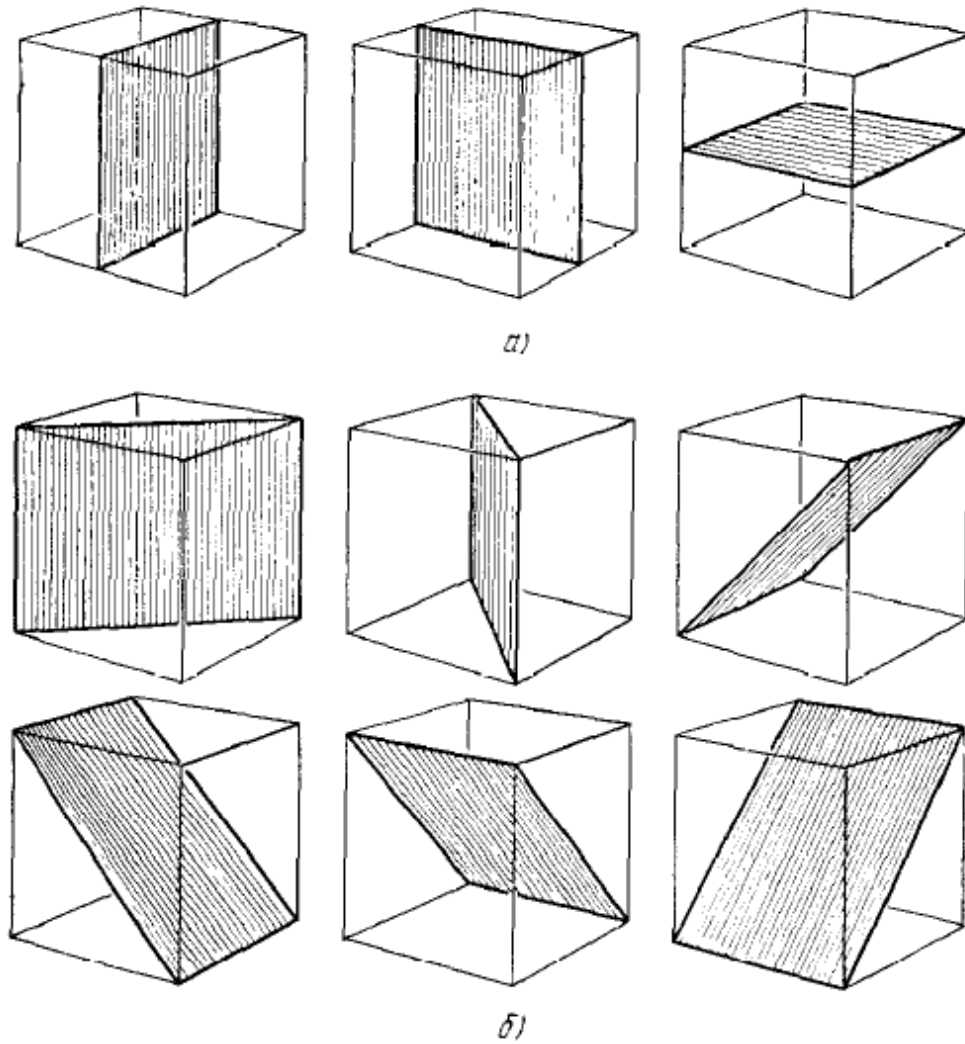
## Podstawowe rodzaje sieci

- Przykład przekształcenia symetrii: obrót wokół osi – sieć się nie zmienia, jeśli stosujemy obrót wokół jedno-, dwu-, trzy-, cztero- i sześciokrotnych osi symetrii ( $2\pi$ ,  $2\pi/2$ ,  $2\pi/3$ ,  $2\pi/4$ ,  $2\pi/6$ ) i jeśli pomnożymy obroty przez liczbę całkowitą

