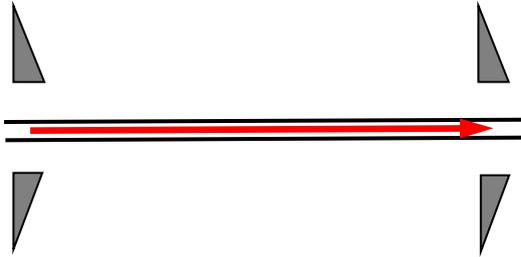


Кристаллохимия: строение
кристаллических веществ и материалов

лекция №5

**Построение графиков и классификация
пространственных групп.
«Интернациональные таблицы».**

Трансляции, параллельные элементам симметрии кристалла, **не влияют на эти элементы**



Трансляции, перпендикулярные к элементам симметрии кристалла, **не порождают новых элементов симметрии**, но распределяют по ячейке существующие элементы (в том числе входящие в состав других элементов:
 $2 \subset 4$, $m \subset \bar{6}$ и т.д.)

Трансляции, направленные **наклонно**
к элементам симметрии кристалла,

порождают новые элементы симметрии.

При этом все исходные элементы сохраняются,

а возникшие новые элементы симметрии

сдвигаются относительно исходных элементов

$$R + t_{\text{накл}} \rightarrow R'(t_{\perp}/2)$$

где $t_{\text{накл}} = t_{\parallel} + t_{\perp}$ **относительно элемента R:**

t_{\parallel} «вливается» в R, **образуя новый элемент R'**,

t_{\perp} переносит полученный элемент **R'** на $t_{\perp}/2$

Элемент симметрии + наклонная трансляция

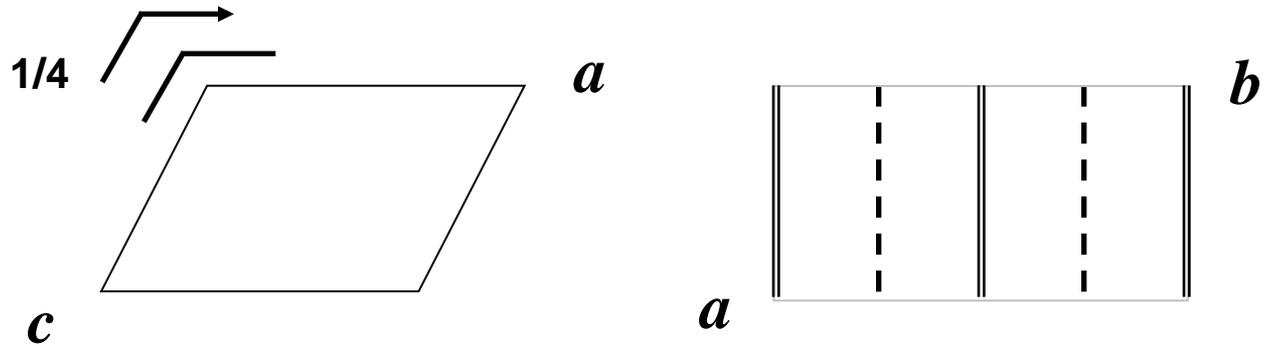
$$\mathbf{t} = \mathbf{t}_{\parallel} + \mathbf{t}_{\perp}$$

\mathbf{t}_{\parallel} «вливаётся», образуя новый элемент,
 \mathbf{t}_{\perp} переносит новый элемент на $t_{\perp}/2$

