

FZM 419

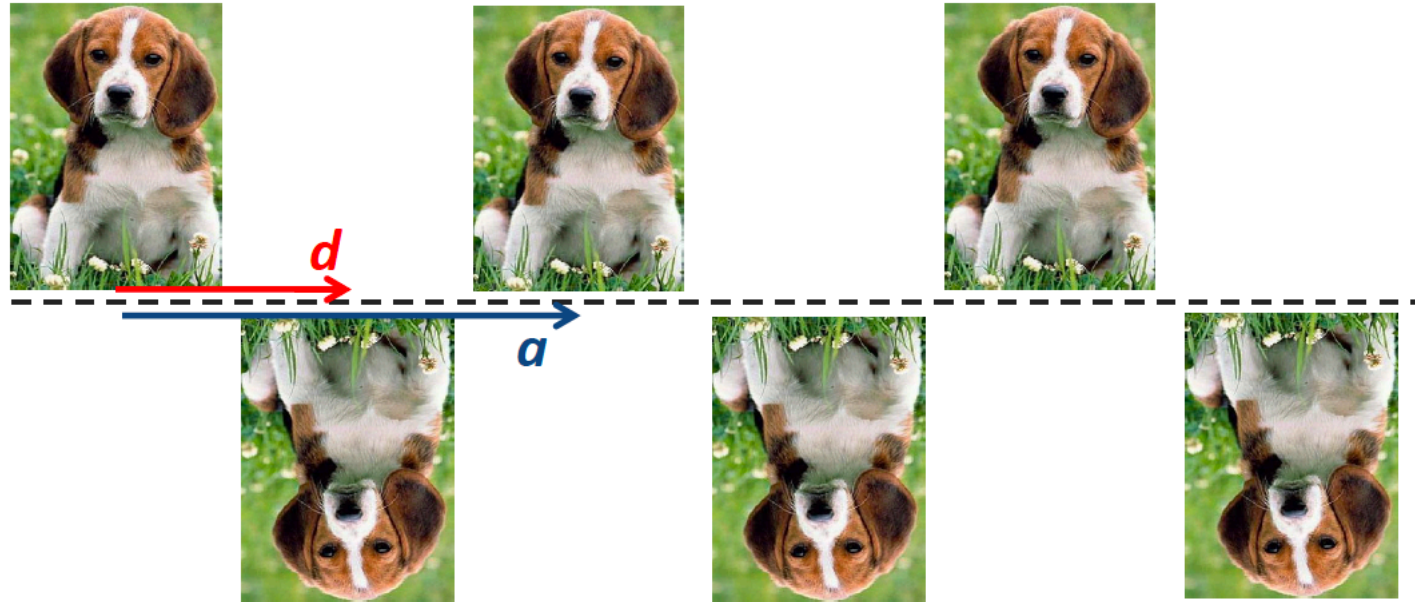
11

# Uzay simetri işlemlerine ve uzay gruplarına giriş

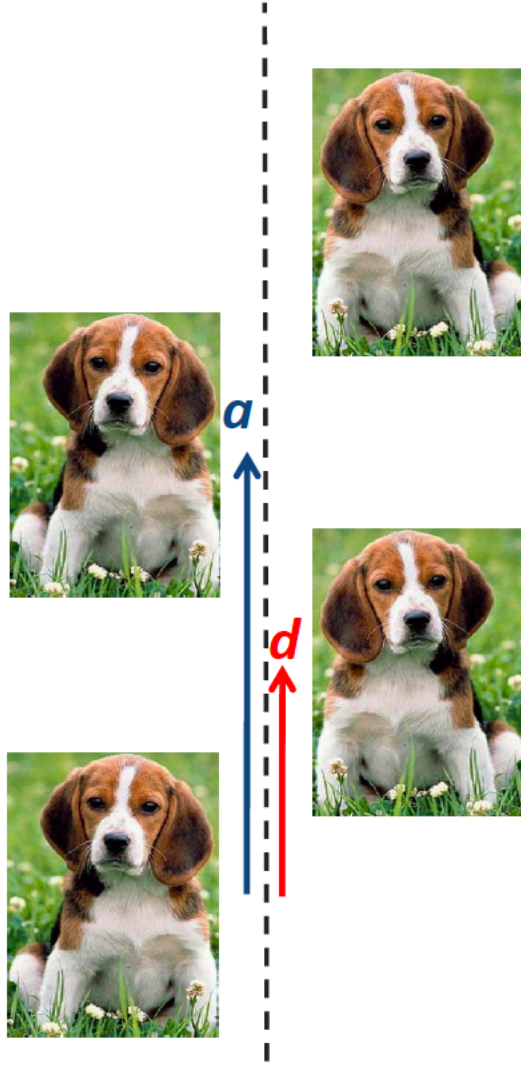
- Uzay simetri işlemleri:

Kayma düzlemleri:

Kayma düzlemi, bir ayna ve ayna boyunca öteleme kombinasyonu ile ilişkili simetri unsurudur.







***d** is the displacement, **a=2d** is a periodicity of a system*



- Bir kayma düzlemindeki yer deęiřtirme her zaman yer deęiřtirme yönündeki sistemin periyodiklięinin yarısıdır

# Kayma düzlemi için notasyon

Notation	Graphical symbol	Actual meaning
$a, b, c$		The glide is along basis vectors $\mathbf{a}$ , $\mathbf{b}$ or $\mathbf{c}$
$g$		The glide is along the line (in 2D)
$n$		The glide is along one of the diagonal [110]
$d$		The glide is along the diagonal [111]

- Kayma düzlemlerini içeren simetri diyagramlarının okunması



1. Glide direction is parallel to the line (for  $a$   $b$  or  $c$  planes)



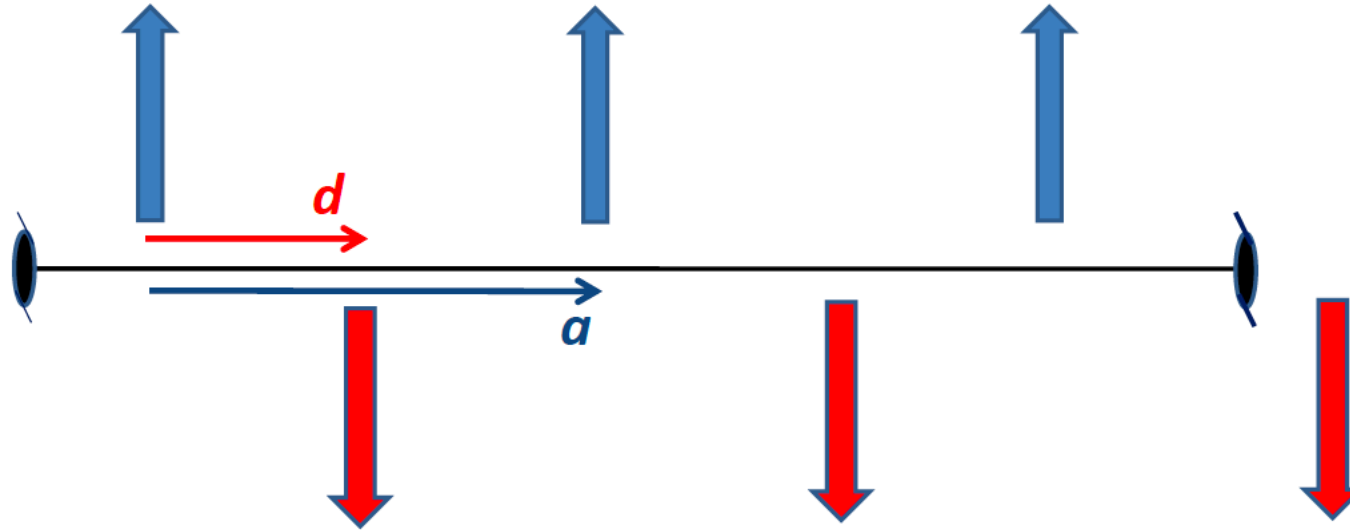
2. Glide direction is perpendicular to the projection plane (for  $a$   $b$  or  $c$  planes)



3. Glide direction between the directions 1 and 2 (for  $n$  planes)

# Vida ekseni

- Vida ekseni, bir dönme ekseni ve eksen boyunca öteleme kombinasyonu ile ilişkili simetri unsurudur.