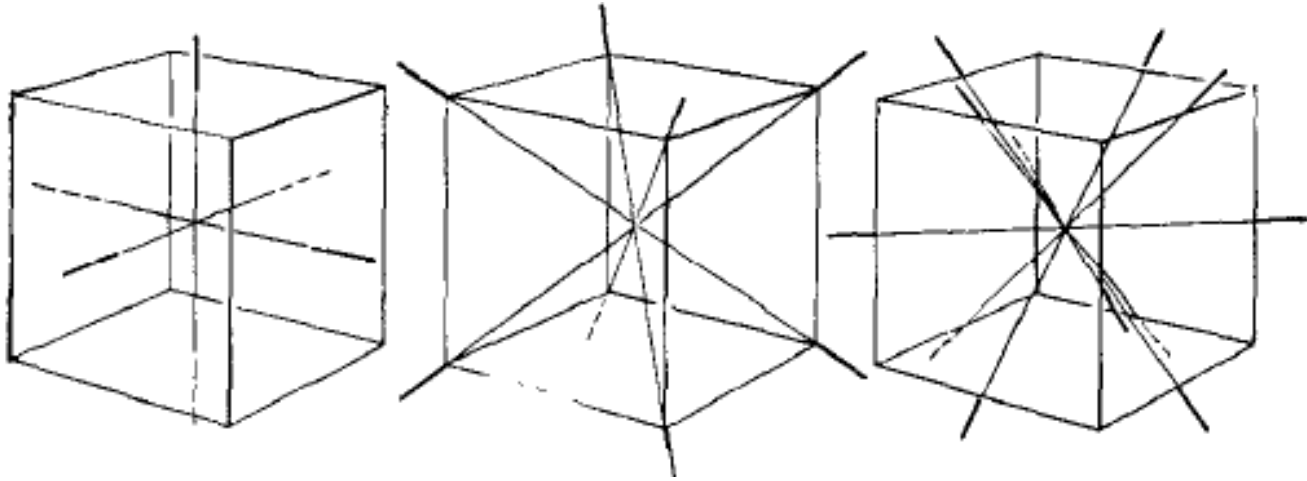
**Osie obrotu** są oznaczone symbolami 1, 2, 3, 4 i 6



- Może zachodzić także **odbicie zwierciadlane** względem płaszczyzny przechodzącej przez węzeł sieci
- **Grupa punktowa sieci** jest określona jako zbiór przekształceń symetrii, które nie zmieniają sieci, gdy zastosujemy obrót wokół punktu



Плоскости симметрии шестигранника



trzy czterokrotne  
osi sześcianu

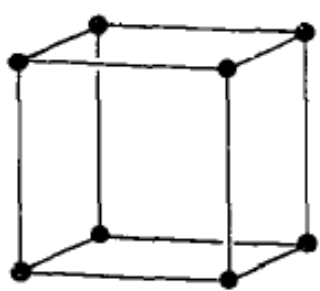
cztery trzykrotne  
osi sześcianu

sześć dwukrotnych  
osi sześcianu

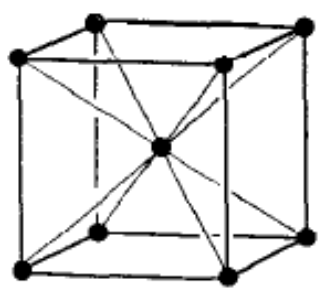
## Trójwymiarowe rodzaje sieci

- W przypadku trzech wymiarów symetria grup punktowych wymaga 14 różnych rodzajów sieci
- 14 rodzajów sieci zostało w sposób umowny podzielono na siedem **układów**, odpowiednio do siedmiu rodzajów umownych komórek elementarnych: ***trójskośny, jednoskośny, rombowy, tetragonalny, regularny, romboedryczny i heksagonalny***

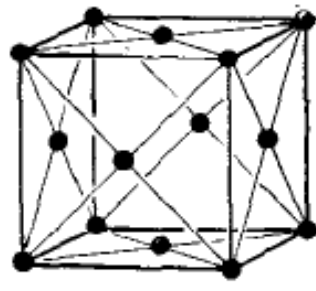
# Czternaście sieci Bravais'go (sieci przestrzennych)