Моноклинные C: трансляция $t_c = a/2 + b/2$

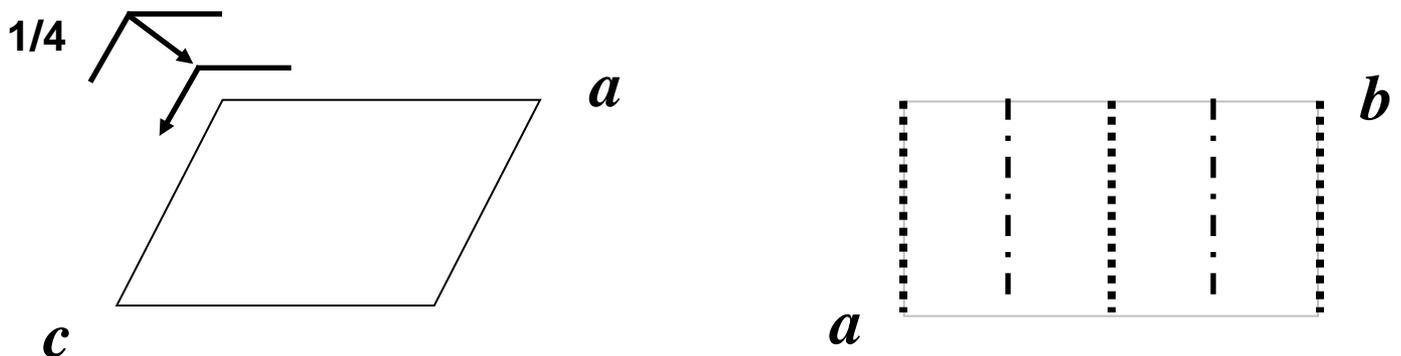
$a/2 + \text{пл-сть } m \rightarrow \text{пл-сть } a$ $b/2 + \text{пл-сть } a \rightarrow \text{сдвиг на } b/4$

Группа **Cm**:
 $t_c + Pm$



$a/2 + \text{пл-сть } c \rightarrow \text{пл-сть } n$ $b/2 + \text{пл-сть } n \rightarrow \text{сдвиг на } b/4$

Группа **Cc**:
 $t_c + Pc$



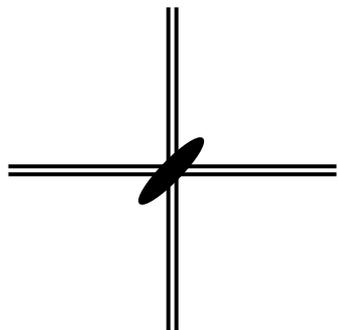
Взаимодействие открытых элементов симметрии с закрытыми и открытыми элементами:

- (1) возникновение нового элемента
- (2) перемещение нового элемента

Если $\mathbf{s} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ – суммарный сдвиг в составе взаимодействующих элементов $R_1(\mathbf{s}_1)$ и $R_2(\mathbf{s}_2)$, то

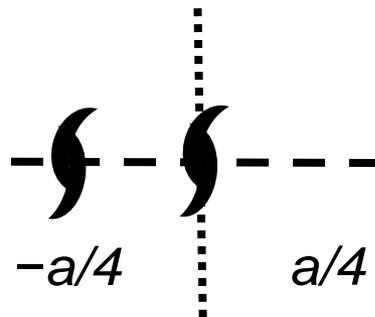
$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_{\parallel} + \mathbf{s}_{\perp}$$

где \mathbf{s}_{\parallel} «**вливаётся**» в новый элемент $R' = R_1' R_2'$, (R_1', R_2' – закрытые части R_1 и R_2)
 \mathbf{s}_{\perp} **перемещает** $R(\mathbf{s}_{\parallel})$ на величину **$\mathbf{s}_{\perp}/2$**