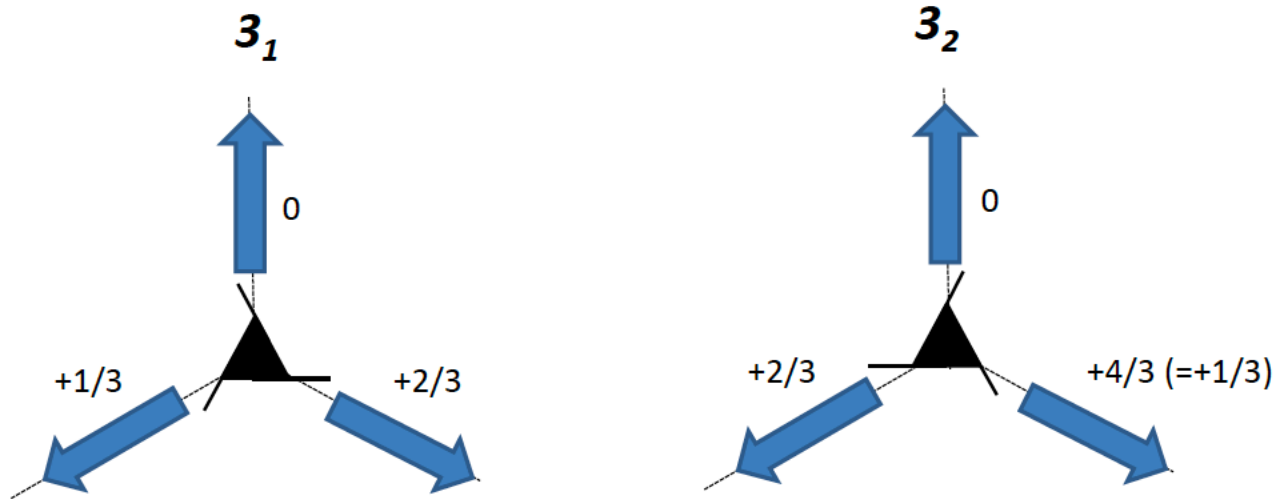


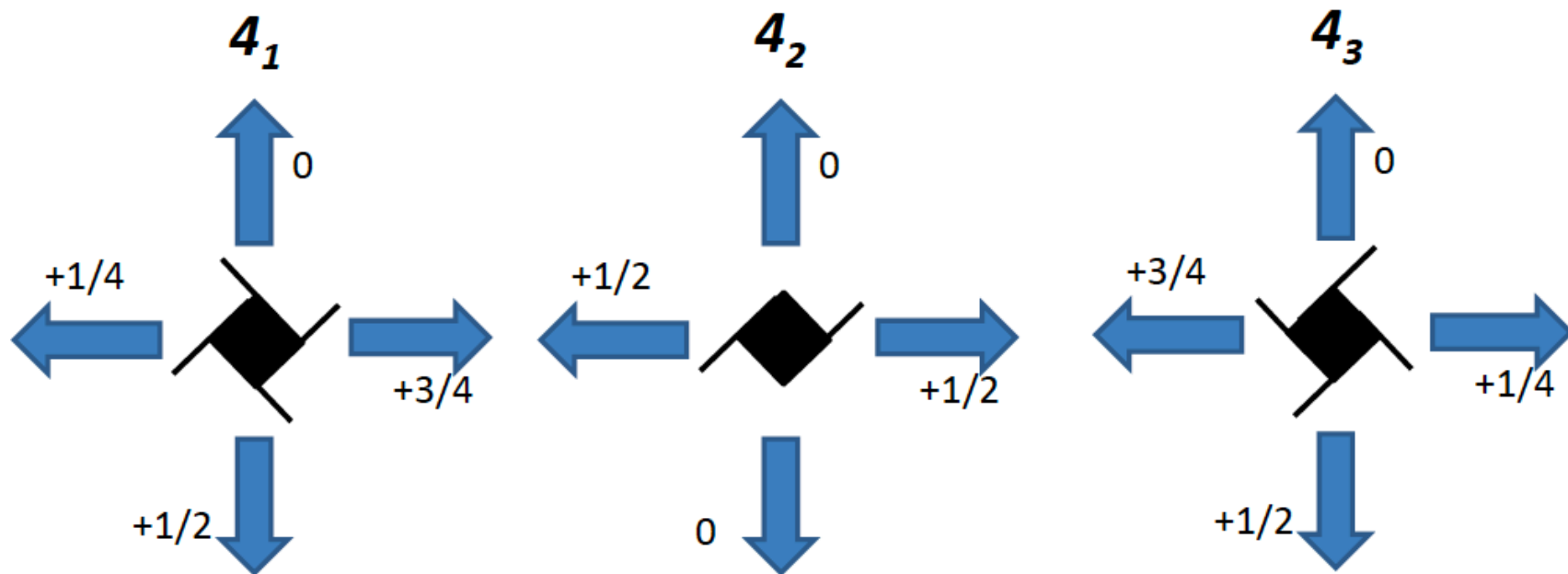
# Vida ekseni gösterimi

$n_m$  ( $n$  denotes rotation angle and  $m$  denotes the displacement)