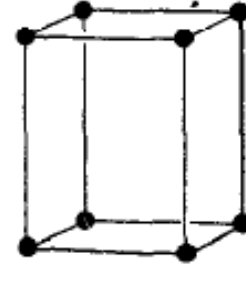
regularna P



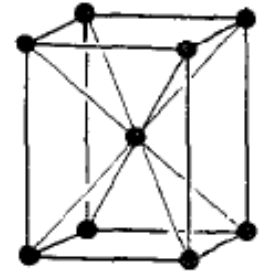
regularna I



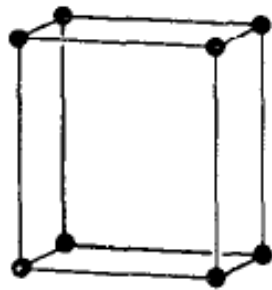
regularna F



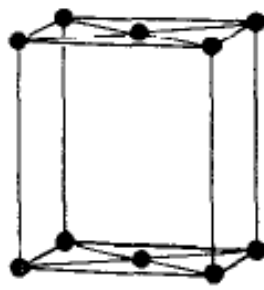
tetragonalna P



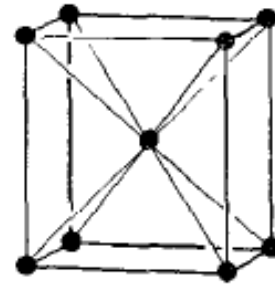
tetragonalna I



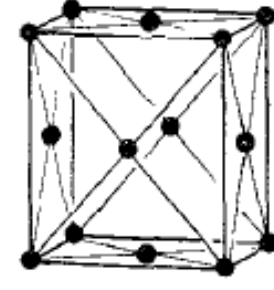
rombowa P



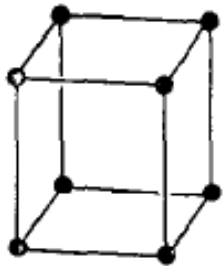
rombowa C



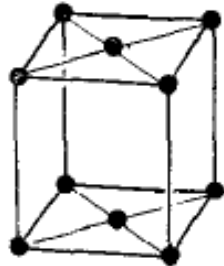
rombowa I



rombowa F



jednoskośna P



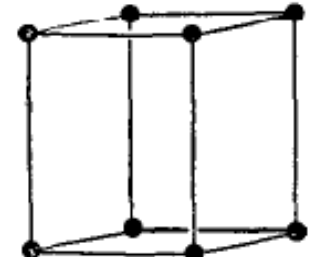
jednoskośna C



trójskośna P



romboedryczna



heksagonalna P

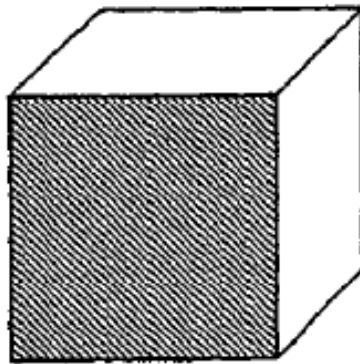


## Czternaście rodzaje sieci trójwymiarowych

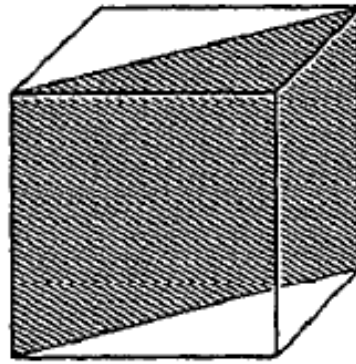
Układ	Liczba sieci w układzie	Symbole sieci	Parametry sieciowe komórki elementarnej
Trójskośny	1	$P$	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Jednoskośny	2	$P, C$	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Rombowy	4	$P, C, I, F$	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonalny	2	$P, I$	$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Regularny	3	$P, I, F$	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Romboedryczny	1	$R$	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
Heksagonalny	1	$P$	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

# Położenie i orientacja płaszczyzn w kryształach

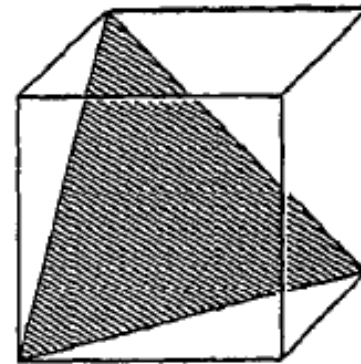
- Orientację płaszczyzny można określić przy pomocy **wskaźników Millera**
- W celu określenia wskaźników Millera należy:
  - znaleźć punkty przecięcia trzech osi  $a$ ,  $b$ ,  $c$  wyrażone w stałych sieci
  - odwrotność powyższych liczb sprowadzić do najmniejszych trzech liczb całkowitych mających wspólny mianownik
  - wynik należy podać w nawiasach  $(hkl)$



