

Projekt pn. „*Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych*”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Krystalochemia

Laboratorium

Dr Anna Kozakiewicz

UMK Toruń 2014

Projekt pn. „*Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych*”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

1.	Podstawowe pojęcia w krystalografii	3
2.	Grupy translacyjne Bravais	9
3.	Symetria w morfologii kryształów	13
4.	Rzut stereograficzny	19
5.	Układy: trójskośny, jednoskośny i rombowy	25
6.	Identyfikacja i opis modeli z układu trójskośnego, jednoskośnego i rombowego	30
7.	Układy: tetragonalny i regularny	34
8.	Identyfikacja i opis modeli z układu tetragonalnego i regularnego	39
9.	Układy: trygonalny i heksagonalny	42
10.	Identyfikacja i opis modeli z układu trygonalnego i heksagonalnego	46
11.	Grupy przestrzenne	50
12.	Identyfikacja substancji metodą proszkową DSH	55
13.	Wskaźnikowanie dyfraktogramu DSH dla układu regularnego	57
14.	Obliczanie stałej sieci ze zdjęcia metodą obracanego kryształu	59
15.	Wygaszenia systematyczne	61
	Literatura	65

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 1: Podstawowe pojęcia w krystalografii

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ stosunek osiowy,
- ❖ symbolika: punktów, prostych i płaszczyzn,
- ❖ pas, oś pasa, równanie pasowe,
- ❖ komórka elementarna, czworościan zasadniczy,
- ❖ układy krystalograficzne,

Wstęp teoretyczny:

Czworościan zasadniczy tworzą ściany kryształu, które przecinają się wzdłuż osi układu współrzędnych, zamknięte ścianą jednostkową. Ściana jednostkowa przecina dodatnie części osi krystalograficznych, odcinając na nich równą ale nieznaną liczbę jednostek osiowych. Jednostki te wykorzystuje się do wyznaczania położenia węzłów, prostych i płaszczyzn w sieci przestrzennej. Oznacza się je symbolami a_0 , b_0 , c_0 , odpowiednio dla osi X, Y i Z.

Znając kształt czworościany zasadniczego kryształu (stosunek osiowy $a:b:c$ i kąty α , β , γ między osiami krystalograficznymi) można przyporządkować ciała krystaliczne do jednego z 7 układów krystalograficznych:

Układy	Parametry komórki elementarnej	
Trójskośny	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha \neq 90^\circ$	$a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$
Jednoskośny	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	$a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$
Rombowy	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$
Tetragonalny	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a_0 = b_0 \neq c_0$
Regularny	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a_0 = b_0 = c_0$
Trygonalny lub kom. romboedryczny	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$a_0 = b_0 \neq c_0$
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a_0 = b_0 = c_0$
Heksagonalny	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$a_0 = b_0 \neq c_0$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Opisanie położenia węzłów, prostych i płaszczyzn w sieci przestrzennej wymaga wprowadzenia jednoznacznych symboli:

- położenie **węzła** zapisuje się jako wektor wypadkowy (kombinacja liniowa wektorów jednostkowych),

$$\mathbf{R} = x\mathbf{a}_0 + y\mathbf{b}_0 + z\mathbf{c}_0$$

Symbolem węzła są trzy współrzędne x y z , podające liczbę jednostek osiowych odpowiednio na osiach X, Y i Z.

- położenie **prostej sieciowej** zapisuje się w nawiasie kwadratowym $[uvw]$, wystarczy znać współrzędne dwóch węzłów A: $x_1 y_1 z_1$ i B: $x_2 y_2 z_2$ leżących na tej prostej

$$\mathbf{u} = x_2 - x_1; \quad \mathbf{v} = y_2 - y_1; \quad \mathbf{w} = z_2 - z_1;$$

- położenie płaszczyzny zapisuje się w nawiasie okrągłym (hkl) – symbol Millera, wskaźnik Millera określa ile razy odcinki odcięte na osiach przez pierwszą z równoległych płaszczyzn mieszczą się w jednostkach osiowych a_0 , b_0 , c_0 .

W symbolach węzłów, prostych i płaszczyzn przecinki używane są tylko wtedy, gdy występuje w symbolu liczba dwucyfrowa i istnieje możliwość dwuznaczności. W przypadku gdy w symbolu występuje liczba ujemna, minus zapisujemy nad liczbą. Liczby w symbolu prostych i płaszczyzn należą do liczb całkowitych.

Pas jest to zbiór płaszczyzn, które są równoległe do wspólnego kierunku $[uvw]$, zwanego **osią pasa**. Z **prawa pasowego Weissa** wynika, że każda ściana kryształu należy przynajmniej do dwóch pasów, natomiast oś pasa jest wyznaczona przez dwie ściany.

Wykorzystując **równanie pasowe** można określić czy dana ściana (hkl) należy do osi pasa $[uvw]$.

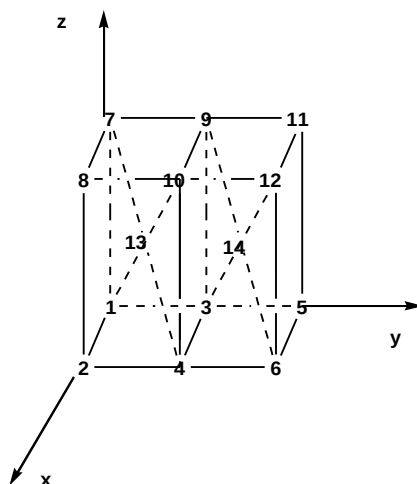
$$hu + kv + lw = 0$$

Znając symbole płaszczyzn $(h_1k_1l_1)$ i $(h_2k_2l_2)$, można obliczyć symbol osi pasa $[uvw]$, do którego one należą. Podobnie można wyznaczyć symbol płaszczyzny (hkl) , która należy do dwóch pasów o osiach $[u_1v_1w_1]$ i $[u_2v_2w_2]$.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zadania:

Zadanie 1. Określić współrzędne x , y , z wszystkich oznaczonych węzłów w tetragonalnej sieci przestrzennej, przedstawionej na rysunku:



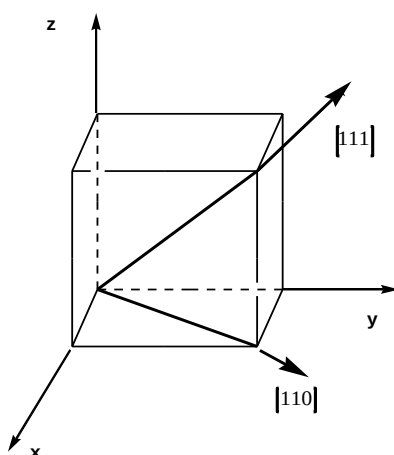
Przykładowe rozwiązanie:

Węzeł 6 ma współrzędne: 120, węzeł 11 ma współrzędne: 021.

Zadanie 2. Wykreślić kierunki o symbolach $[010]$, $[130]$, $[112]$ oraz $[\bar{1} \bar{2} 1]$ w kryształach z układu: regularnego, tetragonalnego i rombowego.

Przykładowe rozwiązanie:

Wykreśl kierunki: $[110]$ i $[111]$ w układzie regularnym:



Zadanie 3. Obliczyć symbol $[uvw]$ prostej przechodzącej przez punkty A i B (dwa węzły w sieci przestrzennej), jeśli znane są współrzędne $x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2$ tych węzłów: węzeł A $0 \ 1 \ \frac{1}{2}$, węzeł B $\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2}$.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Przykładowe rozwiązanie:

Oblicz symbol $[uvw]$ prostej przechodzącej przez punkty C: $0 \ 1 \ \frac{1}{2}$ i D: $\frac{1}{2} \ 1 \ 0$:

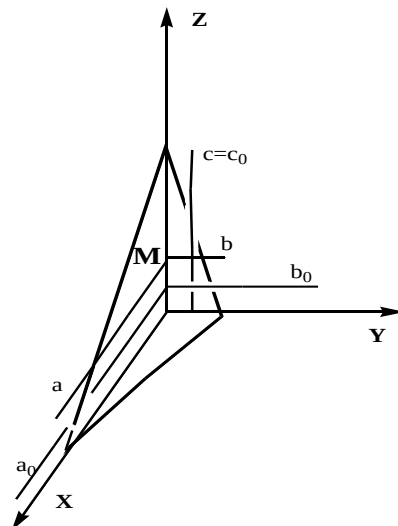
$$u = x_2 - x_1 = \frac{1}{2} - 0 = \frac{1}{2}$$

$$v = y_2 - y_1 = 1 - 1 = 0$$

$$w = z_2 - z_1 = 0 - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}$$

$$[uvw] = [10\bar{1}]$$

Zadanie 4. Obliczyć wskaźniki Millera płaszczyzny M, której położenie w układzie osi krystalograficznych X, Y, Z przedstawia rysunek. Podać symbol (hkl) płaszczyzny M, $a=2\text{\AA}$, $a_0=3\text{\AA}$, $b=1\text{\AA}$, $b_0=4\text{\AA}$, $c=c_0=4\text{\AA}$,



Przykładowe rozwiązanie:

Obliczyć wskaźniki Millera (hkl) płaszczyzny M, $a=1\text{\AA}$, $a_0=3\text{\AA}$, $b=2\text{\AA}$, $b_0=3\text{\AA}$, $c=c_0=2\text{\AA}$.

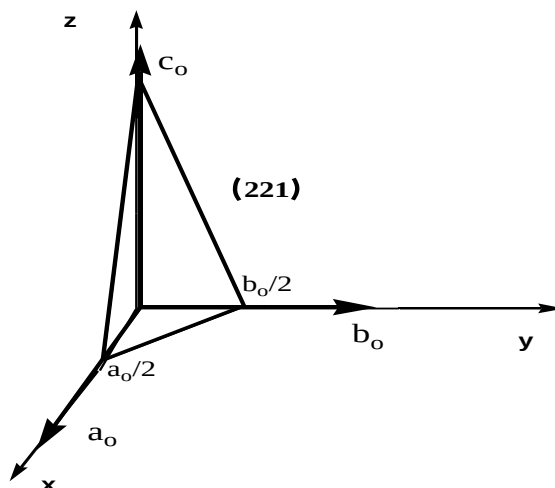
Jednostki osiowe a_0 , b_0 , c_0 wynoszą odpowiednio $3\text{\AA}$, $3\text{\AA}$, $2\text{\AA}$. Płaszczyzna M odcina na osiach krystalograficznych odcinki $a=1\text{\AA}$, $b=2\text{\AA}$, $c=2\text{\AA}$. Dzieląc kolejno wartości jednostek przez wartości odpowiedniego dla danej osi parametru płaszczyzny M, otrzymuje się następujące wartości liczbowe: $h = a_0/a = 3$, $k = b_0/b = 3/2$, $l = c_0/c = 1$, $hkl \in C, (hkl) = (632)$

Zadanie 5. Narysować w regularnej komórce elementarnej płaszczyzny o symbolach (110) , (210) , (101) , $(12\bar{1})$ i $(\bar{2} \ 10)$.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Przykładowe rozwiązanie:

Narysować w regularnej komórce elementarnej płaszczyznę o symbolu (221).



Zadanie 6. Wyznacz symbole Millera płaszczyzn, które odcinają na osiach krystalograficznych znane odcinki, wyrażone w jednostkach osiowych:

A: $\frac{1}{2}a_o, \frac{1}{2}b_o, 1c_o$; B: $\infty, 1b_o, \frac{2}{5}c_o$; C: $\frac{2}{3}a_o, \infty, \frac{1}{6}c_o$; D: $\frac{1}{3}a_o, \frac{2}{5}b_o, \infty$;

Zadanie 7. Obliczyć wskaźniki (hkl) płaszczyzny należącej równocześnie do pasów o osiach [110] i [001]. Wykazać równaniem pasowym, że płaszczyzna ta może należeć również do pasa, którego osią jest prosta [111].

Zadanie 8. Wyznaczyć kierunek [uvw] osi pasa, do którego należą ściany o symbolach:

- | | |
|----------------------------------|--------------------------------|
| a) $(20\bar{1})$ i $(\bar{6}41)$ | c) $(\bar{1}1\bar{2})$ i (001) |
| b) $(41\bar{5})$ i $(1\bar{1}0)$ | d) $(20\bar{3})$ i (111) |

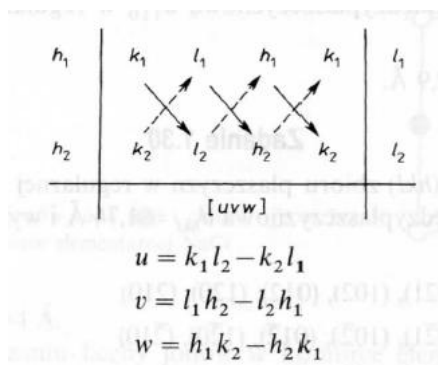
Przykładowe rozwiązanie:

Wyznaczyć kierunek osi pasa [uvw], do którego należą ściany o symbolach (123) i $(0\bar{1}1)$.

Zadanie można rozwiązać posługując się schematem:

- napisać pod sobą wskaźniki każdej ściany, dwukrotnie w jednym wierszu,
- odrzucić pierwszą i ostatnią kolumnę,
- obliczyć [uvw], sumując na krzyż minory utworzonej macierzy.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych” realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki



$$(h_1 k_1 l_1) = (123), (h_2 k_2 l_2) = (0\bar{1}1)$$

$$u = 2 \cdot 1 - 3 \cdot (-1) = 4$$

$$v = 3 \cdot 0 - 1 \cdot 1 = 2$$

$$w = 1 \cdot (-1) - 0 \cdot 2 = -1$$

$$[uvw] = [42\bar{1}]$$

Zadanie 10. Sprawdź czy płaszczyzny o symbolach (-110) , (-311) i $(-1\bar{3}2)$ należą do wspólnego pasa. Jeśli tak, podać symbol $[uvw]$ osi tego pasa.

Zadanie 11. Jaki jest symbol osi pasa $[uvw]$, do którego należą ściany o wskaźnikach (112) i (341) .

Zadanie 12. Jakie są wskaźniki Millera płaszczyzny należącej do pasów osi:

a) $[123]$ i $[\bar{1}1\bar{1}]$

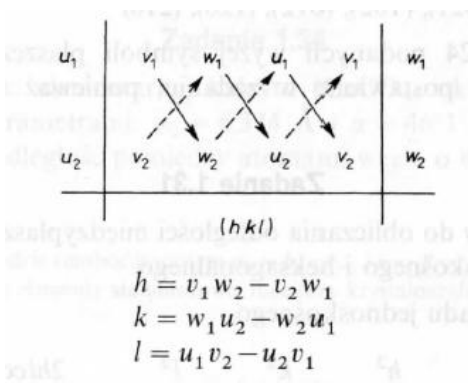
b) $[101]$ i $[21\bar{1}]$

c) $[012]$ i $[1\bar{1}0]$

Przykładowe rozwiązanie:

Jakie są wskaźniki Millera płaszczyzny należącej do pasów osi $[113]$ i $[201]$.

