Modelovanie kryštálov

Stanislav Fecko

Vedúci práce: Marián Fecko

19.04.2011

Obsah

Úvod

Úvod

Kocka ja na prvý pohľad **symetrické** teleso.
Matematicky to znamená,
že má dostatočne bohatú **grupu symetrie**.

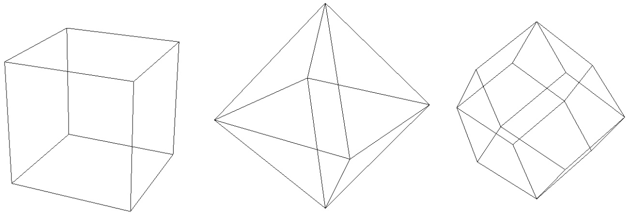
Zaujímavé je, že **tú istú** grupu majú **aj iné** telesá.
V prírode ich nachádzame ako **kryštály so symetriou kocky**.

Cieľom práce bolo modelovať kryštály s touto symetriou.

Úvod (2)

Existuje niekoľko typov tzv. **čistých tvarov** a všeobecný kryštál je ich **kombináciou**.

Takýmito čistými tvarmi sú napríklad **kocka**, **osemsten**, alebo **dvanásťsten**.



Čisté tvary

Podľa učebnice [Phillips, 1963] je čistým tvarom

"súbor všetkých stien, ktoré musí kryštál obsahovať, aby zachoval symetriu, ak je jedna stena zadaná"

Z pohľadu **teórie grúp** pre nás steny kryštálu tvoria množinu, na ktorej **pôsobí grupa** symetrií kocky [Sternberg, 1994].

Hľadaný čistý tvar je potom **orbitou** tohoto pôsobenia.

Postup

Grupa symetrie kocky

Najprv si odpovedzme na otázku,
s akou grupou symetrie budeme mať do činenia.

Budeme uvažovať grupu **lineárnych** zobrazení $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$,
ktoré zobrazia **kocku samu do seba**
(vrcholy do vrcholov, hrany do hrán a steny do stien).

Nemusia byť nevyhnutne hmotne realizovateľné
(napríklad stredová súmernosť podľa ťažiska).

Grupa symetrie kocky (2)

Majme jednotkovú kocku (s vrchomi $[\pm 1, \pm 1, \pm 1]$).
Uvažujme zobrazenia

$$(x, y, z) \mapsto (u, v, w),$$

kde u,v,w sú permutované prvky $\pm x$, $\pm y$ a $\pm z$.

Ukazuje sa, že táto množina transformácií naozaj kocku zachováva a zároveň že sú to jediné zobrazenia s danou vlastnosťou.

Grupa symetrie kocky (3)

Táto grupa sa označuje O_h (od slova octaheder).
Počet jej prvkov je $2^3.3! = 48$.

$$\sharp(O_h) = 48$$

Je to jedna z konečných podgrúp grupy $O(3)$.

Orbity

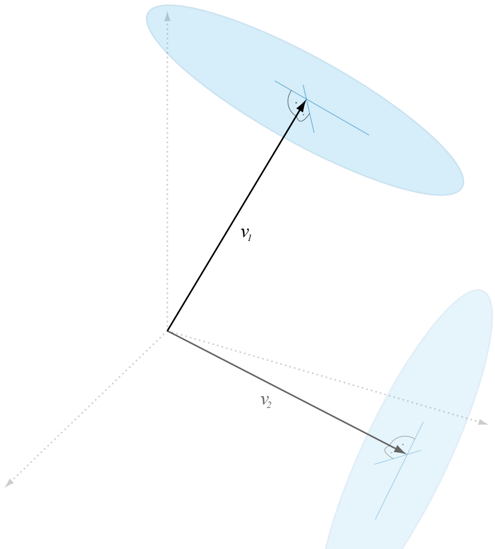
Grupa transformácií pôsobí na množine **stien** kryštálu.