(100)



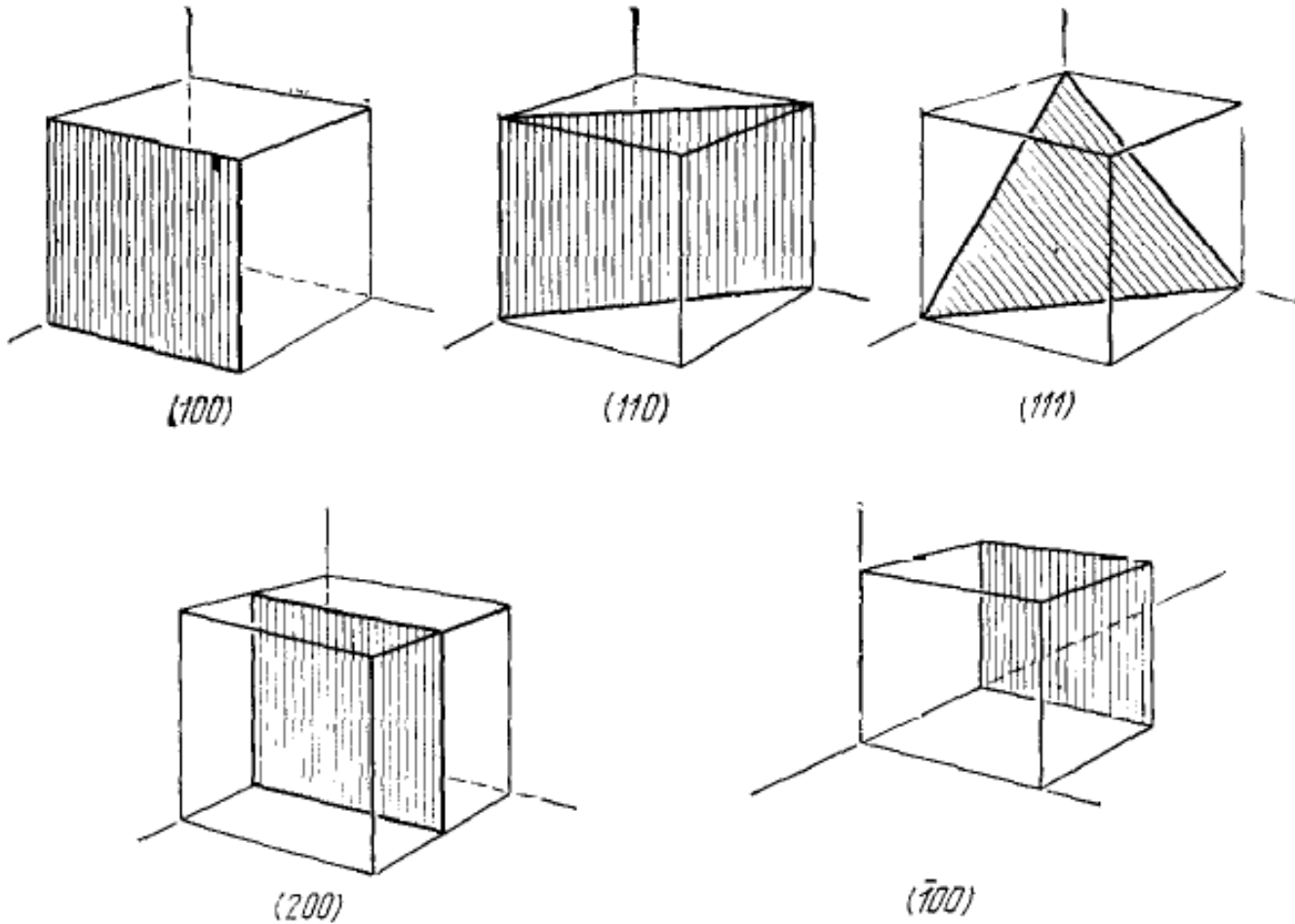
(110)



(111)

