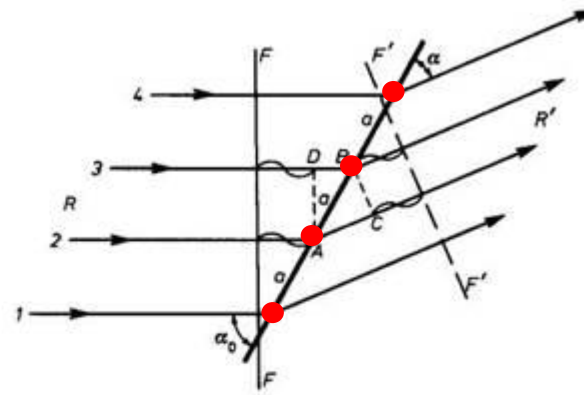
# **WWW11, warsztaty z krystalografii, zadania kwalifikacyjne** (max 10 pkt)

(nie mam preferencji co do formatu rozwiązań, byle dało się je odczytać)

## **Zadanie 1, część 1** (2 pkt)

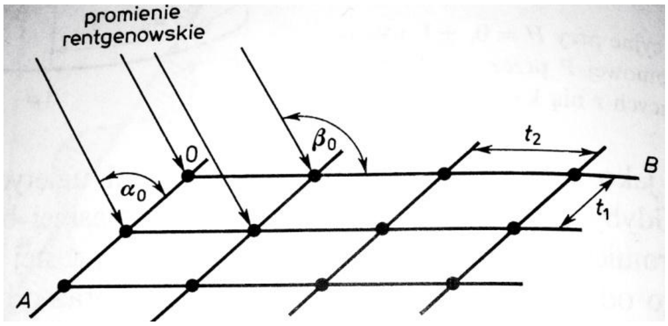
Wyprowadź równanie Lauego (bardzo podobne do prawa Bragga) dla jednowymiarowego kryształu.

O co chodzi?




Jednowymiarowy kryształ składa się z atomów (czerwone) odległych od siebie o $a$. Na te atomy pada światło pod kątem $\alpha_0$ Te atomy potrafią rozproszyć to światło w dowolnym kierunku. Ale światło z sąsiednich atomów będzie ze sobą interferować, więc maksymalne natężenie będzie tam, gdzie różnica dróg optycznych jest równa wielokrotności długości fali (polecam przypomnieć sobie wyprowadzenie prawa Bragga). Pod jakim kątem $\alpha$ natężenie światła rozproszonego będzie największe? To wszystko jest w 3D, więc skoro mam tylko warunek na kąt $\alpha$, a światło jest rozpraszane równomiernie wokół kryształu, najwięcej światła będzie na całej powierzchni odchylonej o $\alpha$ względem osi kryształu. Taka powierzchnia to… stożek! Źródło: rentgenografia.prv.pl/RownanieLauego.html

## **Zadanie 1, część 2** (4 pkt)




Mam kryształ dwuwymiarowy, czyli siatkę atomów, ułożonych wzdłuż jednej osi co $t_1$, a wzdłuż drugiej osi co $t_2$. Jakie są warunki na kąt rozproszenia, dla którego będzie najwięcej światła? Dlaczego będą potrzebne dwa kąty? Możesz założyć, że osie są do siebie prostopadłe.

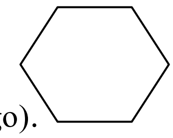
Rysunek z książki Bojarskiego o krystalografii.

## **Zadanie 1, część 3** (niekonieczna do kwalifikacji, ale może pomóc i dać dodatkowe 2 pkt)

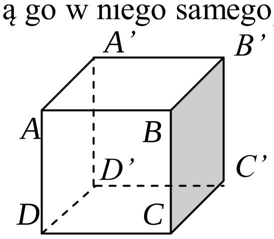
Co się zmieni, gdy osie kryształu nie będą do siebie prostopadłe?