mm2

$$\mathbf{s}_{\parallel} = \mathbf{s}_{\perp} = 0$$

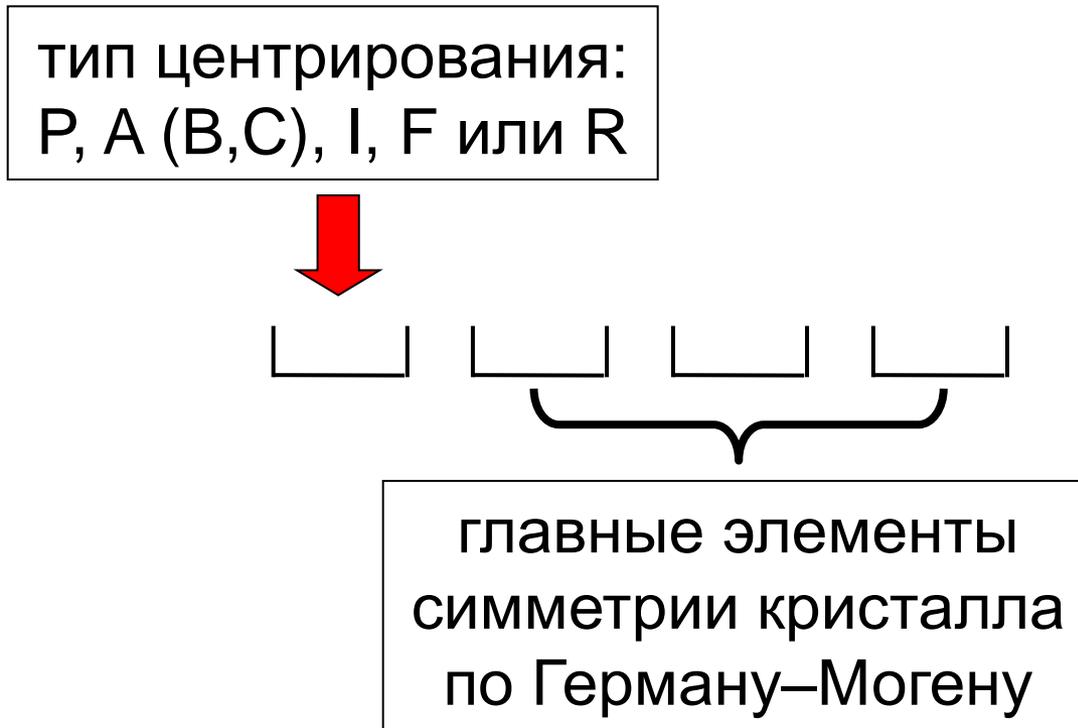


ca2₁

$$\mathbf{s}_{\parallel} = c/2$$

$$\mathbf{s}_{\perp} = a/2$$

Международный символ пространственной группы: трансляции + другие элементы симметрии



Если в символе группы только закрытые элементы

– **симморфные** пространственные группы.

Если в символе группы есть открытые элементы

– **несимморфные** пространственные группы

Симморфные пространственные группы:

решетка Браве + кристаллический класс

$P1$, $P\bar{1}$, $P2$, Pm , $P2/m$, $C2$,..., $I4/m$, $Fm\bar{3}m$ и т.д.

Кристаллические классы + их решетки Браве:

66 комбинаций

другие ориентации элементов симметрии

к трансляциям решетки:

