Лекция 6.

Основы кристаллографической магии. Часть 2

Характеристики правильных систем точек

Симметрия позиции - комплекс элементов симметрии, которые, проходя через точку, расположенную в данной позиции, не размножают ее. Такими (не размножающими) могут быть лишь ***элементы макросимметрии***, и их сочетание оказывается одной из 32 точечных групп симметрии

Элементы микросимметрии не оставляют точку на месте!!!

Число степеней свободы точки

ЧСС

Число измерений,
в которых можно
смещать точку и при этом ее
комплекс
макросимметрии (СП)
не изменится

Анализу подвергаются только позиции макросимметрии!!
Волшебные (микро-) элементы симметрии не оставляют точку на месте!!

Центр – 0 степеней свободы
Ось – 1 степень свободы
Плоскость *m* – 2 степени свободы
Точка без элементов симметрии (1) – 3 степени свободы

Характеристики правильных систем точек

Симметрия позиции - комплекс **макро**элементов симметрии, которые, проходя через точку, расположенную в данной позиции, не размножают ее (**оставляют ее на месте).** Такими (не размножающими) могут быть лишь ***элементы макросимметрии***, и их сочетание оказывается одной из 32 известных вам точечных групп (классов) симметрии.

Элементы микросимметрии не оставляют точку на месте!!!

Характеристики правильных систем точек

Величина симметрии позиции - число точек, на которые разделится одна точка, выведенная из данной частной позиции в общую.

Кратность - число точек, приходящихся на одну элементарную ячейку.

Важная формула 1

ВСГ/ВСП = кратность

Важная формула 2: ВСГ =

Число граней общей простой формы макроаналога

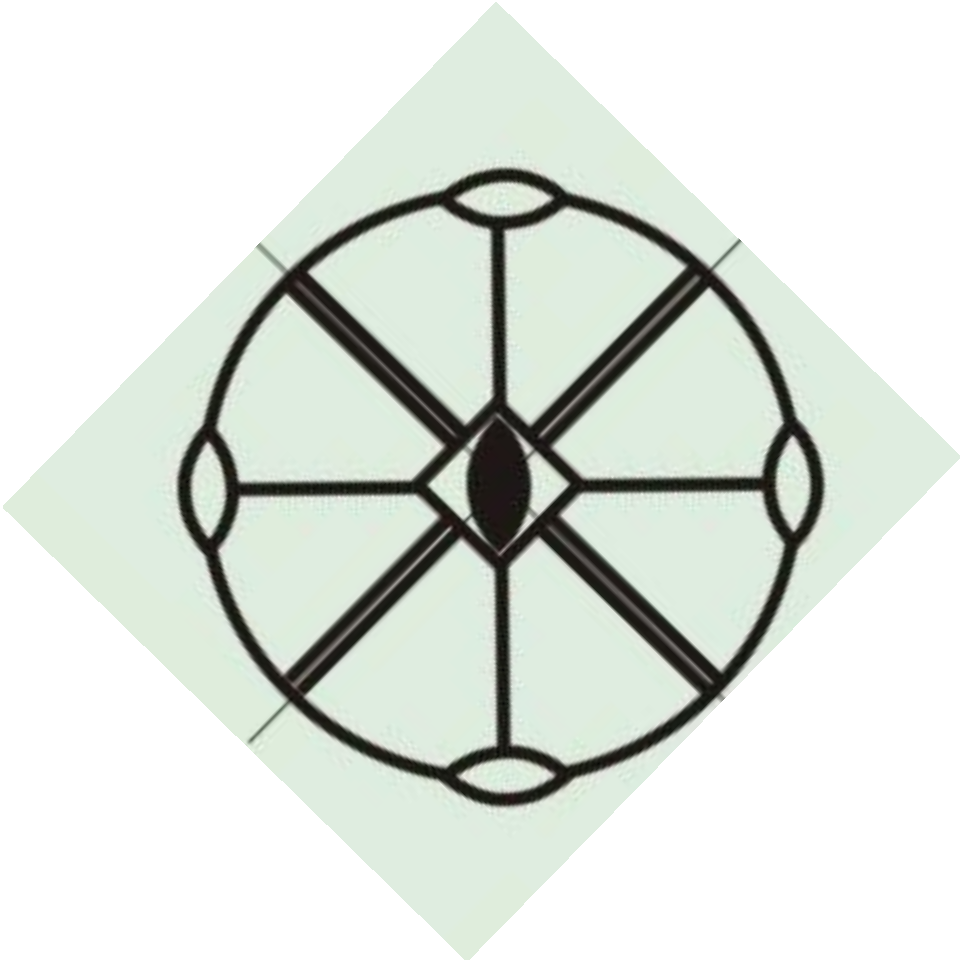
×

Размножающую способность решетки Браве

Потренируемся

$I\bar{4}2d$

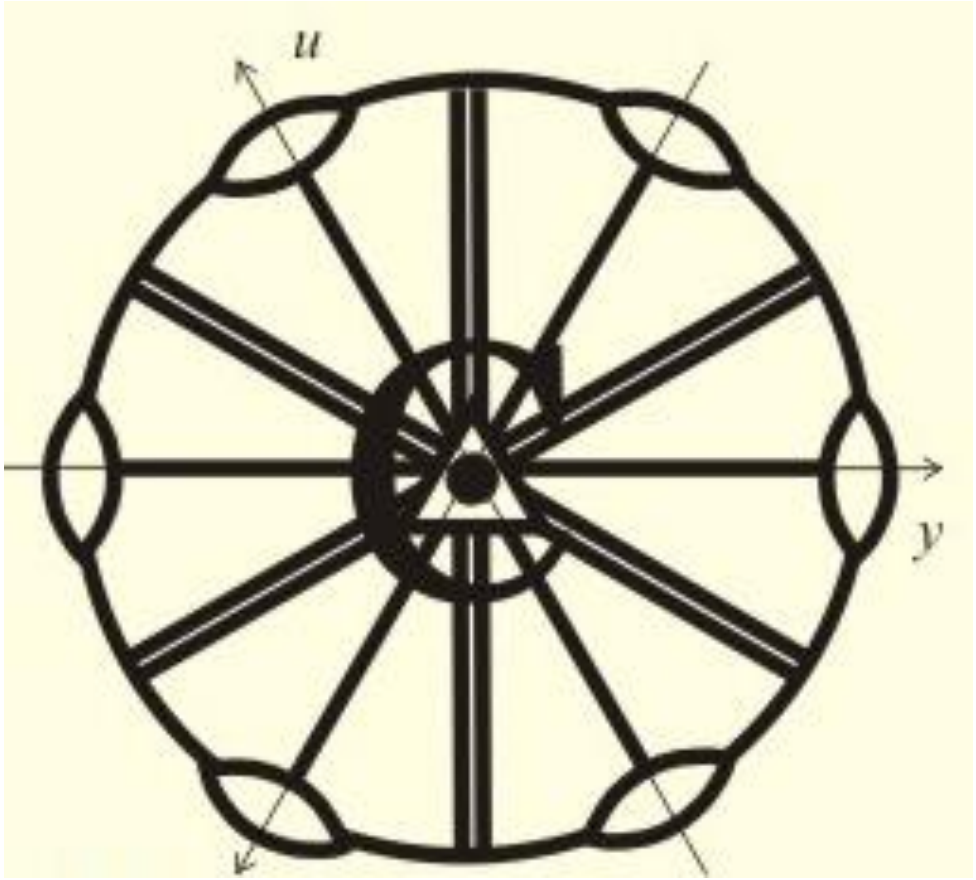
ВСГ = 2 * 8 = 16



Потренируемся

$R\bar{3}c$

ВСГ = 3 * 12 = 36



Потренируемся

Fddd

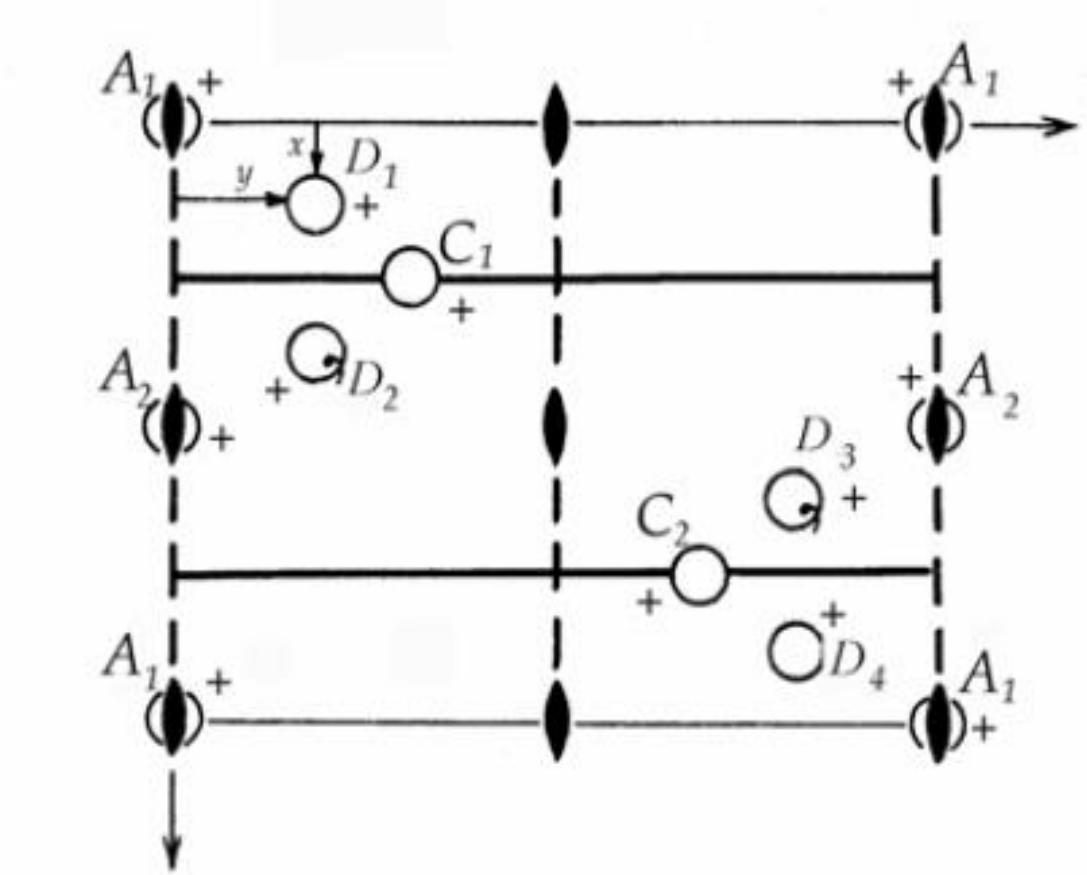
ВСГ = 4 * 8 = 32

Потренируемся

$Fd\bar{3}m$

ВСГ = 4 * 48 = 192 Ой!