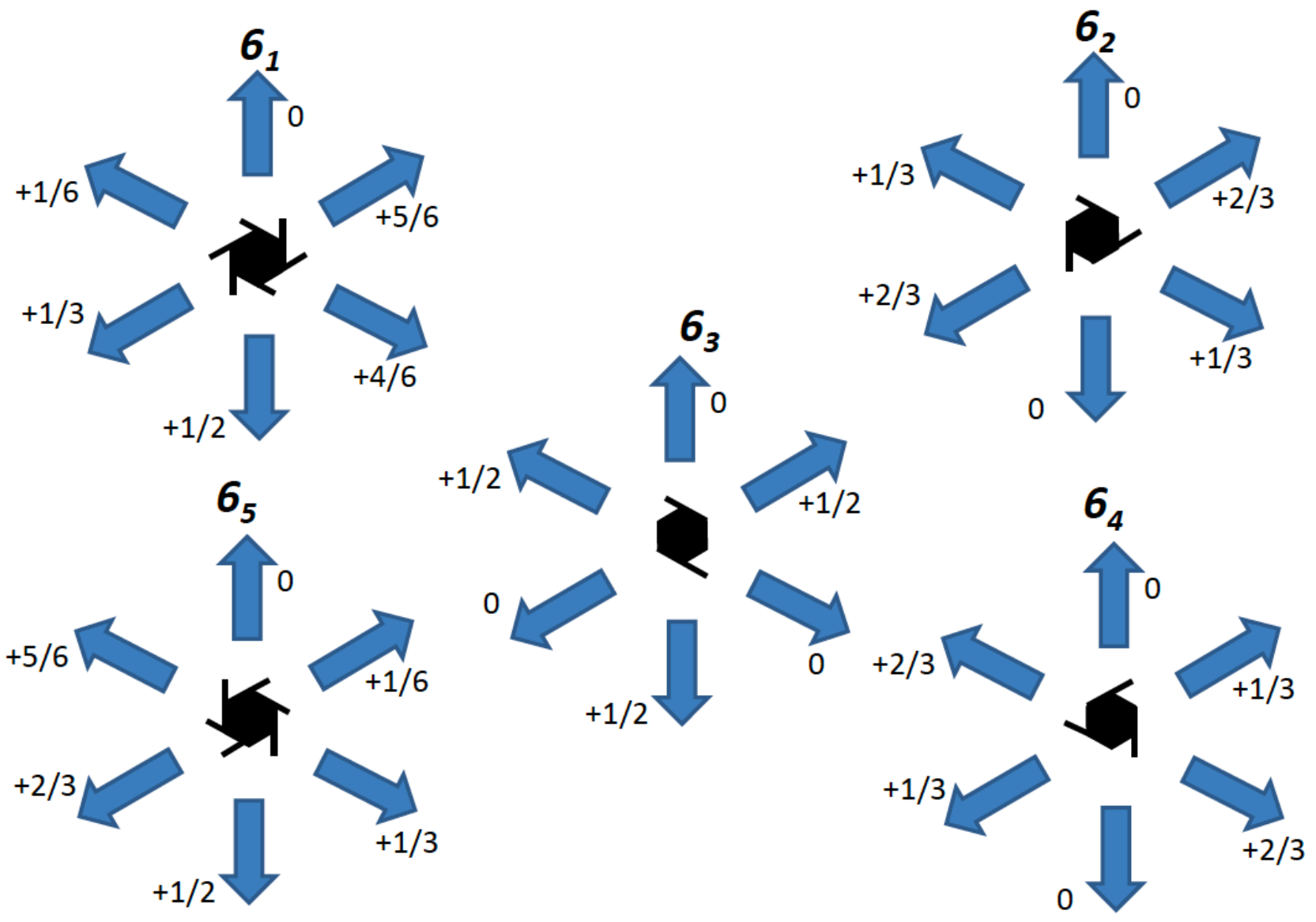
$$\alpha = 360/n$$

$d = a \cdot m/n$ , where  $a$  is the lattice period along direction of the axis