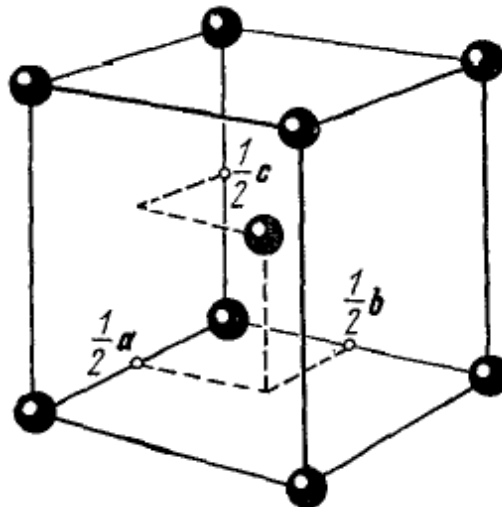
- Wskaźniki dotyczące kierunku w kryształach są wyrażane przy pomocy zbioru najmniejszych liczb całkowitych, mających te same stosunki jako składowe wektora w danym kierunku odniesione do wektorów osiowych
- Liczby całkowite pisane są w nawiasach kwadratowych  $[hkl]$
- Oś  $x$  w kryształach regularnych odpowiada kierunkowi  $[100]$ , oś  $y$  – kierunek  $[010]$

# Wskaźniki Millera ważniejszych płaszczyzn kryształu układu regularnego



## Położenie w komórce elementarnej

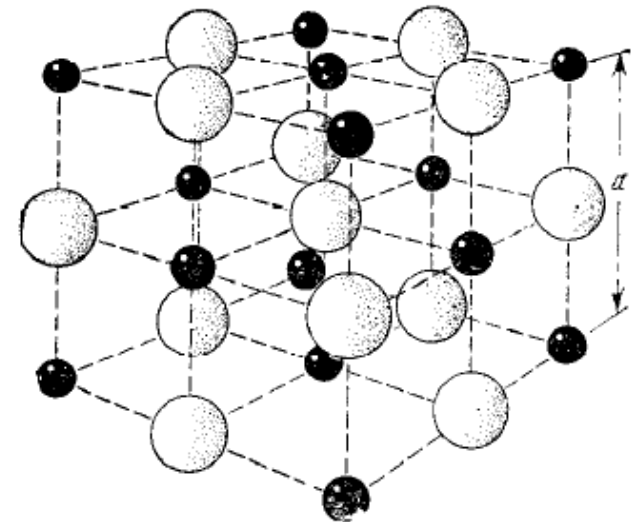
- Położenie punktów w komórce elementarnej jest określone przy pomocy współrzędnych  $u, v, w$  określających położenie atomów, przy czym każda współrzędna stanowi część długości osi  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  w kierunku danej współrzędnej, przyjmując początek układu w narożach komórki elementarnej
- Współrzędne punktu środkowego komórki są więc  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ , natomiast położenie punktów w środkach ścian:  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$



## Proste struktury krystaliczne

### Struktura krystaliczna chlorku sodu

- Sieć Bravais'go jest siecią regularną centrowana powierzchniowo
- Baza zawiera jeden atom Na i jeden atom Cl
- W elementarnym sześcianie znajdują się 4 cząsteczki NaCl, których atomy zajmują pozycję:  
 Na:  $0\ 0\ 0$ ,  $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$ ,  $\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$ ,  $0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$   
 Cl:  $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$ ,  $0\ 0\ \frac{1}{2}$ ,  $0\ \frac{1}{2}\ 0$ ,  $\frac{1}{2}\ 0\ 0$
- Każdy atom jednego rodzaju ma w swoim najbliższym otoczeniu 6 atomów innego rodzaju



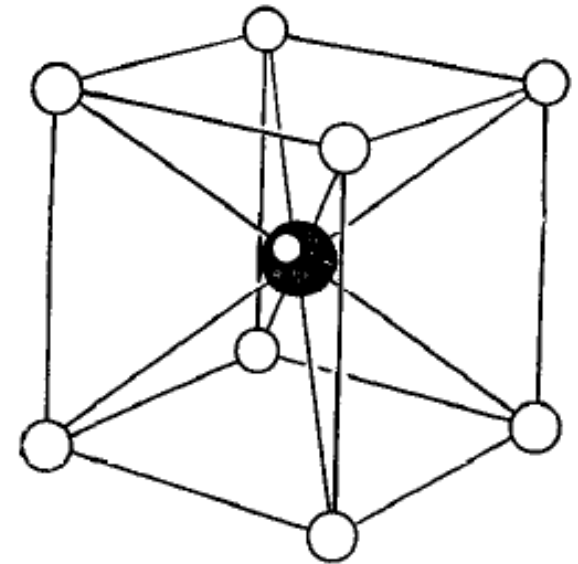
NaCl

## Struktura krystaliczna chlorku cezu

- Sieć przestrzenna jest prostą siecią regularną
- W komórce elementarnej znajduje się jedna cząsteczka z atomem w położeniach centrowanych przestrzennie:

Cs: 0 0 0

Cl:  $\frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}$

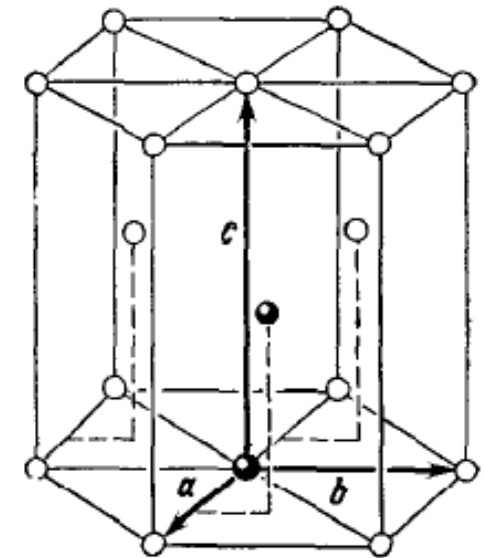
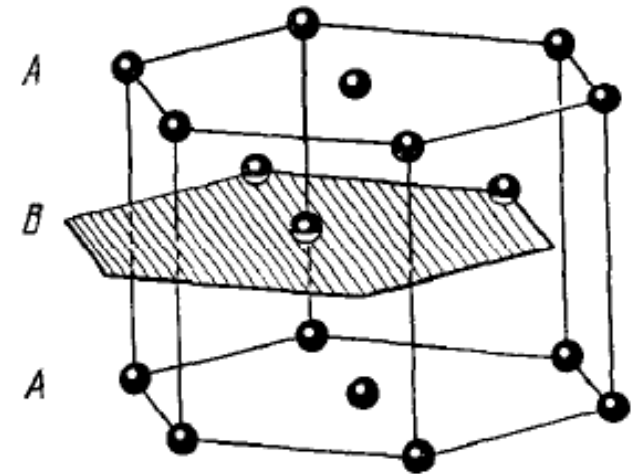
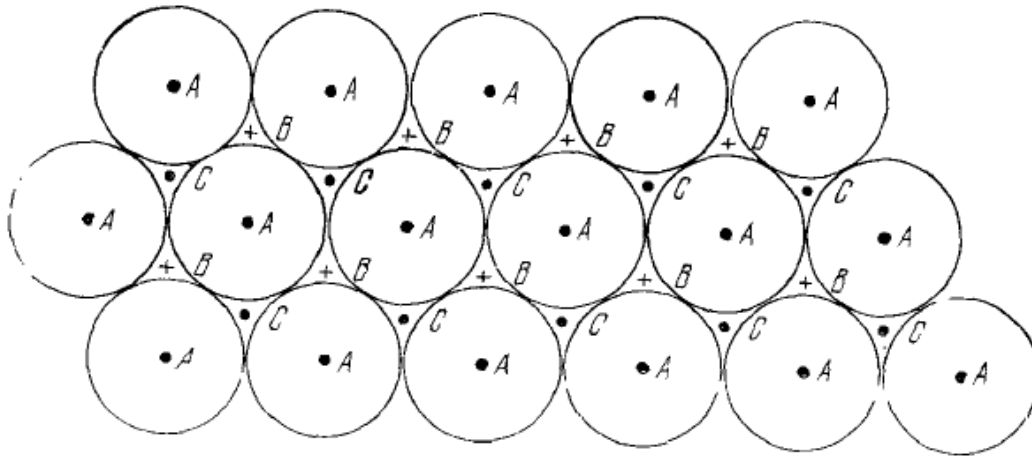