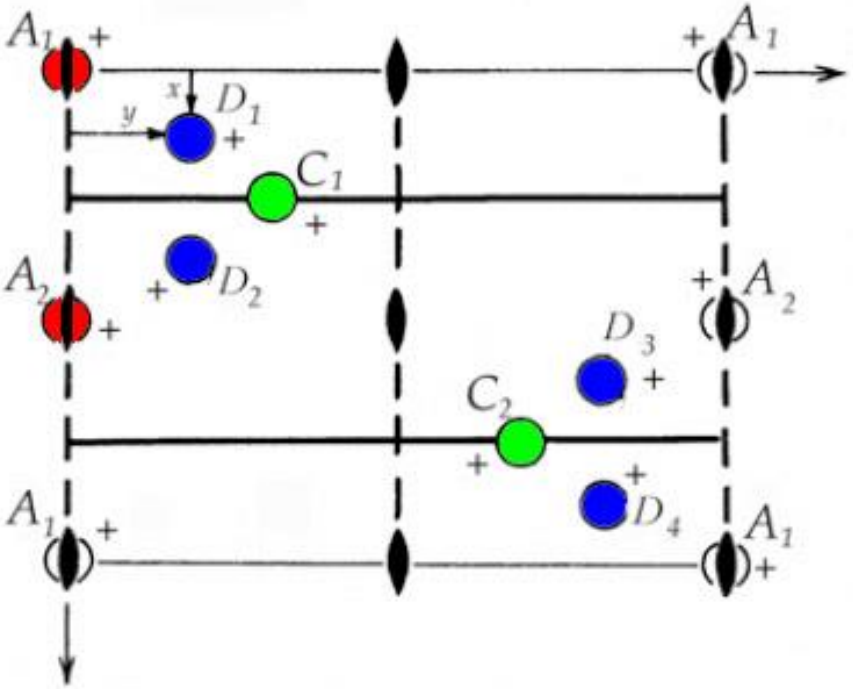
Правильные системы точек



Правильные системы точек - общая (*D*) и частные (*A* и *C*) - на графике пространственной группы *Pma2*. Тонкими стрелками показаны значения координат *x* и *y* точки D_1

Pma2

$ВСГ = 1*4 = 4$



Законы, работающие при любом x y z!

Позиция	Симметрия позиции	Величина симметрии	Число степеней свободы	Кратность $ВСГ = 1*4 = 4$	Координаты
D	1	1	$3_{(x,y,z)}$	$4:1=4$	$xyz,\ \left(\frac{1}{2}-x\right)yz,\ \left(\frac{1}{2}+x\right)\bar{y}z,\ \bar{x}\bar{y}z$
A	2	2	$1_{(z)}$	$4:2=2$	$00z,\ \frac{1}{2}0z$
C	m	2	$2_{(y,z)}$	$4:2=2$	$\frac{1}{4}yz,\ \frac{3}{4}\bar{y}z$

Законы, работающие при любом x y z!

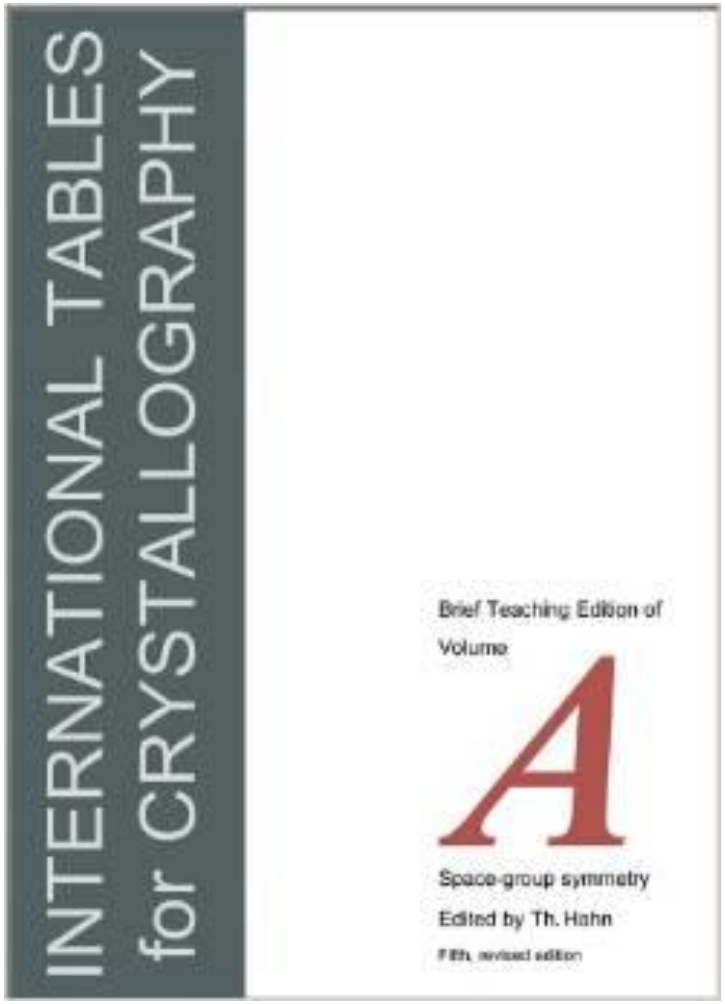
Что такое -x?

Допустим, x=0,1

Тогда -x = -0,1 = 0,9!!!