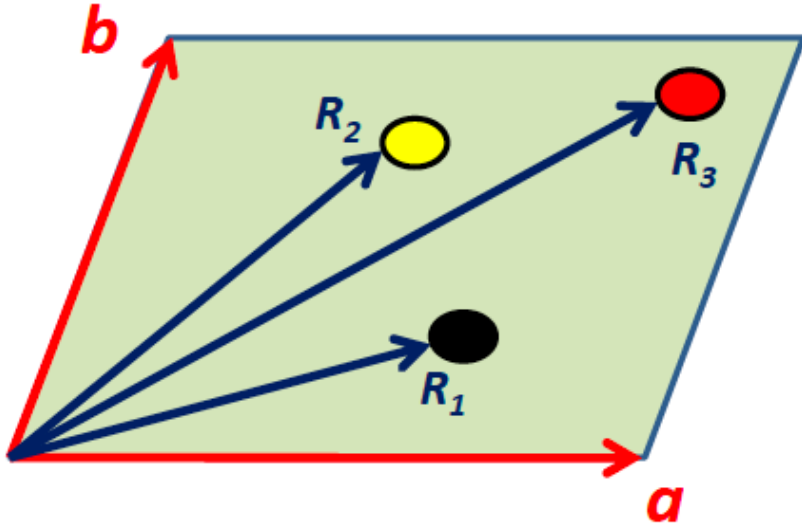








# BİRİM HÜCRE ve ATOMİK POZİSYONLAR



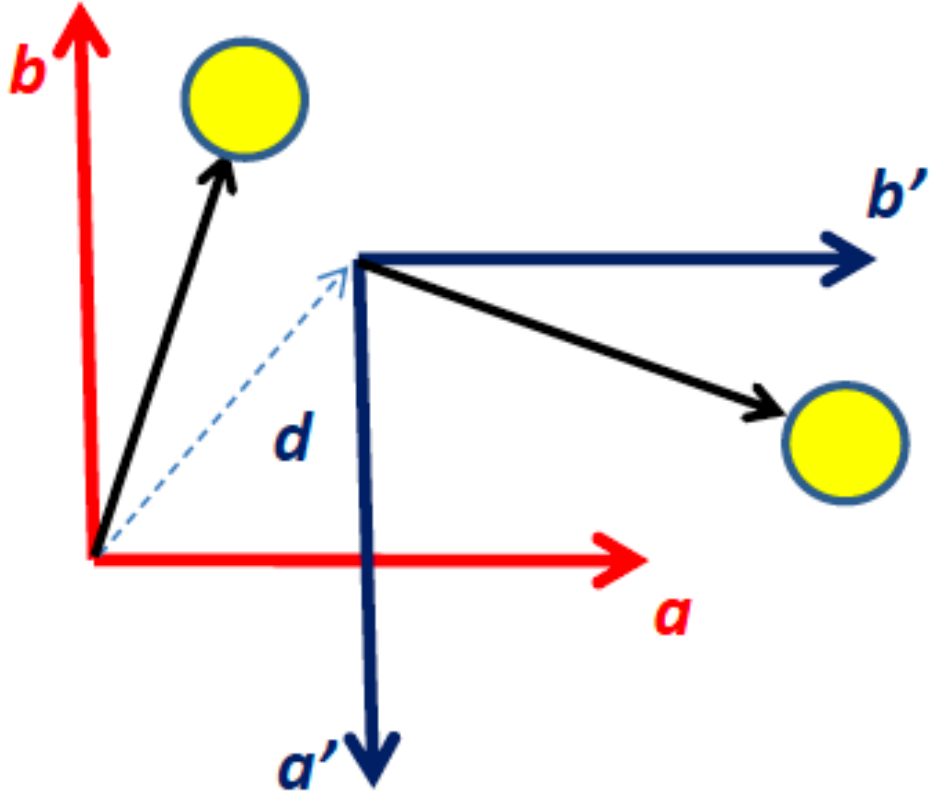
$$R = xa + yb + zc,$$

with  $0 \leq x < 1, 0 \leq y < 1, 0 \leq z < 1$

Örgü ötelemeleri her atomik konuma uygulanır, yani  $[x, y, z]$  koordinatına sahip bir atom varsa, o zaman  $[x + u, y + v, z + w]$  koordinatlarına sahip bir atom da vardır. Çeviri  $[uvw]$  simetri işlemi olarak kabul edilir

- Kristal bir örgü düşünün. Bravais tipine göre, temel vektörlerin geleneksel çiftini (üçlü) seçtik:  $a$ ,  $b$  ve  $c$ . Kristalografik birim hücre,  $a$ ,  $b$  ve  $c$  vektörlerine dayalı olarak paralelkenarın içindeki  $R_1, R_2, \dots, R_n$  bölgelerine atomlar, moleküller vb. Koyarak tanımlanır. Birim hücredeki her bir atomun yeri, fraksiyon atomik konumları,  $x$ ,  $y$  ve  $z$  ile verilir.

# Simetri işlemi için matris gösterimi



- Herhangi bir simetri işlemi, rotasyon matrisi ve yer değiştirme vektörü ile sunulabilir.