Zadanie 2 jest także zadaniem na warsztaty z Geometrycznej Teorii Grup.
Na 2. stronie krótki wstęp do warsztatów, który może pomóc w zadaniu 2.

## **Zadanie 2, część 1** (2 pkt)



W przestrzeni $\mathbb{R}^2$ dany jest sześciokąt foremny.
Wypisz wszystkie jego izometrie własne (tzn. izometrie, która przekształcają go w niego samego).




## **Zadanie 2, część 2** (2 pkt)

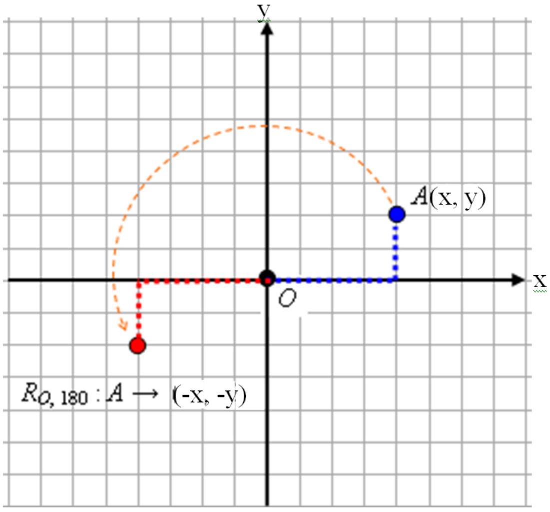
W przestrzeni $\mathbb{R}^3$ dany jest sześcian $ABCDA'B'C'D'$ ($ABCD$ i $A'B'C'D'$ to równoległe ściany, krawędzie $AA'$, $BB'$, $CC'$, $DD'$ są parami równoległe). Niech $\sigma_1$ będzie symetrią przestrzeni względem płaszczyzny $ABC'D'$, zaś $\sigma_2$ - symetrią względem płaszczyzny $BCD'A'$. Symetrie te są izometriami własnymi danego sześcianu. Jakie izometrie własne sześcianu można otrzymać przez składanie $\sigma_1$ i $\sigma_2$ (dowolną liczbę razy i w dowolnej kolejności)? Opisz ich jak najwięcej.

## **Zadanie 2, część 3** (niekonieczna do kwalifikacji, ale może pomóc i dać dodatkowe 2 pkt)

Rozważamy sześcian z poprzedniego zadania. Niech $\rho_1$ będzie obrotem przestrzeni o 120 stopni względem osi zawierającej przekątną $AC'$, zaś $\rho_2$ będzie obrotem przestrzeni o 120 stopni względem osi zawierającej przekątną $BD'$. Opisz wszystkie izometrie własne sześcianu, które można otrzymać składając $\rho_1$ i $\rho_2$ (dowolną liczbę razy i w dowolnej kolejności).

# Wstęp do warsztatów z krystalografii

Operacją symetrii (w skrócie symetrią) nazywamy izometrię, która zachowuje jakiś zbiór punktów w przestrzeni (każda izometria własna jakiejś figury jest symetrią, mówimy wtedy o symetrii tej figury).




Przykład: w przestrzeni $\mathbb{R}^3$ obrót punktu o 180 stopni wokół osi Z zamienia współrzędną x na –x oraz y na –y:

$$\begin{bmatrix} macierz\ obrotu \\ o\ 180°\ wokół\ osi\ z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ z \end{bmatrix}.$$

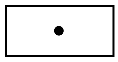
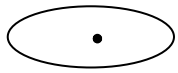
Odbicie wzgl. płaszczyzny określonej równaniem $x = y = 0$ daje

$$\begin{bmatrix} macierz\ odbicia\ wzgl. \\ płaszczyzny\ x = y = 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ -z \end{bmatrix}$$

Gdy najpierw obrócę punkt o 180 stopni wzgl. osi z, a potem odbiję względem płaszczyzny x=y=0, dostanę to samo, co gdy najpierw odbiję, a potem obrócę, wzory poniżej. W obu przypadkach wyjdzie to samo, a powstałą operację nazywamy symetrią względem środka symetrii (w tym przypadku punktu x=y=z=0). Źródło obrazka

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{bmatrix}$$

Jak widać, złożenie dwóch symetrii to po prostu mnożenie macierzy. Takie mnożenie nie zawsze jest przemienne, więc wynik złożenia dwóch symetrii może zależeć od kolejności, w jakiej je składamy.