Należy postępować analogicznie jak w przypadku wyznaczania kierunku $[uvw]$ do którego należą ściany o znanych symbolach.



$$[u_1 v_1 w_1] = [113], [u_2 v_2 w_2] = [201]$$

$$h = 1 \cdot 1 - 0 \cdot 3 = 1$$

$$k = 3 \cdot 2 - 1 \cdot 1 = 5$$

$$l = 1 \cdot 0 - 1 \cdot 2 = -2$$

$$(hkl) = (15\bar{2})$$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 2: Grupy translacyjne Bravais

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ definicja grupy,
- ❖ translacje,
- ❖ typy komórek Bravais,
- ❖ współrzędne węzłów,
- ❖ liczba węzłów w komórce,
- ❖ typy sieci translacyjnych,

Pomoce naukowe: modele 14 typów translacyjnych sieci przestrzennych.

Wstęp teoretyczny:

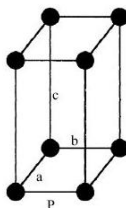
August Bravais udowodnił możliwość istnienia w trzech wymiarach 14 rodzajów translacyjnych sieci przestrzennych pod nazwą sieci Bravais'go. Sieć translacyjna Bravais'go określa charakter okresowego uporządkowania w przestrzeni powtarzających się elementów strukturalnych kryształu (atomów, jonów lub cząsteczek). Każdy z 14 rodzajów sieci przestrzennych Bravais'go ma swoją charakterystyczną komórkę elementarną, która ze względu na parametry sieci przestrzennej jest podporządkowana jednemu z 7 układów krystalograficznych. Komórki elementarne mogą zawierać węzły tylko w narożach oraz dodatkowo w środku geometrycznym, na środku dwóch równoległych lub na środkach wszystkich ścian.

Układy krystalograficzne	Typy komórek
Trójskośny	P
Jednoskośny	P, C
Rombowy	P, I, F, C (A, B)
Tetragonalny	P, I
Regularny	P, I, F
Trygonalny lub Romboedryczny	R
Heksagonalny	P

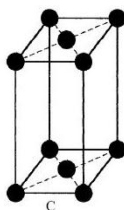
Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Wyróżnia się cztery typy komórek:

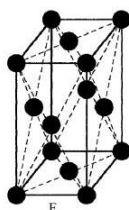
- Komórka **prymitywna (P)** zawiera węzły tylko w narożach. W skład komórki typu P wchodzi $\frac{1}{8}$ każdego węzła z naroża, ponieważ każdy węzeł należy do ośmiu sąsiadujących komórek, dlatego do komórki należy jeden węzeł: $N = \frac{1}{8} \cdot 8 = 1$.



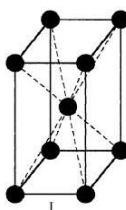
- Komórka o **centrowanych podstawach (A, B lub C)** zawiera węzły w narożach oraz w środku przeciwległych ścian. Gdy węzły znajdują się w środku ścian, które przecinają oś X to komórkę oznaczamy literą A, gdy oś Y – typ B, oś Z – typ C. Tego typu komórki zawierają dwa węzły: $N = \frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 2 = 2$.



- Komórka **ściennie centrowana (F)** posiada węzły w narożach i w środku każdej ściany. Komórka ta ma cztery węzły: $N = \frac{1}{8} \cdot 8 + 3 \cdot (\frac{1}{2} \cdot 2) = 4$.



- Komórka **przestrzennie centrowana (I)** posiada węzły w narożach oraz w centrum geometrycznym. Komórka posiada dwa węzły: $N = \frac{1}{8} \cdot 8 + 1 = 2$

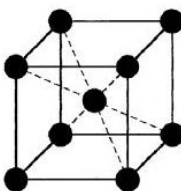


Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zadania:

Zadanie 1. Przeanalizować otrzymany model: przyporządkować model do jednego z 7 układów krystalograficznych, określić typ komórki translacyjnej Bravais. Podać współrzędne wszystkich węzłów oraz liczbę węzłów należących do tej komórki. Sprawdzić, czy spełnione są warunki aby istniała grupa translacyjna.

Przykładowa analiza:



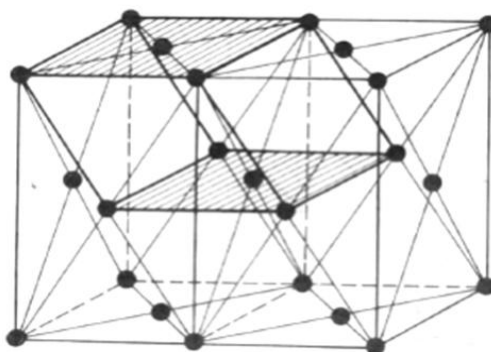
Układ krystalograficzny	<i>Regularny</i>
Typ komórki	<i>Komórka przestrzennie centrowana, typ I</i>
Współrzędne węzłów	$[\vec{000}][\vec{100}][\vec{010}][\vec{001}][\vec{110}][\vec{011}][\vec{101}][\vec{111}]\left[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right]$
Liczba węzłów należących do komórki (N)	2
Sprawdzenie warunków na istnienie grupy: 1. Przemienność: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$ 2. Element neutralny: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{e} = \mathbf{e} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}$ 3. Element przeciwny: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^{-1} = \mathbf{a}^{-1} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}$ 4. Łączność: $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c} = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$ Symbol $\cdot$ oznacza dodawanie wektorów.	1. $\mathbf{a}[\vec{010}] \mathbf{b}[\vec{100}]$ $[\vec{010}] \cdot [\vec{100}] = [\vec{110}]$ $[\vec{100}] \cdot [\vec{010}] = [\vec{110}]$ 2. <i>element neutralny</i> $[\vec{000}]$ 3. $\mathbf{a}[\vec{010}] \mathbf{a}^{-1}[\vec{0-10}]$ 4. $\mathbf{a}[\vec{110}] \mathbf{b}[\vec{100}] \mathbf{c}\left[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right]$ $([\vec{110}] \cdot [\vec{100}]) \cdot \left[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right] = \left[\frac{5}{2}\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right]$ $[\vec{110}] \cdot ([\vec{100}] \cdot \left[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right]) = \left[\frac{5}{2}\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right]$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zadanie 2. Wykazać na rysunku, dlaczego w przypadku układu jednoskośnego nie ma translacyjnych komórek elementarnych Bravais typu F oraz typu I.

Przykładowe rozwiązanie:

Zestawiając dwie komórki ściennie centrowane (typu F), można wybrać w inny sposób komórkę elementarną otrzymując komórkę o centrowanych podstawach (typu C).



Zadanie 3. Wykazać na rysunku, dlaczego w przypadku układu tetragonalnym nie ma translacyjnych komórek elementarnych Bravais typu C oraz typu F.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 3: Symetria w morfologii kryształów

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ elementy symetrii w grupach punktowych, symbol Grotha,
- ❖ macierzowe operatory 3x3 przekształceń,
- ❖ reguły składania operacji symetrii,
- ❖ reguły wyboru osi krystalograficznych XYZ,
- ❖ grupy punktowe (układy: trójskośny, jednoskośny i rombowy), symbolika międzynarodowa i Schoenflisa,

Wstęp teoretyczny:

W morfologii kryształów wyróżnia się trzy główne typy elementów symetrii:

- symetria względem punktu: **środek symetrii**,
- symetria względem prostej: **oś symetrii**,
- symetria względem płaszczyzny: **płaszczyzna symetrii**.

Środek symetrii – punkt położony wewnątrz kryształu, który ma tę własność, że na dowolnej prostej przeprowadzonej przez ten punkt, w jednakowej od niego odległości, znajdują się jednakowe pod względem geometrycznym i fizycznym punkty kryształu.

Oś symetrii – prosta, wokół której powtarzają się jednakowe części kryształu, przy czym te części mogą się powtarzać co kąt $\alpha = 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 360^\circ$, liczbę $n = 360/\alpha$ nazywa się krotnością osi symetrii; w kryształach możliwe są osie jedno-, dwu-, trzy- cztero- i sześciokrotne.

Płaszczyzny symetrii – płaszczyzny dzielące kryształ na dwie części pozostające względem siebie w takim stosunku jak przedmiot do swego obrazu w zwierciadle płaskim.

Reguły składania operacji symetrii:

1. $L_{2n} \cdot C = P \perp L_n$
 $P \cdot C = L_{2 \perp} P$
 $P \cdot L_{2n} = C$
2. $L_n \cdot L_{2 \perp} L_n = n L_{2 \perp} L_n$ dwie L_2 pod kątem $180^\circ/n$
3. $L_n \cdot P_{\parallel} = n P_{\parallel} L_n$ dwie P pod kątem $180^\circ/n$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

<i>Nazwa</i>	<i>Symbol Grotha</i>	<i>Symbol graficzny</i>	<i>Macierz</i>
Tożsamość	E	brak	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Środek symetrii	C	•	$\begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$
Płaszczyzna symetrii	P_{⊥x} lub P₍₁₀₀₎	lub	$\begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
	P_{⊥y} lub P₍₀₁₀₎		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
	P_{⊥z} lub P₍₀₀₁₎		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$
Oś symetrii	L₂ x lub L₂[100]	○	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$
	L₂ y lub L₂[010]		$\begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$
	L₂ z lub L₂[001]		$\begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zadania:

Zadanie 1. Wyprowadzać grupy punktowe dla 3 układów: trójskośny, jednoskośny i rombowy. Wykorzystaj tabelę mnożenia grupowego oraz reguły składania operacji symetrii.

1. Układ trójskośny – możliwe elementy symetrii {E, C}

Zbiór elementów symetrii	Tabela mnożenia grupowego									
{E}	<table><tr><td></td><td>E</td></tr><tr><td>E</td><td></td></tr></table>		E	E						
	E									
E										
{E, C}	<table><tr><td></td><td>E</td><td>C</td></tr><tr><td>E</td><td></td><td></td></tr><tr><td>C</td><td></td><td></td></tr></table>		E	C	E			C		
	E	C								
E										
C										

Przykładowe wyprowadzenie grupy punktowej:

Tworzymy tabelę mnożenia grupowego wpisując w wierszu i w kolumnie elementy symetrii, które mają wchodzić w skład grupy punktowej.

	C
C	

W celu uzupełnienia tabeli mnożenia grupowego należy wymnożyć macierze dla elementu symetrii, który znajduje się wierszu (C) i kolumnie (C) a następnie określić jakiemu elementowi symetrii odpowiada otrzymana z wymnożenia macierz.

$$C \cdot C = E \quad \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Otrzymana macierz odpowiada tożsamości E. Kolejnym krokiem jest wpisanie w wierszu i w kolumnie nowego elementu symetrii (E). Postępować analogicznie: w celu uzupełnienia całej tabeli. W przypadku uzyskania kolejnego nowego elementu symetrii należy go dopisać w wierszu i w kolumnie i uzupełnić tabelę.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

	C	E
C	<i>E</i>	<i>C</i>
E	<i>C</i>	<i>E</i>

Grupy punktowe dla układu trójskośnego:

Elementy grupy punktowej	Symbol międzynarodowy	Symbol Schoenflisa
{E}	1	C_1
{E, C}	-1	C_i

2. Układ jednoskośny - możliwe elementy symetrii {E, C, $P_{(010)}$, $L_{2[010]}$ }

Zbiór elementów symetrii	Tabela mnożenia grupowego																												
$\{E, P_{(010)}\}$	<table><tr><td></td><td>E</td><td>$P_{(010)}$</td></tr><tr><td>E</td><td></td><td></td></tr><tr><td>$P_{(010)}$</td><td></td><td></td></tr></table>					E	$P_{(010)}$	E			$P_{(010)}$																		
	E	$P_{(010)}$																											
E																													
$P_{(010)}$																													
$\{E, L_{2[010]}\}$	<table><tr><td></td><td>E</td><td>$L_{2[010]}$</td></tr><tr><td>E</td><td></td><td></td></tr><tr><td>$L_{2[010]}$</td><td></td><td></td></tr></table>					E	$L_{2[010]}$	E			$L_{2[010]}$																		
	E	$L_{2[010]}$																											
E																													
$L_{2[010]}$																													
$\{E, L_{2[010]}, C, P_{(010)}\}$ wykorzystanie I reguły składania	<table><tr><td></td><td>E</td><td>$L_{2[010]}$</td><td>C</td><td>$P_{(010)}$</td></tr><tr><td>E</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>$L_{2[010]}$</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>C</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td>$P_{(010)}$</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></table>					E	$L_{2[010]}$	C	$P_{(010)}$	E					$L_{2[010]}$					C					$P_{(010)}$				
	E	$L_{2[010]}$	C	$P_{(010)}$																									
E																													
$L_{2[010]}$																													
C																													
$P_{(010)}$																													

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Przykładowe wyliczenie:

Elementy symetrii wchodzące w skład grupy punktowej: $\{E, L_{2[010]}, C, P_{(010)}\}$. Tworzymy tabelę mnożenia grupowego wpisując w kolumnach i w wierszach wszystkie elementy symetrii. Uzupełniamy tabelę. W tym celu trzeba wymnożyć macierze dla elementów symetrii zapisanych w wierszach przez macierze dla elementów symetrii zapisanych w kolumnach. Przykładowo wybierzmy element symetrii, który znajduje się w 2 wierszu ($L_{2[010]}$) i 3 kolumnie (C) a następnie określmy jakiemu elementowi symetrii odpowiada otrzymana z wymnożenia macierz ($P_{(010)}$).

$$L_{2[y]} \cdot C = P_{(010)} \perp L_{2[y]} \quad \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Uzupełnić tabelę mnożenia grupowego. Postępujemy analogicznie w celu uzupełnienia całej tabeli. W przypadku uzyskania nowego elementu symetrii należy go dopisać w wierszu i w kolumnie i uzupełnić tabelę.