Ukazuje sa, že jednoduchšie ako pracovať so stenami
je pracovať s ich **normálovými vektormi**.

Ak upustíme od škálovania celého kryštálu, tak skúmaná množina vektorov je množina bodov **jednotkovej sféry**.

Z pôsobenia grupy na stenách sa tak stáva pôsobenie
na jednotkových vektoroch, resp.
na **bodoch jednotkovej sféry**.

Orbity



Orbity (2)

Množina bodov sféry sa vďaka pôsobeniu grupy rozpadá na **orbity**.

Všeobecne platí pravidlo, že
počet prvkov orbity musí deliť počet prvkov celej grupy.
A keďže počet prvkov našej grupy je 48,
počet prvkov každej z orbít musí **deliť** číslo 48.

Už z toho vieme, že v princípe môžu v našom prípade vzniknúť
len 1,2,3,4,6,8,12,16,24 alebo 48-prvkové orbity.

Orbity (3)

Orbita s n prvkami je n-prvková množina vektorov,
ktoré definujú n rovín.
Tie zase reprezentujú steny kryštálu.
Orbita s n prvkami teda generuje n-sten.

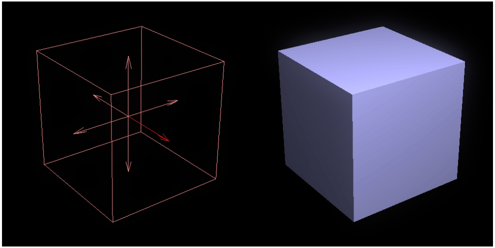
Preto 1,2 a 3-prvkové orbity vzniknúť **nemôžu**.

Na viac-steny však už niekedy nestačí len predstavivosť.

Príklady orbít

Ako najjednoduchší príklad poslúži kocka. Ukazuje sa, že orbita generovaná vektorom $(1,0,0)$ má 6 prvkov, a sú to vektory

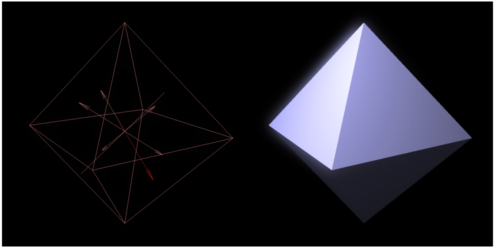
$$\begin{array}{ccc} (1,0,0) & (0,1,0) & (0,0,1) \\ (-1,0,0) & (0,-1,0) & (0,0,-1) \end{array}$$



Príklady orbít (2)

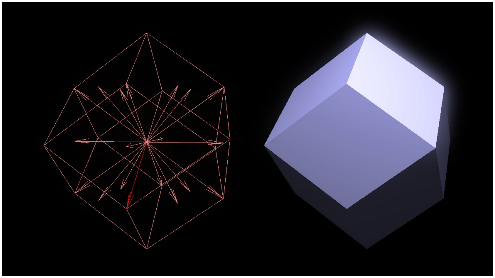
Ďalší príklad je **osemsten**: 8-prvková orbita je generovaná vektorom $(1,1,1)$ (nekomplikujme si život normalizáciou)

$$\begin{array}{cccc} (1,1,1) & (-1,-1,-1) & (-1,1,1) & (1,-1,1) \\ (1,1,-1) & (-1,-1,1) & (1,-1,-1) & (-1,1,-1) \end{array}$$



Príklady orbít (3)

Ešte jeden príklad: 12-prvková orbita generovaná vektorom $(1, 0, 1)$



Systematické hľadanie orbít

Máme teda tri orbity.
Naším cieľom je ale nájsť **všetky** orbity. Ako na to?

Už predstaviť si dvanásťsten vie dať predstavivosti pekne zabrať.
A to tušíme, že nás čakajú ešte ťažšie kryštály...

Preto som sa rozhodol orbity nehľadať iba intuíciou, ale **systematicky** testovať **všetky body** na sfére a pre každý z nich zistiť, koľkoprvkovú orbitu generuje.