еще 7 сочетаний

$Cmm2 \neq Amm2$

$P321 \neq P312$

$P\bar{4}2m \neq P\bar{4}m2$

$P3m1 \neq P31m$

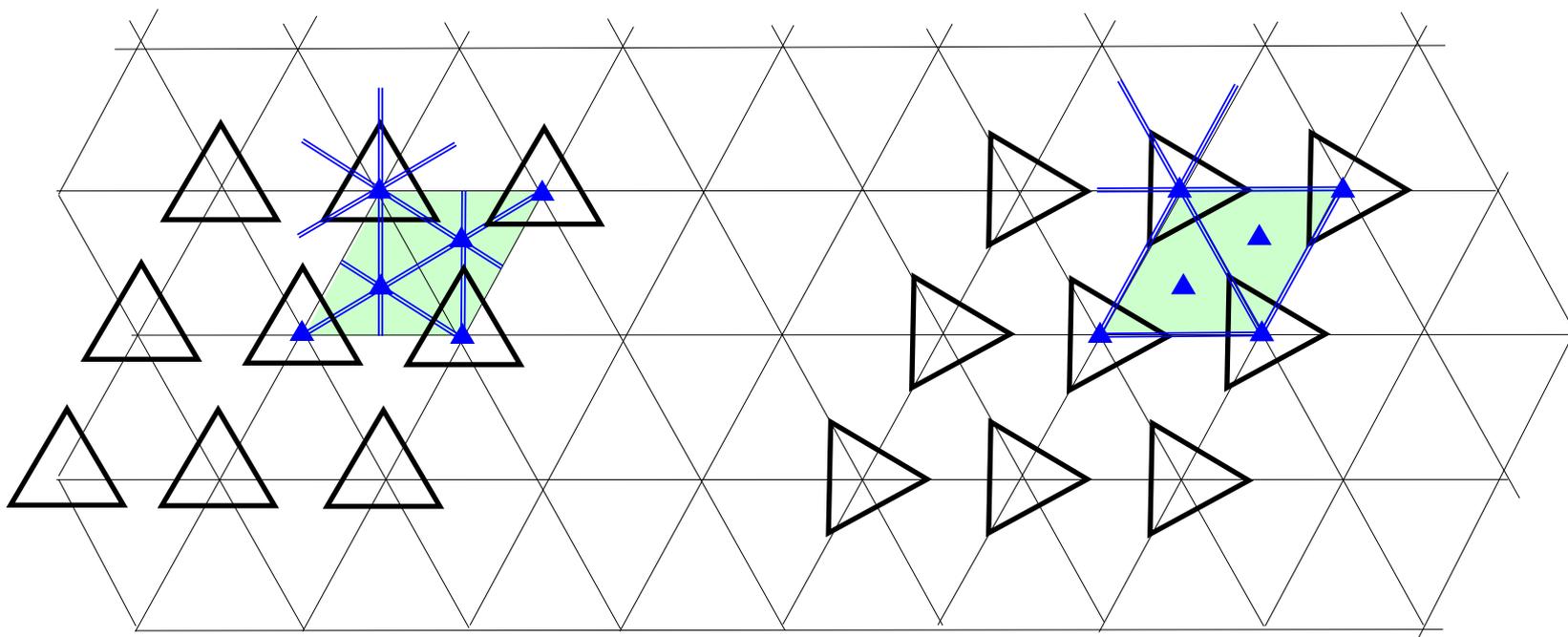
$I\bar{4}2m \neq I\bar{4}m2$

$P\bar{3}m1 \neq P\bar{3}1m$

$P\bar{6}m2 \neq P\bar{6}2m$

Вместе – 73 симморфные группы

Пример: группы $P3m1$ и $P31m$
 $3m$ + трансляции



$P3m1$

$P31m$

Симморфные: 73 пространственные группы
($P1$, $P2/m$, $Cmm2$, $I4/m$, $Fm\bar{3}m$ и т.д.)

Несимморфные пространственные группы:
замена некоторых или всех закрытых элементов
соответствующими открытыми элементами

Несимморфные: 146 пространственных групп
($P2_1/c$, $Pna2_1$, $P4/nmm$, $P6_3mc$, $Fd\bar{3}m$ и т.д.)

219 геометрически различных групп

+ 11 энантиоморфов:

$P3_1 \parallel P3_2$	$P4_1 \parallel P4_3$	$P6_1 \parallel P6_5$	$P6_2 \parallel P6_4$
$P3_1 21 \parallel P3_2 21$	$P3_1 12 \parallel P3_2 12$	$P4_1 22 \parallel P4_3 22$	$P4_1 2_1 2 \parallel P4_3 2_1 2$
$P6_1 22 \parallel P6_5 22$	$P6_2 22 \parallel P6_4 22$	$P4_1 32 \parallel P4_3 32$	

230 пространственных (федоровских) групп

Пространственные группы низших сингоний

Сингония и решетки Браве	Классы	Пространственные группы (в скобках обозначения по Шенфлису)	
		симморфные	несимморфные
Триклин- ная (P)	1 (C_1) $\bar{1}$ (C_i)	$P1$ (C_1^1) $P\bar{1}$ (C_i^1)	
Моно- клинная (P, C)	2 (C_2) m (C_s) $2/m$ (C_{2h})	$P2$ (C_2^1) $C2$ (C_2^3) Pm (C_s^1) Cm (C_s^3) $P2/m$ (C_{2h}^1) $C2/m$ (C_{2h}^3)	$P2_1$ (C_2^2) Pc (C_s^2) Cc (C_s^4) $P2_1/m$ (C_{2h}^2), $P2/c$ (C_{2h}^4), $P2_1/c$ (C_{2h}^5), $C2/c$ (C_{2h}^6)