Магическая книга кристаллографа - International Tables for X-Ray Crystallography

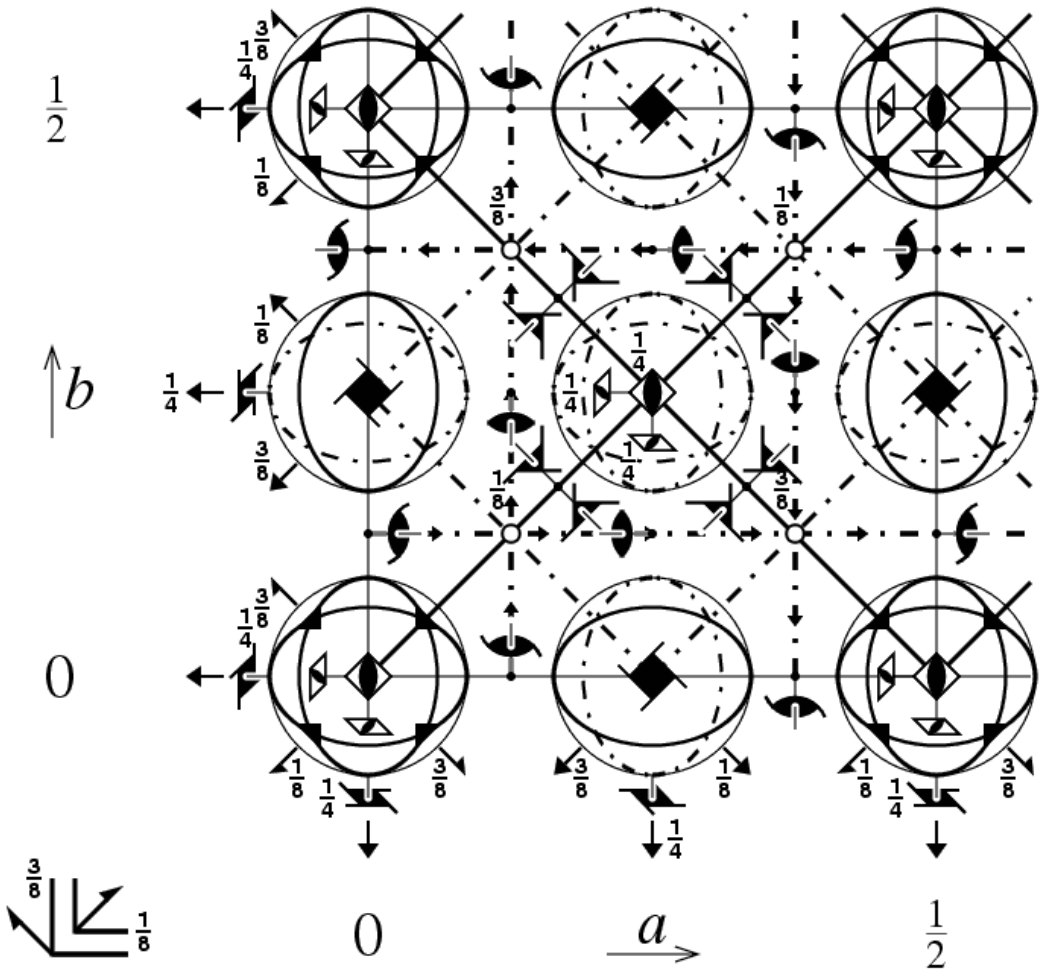
Volume A, Space-group Symmetry



International Tables for X-Ray Crystallography

Volume A, Space-group Symmetry

Fd$\bar{3}$m *F $4_1/d\,\bar{3}\,2/m$* *m$\bar{3}$m* No. 227



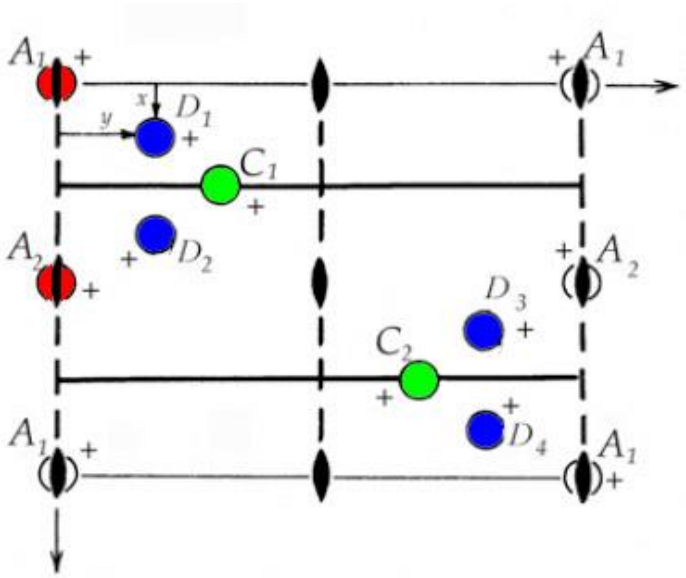
1	x, y, z	25	$\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-y, \frac{1}{4}-z$
2	$x, \bar{y}, \bar{z}$	26	$\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}+y, \frac{1}{4}+z$
3	$\bar{x}, y, \bar{z}$	27	$\frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}-y, \frac{1}{4}+z$
4	$\bar{x}, \bar{y}, z$	28	$\frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}+y, \frac{1}{4}-z$
5	z, x, y	29	$\frac{1}{4}-z, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-y$
6	$\bar{z}, \bar{x}, y$	30	$\frac{1}{4}+z, \frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}-y$
7	$z, \bar{x}, \bar{y}$	31	$\frac{1}{4}-z, \frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}+y$
8	$\bar{z}, x, \bar{y}$	32	$\frac{1}{4}+z, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}+y$
9	y, z, x	33	$\frac{1}{4}-y, \frac{1}{4}-z, \frac{1}{4}-x$
10	$\bar{y}, z, \bar{x}$	34	$\frac{1}{4}+y, \frac{1}{4}-z, \frac{1}{4}+x$
11	$\bar{y}, \bar{z}, x$	35	$\frac{1}{4}+y, \frac{1}{4}+z, \frac{1}{4}-x$
12	$y, \bar{z}, \bar{x}$	36	$\frac{1}{4}-y, \frac{1}{4}+z, \frac{1}{4}+x$
13	$\frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}-z, \frac{1}{4}+y$	37	$\bar{x}, z, \bar{y}$
14	$\frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}+z, \frac{1}{4}-y$	38	$\bar{x}, \bar{z}, y$
15	$\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-z, \frac{1}{4}-y$	39	x, z, y
16	$\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}+z, \frac{1}{4}+y$	40	$x, \bar{z}, \bar{y}$
17	$\frac{1}{4}+z, \frac{1}{4}+y, \frac{1}{4}-x$	41	$\bar{z}, \bar{y}, x$
18	$\frac{1}{4}-z, \frac{1}{4}+y, \frac{1}{4}+x$	42	$z, \bar{y}, \bar{x}$
19	$\frac{1}{4}-z, \frac{1}{4}-y, \frac{1}{4}-x$	43	z, y, x
20	$\frac{1}{4}+z, \frac{1}{4}-y, \frac{1}{4}+x$	44	$\bar{z}, y, \bar{x}$
21	$\frac{1}{4}-y, \frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}+z$	45	$y, \bar{x}, \bar{z}$
22	$\frac{1}{4}+y, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}+z$	46	$\bar{y}, x, \bar{z}$
23	$\frac{1}{4}-y, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-z$	47	y, x, z
24	$\frac{1}{4}+y, \frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}-z$	48	$\bar{y}, \bar{x}, z$

+ $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$

Позиции Уайкоффа

Positions

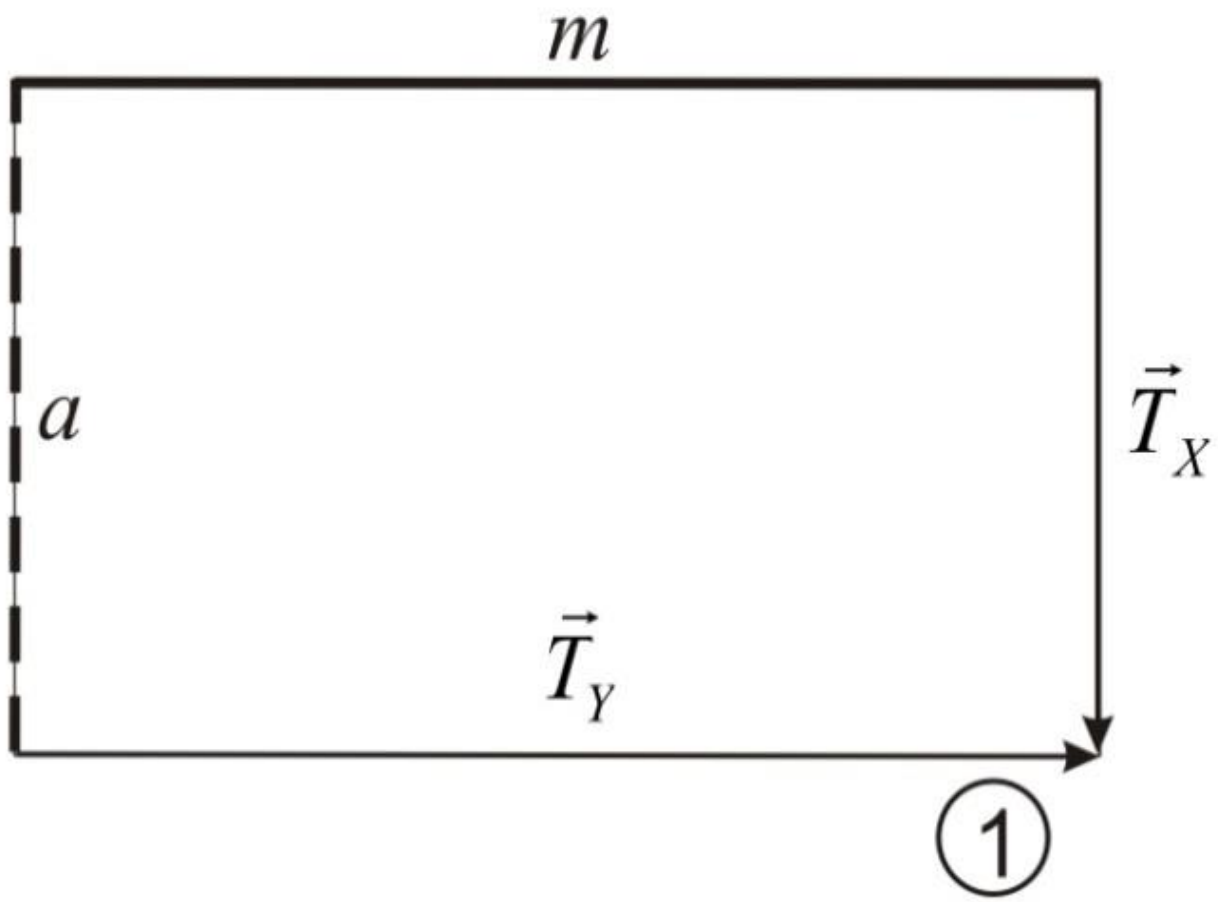
Multiplicity, Wyckoff letter. Sire symmetry			Coordinates			
4	*d*	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},\bar{y},z$	(3) $x+\frac{1}{2},\ \bar{y},z$	(4) $\bar{x}+\frac{1}{2},y,z$
2	*c*	*m* . .	$\frac{1}{4},y,z$	$\frac{1}{2},\bar{y},z$		
2	*b*	. . 2	$0,\frac{1}{2},z$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},z$		
2	*a*	. . 2	$0,0,z$	$\frac{1}{2},0,z$		