Keďže sféra sa dá jednoducho parametrizovať dvoma hodnotami, θ a ϕ, potrebujem prehľadať obdĺžnik.

Systematické hľadanie orbít (2)

Program teda systematicky bod za bodom prechádza skúmanou 2D oblasťou ($\phi \in < 0, 360^\circ >; \theta \in < -90^\circ, 90^\circ >$) a v každom bode si vygeneruje celú 48-prvkovú množinu.

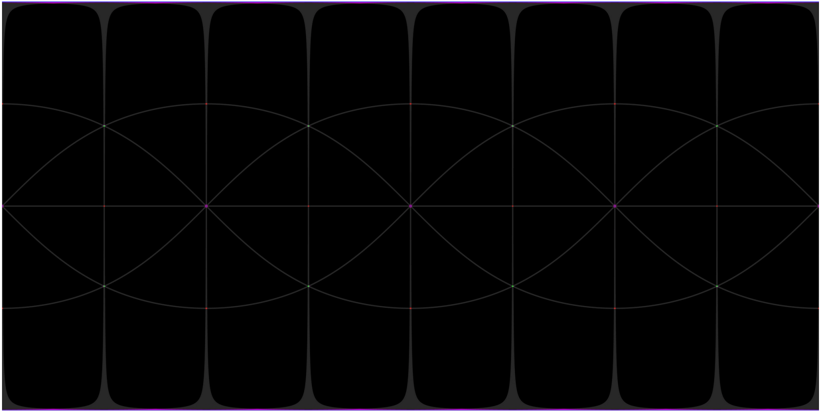
Keďže ale niektoré vektory sa mohli v 48-tici nachádzať **viackrát**, ďalším krokom bolo **vyhodiť duplikáty**. Tak som napokon dostal nejaký počet vektorov. A podľa tohoto počtu som bodu na sfére priradil **farbu**.

Výpočet som realizoval pomocou textúry, do ktorej som si predpočítaval farby a ktorú som nakoniec nalepil na guľu a zobrazil.

Výsledky

Nájdené orbity

Výsledná textúra vyzerá takto:



Nájdené orbity (2)

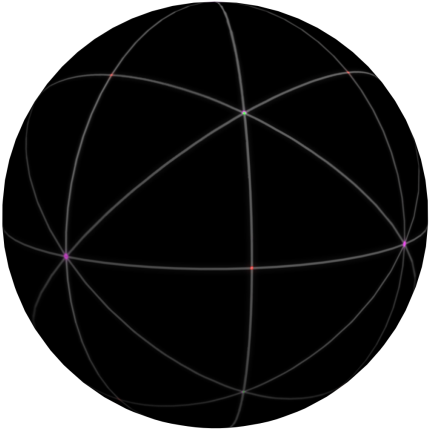
Čo z nej vidno?
Ukazuje, že existuje:

- nekonečne veľa 48-prvkových orbít (čierne body)
- nekonečne veľa 24-prvkových orbít (sivé body)
- jedna 12-prvková orbita (červené body)
- jedna 8-prvková orbita (zelené body)
- jedna 6-prvková orbita (fialové body)

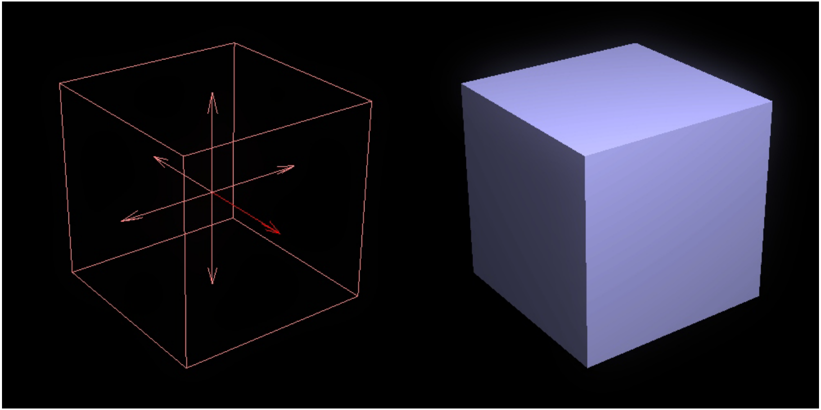
A nič viac :-)