классы	Пространственные группы орторомбической сингонии	
	симморфные	несимморфные
222 (D ₂)	P222 C222 F222 I222	P222 ₁ , P2 ₁ 2 ₁ 2, P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ C222 ₁ I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
mm2 (C _{2v})	Pmm2 Cmm2, Amm2 Fmm2 Imm2	Pmc2 ₁ , Pcc2, Pma2, Pca2 ₁ , Pnc2, Pmn2 ₁ , Pba2, Pna2 ₁ , Pnn2 Cmc2 ₁ , Ccc2, Aem2, Ama2, Aea2 Fdd2 Iba2, Ima2
mmm (D _{2h})	Pmmm Cmmm Fmmm Immm	Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna, Pmna, Pcca, Pbam, Pccn, Pbcm, Pnnm, Pmmn, Pbcn, Pbca, Pnma Cmcm, Cmce, Cccm, Cmme, Ccce Fddd Ibam, Ibca, Imma

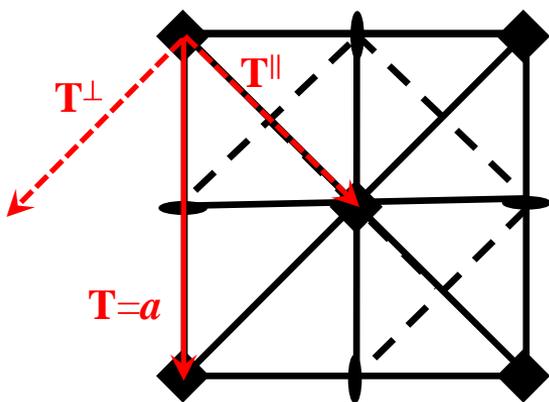
Пространственные группы средней категории

сингония	класс	пространственные группы (в скобках – по Шенфлису)	
		симморфные	несимморфные
Тригональная (P, R)	$\bar{3}$ (C_3) $\bar{3}$ (S_6) 32 (D_3) $3m$ (C_{3v}) $\bar{3}m$ (D_{3d})	$P\bar{3}$ (C_3^1), $R\bar{3}$ (C_3^4) $P\bar{3}$, $R\bar{3}$ $P312$, $P321$, $R32$ $P3m1$, $P31m$, $R3m$ $P\bar{3}1m$, $P\bar{3}m1$ $R\bar{3}m$,	$P3_1$ (C_3^2), $P3_2$ (C_3^3) $P3_112$, $P3_121$, $P3_212$, $P3_221$ $P3c1$, $P31c$, $R3c$ $P\bar{3}1c$, $P\bar{3}c1$, $R\bar{3}c$
Гексагональная (P)	6 (C_6) $\bar{6}$ (C_{3h}) $6/m$ (C_{6h}) 622 (D_6) $6mm$ (C_{6v}) $\bar{6}m$ (D_{3h}) $6/mmm$ (D_{6h})	$P6$ $P\bar{6}$ $P6/m$ $P622$ $P6mm$ $P\bar{6}m2$, $P\bar{6}2m$ $P6/mmm$	$P6_1$, $P6_5$, $P6_2$, $P6_4$, $P6_3$ $P6_3/m$ $P6_122$, $P6_522$, $P6_222$, $P6_422$, $P6_322$ $P6cc$, $P6_3cm$, $P6_3mc$ $P\bar{6}c2$, $P\bar{6}2c$ $P6/mcc$, $P6_3/mcm$, $P6_3/mmc$

Пространственные группы кубической сингонии (высшая категория симметрии)

Класс	Пространственные группы (в скобках – по Шенфлису)	
	симморфные	несимморфные
2 3 (T)	P 2 3 (T ¹), F 2 3 (T ²), I 2 3 (T ³)	P 2 ₁ 3 (T ⁴), I 2 ₁ 3 (T ⁵)
m $\bar{3}$ (T _h)	P m $\bar{3}$, F m $\bar{3}$, I m $\bar{3}$	P n $\bar{3}$, F d $\bar{3}$, P a $\bar{3}$, I a $\bar{3}$
4 3 2 (O)	P 4 3 2, F 4 3 2, I 4 3 2	P 4 ₁ 3 2, P 4 ₃ 3 2, P 4 ₂ 3 2, F 4 ₁ 3 2, I 4 ₁ 3 2
$\bar{4}$ 3 m (T _d)	P $\bar{4}$ 3 m, F $\bar{4}$ 3 m, I $\bar{4}$ 3 m	P $\bar{4}$ 3 n, F $\bar{4}$ 3 c, I $\bar{4}$ 3 d
m $\bar{3}$ m (O _h)	P m $\bar{3}$ m, F m $\bar{3}$ m, I m $\bar{3}$ m	P m $\bar{3}$ n, P n $\bar{3}$ m, P n $\bar{3}$ n, F m $\bar{3}$ c, F d $\bar{3}$ m, F d $\bar{3}$ c, I a $\bar{3}$ d