	E	$L_{2[010]}$	C	$P_{(010)}$
E				
$L_{2[010]}$			$P_{(010)}$	
C		$P_{(010)}$		
$P_{(010)}$				

Grupy punktowe dla układu jednoskośnego:

Elementy grupy punktowej	Symbol międzynarodowy	Symbol Schoenflisa
$\{E, P_{(010)}\}$	m	C_s
$\{E, L_{2[010]}\}$	2	C_2
$\{E, L_{2[010]}, C, P_{(010)}\}$	$2/m$	C_{2h}

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

3. Układ rombowy – możliwe elementy symetrii $\{E, C, P_{(010)}, P_{(100)}, P_{(001)}, L_{2[010]}, L_{2[100]}, L_{2[001]}\}$

Zbiór elementów symetrii	Tabela mnożenia grupowego								
{E, L _{2[100]} , L _{2[010]} , L _{2[001]} }		E	L _{2[010]}	L _{2[100]}	L _{2[001]}				
	E								
	L _{2[010]}								
	L _{2[100]}								
	L _{2[001]}								
{E, P ₍₀₁₀₎ , P ₍₁₀₀₎ , L _{2[001]} }		E	P ₍₀₁₀₎	P ₍₁₀₀₎	L _{2[001]}				
	E								
	P ₍₀₁₀₎								
	P ₍₁₀₀₎								
	L _{2[001]}								
{E, L _{2[010]} , L _{2[100]} , L _{2[001]} , C, P ₍₀₁₀₎ , P ₍₁₀₀₎ , P ₍₀₀₁₎ }		E	P ₍₀₁₀₎	P ₍₁₀₀₎	P ₍₀₀₁₎	C	L _{2[001]}	L _{2[010]}	L _{2[100]}
	E								
	P ₍₀₁₀₎								
	P ₍₁₀₀₎								
	P ₍₀₀₁₎								
	C								
	L _{2[001]}								
	L _{2[010]}								
	L _{2[100]}								

Grupy punktowe dla układu rombowego:

Elementy grupy punktowej	Symbol międzynarodowy	Symbol Schoenflisa
$\{E, L_{2[010]}, L_{2[100]}, L_{2[001]}\}$	222	D ₂
$\{E, P_{(010)}, P_{(100)}, L_{2[001]}\}$	mm2	C _{2v}
$\{E, C, P_{(010)}, P_{(100)}, P_{(001)}, L_{2[010]}, L_{2[100]}, L_{2[001]}\}$	$^2/m^2/m^2/m$	D _{2h}

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 4: Rzut stereograficzny

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ standardowa projekcja,
- ❖ współrzędne sferyczne,
- ❖ rzutowanie,
- ❖ zasady pomiaru kątów,
- ❖ symbol graficzny: prostych i ścian,
- ❖ elementy symetrii – symbole graficzne i rzutowanie,

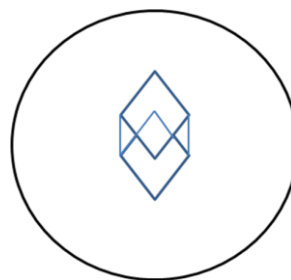
Pomoce naukowe: kalka techniczna A4, siatka Wulfa, ołówek i gumka.

Wstęp teoretyczny:

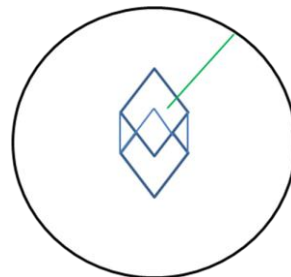
Rzut stereograficzny ma na celu przedstawienie geometrii kryształu (bryły) na płaszczyźnie. Projekcja ta pozwala nie tylko przedstawić w prostej postaci monokryształ z jego związkami kątowymi, zależnościami pasowymi, elementami symetrii i orientacją w przestrzeni, ale także umożliwia pomiar kątów między kierunkami i płaszczyznami w kryształach.

Zasady rzutu stereograficznego

Kryształ umieszczamy w środku kuli.

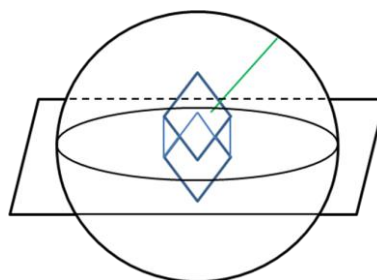


Prowadzimy normalną (prostą prostopadłą) do ściany kryształu, którą chcemy zrzutować – otrzymujemy punkt na sferze.

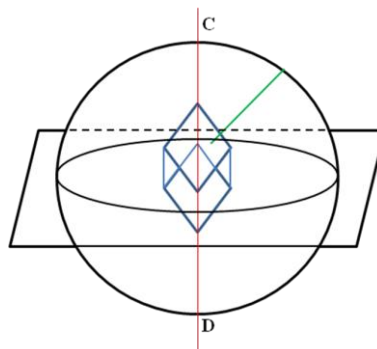


Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

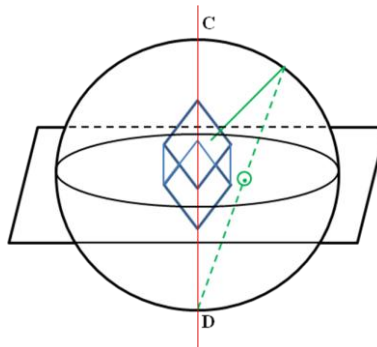
Przeprowadzamy płaszczyznę przez środek
kuli.



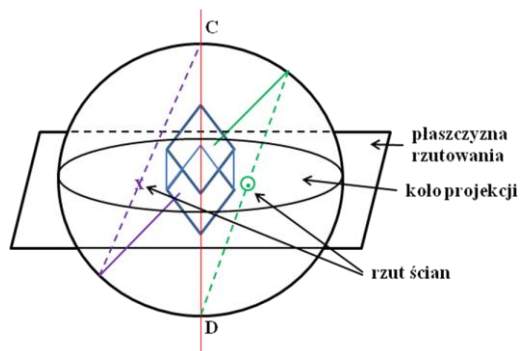
Prowadzimy prostą prostopadłą do tej
płaszczyzny – otrzymujemy dwa bieguny C i D
(tzw. punkty oczne).



Punkty z górnej półkuli łączymy z dolnym
biegunem D – na rzucie ścianę zaznaczymy:



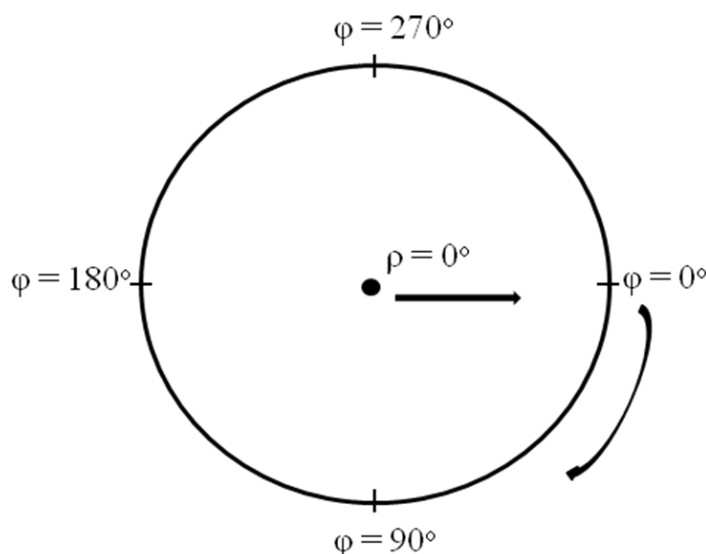
Punkty z dolnej półkuli łączymy z górnym
biegunem C – na rzucie ścianę zaznaczymy:



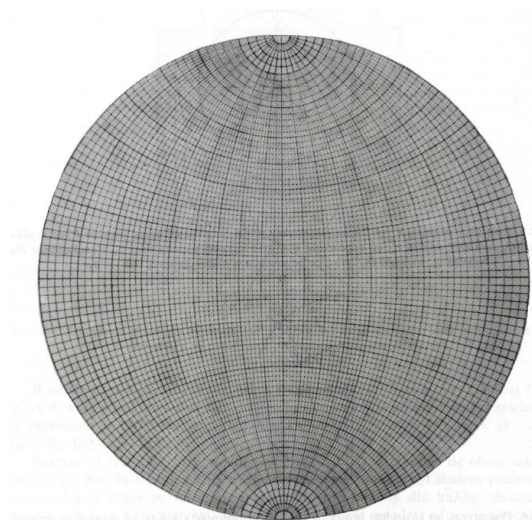
Na powierzchnię sfery można nałożyć siatkę równoleżników i południków, co pozwala na określenie dokładnego położenia każdej ściany dla której podane są dwie współrzędne kątowe: azymut φ i odległość biegunową ρ . Wartość kąta φ mierzona jest zgodnie z kierunkiem ruchu wskazówek zegara (0-360°). Druga współrzędna kątowa to odległość biegunowa - ρ , która liczona

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

jest od środka koła projekcji w kierunku krawędzi ($0-180^\circ$) (Rys. 1). **Siatki Wulfa** (Rys. 2) jest narzędziem służącym do obliczeń krystalograficznych i konstrukcji geometrycznych związanych z wykorzystaniem rzutu stereograficznego. Siatka ta jest rzutem stereograficznym powierzchni kuli podzielonej co 2° kołami wielkimi (południkami) i kołami małymi (równoleżnikami) na jedną z płaszczyzn południkowych.



Rys. 1.



Rys. 2. Siatka Wulfa

Zadania

Zadanie 1. Zrzutować na płaszczyznę projekcji następujące punkty: A_1 ($\varphi = 30^\circ$, $\rho = 52^\circ$) i A_2 ($\varphi = 170^\circ$, $\rho = 130^\circ$).

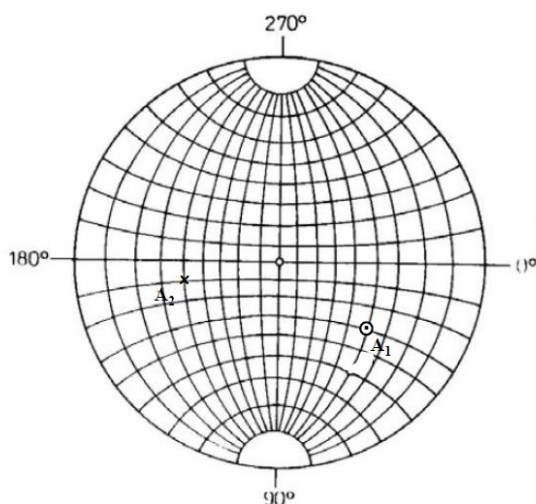
Rozwiązanie:

Przy konstrukcji geometrycznej nakładamy przezroczystą kalkę techniczną na siatkę Wulfa, na kalce rysujemy linią ciągłą koło projekcji, zaznaczamy środek siatki, od którego mierzymy odległość biegunową oraz wartości azymutu: 0° , 90° , 180° i 270° . Na rysunku 1 przedstawiono kalkę rysunkową przygotowaną do pracy na siatce Wulfa.

Aby zrzutować punkt A_1 zaczynamy od zaznaczenia na kalce punktu pomocniczego, który odpowiada wartości azymutu dla tego punktu ($\varphi = 30^\circ$). Następnie przesuwamy kalkę względem siatki Wulfa do momentu gdy pomocniczy punkt znajdzie się na prostej siatki (np. na równiku). Wzdłuż tej prostej, od środka siatki odliczamy wartość odległości biegunowej ($\rho = 52^\circ$). Punkt A_1 w projekcji sferycznej znajduje się na górnej półsfery, dlatego punkt ten na płaszczyźnie projekcji oznaczony jest

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

kropeczką w kółeczku. Dla punktu A_2 wartość kąta ρ jest $> 90^\circ$, wartość tego kąta na płaszczyźnie projekcji odlicza się od środka siatki wzdłuż promienia określającego wartość azymutu ($\phi = 170^\circ$) do okręgu koła projekcji ($\rho = 90^\circ$), następnie wracamy po tym samym promieniu w kierunku środka siatki, odliczamy brakujące 40° . Punkt A_2 na projekcji sferycznej znajduje się na dolnej półsfery, dlatego punkt ten na płaszczyźnie projekcji oznaczony jest krzyżykiem. Rzut stereograficzny punktów A_1 i A_2 przedstawia rysunek 3.



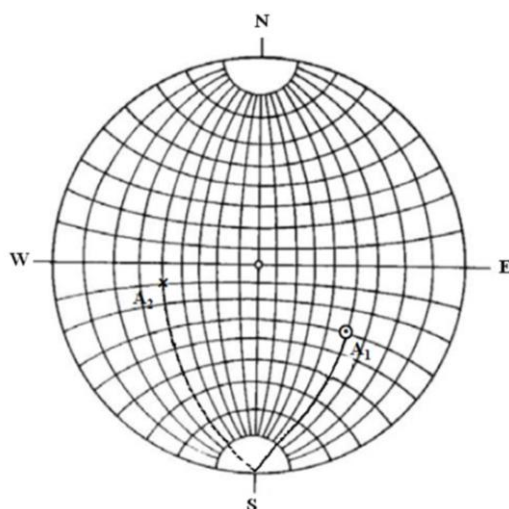
Rys. 3

Zadanie 2. Zmierz odległość kątową między punktami A_1 i A_2 (zadanie 1) na płaszczyźnie projekcji stereograficznej.

Rozwiązanie:

Przygotuj kalkę techniczną do pracy na siatce Wulfa (Rys. 1). Punkt A_1 w projekcji sferycznej znajduje się na górnej półsfery, a punkt A_2 leży na dolnej. Odległość kątową między tymi punktami mierzy się wzdłuż jednego koła wielkiego. Najpierw należy naprowadzić punkty na koła wielkie, położone symetrycznie po obu stronach średnicy NS. Miarą odległości kątowej między punktami A_1 i A_2 jest odległość mierzona po tym wspólnym kole wielkim (Rys. 4). Odległość kątowa pomiędzy punktami A_1 i A_2 wynosi 140° .

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych” realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki



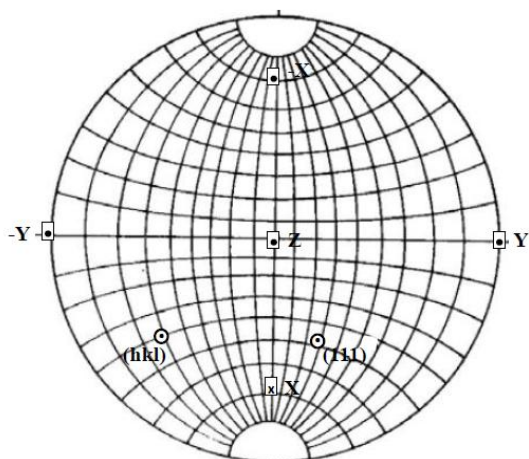
Rys. 4

Zadanie 3. Wyznaczyć na płaszczyźnie projekcji stereograficznej następujące punkty: P_1 ($\varphi_1 = 57^\circ$ i $\rho_1 = 71^\circ$), P_2 ($\varphi_2 = 130^\circ$ i $\rho_2 = 56^\circ$), P_3 ($\varphi_3 = 200^\circ$ i $\rho_3 = 116^\circ$), P_4 ($\varphi_4 = 220^\circ$ i $\rho_4 = 108^\circ$), P_5 ($\varphi_5 = 80^\circ$ i $\rho_5 = 90^\circ$) i P_6 ($\varphi_6 = 260^\circ$ i $\rho_6 = 90^\circ$). Zmierzyć kąty pomiędzy wszystkimi możliwymi parami tych punktów.

Zadanie 4. Zrzutować na płaszczyznę projekcji normalną do ściany jednostkowej (111) ($\varphi = 61,5^\circ$, $\rho = 60^\circ$) oraz normalną do ściany P ($\varphi = 138^\circ$, $\rho = 66^\circ$). Wykonać rzut osi XYZ w układzie jednoskośnym. Obliczyć wskaźniki Millera (hkl) dla nieznanej ściany P.

Rozwiązanie:

Przygotowujemy kalkę techniczną do pracy na siatce Wulfa (Rys. 1). Rzutujemy ścianę (111), (hkl) oraz wychodne osi XYZ (układ jednoskośny: $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$).