CsCl

# Struktura heksagonalna o najgęstszym upakowaniu $A_3$

15

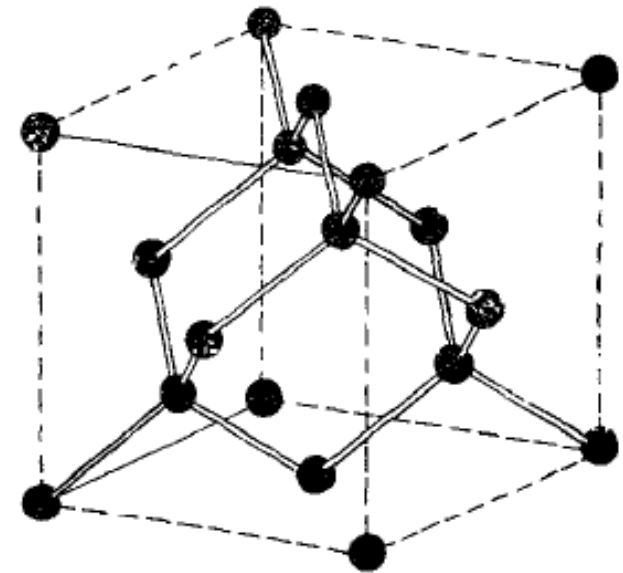
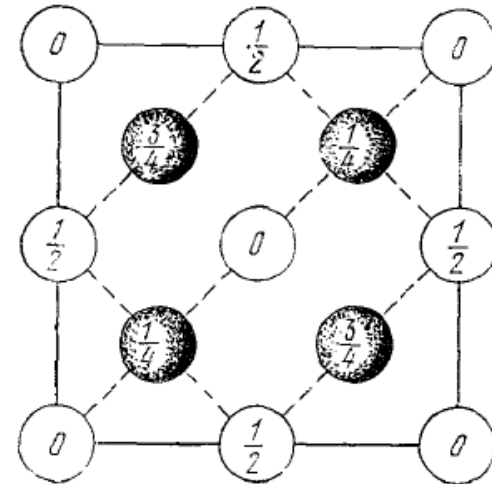
- Sieć przestrzenna jest prostą siecią heksagonalną, mającej dwa takie same atomy w każdym węźle sieci





## Struktura diamentu

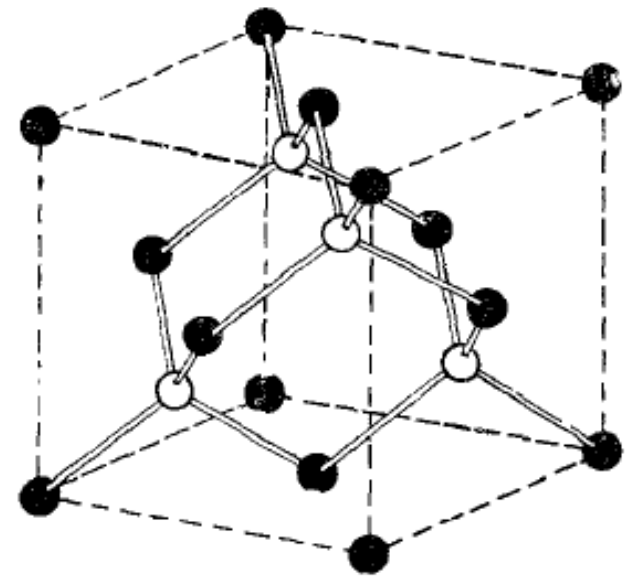
- Sieć przestrzenna diamentu jest siecią regularną powierzchniowo centrowaną
- Prosta baza zawiera dwa takie same atomy w położeniach  $0\ 0\ 0$ ,  $\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}$



Struktura krystaliczna diamentu, przedstawiająca wiązania w konfiguracji tetraedrycznej

## Regularna struktura siarczku cynku

- Regularna struktura siarczku cynku pokrywa się ze strukturą diamentu wówczas, gdy atomy Zn umieszczone są na jednej sieci  $A_1$ , a atomy S na drugiej sieci  $A_1$



ZnS

## Matematyka: Grupy

Zbiór elementów  $G$ , nazywany jest grupą  $G$ , jeżeli ma on następujące własności:

- Zdefiniowana jest **operacja mnożenia (działania grupowego)**: jeśli  $g_1$  i  $g_2$  – dwa dowolne elementy grupy  $G$ , to można wprowadzić pewną relację  $g_1 g_2 = g_3$ , gdzie  $g_3$  – element grupy  $G$

W ogólnym przypadku  $g_1 g_2 \neq g_2 g_1$ .