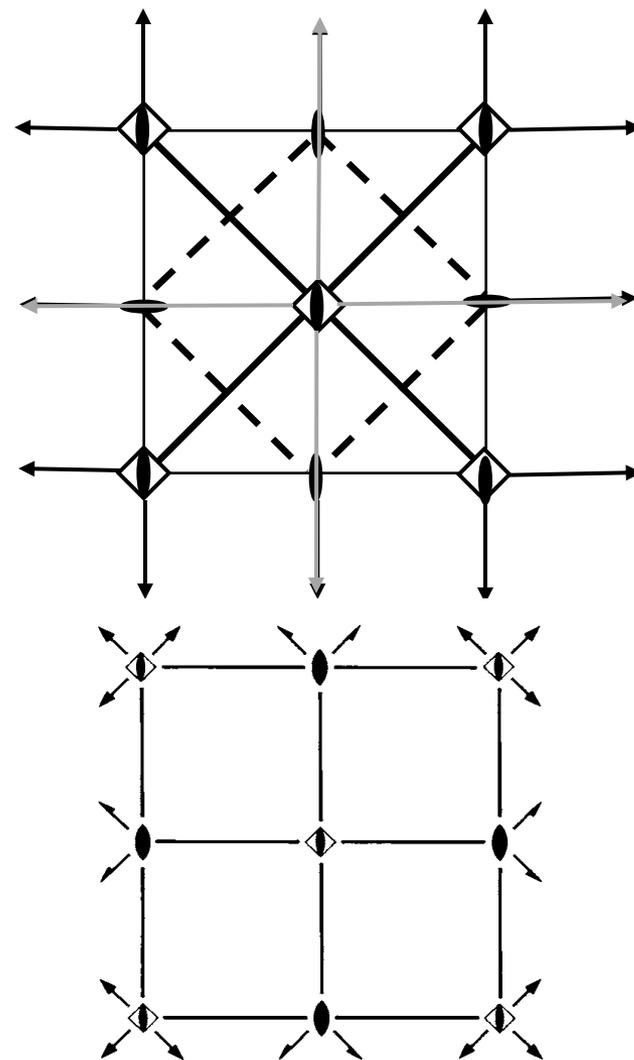
В пространственных группах средней категории симметрии всегда есть элементы, расположенные наклонно к координатным трансляциям



Группа $P4mm$
 $4 + m^\parallel \rightarrow 4mm$
 $P4 + m^\parallel \rightarrow P4mm$

Группа $P\bar{4}2m$
 $4 + 2^\perp \rightarrow \bar{4}2m$
 $P4 + 2^\perp \rightarrow P42m$