Rys. 5

$\rho > 90^\circ$ ☐ $\times$
 $\rho < 90^\circ$ lub $= 90^\circ$ ☐ $\bullet$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Wskaźniki Millera ściany kryształu (hkl) można wyznaczyć z wartości kątów, jakie tworzy normalna do tej ściany z osiami krystalograficznymi XYZ , w tym celu korzystamy ze wzoru,

$$h:k:l = \frac{\cos P_x}{\cos(111)_x} : \frac{\cos P_y}{\cos(111)_y} : \frac{\cos P_z}{\cos(111)_z}$$

w którym P_x, P_y, P_z oznaczają kąty, jakie tworzy normalna do ściany P o nieznanym symbolu (hkl) z osiami krystalograficznymi XYZ , natomiast $(111)_x, (111)_y, (111)_z$ – kąty, jakie tworzy normalna do ściany jednostkowej (111) z osiami XYZ .

Dokonujemy pomiaru kątów pomiędzy normalną do ściany (hkl) a osiami XYZ oraz pomiędzy normalną do ściany (111) a osiami XYZ . Biegun P tworzy z osiami XYZ kąty odpowiednio $61^\circ, 132^\circ$ i 66° , natomiast ściana jednostkowa tworzy z osiami XYZ kąty odpowiednio $54^\circ, 66^\circ$ i 60° .

$$h:k:l = \frac{\cos 61^\circ}{\cos 54^\circ} : \frac{\cos 132^\circ}{\cos 66^\circ} : \frac{\cos 66^\circ}{\cos 60^\circ}$$

$$h:k:l = 0,82 : (-1,64) : 0,81$$

Po podzieleniu ilorazów przez 0,81 dostajemy wskaźniki Millera dla ściany P :

$$(hkl) = (\bar{1}21)$$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 5: Układy: trójskośny, jednoskośny i rombowy

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ grupy punktowe (reguły składania) – układ trójskośny, jednoskośny i rombowy,
- ❖ rzut stereograficzny: osie XYZ, koła pasowe, elementy symetrii,
- ❖ rzut i wskaźnikowanie ścian (hkl),

Wstęp teoretyczny:

Znajomość grupy symetrii dostarcza pełnej informacji o wszystkich operacjach symetrii możliwych do zastosowania na obiekcie. Zbiór wszystkich punktowych operacji symetrii danego obiektu, wraz z działaniem polegającym na składaniu tych operacji tworzą grupę.

Reguły tworzenia symboliki międzynarodowej grup punktowych:

1. Układ trójskośny – nie ma potrzeby wprowadzania ustaleń.
2. Układ jednoskośny – jedno miejsce w symbolu, które odpowiada symetrii kierunku Y.
3. Układ rombowy – trzy miejsca w symbolu, kolejno symetria kierunku: X, Y, Z.

Układy krystalograficzne	Parametry komórki elementarnej	Grupy punktowe	
		symbol międzynarodowy	symbol Schoenflisa
Trójskośny	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$	1	C_1
		$\bar{1}$	C_i
Jednoskośny	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ $a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$	2	C_2
		m	C_s
		$2/m$	C_{2h}
Rombowy	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$	222	D_2
		mm2	C_{2v}
		$2/m \ 2/m \ 2/m$	D_{2h}

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

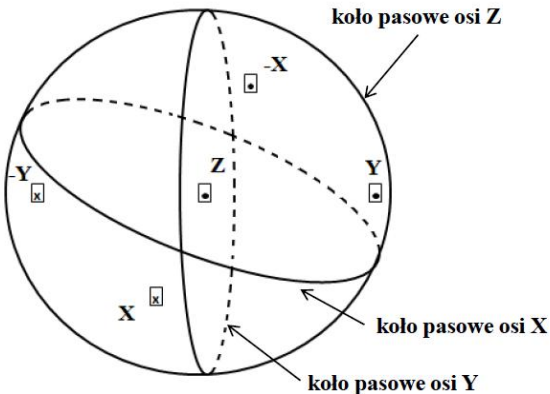
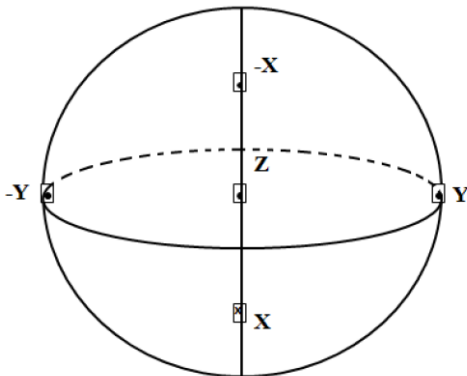
Reguły wyboru osi układu XYZ:

1. C 000
2. $L_n \parallel XYZ$
3. $P \perp XYZ$
4. Krawędzie $\parallel XYZ$

Wybór osi krystalograficznych w układach: trójskośnym, jednoskośnym i rombowym:

Układ trójskośny	Układ jednoskośny	Układ rombowy
$XYZ \parallel$ krawędzi w kryształach	$Y \parallel L_2$ lub $\perp P$ $XZ \parallel$ krawędzi w kryształach $\beta > 90^\circ$	$XYZ \parallel L_2$ lub $\perp P$

Rzut stereograficzny osi i kół pasowych:

Układy	Wartość kątów	Rzut osi XYZ i kół pasowych
Trójskośny	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ np. $\alpha (YZ) = 80^\circ$ $\beta (XZ) = 120^\circ$ $\gamma (XY) = 110^\circ$	
Jednoskośny	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ np. $\beta (XZ) = 120^\circ$	

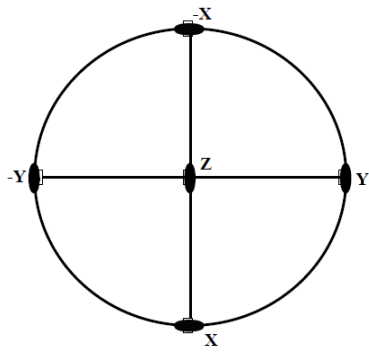
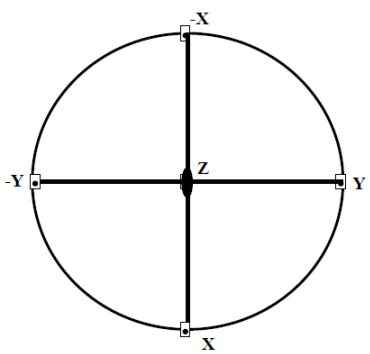
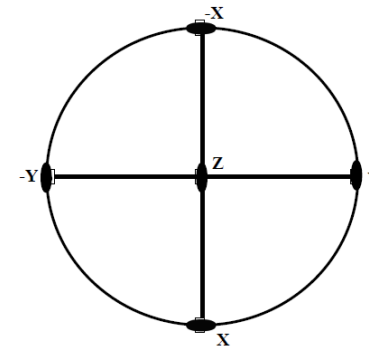
Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Rombow	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
---------------	--------------------------------------	--

Rzut elementów symetrii w grupach punktowych:

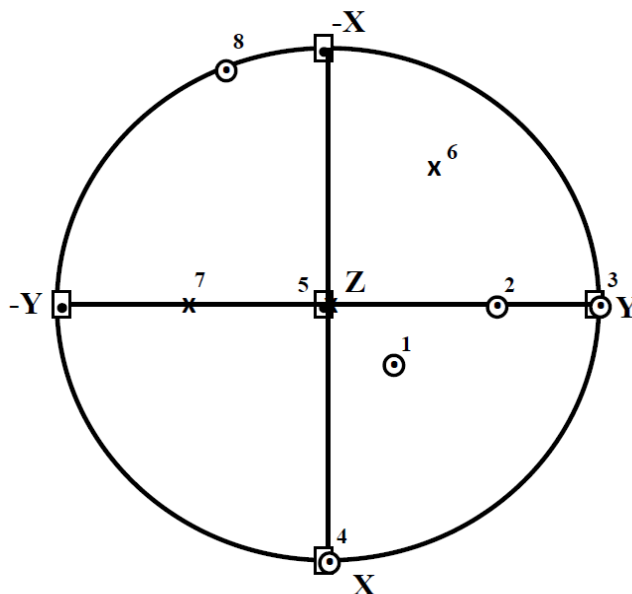
Układ trójskośny		
1	-1	
Układ jednoskośny		
m	2	$2/m$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Układ rombowy		
 222	 mm2	 $2/m \ 2/m \ 2/m$

Zadania

Zadanie 1. Podaj symbol Millera (hkl) ścian kryształu (1-8) z układu rombowego, których znajdują się na rzucie stereograficznym.



Przykładowe rozwiązanie:

Znaki wskaźników Millera w symbolu hkl możemy określić korzystając z następujących wzorów,

$$h = a_o \cos(hkl)_x$$

$$k = b_o \cos(hkl)_y$$

$$l = c_o \cos(hkl)_z$$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

gdzie a_0 , b_0 i c_0 oznaczają jednostki osiowe, natomiast $(hkl)_x$, $(hkl)_y$, $(hkl)_z$ - kąty, jakie tworzy normalna do ściany o nieznanym symbolu (hkl) z osiami XYZ .

Ściana numer 1:

- kąt pomiędzy normalną do ściany 1 a osią X jest $< 90^\circ$, cosinus kąta $< 90^\circ$ ma dodatnią wartość, czyli wskaźnik h ma dodatnią wartość,
- kąt pomiędzy normalną do ściany 1 a osią Y jest $< 90^\circ$, cosinus kąta $< 90^\circ$ ma dodatnią wartość, czyli wskaźnik k ma dodatnią wartość,
- kąt pomiędzy normalną do ściany 1 a osią Z jest $< 90^\circ$, cosinus kąta $< 90^\circ$ ma dodatnią wartość, czyli wskaźnik l ma dodatnią wartość.

Symbol Millera ściany 1: **(hkl)** .

Ściana numer 2:

- kąt pomiędzy normalną do ściany 2 a osią $X = 90^\circ$, $\cos 90^\circ$ ma wartość 0, czyli wskaźnik $h = 0$,
- kąt pomiędzy normalną do ściany 2 a osią Y jest $< 90^\circ$, cosinus kąta $< 90^\circ$ ma dodatnią wartość, czyli wskaźnik k ma dodatnią wartość,
- kąt pomiędzy normalną do ściany 2 a osią Z jest $< 90^\circ$, cosinus kąta $< 90^\circ$ ma dodatnią wartość, czyli wskaźnik l ma dodatnią wartość.

Symbol Millera ściany 2: **$(0kl)$** .

Ściana numer 5:

- kąt pomiędzy normalną do ściany 5 a osią $X = 90^\circ$, $\cos 90^\circ$ ma wartość 0, czyli wskaźnik $h = 0$,
- kąt pomiędzy normalną do ściany 5 a osią $Y = 90^\circ$, $\cos 90^\circ$ ma wartość 0, czyli wskaźnik $k = 0$,
- kąt pomiędzy normalną do ściany 5 a osią Z jest $> 90^\circ$, cosinus kąta $> 90^\circ$ ma ujemną wartość, czyli wskaźnik l ma wartość ujemną.

Symbol Millera ściany 5: Po podzieleniu przez l , czyli przesunięciu płaszczyzny otrzymujemy: **$(00\bar{1})$** .

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 6: Opis i identyfikacja modeli z układu trójskośnego, jednoskośnego i rombowego

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ grupy punktowe (reguły składania) – układ trójskośny, jednoskośny i rombowy,
- ❖ rzut stereograficzny: osie XYZ, koła pasowe, elementy symetrii,
- ❖ rzut i wskaźnikowanie ścian (hkl),
- ❖ postać {hkl},
- ❖ punkty równoważne symetrycznie,
- ❖ cząsteczki,

Pomoce naukowe: modele grup punktowych dla układu trójskośnego, jednoskośnego i rombowego.

Wstęp teoretyczny:

Punkty równoważne symetrycznie są to punkty związane z punktem x y z operacjami symetrii w danej przestrzeni. Aby dany kryształ miał rzeczywiście symetrię taką jak pusta komórka elementarna, atomy w niej się znajdujące muszą być w odpowiednich miejscach. Macierze symetrii są bardzo przydatne do wyznaczania położenia punktów symetrycznie równoważnych. Położenia wszystkich punktów równoważnych otrzymamy działając macierzą przekształcenia na punkt x y z i kolejne punkty równoważne tak długo, aż wrócimy do punktu wyjścia.

Zadania:

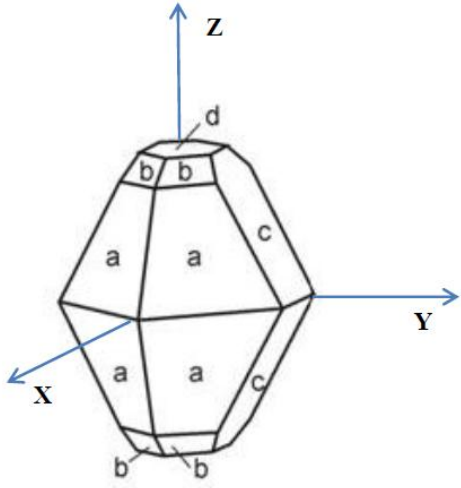
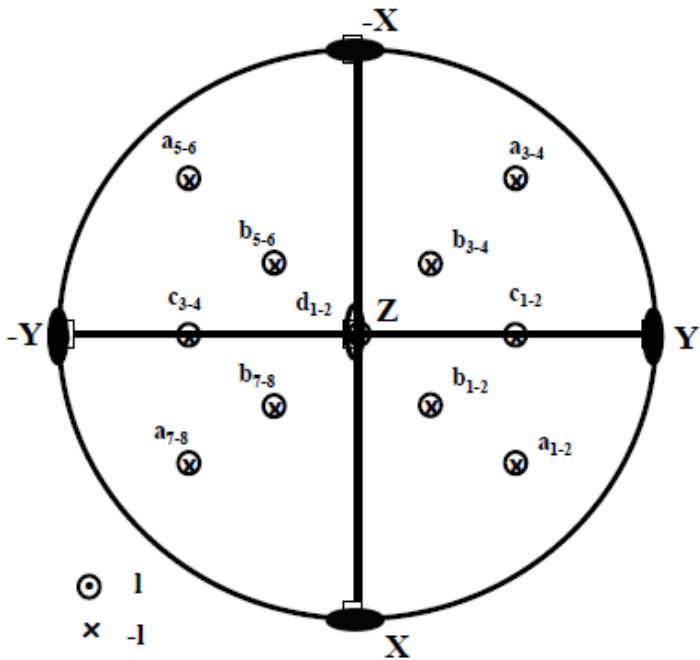
Zadanie 1. Dokonaj identyfikacji i opisu otrzymanego modelu.