Grupa jest nazywana **komutatywną (przemienne, abelową)** jeśli dla wszystkich elementów  $g_1 g_2 = g_2 g_1$

Przy mnożeniu zawsze jest wykonany warunek łączności mnożenia  
 $(g_1 g_2) g_3 = g_1 (g_2 g_3)$

- Istnieje jeden **element jednostkowy**  $E$ , taki, że  $gE = Eg = g$  dla wszystkich  $g$
- Istnieje element  $g^{-1}$  **odwrotny** do  $g$ , taki, że  $gg^{-1} = E$

Przykład: Liczby całkowite z działaniem dodawania tworzą grupę abelową (operacją dodawania algebraicznego jest mnożenie grupowe)

Przykład: Przekształcenia symetrii w kryształach tworzą grupę

Przykład: Przekształcenia translacji tworzą grupę abelową

- Grupa może być ***skończona albo nieskończona***
- Grupa może być ***ciągła albo nieciągła***

- Przekształcenia symetrii kryształu tworzą **grupę symetrii kryształu**
- Przekształcenia translacji tworzą **grupę translacji**, która jest **podgrupą grupy symetrii kryształu**
- Przekształcenia obrotowe wokół pewnej osi  $C_n$  (obrót o kąt  $2\pi/n$ ), odbicia w płaszczyźnie  $\sigma$ , przekształcenia zwierciadlano-obrotowe  $S_n=C_n\sigma_h$  ( $\sigma_h$  – odbicie w płaszczyźnie prostopadłej do osi obrotu), oraz operacja inwersji  $I=S_2=C_2\sigma_h$  stanowią elementy **grup punktowych**
- Przy operacjach w grupach punktowych **przynajmniej jeden punkt ciała zostaje na swoim miejscu**

## Grupy punktowe

$C_n$  – grupa obrotów wokół osi  $n$ -go rzędu

$S_{2n}$  – grupa obrotów wokół osi zwierciadlano-obrotowych rzędu  $2n$

$C_{nh}$  – do osi symetrii  $n$ -go rzędu dołączamy prostopadłą do niej płaszczyznę symetrii

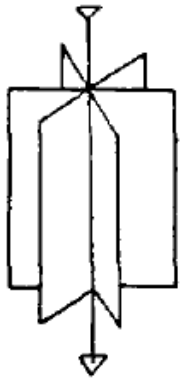
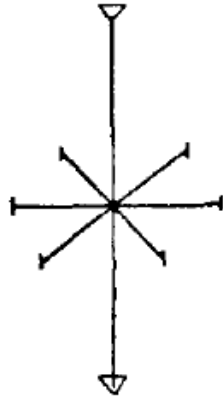
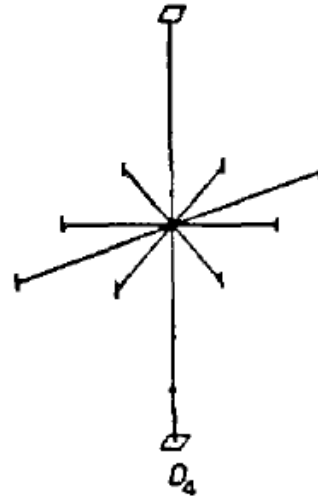
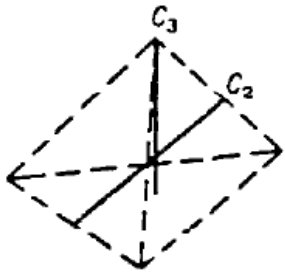
$C_{nv}$  – do osi symetrii  $n$ -go rzędu dołączamy przechodzącą przez tę oś płaszczyznę symetrii

$D_n$  – do osi symetrii  $n$ -go rzędu dodajemy prostopadłą do niej oś 2-go rzędu

$T$  (grupa czworościanu) – zbiór osi symetrii czworościanu

$O$  (grupa ośmiościanu) – zbiór osi symetrii sześciangu

$O_h$  – grupa wszystkich przekształceń symetrii sześciangu,  $O_h = O \times C_i$  ( $C_i$  - grupa złożona z dwóch elementów  $I$  i  $E$ )

 $C_{3v}$  $C_{4v}$  $D_3$  $D_4$ 

7