Группа $P\bar{4}m2$



Орбиты пространственных групп

Pmm2

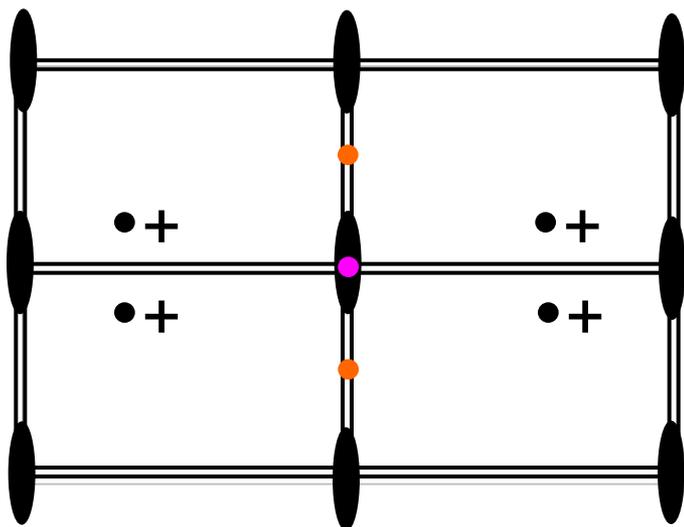
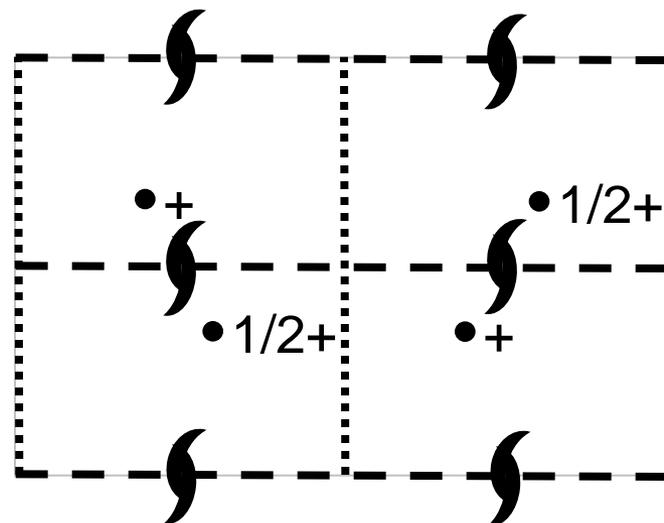


график группы

Pca2₁

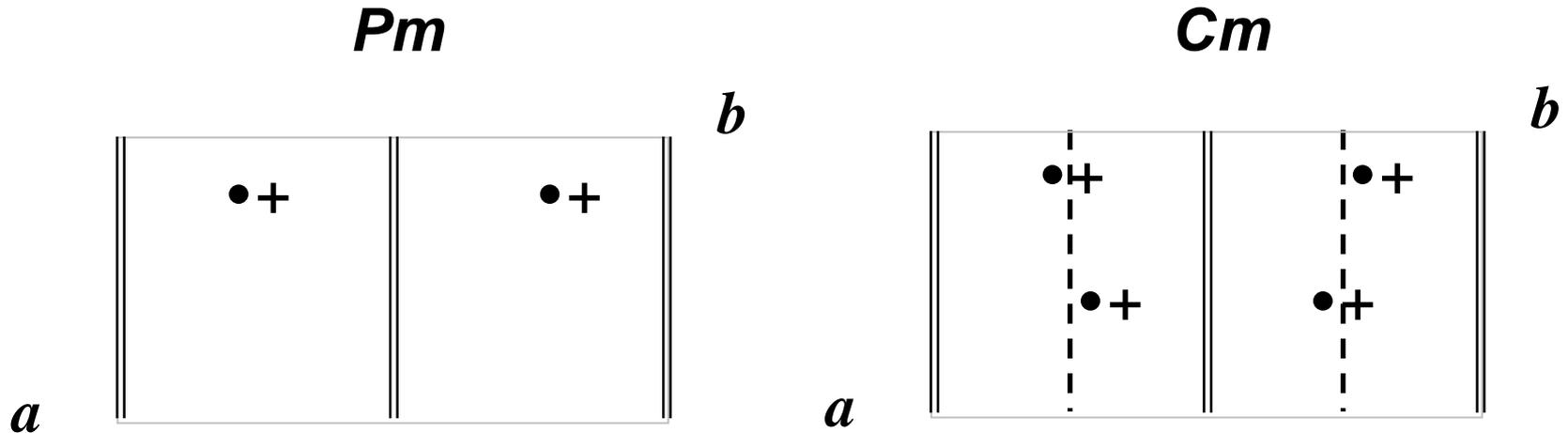


Позиции кратность

1	4	общая
<i>m</i>	<i>2</i>	} частные
<i>mm2</i>	<i>1</i>	

кратность общих позиций в группах с *P*-решеткой равна порядку кристаллического класса (т.е. группы *mm2*)