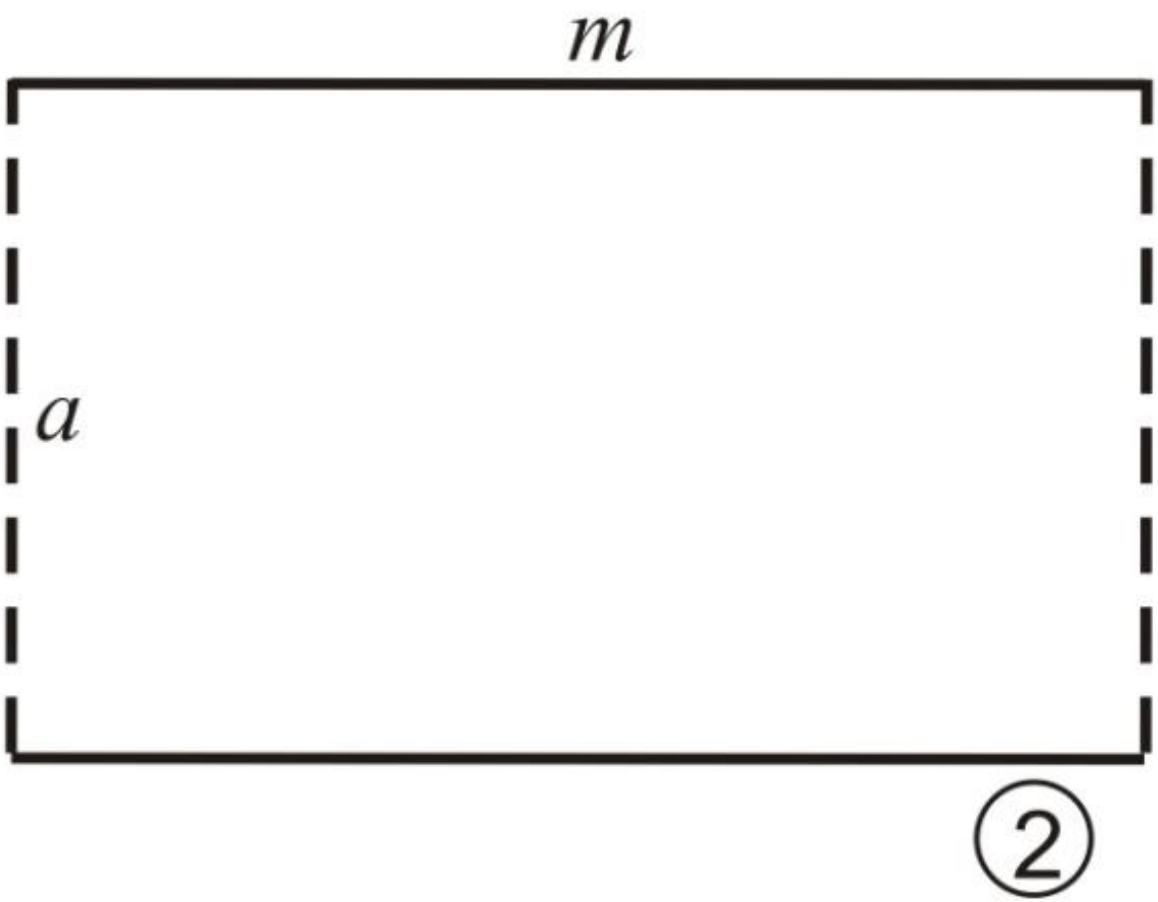


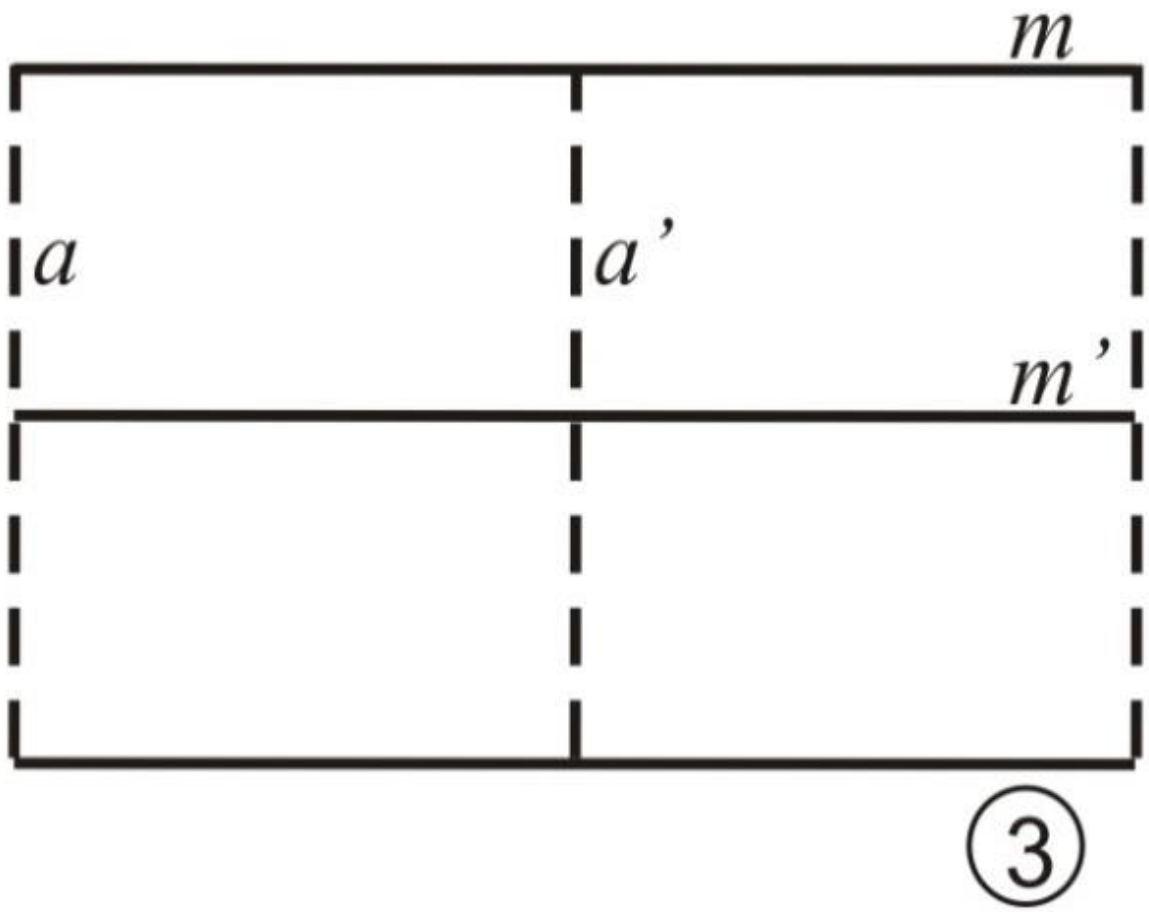
В Интернациональных таблицах в характеристику ПСТ входит еще *позиция Уайкоффа* (Wyckoff) буквенное обозначение. Самая симметричная позиция (с минимальной кратностью)обозначается буквой ***a***. В символе Уайкоффа независимые позиции даже с одинаковыми характеристиками, различающиеся лишь координатами, обозначаются разными буквами.