Warto uściślić co to znaczy, że symetria „zachowuje jakiś zbiór punktów”: jak mam zbiór punktów (figurę), który jest zachowany przez tę symetrię, to każdy punkt tego zbioru jest przyporządkowywany przez tę symetrię jakiemuś (niekoniecznie temu samemu) punktowi z tego zbioru. Dlatego np. obrót o 180 stopni zachowuje bardzo wiele figur, np. takie (jeśli oś obrotu jest w geometrycznym środku figury):  

Są też specjalne punkty, które są przyporządkowane przez operację symetrii im samym: nazywamy je punktami stałymi. Dla dowolnego obrotu jego zbiór punktów stałych to oś obrotu. Dla odbicia względem płaszczyzny zbiór punktów stałych to właśnie ta płaszczyzna. W przykładzie na górze strony złożenie obrotu i odbicia dało symetrię względem środka symetrii (zwaną niepoprawnie[1] przez krystalografów inwersją względem punktu). Ten „środek symetrii” to właśnie zbiór (jednoelementowy) punktów stałych powstałej symetrii, który jest (nieprzypadkowo) częścią wspólną płaszczyzny $x = y = 0$ i osi Z. Na zajęciach często będziemy nazywać zbiór punktów stałych jakiejś symetrii „elementem symetrii” (np. oś Z jest elementem symetrii).

Gdy mam jakąś figurę, może być wiele symetrii, które ją zachowują. Złożenie dwóch symetrii, które zachowują tę figurę, też jest symetrią zachowującą tę figurę. Każda figura ma symetrię „tożsamościową” (identyczność), która przyporządkowuje każdemu punktowi jego samego. Złożenie identyczności z dowolną inną symetrią X daje symetrię X. Gdy złożę 2 symetrie (np. YZ), a potem złożę je z 3. symetrią (np. X), to otrzymam X(YZ), czyli to samo co składając w kolejności (XY)Z. Inaczej mówiąc, symetrie danej figury tworzą grupę (działaniem jest składanie symetrii). Każdej symetrii można przyporządkować macierz, więc równie dobrze mogę rozpatrywać grupę macierzy (z działaniem mnożenia macierzy).
Gdy wezmę jakieś symetrie (niekoniecznie dwie) i będę je (oraz wyniki tego składania) składał aż do skutku (tzn aż w wyniku składania dowolnych dwóch symetrii nie powstanie żadna nowa), też dostanę grupę. Te elementy, od których zaczynałem będą generatorami tej grupy.

Na warsztatach nie będziemy rozpatrywać dokładnie $\mathbb{R}^3$, ponieważ kryształy mają strukturę periodyczną, i co jakąś odległość wszystko się powtarza. Dlatego będziemy badać komórkę elementarną (najmniejszą powtarzalną część kryształu), w której jeśli coś wyjdzie z jednej ściany, musi wejść z naprzeciwka[2]. Nakłada to pewne warunki na możliwe operacje symetrii - warsztaty zaczniemy właśnie od opisania możliwych operacji symetrii w kryształach i uzasadnienia, dlaczego są takie a nie inne.

[1] W geometrii inwersja oznacza całkiem inne przekształcenie, którym nie będziemy się zajmować.
[2] Jeśli ktoś ma plugin Mathematici, polecam obejrzeć to, a wszystkim polecam obejrzeć ten filmik i inne na prawo od niego.