Identyfikacja układu i opis:

1. Elementy symetrii {symbol Grotha} > reguły składania.
2. Układ krystalograficzny (wybór osi XYZ).
3. Grupa punktowa – symbol międzynarodowy i Schoenflisa.
4. Rzut: osi XYZ, kół pasowych, elementów symetrii, ścian.
5. Wskaźnikowanie ścian (hkl).
6. Postać {hkl}.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Przykładowa identyfikacja i opis układu:

	
Elementy symetrii {symbol Grotha}	$\{ E, C, L_{2[010]}, L_{2[100]}, L_{2[001]}, P_{(010)}, P_{(100)}, P_{(001)} \}$
Układ krystalograficzny (wybór osi XYZ)	<i>układ rombowy</i>
Grupa punktowa – symbol międzynarodowy i Schoenflisa	mmm, D_{2h}
Rzut: osi XYZ, kół pasowych, elementów symetrii, ścian	

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Wskaźnikowanie ścian (hkl)	$a1 (hkl)$ $a2 (hk-l)$ $a3 (-hkl)$ $a4 (-hk-l)$ $a5 (-h-kl)$ $a6 (-h-k-l)$ $a7 (h-kl)$ $a8 (h-k-l)$	$b1 (hkl)$ $b2 (hk-l)$ $b3 (-hkl)$ $b4 (-hk-l)$ $b5 (-h-kl)$ $b6 (-h-k-l)$ $b7 (h-kl)$ $b8 (h-k-l)$	$c1 (0kl)$ $c2 (0k-l)$ $c3 (0-k-l)$ $c4 (0-k-l)$	$d1 (001)$ $d2 (00\bar{1})$
Postacie (postacie w kryształach jest to zespół ścian symetrycznie równoważnych, tj. związanych ze sobą elementami symetrii)	$\{hkl\}$	$\{hkl\}$	$\{0kl\}$	$\{001\}$

Zadanie 2. Podaj liczbę i współrzędne punktów równoważnych symetrycznie w grupie $^2/m, mm2, 222, ^2/m^2/m^2/m$.

Przykładowe rozwiązanie:

Najpierw zapisujemy macierze dla przekształceń symetrii w grupie $mm2$: $m_{\perp x}, m_{\perp y}$ i $2 \parallel z$.

$$m_{\perp x} \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad m_{\perp y} \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad 2 \parallel z \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Położenia wszystkich punktów równoważnych symetrycznie otrzymamy działając macierzami przekształceń na punkt xyz i kolejne punkty równoważne symetrycznie:

$$m_{\perp x} \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad m_{\perp y} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} \quad 2 \parallel z \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}$$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

$$m_{\perp y} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} \bar{x} \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}$$

$$2 \parallel z \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} \bar{x} \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}$$

$$m_{\perp x} \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}$$

$$2 \parallel z \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Liczba punktów równoważnych symetrycznie: 4

Współrzędne punkty równoważne symetrycznie w grupie $mm2$: xyz , $\bar{x}yz$, $x\bar{y}z$, $\bar{x}\bar{y}z$.

Zadanie 3. Zaproponuj cząsteczki o symetrii: C_1 , C_i , C_{2h} , C_{2v} , C_2 , C_s , D_{2h} .

Przykładowe rozwiązanie:

C_1 CBrClH	C_i C ₂ Br ₂ Cl ₂ H ₂	C_s CBr ₂ ClH	C_2 H ₂ S
C_{2h} trans-C ₂ H ₂ Cl ₂	C_{2v} cis-C ₂ H ₂ Cl ₂ , H ₂ O	D_{2h} C ₂ H ₄	

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 7: Układy: tetragonalny i regularny

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ grupy punktowe (reguły składania) – układ tetragonalny i regularny,
- ❖ rzut stereograficzny: osie XYZ, koła pasowe, elementy symetrii,
- ❖ rzut i wskaźnikowanie ścian (hkl),
- ❖ postać {hkl},

Wstęp teoretyczny:

Reguły tworzenia symboliki międzynarodowej grup punktowych:

1. Układ tetragonalny – trzy miejsca w symbolu, kolejno pierwsze miejsce to symetria kierunku Z, drugie: XY a trzecie: kierunek [110].
2. Układ regularny – trzy miejsca w symbolu; pierwsza pozycja odpowiada osiom X, Y, U; druga – czterem kierunkom [111], a trzecia – sześciu kierunkom [110].

Układy krystalograficzne	Parametry komórki elementarnej	Grupy punktowe	
		symbol międzynarodowy	symbol Schoenflisa
Tetragonalny	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a_0 = b_0 \neq c_0$	4	C_4
		$4/m$	C_{4h}
		422	D_4
		4mm	C_{4v}
		$4/m\ 2/m\ 2/m$	D_{4h}
		$\bar{4}$	S_4
		$\bar{4}2m$	D_{2d}
Regularny	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a_0 = b_0 = c_0$	23	T
		$\frac{2}{m}\bar{3}$	T_h
		432	O
		$\bar{4}3m$	T_d
		$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	O_h

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Rzut stereograficzny osi i kół pasowych:

Układy	Wartość kątów	Rzut osi XYZ i kół pasowych
Tetragonalny Regularny	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	

Rzut elementów symetrii w grupach punktowych:

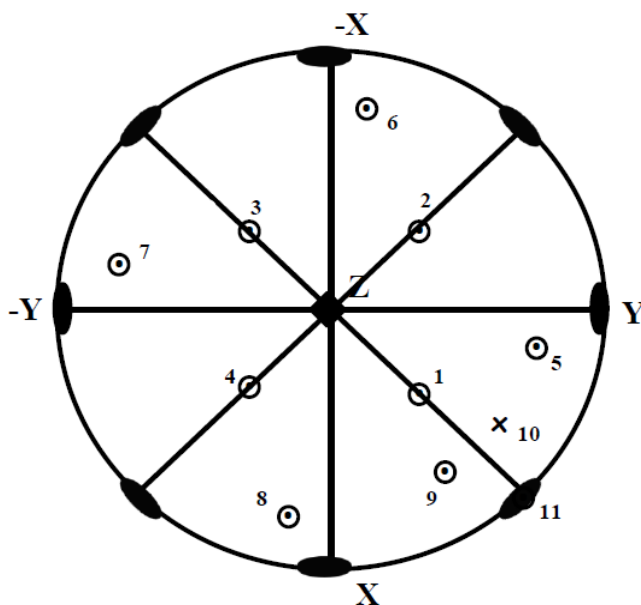
Układ tetragonalny			
4	$4/m$	422	4mm
$4/m \ 2/m \ 2/m$	$\bar{4}$	$\bar{4}2m$	

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Układ regularny				
23		$\frac{2}{3} \frac{2}{3} m$		432
$\bar{4}3m$		$\frac{4}{m} \frac{3}{m} \frac{2}{m}$		

Zadania:

Zadanie 1. Podaj symbol Millera (hkl) ścian kryształu (1-11) z układu tetragonalnego, które znajdują się na rzucie stereograficznym.



Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Przykładowe rozwiązanie:

Znaki wskaźników Millera w symbolu hkl możemy określić korzystając z następujących wzorów:

$$h = a_o \cos(hkl)_x$$

$$k = b_o \cos(hkl)_y$$

$$l = c_o \cos(hkl)_z$$

gdzie a_o , b_o i c_o oznaczają jednostki osiowe, natomiast $(hkl)_x$, $(hkl)_y$, $(hkl)_z$ - kąty, jakie tworzy normalna do ściany o nieznanym symbolu (hkl) z osiami XYZ.

Ściana numer 1:

- kąt $(hkl)_x = 45^\circ$ - czyli wskaźnik h ma dodatnią wartość,
- kąt $(hkl)_y$ ma taką samą wartość jak kąt $(hkl)_x$, ponieważ ściana ta leży na płaszczyźnie, która dzieli kąt pomiędzy osią X i Y na dwie równe części - czyli wskaźnik $k = h$,
- kąt $(hkl)_z < 90^\circ$ - czyli wskaźnik l ma dodatnią wartość.

Symbol Millera ściany 1: **(hhl)**.

Ściana numer 5:

- kąt $(hkl)_x < 90^\circ$ - czyli wskaźnik h ma dodatnią wartość,
- kąt $(hkl)_y < 90^\circ$ - czyli wskaźnik k ma dodatnią wartość,
- kąt $(hkl)_z < 90^\circ$ - czyli wskaźnik l ma dodatnią wartość.

Symbol Millera ściany 5: **(hkl)**.

Ściany numer 6-8:

Ściana 6 oraz 7 i 8 są spokrewnione ze ścianą 5 działaniem osi 4-krotnej równoległej do osi Z . W celu wyznaczenia symbolu Millera pozostałych ścian (6-8) wykorzystamy macierz symetrii. Tworzymy macierz przekształcenia - $L_4 \parallel z$:

$$L_{4 \parallel z} = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Następnie działamy macierzą przekształcenia na ścianę (hkl) i kolejne ściany równoważne tak długo, aż wrócimy do punktu wyjścia:

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

$$\begin{aligned} \text{Ściana 6: } \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \bar{k} \\ h \\ l \end{bmatrix} \\ &(\bar{k}hl) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Ściana 8: } \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ l \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} k \\ \bar{h} \\ l \end{bmatrix} \\ &(k\bar{h}l) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Ściana 7: } \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} \bar{k} \\ h \\ l \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ l \end{bmatrix} \\ &(\bar{h}\bar{k}l) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Ściana 5: } \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} k \\ \bar{h} \\ l \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \\ &(hkl) \end{aligned}$$

Symbole Millera ścian: 6 ($\bar{k}hl$), 7 ($\bar{h}\bar{k}l$), 8 ($k\bar{h}l$).

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 8: Opis i identyfikacja modeli z układu tetragonalnego i regularnego

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ grupy punktowe (reguły składania) – układ tetragonalny i regularny,
- ❖ rzut stereograficzny: osie XYZ, koła pasowe, elementy symetrii,
- ❖ rzut i wskaźnikowanie ścian (hkl),
- ❖ postać {hkl},
- ❖ punkty równoważne symetrycznie,
- ❖ cząsteczki,

Pomoce naukowe: modele grup punktowych dla układu tetragonalnego i regularnego.

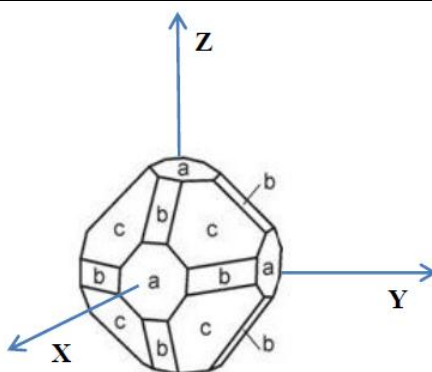
Zadania:

Zadanie 1. Dokonaj identyfikacji i opisu otrzymanego modelu.

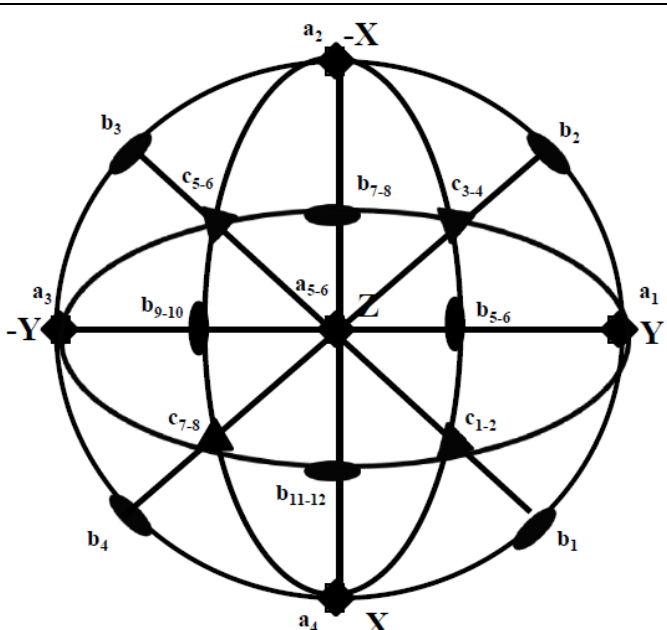
Identyfikacja układu i opis:

1. Elementy symetrii {symbol Grotha} > reguły składania.
2. Układ krystalograficzny (wybór osi XYZ).
3. Grupa punktowa – symbol międzynarodowy i Schoenflisa.
4. Rzut: osi XYZ, kół pasowych, elementów symetrii, ścian.
5. Wskaźnikowanie ścian (hkl).
6. Postać {hkl}.

Przykładowa identyfikacja i opis układu:



Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Elementy symetrii {symbol Grotha}	$\{ E, C, L_4[010], L_4[100], L_4[001], P_{(010)}, P_{(100)}, P_{(001)}, 4 \times L_3[111], 6 \times L_2[110], 6 \times P_{(110)} \}$		
Układ krystalograficzny (wybór osi XYZ)	układ regularny		
Grupa punktowa – symbol międzynarodowy i Schoenflisa	$\frac{4}{m} \frac{3}{m} \frac{2}{m}, O_h$		
Rzut: osi XYZ, kół pasowych, elementów symetrii, ścian			
Wskaźnikowanie ścian (hkl)	$a1 (010)$ $a2 (-100)$ $a3 (0-10)$ $a4 (100)$ $a5 (001)$ $a6 (00-1)$	$b1 (110)$ $b2 (-110)$ $b3 (-1-10)$ $b4 (1-10)$ $b5 (011)$ $b6 (01-1)$ $b7 (-101)$ $b8 (-10-1)$ $b9 (0-11)$ $b10 (0-1-1)$ $b11 (101)$ $b12 (10-1)$	$c1 (111)$ $c2 (11-1)$ $c3 (-111)$ $c4 (-11-1)$ $c5 (-1-11)$ $c6 (1--1-1)$ $c7 (1-11)$ $c8 (1-1-1)$
Postacie	$\{010\}$	$\{110\}$	$\{111\}$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zadanie 2. Podaj liczbę i współrzędne punktów równoważnych symetrycznie w grupie $4/m, 422, 23$.

Przykładowe rozwiązanie:

Najpierw zapisujemy macierze dla przekształceń symetrii w grupie $4/m: 4 \parallel z, m \perp z$:

$$4 \parallel z \begin{bmatrix} \bar{0} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad m \perp z \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$$

Położenia wszystkich punktów równoważnych symetrycznie otrzymamy działając macierzami przekształceń na punkt xyz i kolejne punkty równoważne symetrycznie:

$$\begin{aligned} 4 \parallel z \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{bmatrix} & 4 \parallel z \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} & 4 \parallel z \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} y \\ \bar{x} \\ z \end{bmatrix} \\ 4 \parallel z \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y \\ \bar{x} \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & m \perp z \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x \\ y \\ \bar{z} \end{bmatrix} & m \perp z \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ \bar{z} \end{bmatrix} \\ m \perp z \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \bar{z} \end{bmatrix} & m \perp z \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y \\ \bar{x} \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} y \\ \bar{x} \\ \bar{z} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Liczba punktów równoważnych symetrycznie: 8

Współrzędne punkty równoważne symetrycznie w grupie $4/m: xyz, \bar{y}xz, \bar{x}\bar{y}z, y\bar{x}z, xy\bar{z}, \bar{y}x\bar{z}, \bar{x}\bar{y}\bar{z}, y\bar{x}\bar{z}$.