- Örgünün  $a$ ,  $b$  ve  $c$  temel vektörleri üzerine inşa edildiğini ve atomların konumlarının kesirli koordinatlarla  $[xyz]$  verildiğini ve böylece  $R = xa + yb + zc$  olduğunu varsayalım. Belirli simetri işlemiyle ilgili hareketi uygularsak,  $a$ ,  $b$  ve  $c$  vektörleri  $a'$ ,  $b'$  ve  $c'$ 'ye dönüşür ve orijini  $d$  vektörü ile yer değiştirir. Simetri eşdeğer atomunun konumu

$$\mathbf{R}' = x \mathbf{a}' + y \mathbf{b}' + z \mathbf{c}' + \mathbf{d} = x_1 \mathbf{a} + y_1 \mathbf{b} + z_1 \mathbf{c}$$

$$\begin{cases} \mathbf{a}' = S_{11} \mathbf{a} + S_{21} \mathbf{b} + S_{31} \mathbf{c} \\ \mathbf{b}' = S_{12} \mathbf{a} + S_{22} \mathbf{b} + S_{32} \mathbf{c} \\ \mathbf{c}' = S_{13} \mathbf{a} + S_{23} \mathbf{b} + S_{33} \mathbf{c} \\ \mathbf{d} = d_1 \mathbf{a} + d_2 \mathbf{b} + d_3 \mathbf{c} \end{cases}$$



$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix}$$

*Rotation matrix*

*Displacement vector*

# Simetri işlemlerinin matrisler cinsinden kombinasyonu

Symmetry operation 1:  $\{\mathbf{S}_1, \mathbf{d}_1\}$       $\mathbf{R}_1 = \mathbf{S}_1 \mathbf{R}_0 + \mathbf{d}_1$

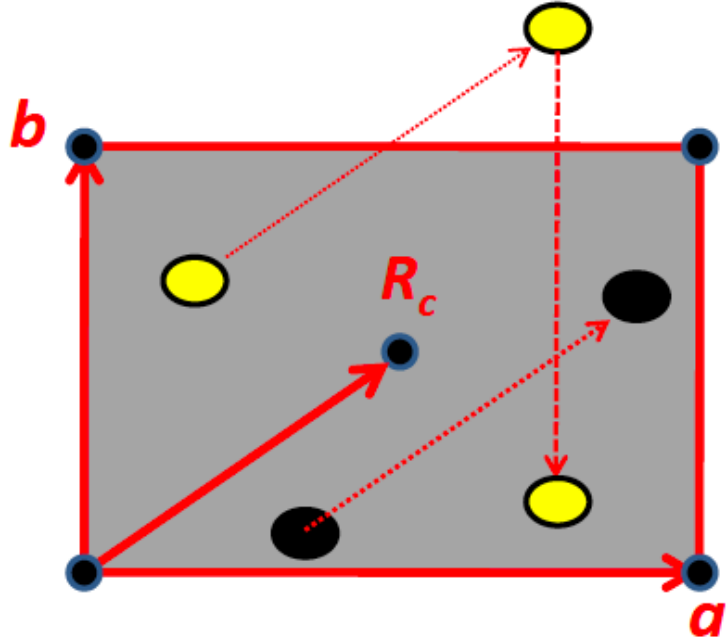
Symmetry operation 2:  $\{\mathbf{S}_2, \mathbf{d}_2\}$       $\mathbf{R}_2 = \mathbf{S}_2 \mathbf{R}_0 + \mathbf{d}_2$