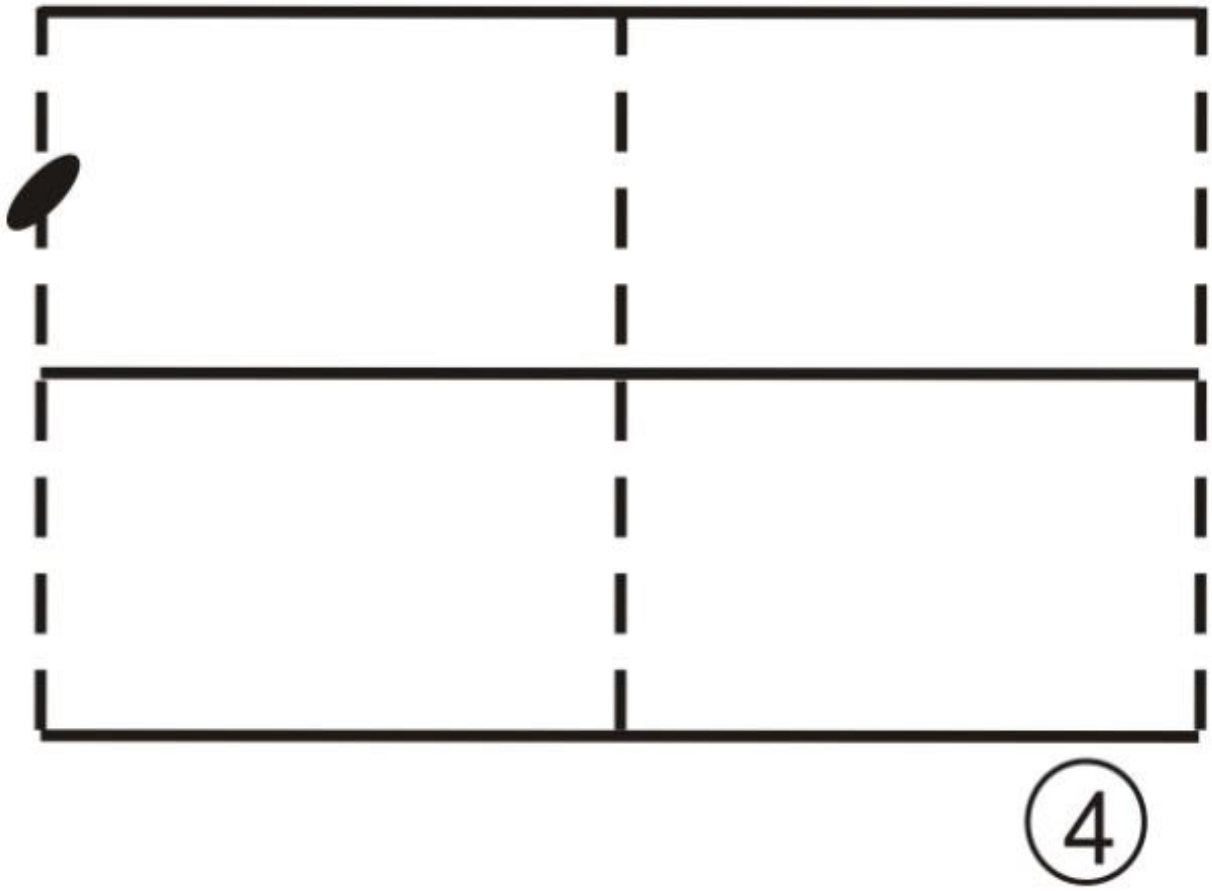
Этапы построения графика группы *Pmab*

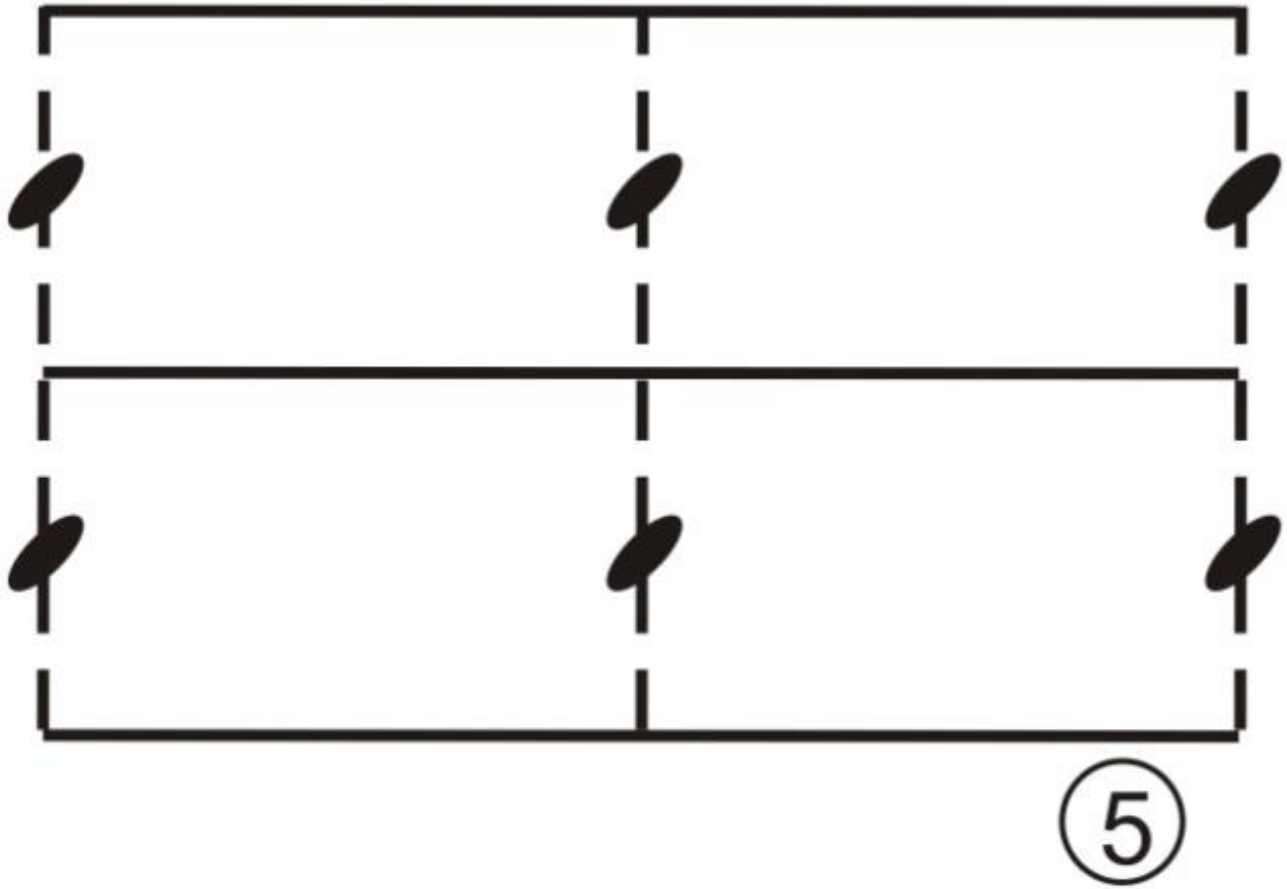
Начнем с *Pma?*

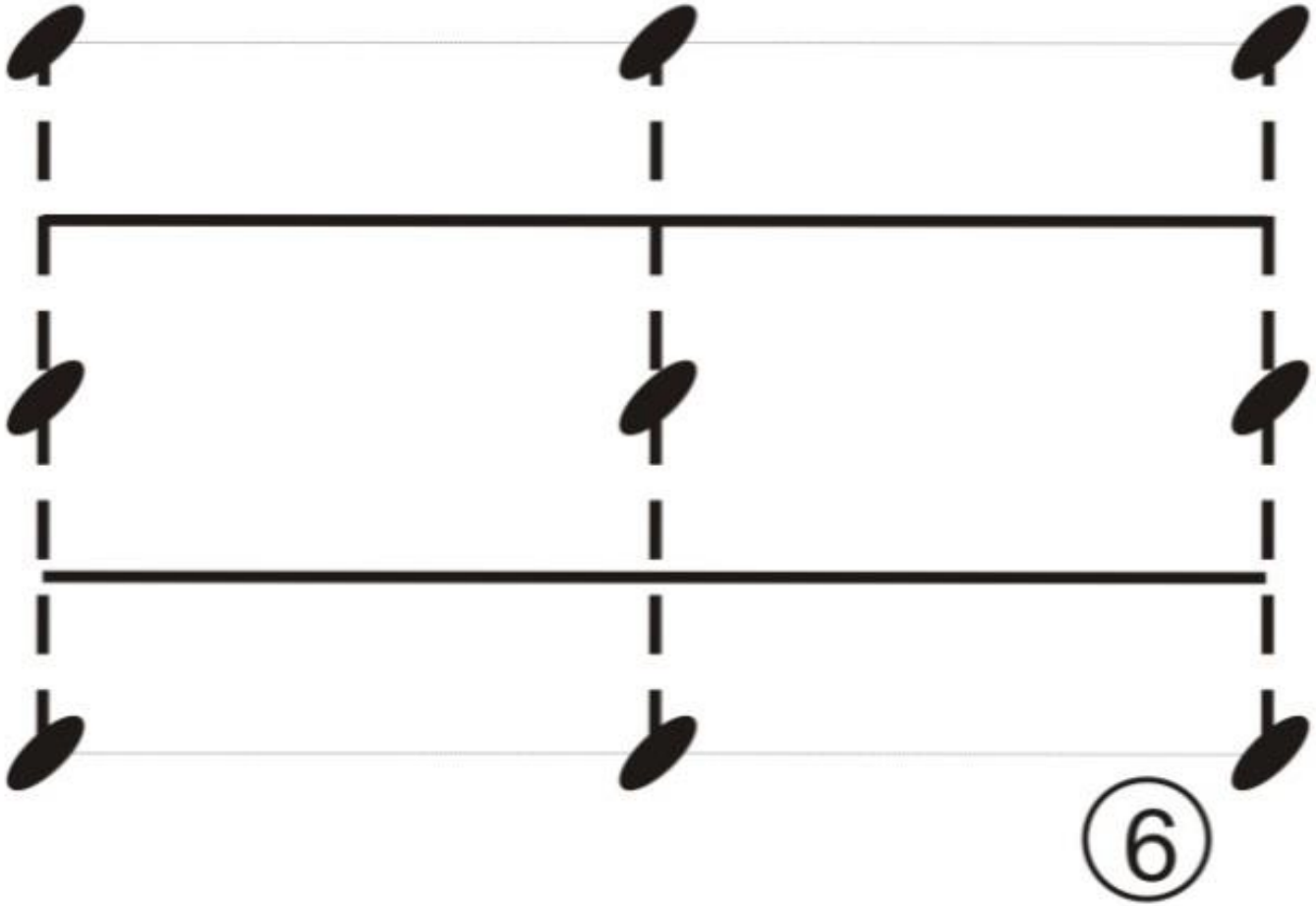