Zadanie 3. Zaproponuj cząsteczki o symetrii: $C_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{4h}, D_{2d}, T_d, O_h$

Przykładowe rozwiązanie:

$C_4/C_{4h}/C_{4v}/D_4/D_{4h} [Cu(H_2O)_4]$	$C_4/C_{4h}/C_{4v} [Cu(NH_3)_4]$
$D_{2d}/T_d CH_4$	$O_h SF_6$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 9: Układy: trygonalny i heksagonalny

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ grupy punktowe (reguły składania) – układ trygonalny i heksagonalny,
- ❖ rzut stereograficzny: osie XYZ, koła pasowe, elementy symetrii,
- ❖ rzut i wskaźnikowanie ścian (hkil),
- ❖ postać {hkil},

Wstęp teoretyczny:

Reguły tworzenia symboliki międzynarodowej grup punktowych:

1. Układ trygonalny/heksagonalny – trzy miejsca w symbolu, pierwsza pozycja w symbolu grupy punktowej jest związana z osią Z, druga – z osiami X, Y, U; trzecia – z kierunkami połowiącymi kąty między dodatnimi i ujemnymi częściami osi X, Y, U.

Układy krystalograficzne	Parametry komórki elementarnej	Grupy punktowe	
		symbol międzynarodowy	symbol Schoenflisa
Trygonalny lub kom. romboedryczny	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ $a_0 = b_0 \neq c_0$ lub $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a_0 = b_0 = c_0$	3	C_3
		$\bar{3}$	C_{3i}
		32	D_3
		3m	C_{3v}
		$\bar{3} \frac{2}{m}$	D_{3d}
Heksagonalny	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ $a_0 = b_0 \neq c_0$	6	C_6
		$6/m$	C_{6h}
		622	D_6
		6mm	C_{6v}
		$6/m \ 2/m \ 2/m$	D_{6h}
		$\bar{6}$	C_{3h}
		$\bar{6}2m$	D_{3h}

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

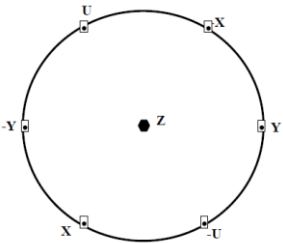
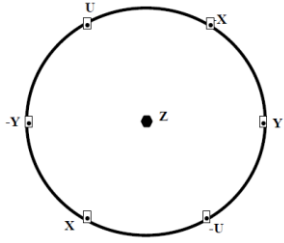
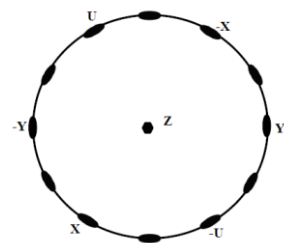
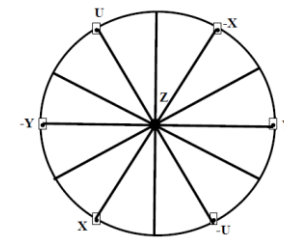
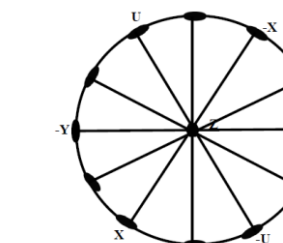
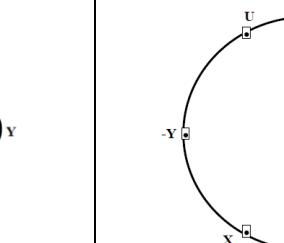
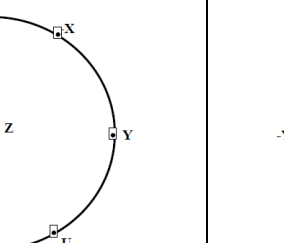
Rzut stereograficzny osi i kół pasowych:

Układy	Wartość kątów	Rzut osi XYZ i kół pasowych
Trygonalny Heksagonalny	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	

Rzut elementów symetrii w grupach punktowych:

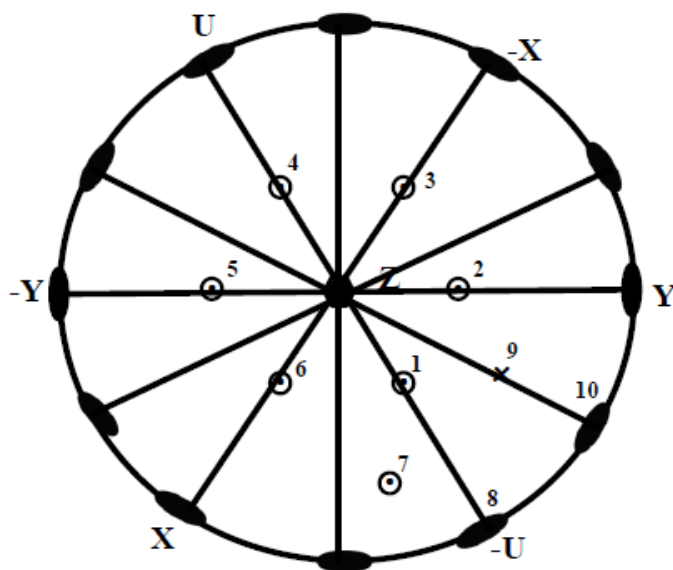
Układ trygonalny			
3	$\bar{3}$	32	
3m		$\bar{3} \frac{2}{m}$	

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Układ heksagonalny			
 6	 $6/m$	 622	 6mm
 $6/m \ 2/m \ 2/m$	 $\bar{6}$	 $\bar{6}2m$	

Zadania:

Zadanie 1. Podaj symbol Millera (hkil) ścian kryształu (1-10) z układu heksagonalnego, których znajdują się na rzucie stereograficznym.



Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Przykładowe rozwiązanie:

W układzie trygonalnym i heksagonalnym występują cztery osie współrzędnych dlatego ogólny symbol ścian kryształu ma postać (hkl) . Wskaźniki h, k, i odnoszą się odpowiednio do osi X, Y, U , wskaźnik l zaś do osi Z . Wskaźniki płaszczyzn w tych układach mają szczególną własność:

$$h + k + i = 0$$

$$i = -(h + k)$$

Ściana numer 1:

- $kąt(hkl)_x < 90^\circ$ - czyli wskaźnik h ma dodatnią wartość,
- $kąt(hkl)_y$ ma taką samą wartość jak $kąt(hkl)_x$, ponieważ ściana ta leży na płaszczyźnie, która dzieli kąt pomiędzy osiami X i Y na dwie równe części - czyli wskaźnik $k = h$,
- $kąt(hkl)_z < 90^\circ$ - czyli wskaźnik l ma dodatnią wartość,
- $i = -(h + k), i = -(h + h) = -2h$.

Symbol Millera ściany 1: $(h\bar{h}2h\bar{l})$.

Ściana numer 7:

- $kąt(hkl)_x < 90^\circ$ - czyli wskaźnik h ma dodatnią wartość,
- $kąt(hkl)_y < 90^\circ$ - czyli wskaźnik k ma dodatnią wartość,
- $kąt(hkl)_z < 90^\circ$ - czyli wskaźnik l ma dodatnią wartość,
- $i = -(h + k)$,

Symbol Millera ściany 7: $(h\bar{k}\bar{l})$.

Ściana numer 8:

- $kąt(hkl)_x < 90^\circ$ - czyli wskaźnik h ma dodatnią wartość,
- $kąt(hkl)_y$ ma taką samą wartość jak $kąt(hkl)_x$, ponieważ ściana ta leży na płaszczyźnie, która dzieli kąt pomiędzy osiami X i Y na dwie równe części - czyli wskaźnik $k = h$,
- $kąt(hkl)_z = 90^\circ$ - czyli wskaźnik $l = 0$,
- $i = -(h + k), i = -(h + h) = -2h$.

Symbol Millera ściany 8: Po przesunięciu (dzielenie przez h) otrzymujemy: $(11\bar{2}0)$.

Ściana numer 10:

- $kąt(hkl)_x = 90^\circ$ - czyli wskaźnik $h = 0$,
- $kąt(hkl)_y < 90^\circ$ - czyli wskaźnik k ma dodatnią wartość,
- $kąt(hkl)_z = 90^\circ$ - czyli wskaźnik $l = 0$,
- $i = -(h + k), i = -(0 + k) = -k$

Symbol Millera ściany 10: Po przesunięciu (dzielenie przez h) otrzymujemy: $(01\bar{1}0)$.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 10: Opis i identyfikacja modeli z układu trygonalnego i heksagonalnego

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ grupy punktowe (reguły składania) – układ trygonalny i heksagonalny,
- ❖ rzut stereograficzny: osie XYZ, koła pasowe, elementy symetrii,
- ❖ rzut i wskaźnikowanie ścian (hkil),
- ❖ postać {hkil},
- ❖ cząsteczki,

Pomoce naukowe: modele grup punktowych dla układu trygonalnego i heksagonalnego.

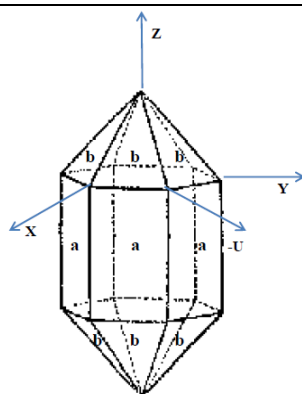
Zadania:

Zadanie 1. Dokonaj identyfikacji i opisu otrzymanego modelu.

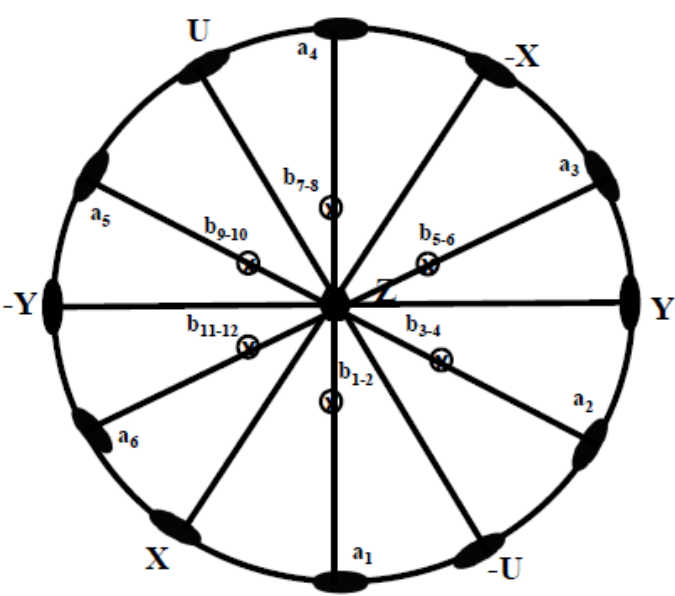
Identyfikacja układu i opis:

7. Elementy symetrii {symbol Grotha} > reguły składania.
8. Układ krystalograficzny (wybór osi XYZ).
9. Grupa punktowa – symbol międzynarodowy i Schoenflisa.
10. Rzut: osi XYZ, kół pasowych, elementów symetrii, ścian.
11. Wskaźnikowanie ścian (hkil).
12. Postać {hkil}.

Przykładowa identyfikacja i opis układu:



Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Elementy symetrii {symbol Grotha}	$\{ E, C, L_{6[0001]}, L_{2[1000]}, L_{2[0100]}, L_{2[0010]}, P_{(0001)}, P_{(1000)}, P_{(0100)}, P_{(0010)}, 3xL_{2[10-10]}, 3x P_{(10-10)} \}$	
Układ krystalograficzny (wybór osi XYZ)	układ heksagonalny	
Grupa punktowa – symbol międzynarodowy i Schoenflisa	$6/m^2/m^2/m, D_{6h}$	
Rzut: osi XYUZ, kół pasowych, elementów symetrii, ścian		
Wskaźnikowanie ścian (hkil)	$a1 (10-10)$ $a2 (01-10)$ $a3 (-1100)$ $a4 (-1010)$ $a5 (0-110)$ $a6 (1-100)$	$b1 (h0-hl)$ $b2 (h0-h-l)$ $b3 (0h-hl)$ $b4 (0h-h-l)$ $b5 (-hh0l)$ $b6 (-hh0-l)$ $b7 (-hh0l)$ $b8 (-hh0-l)$ $b9 (0-hhl)$ $b10 (0-hh-l)$ $b11 (h-h0l)$ $b12 (h-h0-l)$
Postacie	$\{10\bar{1}0\}$	$\{h0\bar{h}l\}$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Elementy symetrii {symbol Grotha}	{ E, C, $L_{3i}[0001]$, $L_2[1000]$, $L_2[0100]$, $L_2[0010]$, $P_{(0001)}$, $P_{(1000)}$, $P_{(0100)}$ }		
Układ krystalograficzny (wybór osi XYZ)	układ trygonalny		
Grupa punktowa – symbol międzynarodowy i Schoenflisa	$\bar{3} \frac{2}{m}$, D_{3d}		
Rzut: osi XYUZ, kół pasowych, elementów symetrii, ścian			
Wskaźnikowanie ścian (hkil)	a_1 (hk-il) a_2 (kh-i-l) a_3 (-ki-h-l) a_4 (-hi-kl)	a_5 (-ihkl) a_6 (-ikh-l) a_7 (-h-ki-l) a_8 (-k-hil)	a_9 (k-ihl) a_{10} (h-ik-l) a_{11} (i-h-k-l) a_{12} (i-k-hl)
Postacie	{ $h\bar{k}i\bar{l}$ }		

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zadanie 2. Zaproponuj cząsteczki o symetrii: C_{3v} , D_{6h} , D_{3d} , D_{3h} .

Przykładowe rozwiązanie:

C_{3v} NH_3	D_{3d} BF_3	D_{6h} benzen	D_{3h} C_2H_6
-----------------	-----------------	-----------------	-------------------

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 11: Grupy przestrzenne

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ zwykle i translacyjne elementy symetrii (osie śrubowe, płaszczyzny z poślizgiem),
- ❖ macierzowe operatory przekształceń 4x4,
- ❖ sieci Bravais,
- ❖ punkty równoważne symetrycznie,
- ❖ grupy przestrzenne,

Wstęp teoretyczny:

Proste grupy przestrzenne w trójwymiarowej przestrzeni uzyskuje się dzięki kombinacji 32 krystalograficznych grup punktowych z 14 sieciami Bravais należących do jednego z 7 układów krystalograficznych, jest ich 73. W budowie wewnętrznej kryształu oprócz zwykłych elementów symetrii $\{C, P, L_n\}$ pojawiają się translacyjne elementy symetrii (osie śrubowe i płaszczyzny z poślizgiem) dlatego liczba grup przestrzennych wzrasta do 230.