Symmetry operation 3:  $\{\mathbf{S}_1, \mathbf{d}_1\} \rightarrow \{\mathbf{S}_2, \mathbf{d}_2\}$

$$\mathbf{R}_2 = \mathbf{S}_2 \mathbf{R}_1 + \mathbf{d}_2 = \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_1 \mathbf{R}_0 + \mathbf{S}_2 \mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2$$

Simetri işleminin kombinasyonu  $\mathbf{S}_2 \mathbf{S}_1$  dönme matrisi ve  $\mathbf{S}_2 \mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2$  yer değiştirme vektörü ile temsil edilir.

- 7 (14'ün dışında) Bravais örgü tipi için temel vektörlerin, birim hücrenin ek nokta içerdiği şekilde seçildiğini biliyoruz. Bu durumlar için merkezleme vektörü ile öteleme (örneğin  $[1/2 \ 1/2 \ 1/2]$ ) aynı zamanda bir simetri işlemidir



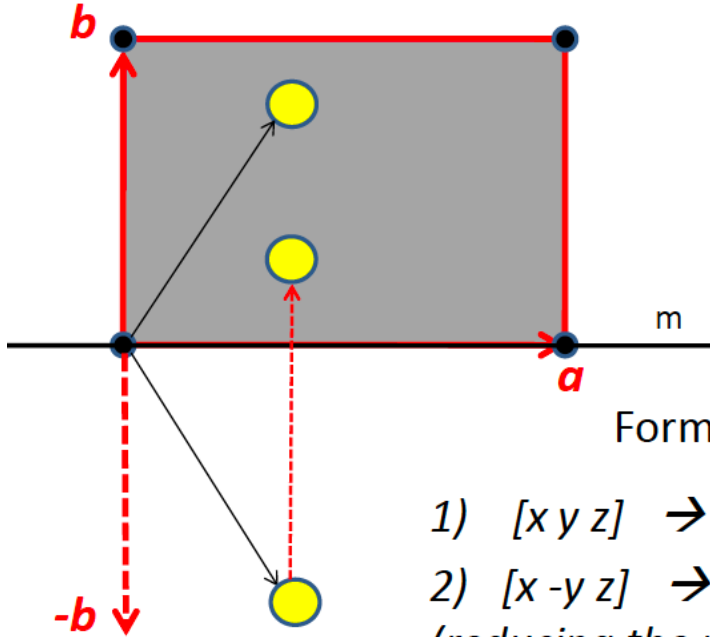
Forming crystallographic unit cell:

$$1) \ [x \ y \ z] \rightarrow [x \ y \ z] + [x_c \ y_c \ z_c]$$

$$2) \ [x \ y \ z] \rightarrow [x \ y \ z] + [x_c \ y_c \ z_c] + [uvw]$$

(reducing the position to the crystallographic unit cell, i.e. providing  $0 \leq x < 1, 0 \leq y < 1, 0 \leq z < 1$ )

# Birim hücre ve nokta simetri işlemleri



Forming crystallographic unit cell:

$$1) [x y z] \rightarrow [x -y z]$$

$$2) [x -y z] \rightarrow [x -y z] + [uvw]$$

(reducing the position to the crystallographic unit cell  $0 \leq x < 1, 0 \leq y < 1, 0 \leq z < 1$ )

- Kristalin dikdörtgen kristal sisteme ait olduğunu ve ayna düzleminin a'ya paralel olduğunu varsayalım. Daha sonra atom simetri işlemiyle kopyalanır