В центрированных решетках



**кратность общего положения в *Cm*
вдвое выше, чем в *Pm***

А, В, С, I: кратность = порядок класса × 2

R: порядок класса × 3

F: порядок класса × 4

Информация в символе пространственной группы

***P bca* → mmm**

примитивная
решетка

кристаллический
класс **mmm**
орторомбическая
сингония

кратность общего положения:

порядок точечной группы × кратность центрирования

$$8 \times 1 = 8$$

***I4₁/amd* →** объемноцентрированная решетка (**×2**)

кристаллический класс **4/mmm**

тетрагональная сингония

кратность общего положения **16 × 2 = 32**

International Tables for X-ray Crystallography Volume A

**Обозначение и действие элементов симметрии.
Графики 230 пространственных групп и их
системы эквивалентных позиций (ПСТ).
Погасания рефлексов, вызванные симметрией.
И многое другое.**

International Tables for X-ray Crystallography Volume A

краткий международный
СИМВОЛ $Pnma$

символ группы по
Шёнфлису: D_{2h}^{16}

$Pnma$

No. 62

D_{2h}^{16}

$P 2_1/n 2_1/m 2_1/a$

mmm
класс

Orthorhombic
СИНГОНИЯ
Patterson symmetry $Pnmm$

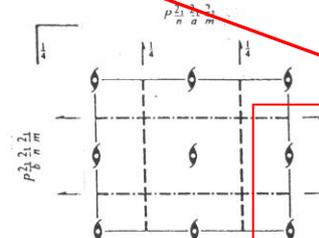
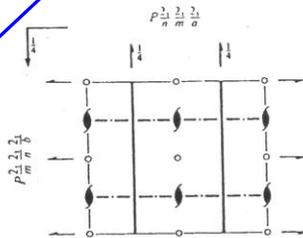
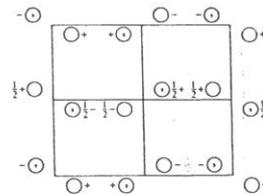
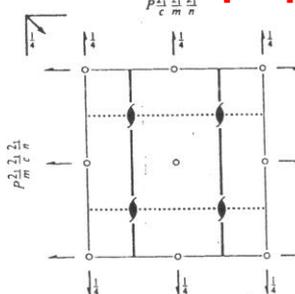


график группы

ПОЛНЫЙ
СИМВОЛ
 $P 2_1/n 2_1/m 2_1/a$



ЭКВИВАЛЕНТНЫЕ
ПОЗИЦИИ

Origin at $\bar{1}$ on 12, 1

Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

Symmetry operations

- (1) 1
- (2) $2(0, 0, \frac{1}{2}) \frac{1}{2}, 0, z$
- (3) $2(0, \frac{1}{2}, 0) 0, y, 0$
- (4) $2(\frac{1}{2}, 0, 0) x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
- (5) $\bar{1} 0, 0, 0$
- (6) $a x, y, \frac{1}{2}$
- (7) $m \bar{x}, \frac{1}{2}, z$
- (8) $n(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \frac{1}{2}, y, z$

Generators selected (1); $t(1, 0, 0); t(0, 1, 0); t(0, 0, 1); (2); (3); (5)$

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

- | | | | | | | |
|---|-----|---|---------------------------------|---|---|---|
| 8 | d | 1 | (1) x, y, z | (2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$ | (3) $\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$ | (4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ |
| | | | (5) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ | (6) $x + \frac{1}{2}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$ | (7) $x, \bar{y} + \frac{1}{2}, z$ | (8) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ |

General:

- $Ok l : k + l = 2n$
- $h k 0 : h = 2n$
- $h 0 0 : h = 2n$
- $0 k 0 : k = 2n$
- $0 0 l : l = 2n$

погасания
рефлексов

Special: as above, plus

no extra conditions

$h k l : h + l, k = 2n$

$h k l : h + l, k = 2n$

4 c $.m.$ $x, \frac{1}{2}, z$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{z}$ $x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$

4 b $\bar{1}$ $0, 0, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, 0, 0$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

4 a $\bar{1}$ $0, 0, 0$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Symmetry of special projections

Along $[001] p2gm$

Along $[100] c2mm$

Along $[010] p2gg$