m
a
$\vec{T}_X$
$\vec{T}_Y$
1


m
a
②

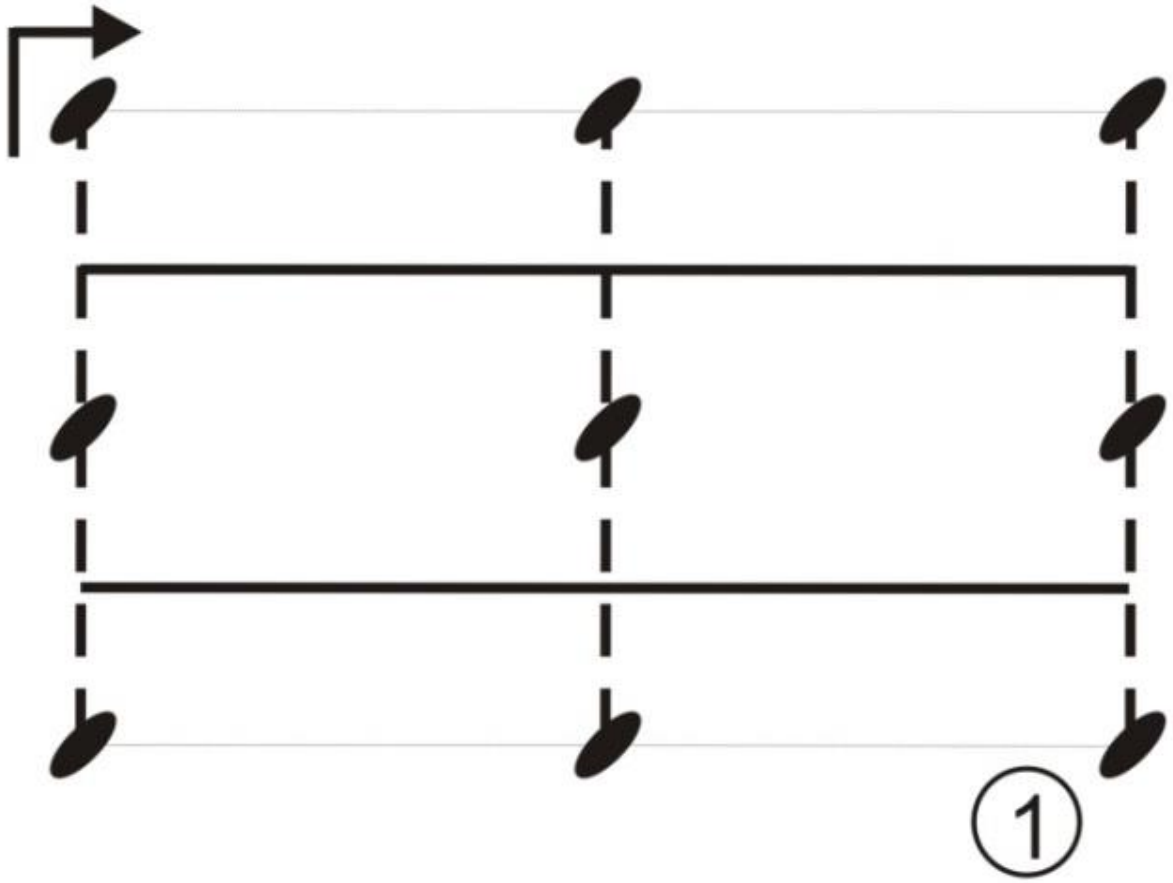

m
a
a'
m'
3

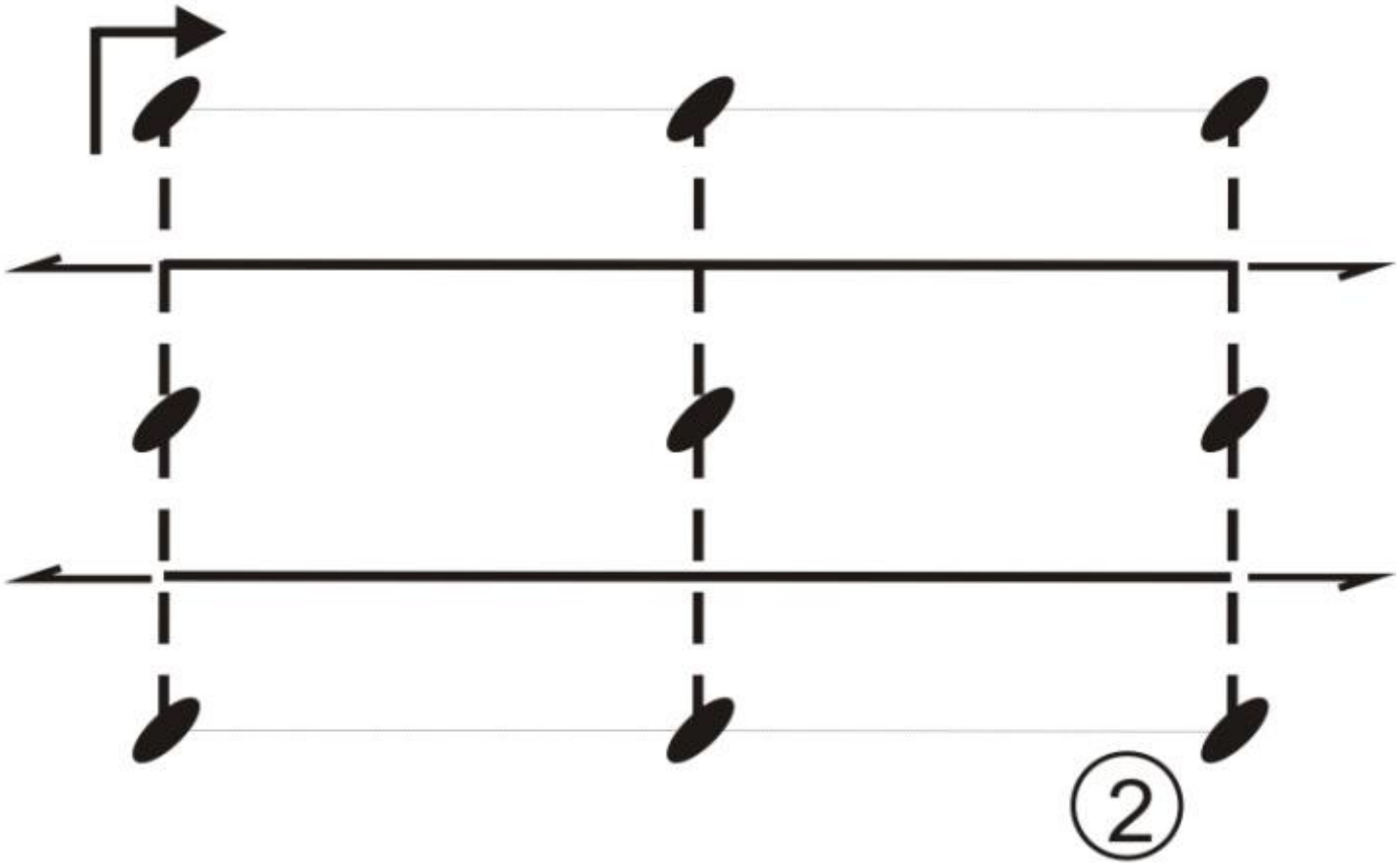

4

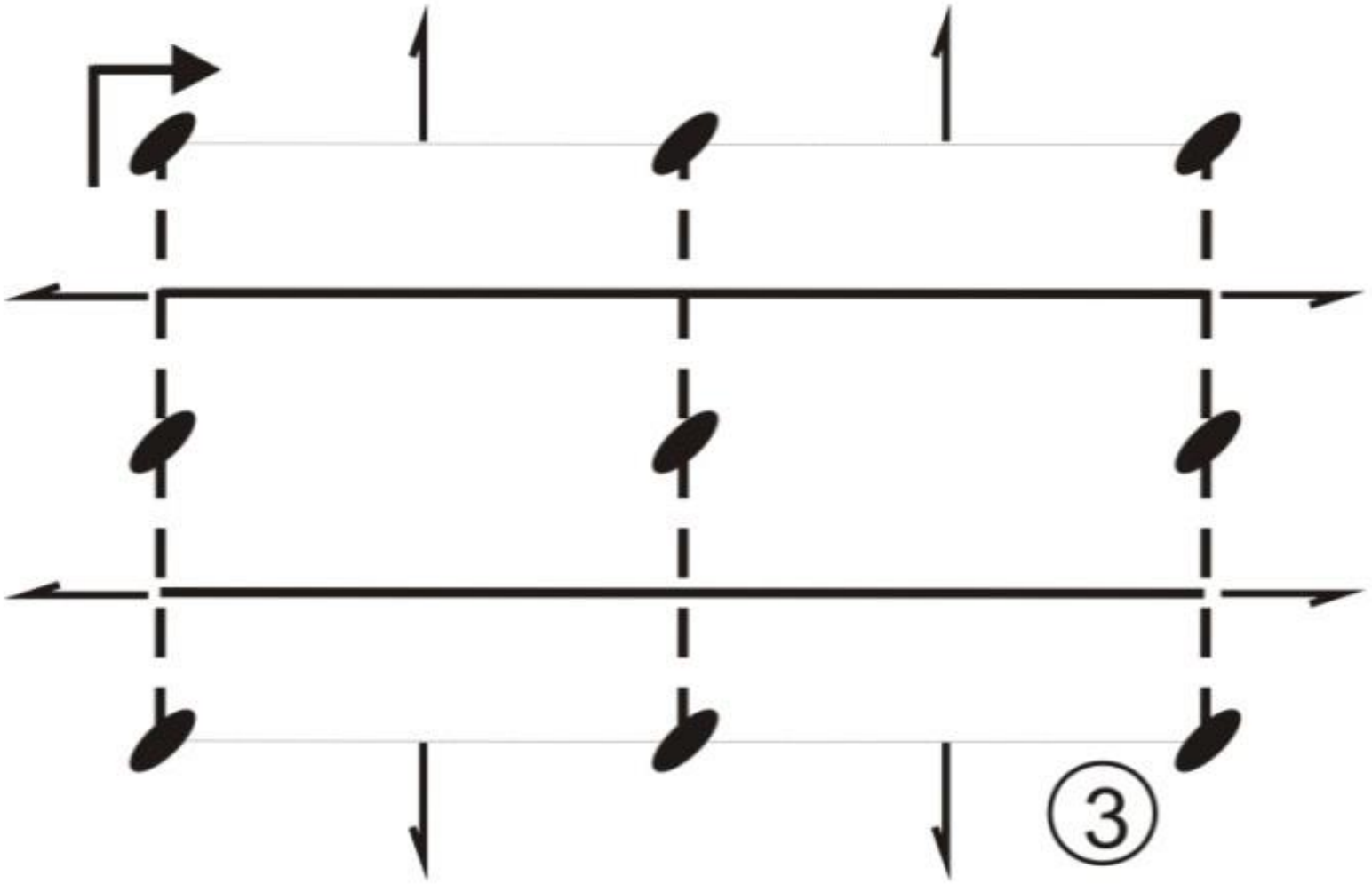