Porównanie grup punktowych z grupami przestrzennymi:

Grupy punktowe	Grupy przestrzenne
- zwykle elementy symetrii: $\{C, P, L_n\}$	- zwykle elementy symetrii: $\{C, P, L_n\}$ - translacyjne elementy symetrii: $\{\text{osie śrubowe :}n_m, \text{płaszczyzny z poślizgiem: } a, b, c, n, d\}$
Macierz dla zwykłych elementów symetrii: $\mathbf{X}' = \mathbf{S} \cdot \mathbf{X} \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$	Macierz dla zwykłych elementów symetrii: $\mathbf{X}' = \mathbf{S}' \cdot \mathbf{X} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & t_1 \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & t_2 \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & t_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
brak	- komórki Bravais (P, A, B, C, I, F)
LPRS = „Niezależna symetria”	LPRS = „Niezależna symetria” • „Komórka Bravais”

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zasady tworzenia symbolu grupy przestrzennej:

1. Pierwsza pozycja: typ sieci Bravais’go:

- P: prymitywna, czyli niecentrowana w żaden sposób;
- F: ściennie centrowana;
- I: wewnątrznie centrowana;
- A, B lub C: centrowana tylko na ścianach prostopadłych do kierunku odpowiednia a, b i c;
- R: komórka romboedryczna.

2. Dalsze pozycje (w zależności od układu krystalograficznego) oznaczają różne elementy symetrii (zwykle lub translacyjne).

Translacyjne elementy symetrii:

1. **Oś śrubowa** - powstają w wyniku sprzężenia translacji z osiami symetrii. Przekształcenie symetryczne względem osi śrubowej składa się z dwu kolejnych po sobie operacji geometrycznych : obrotu wokół osi i translacji równoległej do tej osi. Symbol osi śrubowej: n_m - zawiera symbol krotności osi symetrii (n) oraz indeks (m), który wskazuje o jaką wartość okresu translacyjnego dokonuje się translacja.

Oś śrubowa	Symbol międzynarodowy	Wartość wektora translacji
Dwukrotna oś śrubowa	$2_1 \parallel x$	$a_0/2$
	$2_1 \parallel y$	$b_0/2$
	$2_1 \parallel z$	$c_0/2$

2. **Płaszczyzny poślizgu** - są złożonymi elementami symetrii, powstającymi w wyniku sprzężenia płaszczyzny symetrii oraz translacji. Przekształcenie symetryczne względem płaszczyzny ślizgowej składa się z dwu kolejnych po sobie operacji: odbicie względem płaszczyzny i translacji w płaszczyźnie równoległej do płaszczyzny symetrii. Ze względu na kierunek i wartość translacji rozróżnia się trzy rodzaje płaszczyzn ślizgowych: **płaszczyzny ślizgowe osiowe** (a, b, c); **płaszczyzny ślizgowe diagonalne** (n); **płaszczyzny ślizgowe diamentowe** (d).

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

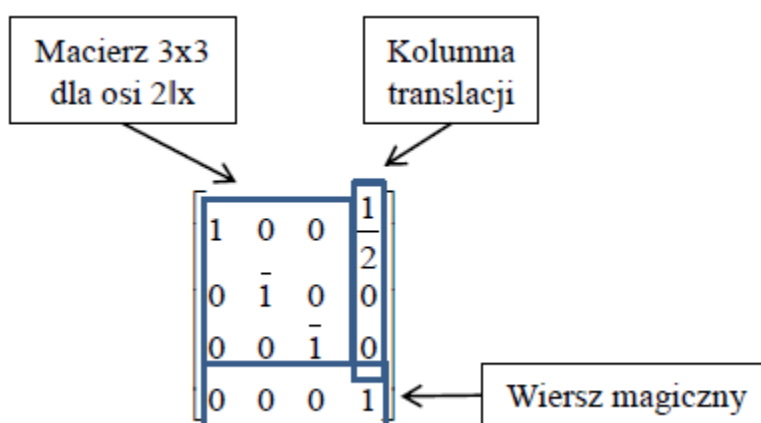
Płaszczyzna symetrii	Symbol międzynarodowy	Wartość wektora translacji
płaszczyzna osiowa	$\mathbf{a}$ $\mathbf{b}$ $\mathbf{c}$	$a_0/2$ $b_0/2$ $c_0/2$
płaszczyzna diagonalna	$\mathbf{n}$	$(a_0+b_0)/2, (a_0+c_0)/2,$ $(b_0+c_0)/2, (a_0+b_0+c_0)/2$
płaszczyzna diamentowa	$\mathbf{d}$	$(a_0+b_0)/4, (a_0+c_0)/4,$ $(b_0+c_0)/4, (a_0+b_0+c_0)/4$

Zadania:

Zadanie 1. Podaj macierz dla następujących elementów symetrii: $2_1 \parallel \mathbf{x}$, $2_1 \parallel \mathbf{y}$, $\mathbf{b}_{(100)}$, $\mathbf{c}_{(010)}$, $\mathbf{n}_{(001)}$, $\mathbf{d}_{(110)}$.

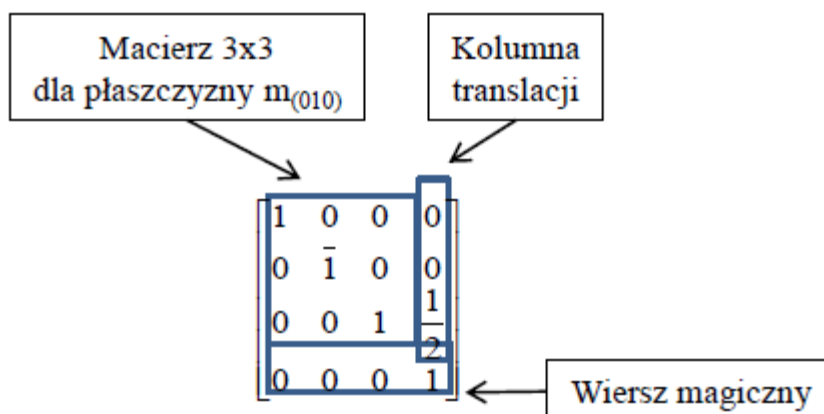
Przykładowe rozwiązanie:

Przekształcenie względem osi śrubowej $2_1 \parallel \mathbf{x}$ składa się z dwóch kolejnych po sobie operacji: obrotu o 180° wokół osi X i translacji równoległej: $a_0/2$. Te informacje można wykorzystać aby utworzyć macierz (o wymiarach 4×4) dla tego przekształcenia. Macierz ta składa się z macierzy 3×3 odpowiadającej zwykłej osi $2 \parallel \mathbf{x}$ i translacji o $a_0/2$ wektor.



Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Przekształcenie względem płaszczyzny z poślizgiem $c_{(010)}$ składa się z dwóch kolejnych po sobie operacji: odbicie względem płaszczyzny $m_{(010)}$ i translacji $c_{\frac{c}{2}}$. Te informacje można wykorzystać aby utworzyć macierz (o wymiarach 4×4) dla tego przekształcenia. Macierz ta składa się z macierzy 3×3 odpowiadającej zwykłej płaszczyźnie symetrii $m_{(010)}$ i translacji o $\frac{c}{2}$ wektor.



Zadanie 2. Uzupełnij symbol grupy przestrzennej: Pna, Pmc, Pca.

Przykładowe rozwiązanie:

Należy zamienić symbol podanej grupy przestrzennej Pca na symbol grupy punktowej: usuń typ komórki Bravais'go a translacyjne elementy symetrii zamień na zwykłe elementy symetrii:

Pca $\Rightarrow$ mm

Następnie określ układ krystalograficzny do którego należy ta grupa punktowa:

Układ rombowy

Wykorzystując informację o regułach tworzenia symbolu międzynarodowego dla układu rombowego podajemy orientację elementów symetrii, które wchodzą w skład podanej grupy:

$c_{(100)}$ i $a_{(010)}$

W celu uzupełnienia symbolu grupy przestrzennej Pca należy wymnożyć macierze dla translacyjnych elementów symetrii ($c_{(100)}$ i $a_{(010)}$) a następnie zinterpretować otrzymaną z mnożenia macierz:

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

$$\begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Oś dwukrotna $\parallel Z$

Translacja $\parallel Z$: $c_0/2$

Uzupełniamy symbol: **$Pca2_1$**

Zadanie 3. Uzupełnij symbol grupy przestrzennej: Pbam, Pnnn, Pcab, Fddd, Pmma.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 12: Identyfikacja substancji metodą proszkową DSH

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ metoda Debye’a-Scherrera-Hulla (DSH),
- ❖ obliczanie d/n - równanie Bragga,
- ❖ obliczanie kąta θ z odległości pomiędzy prążkami l ,
- ❖ identyfikacja substancji: wstępna - na podstawie 5 prążków, a następnie analiza wszystkich prążków,

Pomoce naukowe: rentgenogram proszkowy rejestrowany fotograficznie, suwmiarka, linijka, kalkulator.

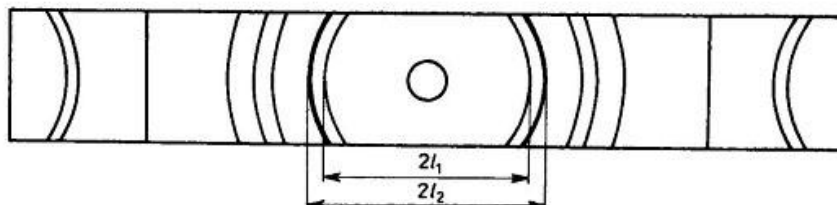
Wstęp teoretyczny:

Metoda Debye’a-Scherrera-Hulla jest podstawową metodą badania substancji polikrystalicznych, w której stosuje się promieniowanie monochromatyczne. Obiektem badań w tej metodzie jest próbka, w której znajduje się bardzo wiele krystalitów o rozmiarach 10-0,1 μm . Krystality te zorientowane są w sposób przypadkowy, dlatego kąt padania θ promieni na poszczególne krystality jest różny. Refleksy uzyskuje się od tych płaszczyzn krystalicznych poszczególnych krystalitów, które są ustawione pod kątem spełniającym równanie Bragga:

$$n\lambda = 2d_{(hkl)} \sin \theta_{(hkl)}$$

gdzie: d – odległość między sąsiednimi płaszczyznami, θ – kąt dyfrakcji, λ – długość fali promieniowania rentgenowskiego, n – rząd odbicia (liczba naturalna).

Obraz dyfrakcyjny uzyskany metodą DSH nazywa się debajogramem. Przykładowy debajogram uzyskany w kamerze cylindrycznej:



Pomiary dokonane na błonie fotograficznej w jednostkach długości łatwo można przeliczyć na wartości katowe, dysponując wartością średnicy kamery cylindrycznej, która zwykle wynosi 57,3mm lub 114,6mm. Do wyliczeń wykorzystuje się zależność

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych” realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

$$\theta = \frac{90}{2\pi R} \cdot 2l$$

w której: $2R$ – średnica kamery [mm], $2l$ – odległość między symetrycznymi prążkami [mm].

Celem ćwiczenia jest identyfikacja substancji na podstawie rentgenogramu proszkowego wykonanego metodą DSH.

Studenci otrzymują rentgenogramy zarejestrowane przez kamerę o średnicy 64mm lub 114,6mm z zastosowaniem promieniowania $\lambda_{Cu} = 1,54178\text{\AA}$ lub $\lambda_{Co} = 1,79021\text{\AA}$. Pomiar odległości między symetrycznymi prążkami umożliwia wyznaczenie wielkości charakteryzującej sieć krystaliczną, a mianowicie odległość międzypłaszczyznową $d_{(hkl)}$.

Odległość między symetrycznymi prążkami (l) należy zmierzyć przy pomocy suwmiarki lub linijki z dokładnością do 0,02 lub 0,1mm. Intensywność prążków (I) ocenia się wizualnie w skali od 1 do 10: najmocniejsza 10, najsłabsza 1. Znając średnicę kamery wyznaczyć kąty dyfrakcji (θ) i ze wzoru Bragga wyliczyć odległości międzypłaszczyznowe (d) wszystkich płaszczyzn sieciowych.

Uzyskane dane należy zestawić w postaci tabeli:

Lp.	I (1-10)	l	θ_{Br}	$\sin\theta_{Br}$	d/n	$I_{teor.}$	$d/n_{teor.}$

Otrzymane wartości odległości międzypłaszczyznowej $d_{(hkl)}$ oraz intensywność prążków I należy porównać z danymi literaturowymi zestawionymi w tablicach, w celu identyfikacji substancji. Na początku dokonuje się wstępnej identyfikacji na podstawie 5 najintensywniejszych prążków a następnie porównuje się wartości d i I dla wszystkich prążków.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 13: Wskaźnikowanie dyfraktogramu DSH dla układu regularnego, obliczanie stałej a_0 i wyznaczenie typu komórki Bravais

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ równanie kwadratowe sieci,
- ❖ wskaźnikowanie,
- ❖ obliczanie stałej sieci a_0 ,
- ❖ wygaszenia systematyczne,
- ❖ wyznaczanie typu komórki Bravais.

Pomoce naukowe: dyfraktogram proszkowy, kalkulator.

Wstęp teoretyczny:

Identyfikację próbki polikrystalicznej można wykonać bez wskaźnikowania rentgenogramu proszkowego. Natomiast w celu uzyskania parametrów sieci i typu komórki Bravais niezbędne jest wywskaźnikowanie prążków dyfrakcyjnych. Jest to tym trudniejsze, im niższa jest symetria badanego kryształu, gdyż liczba nieznanych parametrów wzrasta od jednego dla układu regularnego (a) do sześciu dla układu trójskośnego (a , b , c , α , β , γ).

Równanie kwadratowe dla układu regularnego ma postać:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Suma kwadratów wskaźników $Q = h^2 + k^2 + l^2$ jest liczbą całkowitą, co ogranicza liczbę możliwych rozwiązań.

Po przekształceniu równania Bragga i podniesieniu do kwadratu otrzymujemy:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4\sin^2 \theta}{n^2 \lambda^2}$$

Porównując otrzymane wyrażenie z równaniem kwadratowym sieci dla układu regularnego otrzymujemy:

$$\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} = \frac{4\sin^2 \theta}{n^2 \lambda^2}$$

Wykorzystując powyższe tzw. zmodyfikowane równanie kwadratowe oraz pomiar odległość między symetrycznymi prążkami na dyfraktogramie proszkowym możemy obliczyć stałą sieci dla układu regularnego.

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Ponieważ Q jest zawsze liczbą naturalną, wskaźnikowanie polega na znalezieniu ciągu liczb naturalnych, przez które dzieląc odpowiednie wartości $\sin^2\theta$, uzyskuje się stałą wartość. Znając zestaw tych liczb, znajduje się wskaźniki hkl, które wykorzystuje się do wyznaczenia typu komórki Bravais. Pewne liczby całkowite, takie jak 7, 15, 23, 28, 31 itd. są niemożliwe, gdyż nie mogą one być sumą trzech kwadratów liczb całkowitych.

Celem ćwiczenia jest obliczenie stałej sieci (a_0) dla substancji z układu regularnego oraz wyznaczenie typu komórki Bravais na podstawie rentgenogramu proszkowego wykonanego metodą DSH.

Studenci otrzymują rentgenogramy zarejestrowane przez kamerę o średnicy 64mm lub 114,6mm z zastosowaniem promieniowania $\lambda_{Cu} = 1,54178\text{\AA}$ lub $\lambda_{Co} = 1,79021\text{\AA}$.