Nájdené orbity (3)

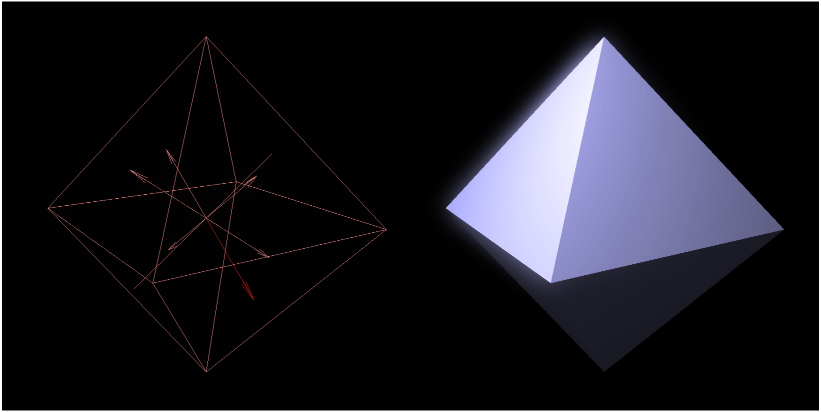
To isté na sfére:



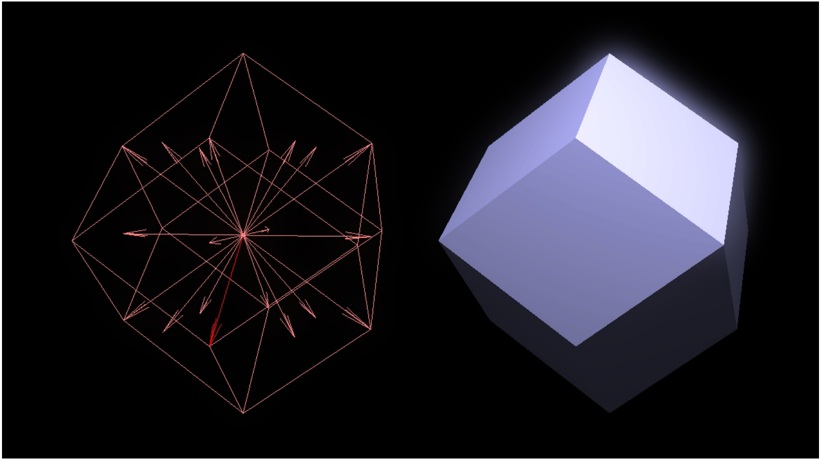
6-prvková orbita



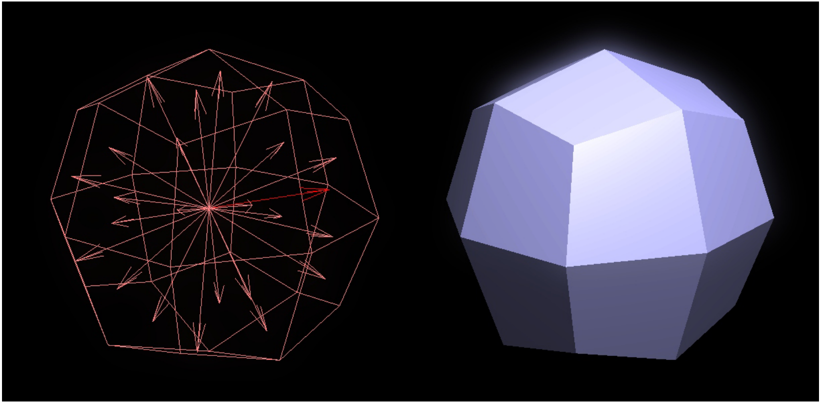
8-prvková orbita



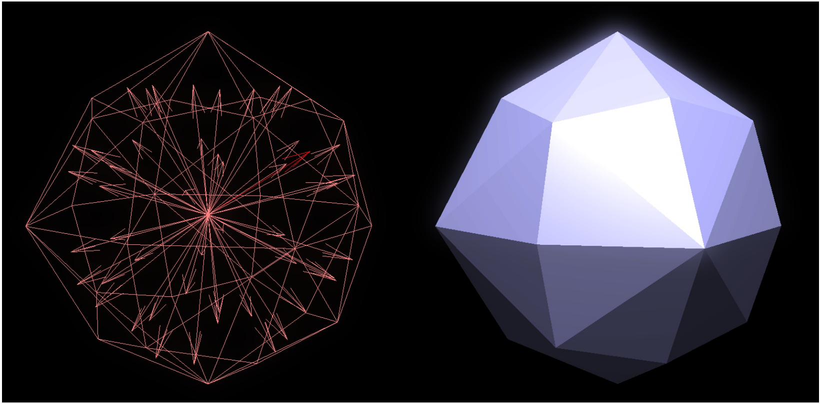
12-prvková orbita



24-prvková orbita

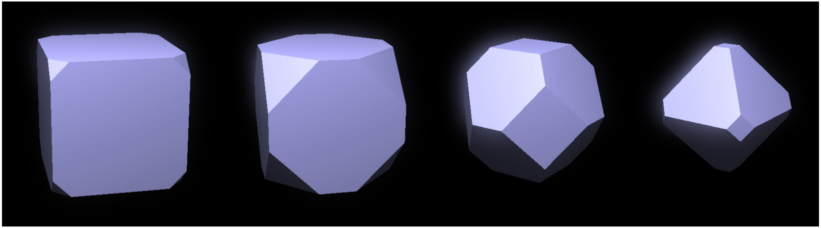


48-prvková orbita



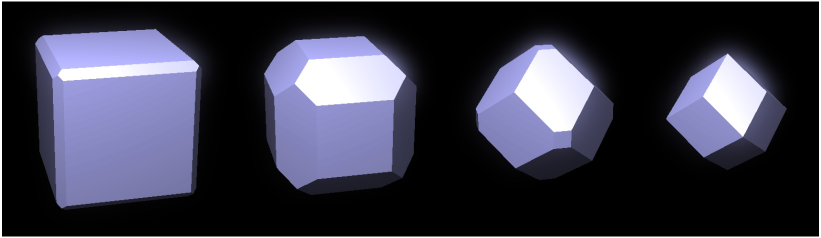
Zmiešané kryštály

Kombinácie šesťprvkovej a osemprvkovej orbity
s rôznym pomerom váh:



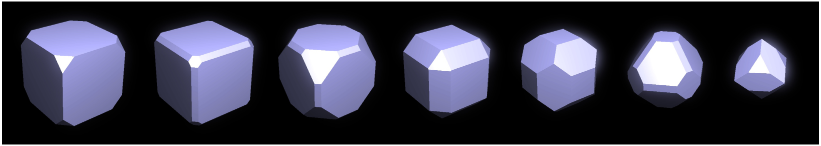
Zmiešané kryštály (2)

Kombinácie šesťprvkovej a dvanásťprvkovej orbity s rôznym pomerom váh:



Zmiešané kryštály (3)

Kombinácie šesťprvkovej, osemprvkovej a dvanásťprvkovej orbity s rôznym pomerom váh:



Možnosti rozšírenia

Celý čas sme pracovali s grupou symetrií kocky O_h.

Metóda sa dá ale rovnako dobre použiť na nájdenie orbít **aj pre iné** konečné podgrupy grupy O(3).

Ďakujem za pozornosť

Sternberg, S. (1994).
Group Theory and Physics
Cambridge University Press

Phillips, F.C. (1963).
An Introduction to Crystallography
Wiley, New York