5

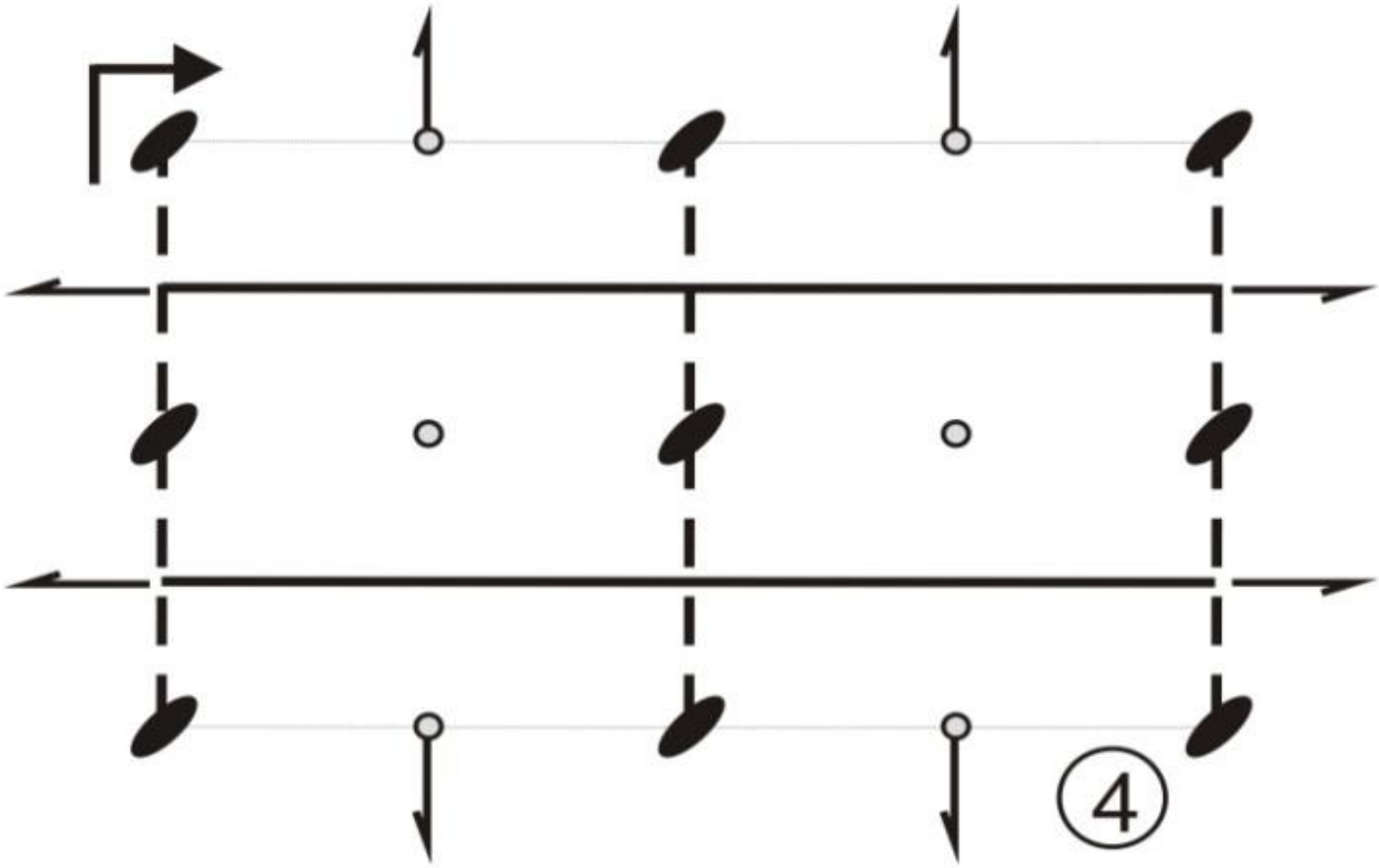

6

Группу *Pmab* можно получить добавлением к уже разобранной группе *Pma2* горизонтальной плоскости скользящего отражения *b*