Odległość między symetrycznymi prążkami (l) należy zmierzyć przy pomocy suwmiarki lub linijki z dokładnością do 0,02 lub 0,1mm. Intensywność prążków (I) ocenia się wizualnie w skali od 1 do 10: najmocniejsza 10, najsłabsza 1. Znając średnicę kamery wyznaczyć kąty Bragga (θ_{Br}) a następnie wyznaczyć wartości Q , wskaźniki hkl oraz typ komórki Bravais. Wykorzystując zmodyfikowane równanie kwadratowe wyliczyć stałą sieci a_0 .

Uzyskane dane należy zestawić w postaci tabeli:

Lp.	I (1-10)	l	θ_{Br}	$\sin\theta_{Br}$	$\sin^2\theta_{Br}$	Q	hkl	a_0

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 14: Obliczanie stałej sieci ze zdjęcia metodą obracanego kryształu

Tematyka ćwiczeń:

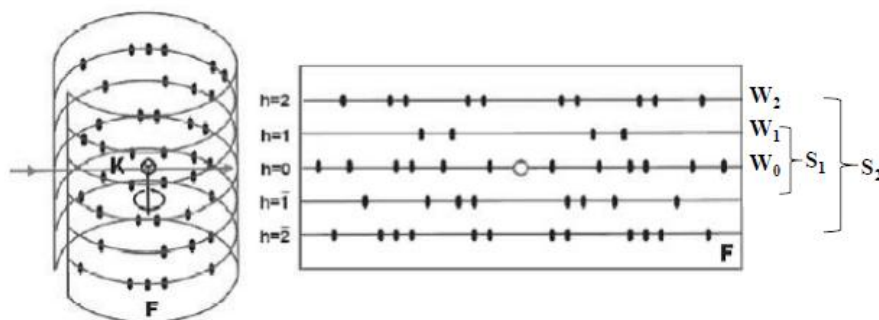
- ❖ metoda obracanego kryształu,
- ❖ równanie Lauego,
- ❖ określenie symetrii zdjęcia i symetrii kryształu,

Pomoce naukowe: rentgenogram uzyskany metodą obracanego kryształu, suwmiarka, linijka, kalkulator.

Wstęp teoretyczny:

W metodzie obracanego kryształu wiązka równoległych monochromatycznych promieni rentgenowskich pada na monokryształ. Kryształ ustawiony jest na główce goniometrycznej zazwyczaj jedną z osi krystalograficznych prostopadle do padającej wiązki i obracany wokół kierunku osi, aby coraz to inne płaszczyzny sieciowe kryształu o różnych odległościach międzypłaszczyznowych d_{hkl} mogły znaleźć się pod kątem wzmocnienia (spełnienie równania Lauego) w stosunku do wiązki padającej promieni.

Wiązki promieni rentgenowskich, ugięte na węzłach płaszczyzn sieciowych, dają na błonie fotograficznej (cylindrycznie otaczającej monokryształ) refleksy układające się wzdłuż równoległych linii zwanych warstwicami. Otrzymany rentgenogram nazywa się dyfraktogramem warstwicowym.



Rentgenogram uzyskany metodą obracanego kryształu przy ustawieniu osi krystalograficznej X prostopadle do padających promieni: zwinięty w cylindrycznej kamerze oraz rozwinięty. K – monokryształ, W_0 , W_1 , W_2 – warstwy, h – liczba całkowita, numer warstwy, S_1 , S_2 – odległość między kolejnymi warstwami położonymi symetrycznie względem warstwy W_0 .

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

W metodzie obracanego kryształu do interpretacji geometrii dyfrakcji promieni rentgenowskich korzysta się z równań Lauego:

$$a_0(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = h\lambda$$

$$b_0(\cos \beta - \cos \beta_0) = k\lambda$$

$$c_0(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = l\lambda$$

w którym: a_0 , b_0 , c_0 to jednostki osiowe wzdłuż osi krystalograficznych X, Y, Z; α_0 , β_0 , γ_0 – kąty między padającą wiązką promieni i odpowiednią osią krystalograficzną, h , k , l – liczby całkowite, wskaźniki refleksów dyfrakcyjnych.

Przekształcając równanie Lauego otrzymujemy wzór służący do wyliczenia stałej sieci a_0 ze zdjęcia uzyskanego metodą obracanego kryształu:

$$a_0 = h\lambda \sqrt{1 + \left(\frac{2R}{S_h}\right)^2}$$

w którym: λ – długość fali promieniowania, h – numer warstwic, $2R$ – średnica kamery, S_h – odległość między kolejnymi warstwicami.

Celem ćwiczenia jest wyznaczenie stałej sieci (a_0) metodą obracanego kryształu, określenie symetrii zdjęcia oraz badanego monokryształu.

Studenci otrzymują rentgenogram uzyskany metodą obracanego kryształu zarejestrowane przez kamerę o średnicy 64mm lub 57,3mm z zastosowaniem promieniowania $\lambda_{Cu} = 1,54178\text{\AA}$ lub $\lambda_{Mo} = 0,71069\text{\AA}$.

Odległość między kolejnymi warstwicami (S_h) należy zmierzyć przy pomocy suwmiarki lub linijki z dokładnością 0,02 do 0,1mm. Znając średnicę kamery oraz korzystając z równania Lauego wyliczyć stałą sieci a_0 . Analizując otrzymany rentgenogram określić symetrię zdjęcia oraz kryształu.

Uzyskane dane należy zestawić w postaci tabeli:

h	S_h	$2R/S_h$	$\sqrt{1 + \left(\frac{2R}{S_h}\right)^2}$	a_0

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Zajęcia 15: Wygaszenia systematyczne

Tematyka ćwiczeń:

- ❖ typ sieci translacyjnych Bravais,
- ❖ translacyjne elementy symetrii,
- ❖ czynnik struktury,
- ❖ wygaszenia systematyczne,

Wstęp teoretyczny:

Zdolność rozpraszania promieniowania w kierunkach braggowskich przez komórkę elementarną nosi nazwę **czynnika struktury (F)** – jest to suma amplitud fal spójnych, pochodzących od atomów wypełniających komórkę elementarną. Natężenie wiązki ugiętej od rodziny płaszczyzn (hkl) można opisać:

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^N f_n \exp[2\pi i(hx_n + ky_n + lz_n)]$$

gdzie: F - czynnik struktury, $\sim \sqrt{I_{hkl}}$; f - atomowy czynnik rozpraszania, hkl - wskaźniki płaszczyzny dającej wiązkę I_{hkl} , xyz - współrzędne atomu i w komórce elementarnej.

Podczas rejestracji natężeń promieni ugiętych na kryształ w wielu przypadkach obserwuje się zerowe natężenie dla niektórych typów wskaźników hkl. Zjawisko systematycznego wygaszania spowodowane jest:

- typem sieci translacyjnej Bravais
- obecnością osi śrubowych lub płaszczyzn ślizgowych.

Wygaszenia systematyczne (refleksy hkl) dla dowolnych xyz:

Typ sieci translacyjne Bravais	Typ wygaszeń
P	Brak
A	$k+l = 2n+1$
B	$h+l = 2n+1$
C	$h+k = 2n+1$
I	$h+k+l = 2n+1$
F	$k+l = 2n+1, h+l = 2n+1, h+k = 2n+1$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
 realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Wybrane reguły wygaszeń systematycznych związanych z translacyjnymi elementami symetrii:

Orientacja	Elementy symetrii	Typ wygaszeń
dowolna	m, 2, 3, 4, 6	brak
[100]	2_1	$h00$; $h = 2n+1$
[010]	2_1	$0k0$; $k = 2n+1$
[001]	2_1	$00l$; $l = 2n+1$
(100)	b	$0kl$; $k = 2n+1$
	c	$0kl$; $l = 2n+1$
	n	$0kl$; $k+l = 2n+1$
(010)	a	$h0l$; $h = 2n+1$
	c	$h0l$; $l = 2n+1$
	n	$h0l$; $h+l = 2n+1$
(001)	a	$hk0$; $h = 2n+1$
	b	$hk0$; $k = 2n+1$
	n	$hk0$; $h+l = 2n+1$

Wnioski:

1. Symetria dyfrakcji odpowiada symetrii grupy punktowej plus środek symetrii C (grupy dyfrakcyjne Lauego) – układ.
2. Wygaszenia refleksów hkl informują o rodzaju grupy translacyjnej Bravais.
3. Wygaszenia refleksów h00, 0k0, 00l informują o osiach śrubowych równoległych do osi x,y,z.
4. Wygaszenia refleksów 0kl, h0l, hk0 informują o płaszczyznach z poślizgiem równoległych do par osi xy, xz, yz.

Wygaszenia systematyczne zawierają informacje o translacyjnych elementach symetrii i sieciach translacyjnych Bravais

Zadania:

Zadanie 1. Wyprowadź warunek na wygaszenia systematyczne dla sieci translacyjne typu A, I, F.

Przykładowe rozwiązanie:

Wyprowadź warunek na wygaszenia systematyczne dla sieci translacyjnej typu C i I.

Siec translacyjna Bravais C: Współrzędne atomu: xyz; $\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, z$, Translacja: $(a+b)/2$

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

$$F_{hkl} = f_i [\exp 2\pi i (hx + ky + lz) + \exp 2\pi i (h (\frac{1}{2}+x) + k (\frac{1}{2}+y) + lz)]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \exp 2\pi i (\frac{h}{2} + \frac{k}{2})]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \exp \pi i (h + k)]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \cos \pi (h + k) + i \sin \pi (h + k)]$$

$$h + k \in \mathbb{C} \Rightarrow \sin \pi (h+k) = 0$$

- dla $h + k = 2n+1$ $1 + \cos \pi (h+k) = 0 \Rightarrow F_{hkl} = 0$ - wygaszenia
- dla $h + k = 2n$ $1 + \cos \pi (h+k) = 2 \Rightarrow F_{hkl} = 2 f_i \exp 2\pi i (hx+ky+lz) = 2 F_{hkl}(P)$

Siec translacyjna Bravais I: Współrzędne atomu: $xyz; \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z$, Translacja: $(a+b+c)/2$

$$F_{hkl} = f_i [\exp 2\pi i (hx + ky + lz) + \exp 2\pi i (h (\frac{1}{2}+x) + k (\frac{1}{2}+y) + l (\frac{1}{2}+z))]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \exp 2\pi i (\frac{h}{2} + \frac{k}{2} + \frac{l}{2})]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \exp \pi i (h + k + l)]$$

$$F_{hkl} = F_{hkl}(P) [1 + \cos \pi (h + k + l)]$$

- dla $h + k + l = 2n+1 \Rightarrow F_{hkl}(I) = 0$ - wygaszenia
- dla $h + k + l = 2n$ $F_{hkl}(I) = 2 F_{hkl}(P)$

Zadanie 2. Wyprowadź warunek na wygaszenia systematyczne dla płaszczyzny z poślizgiem: $a \perp y$, $n \perp z$ oraz osi śrubowej $2_1 \parallel z$.

Przykładowe rozwiązanie:

Wyprowadź warunek na wygaszenia systematyczne dla płaszczyzny z poślizgiem: $c \perp y$ i $n \perp x$.

➤ Płaszczyzna $c \perp y$: Współrzędne atomu: $x, y, z; x, -y, \frac{1}{2}+z$, Translacja: $c/2$

$$F_{hkl} = f_i [\exp 2\pi i (hx + ky + lz) + \exp 2\pi i (hx + k(-y) + l (\frac{1}{2}+z))]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \exp 2\pi i (-2ky + \frac{l}{2})]$$

dla dowolnych x, y, z rozważamy refleksy $h0l$ (pas osi Y)

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \cos \pi l]$$

$$F_{hkl} = 0 \text{ gdy } \cos \pi l = -1 \Rightarrow l = 2n + 1 - \text{wygaszenia}$$

$$F_{hkl} \neq 0 \text{ gdy } \cos \pi l = 1 \Rightarrow l = 2n$$

➤ Płaszczyzna $n \perp x$: Współrzędne atomu: $x, y, z; -x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z$, Translacja: $(b + c)/2$

$$F_{hkl} = f_i [\exp 2\pi i (hx + ky + lz) + \exp 2\pi i (h(-x) + k (\frac{1}{2}+y) + l (\frac{1}{2}+z))]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \exp 2\pi i (-2hx + \frac{k}{2} + \frac{l}{2})]$$

dla dowolnych x, y, z rozważamy refleksy $0kl$ (pas osi X)

Projekt pn. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \cos \pi(k + l)]$$

$$F_{hkl} = 0 \text{ gdy } \cos \pi(k + l) = -1 \Rightarrow k + l = 2n + 1 - \text{wygaszenia}$$

$$F_{hkl} \neq 0 \text{ gdy } \cos \pi(k + l) = 1 \Rightarrow k + l = 2n$$

Zadanie 3. Wyprowadź warunek na wygaszenia systematyczne dla osi śrubowej $2_1||z$.

Przykładowe rozwiązanie:

Wyprowadź warunek na wygaszenia systematyczne dla osi śrubowej $2_1||y$.

➤ Oś $2_1||y$: Współrzędne atomu: x, y, z ; $-x, \frac{1}{2}+y, -z$, Translacja: $b/2$

$$F_{hkl} = f_i [\exp 2\pi i (hx + ky + lz) + \exp 2\pi i (h(-x) + k(\frac{1}{2}+y) + l(-z))]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \exp 2\pi i (-2hx + \frac{k}{2} - 2lz)]$$

dla dowolnych x, y, z rozważamy refleksy $0k0$ (osiowe)

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \cos \pi k]$$

$$F_{hkl} = 0 \text{ gdy } \cos \pi k = -1 \Rightarrow k = 2n + 1 - \text{wygaszenia}$$

$$F_{hkl} \neq 0 \text{ gdy } \cos \pi k = 1 \Rightarrow k = 2n$$

➤ Oś $2_1||x$: Współrzędne atomu: x, y, z ; $\frac{1}{2}+x, -y, -z$, Translacja: $a/2$

$$F_{hkl} = f_i [\exp 2\pi i (hx + ky + lz) + \exp 2\pi i (h(\frac{1}{2}+x) + k(-y) + l(-z))]$$

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \exp 2\pi i (\frac{h}{2} - 2ky - 2lz)]$$

dla dowolnych x, y, z rozważamy refleksy $h00$ (osiowe)

$$F_{hkl} = f_i \exp 2\pi i (hx + ky + lz) [1 + \cos \pi h]$$

$$F_{hkl} = 0 \text{ gdy } \cosh \pi = -1 \Rightarrow h = 2n + 1 - \text{wygaszenia}$$

$$F_{hkl} \neq 0 \text{ gdy } \cosh \pi = 1 \Rightarrow h = 2n$$

Projekt pn. „*Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych*”
realizowany w ramach Poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Literatura:

1. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż i M. Surowiec, Krystalografia. Podręcznik wspomagany komputerowo, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2001.
2. Z. Kosturkiewicz, Metody krystalografii, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2004.
3. Z. Trzaska-Durski i H. Trzaska-Durska, Podstawy krystalografii, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2003.
4. Z. Trzaska-Durski i H. Trzaska-Durska, Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1994.