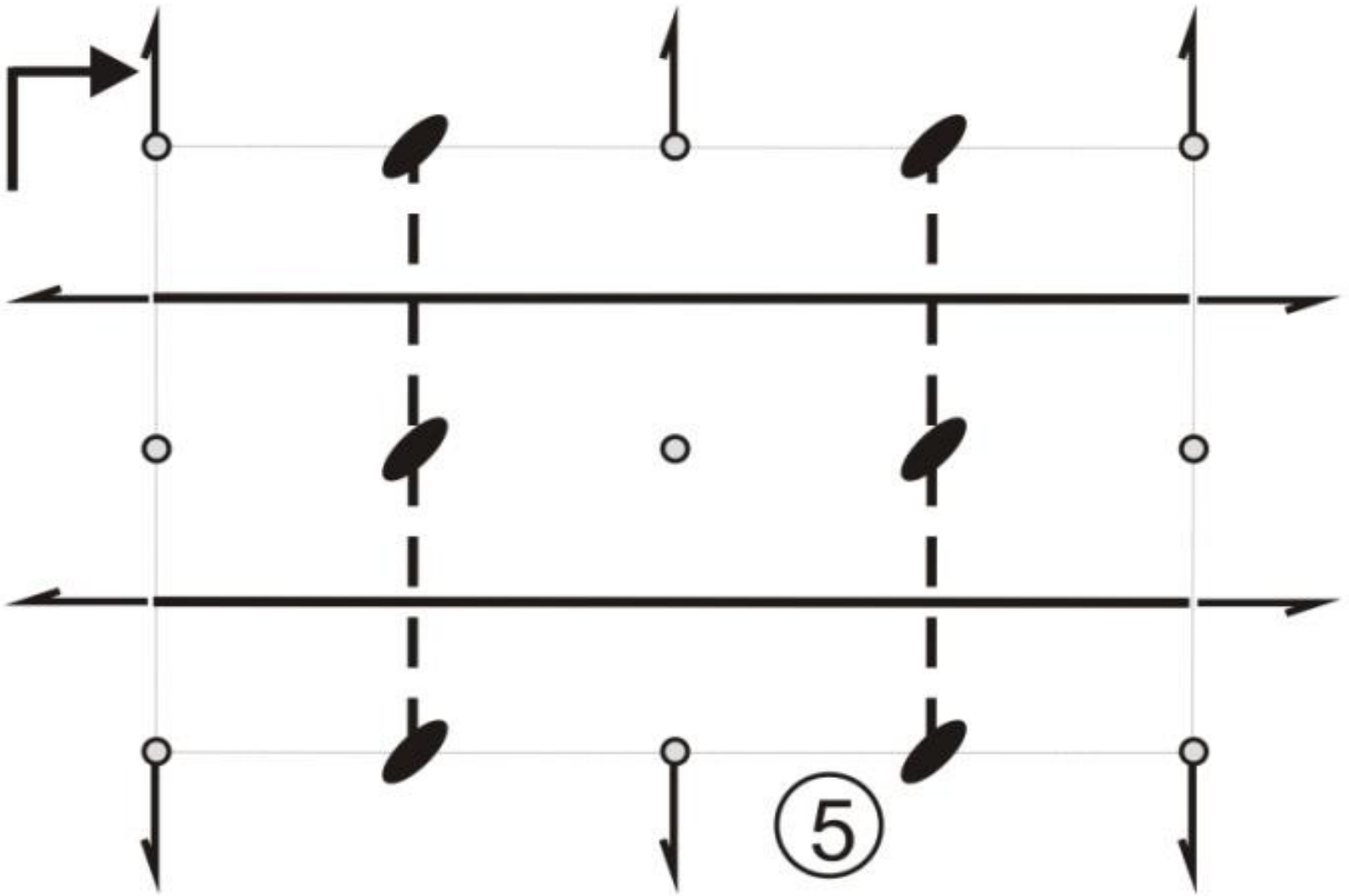


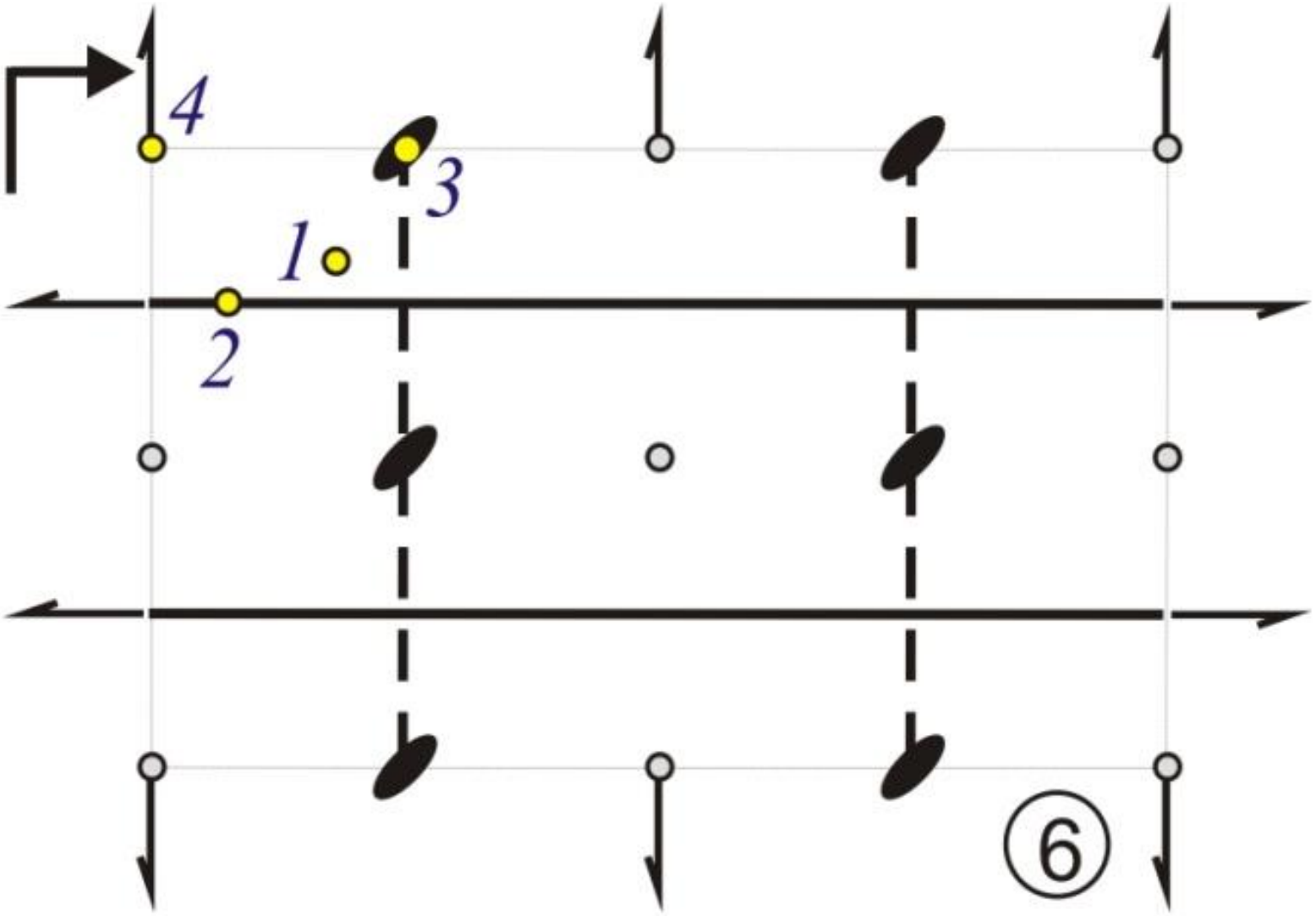

2

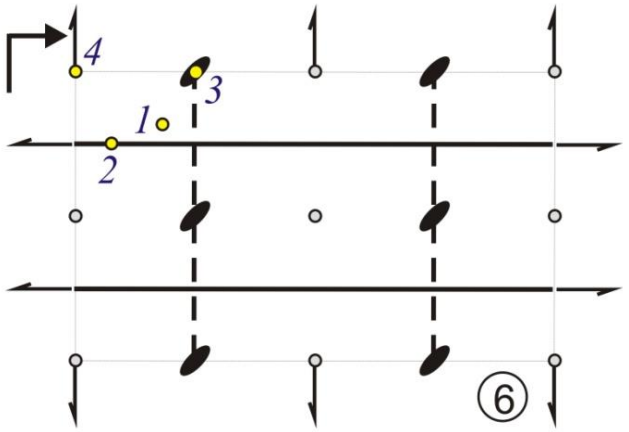

3



Следующим шагом является нахождение центра инверсии, который в этом классе должен неизбежно появиться три раза как результат взаимодействия $m_x \times 2_{1x}$, $b_z \times 2_z$ и $a_y \times 2_{1y}$. Для фиксации центра достаточно взять любую пару. Например, $b_z \times 2_z$

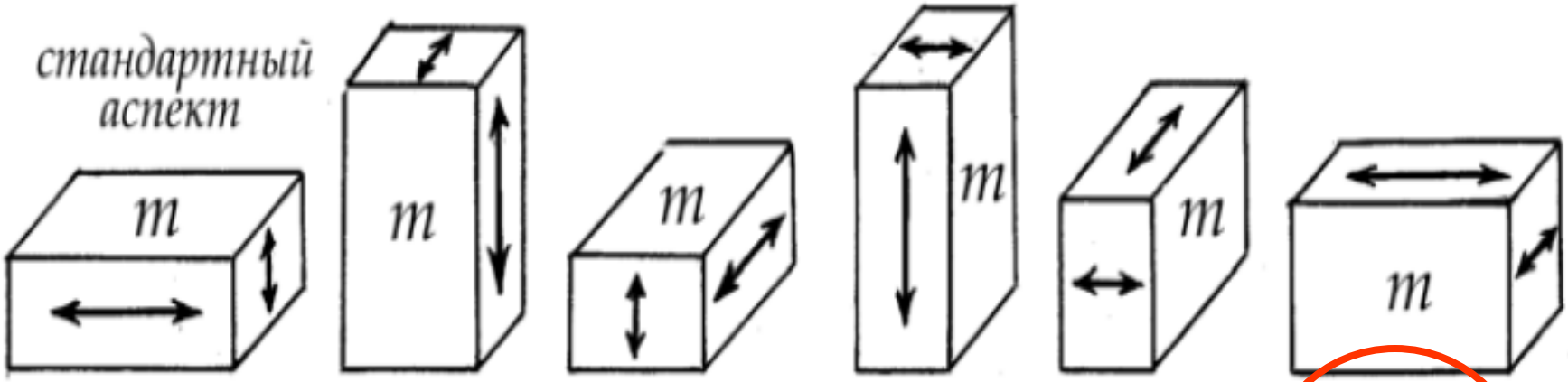

5


4
3
1
2
6



№ позиции	Собственная симметрия позиции (ССП)	Величина симметрии позиции (ВСП)	Число степеней свободы (ЧСС)	Кратность (Порядок группы / ВСП)	Координаты
1	1	1	3 (xyz)	8/1 = 8	$x\ y\ z$, $\bar{x}\ \bar{y}\ \bar{z}$, $x{+}½\ \bar{y}\ \bar{z}$, $\bar{x}{+}½\ y\ z$, $x\ y{+}½\ \bar{z}$, $\bar{x}\ \bar{y}{+}½\ z$, $x{+}½\ \bar{y}{+}½\ z$, $\bar{x}{+}½\ y{+}½\ \bar{z}$
2	*m*	2	2(yz)	8/2 = 4	¼ $y\ z$, ¾ $\bar{y}\ \bar{z}$, ¼ $y{+}½\ \bar{z}$, ¾ $\bar{y}{+}\ ½\ z$
3	2	2	1(z)	8/2 = 4	0 ¼ z, 0 ¾ $\bar{z}$, ½ ¾ $\bar{z}$, ½ ¼ z
4	$\bar{1}$	2	0	8/2 = 4	0 0 0, ½ 0 0, 0 ½ 0, ½ ½ 0

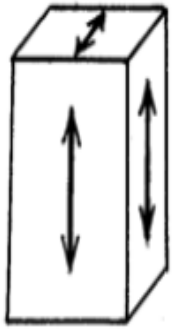
А если повернуть набок? *Pmab* – 6 клонов!



Pbcm = *Pmca* = *Pcam* = *Pcmb* = *Pbma* = *Pmab*

Плоскости скользящего отражения ***a, b*** и ***c*** с трансляционной компонентой, ориентированной вдоль одной из координатных осей, изменяют свои наименования в зависимости от той или иной ориентации их компонент.

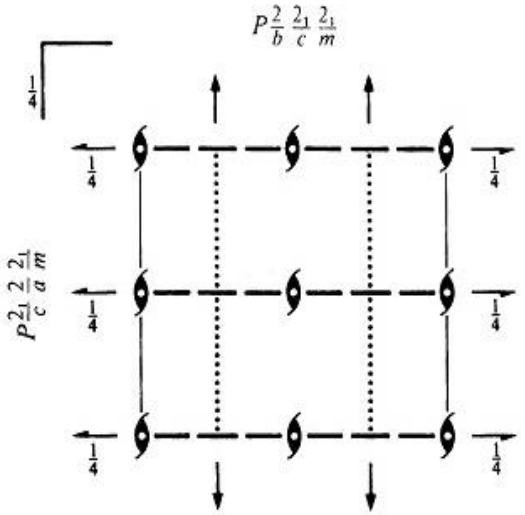
Обозначения же плоскостей
n и ***m*** не меняются в зависимости от их ориентации относительно координатных направлений

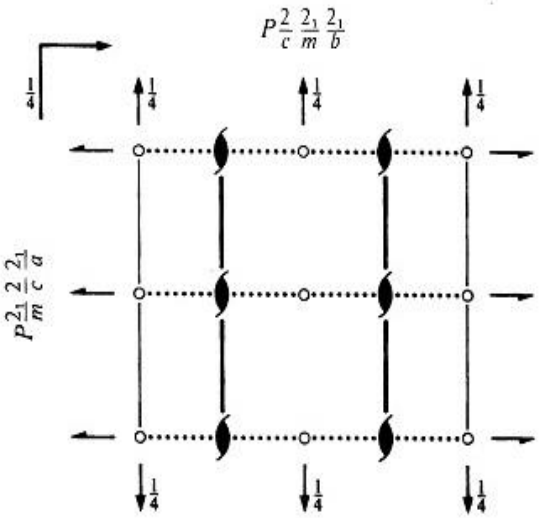


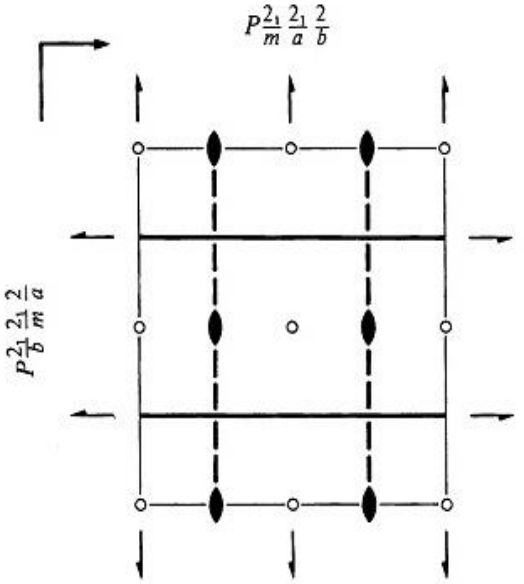
Возьмите детский кубик и клейте на него стрелки!

Pbcm *mmm*

No. 57 $P\ 2/b\ 2_1/c\ 2_1/m$







В следующий раз.
На некоторое время оставляем симметрийную тему и возвращаемся к *объектам симметрии* в вещественный атомарный микромир!

- **Свойства атомов, важные для кристаллохимии.**
- **Строение электронных оболочек.**
- **Электронные конфигурации элементов и Периодическая система.**
- **Орбитальные радиусы атомов и ионов.**