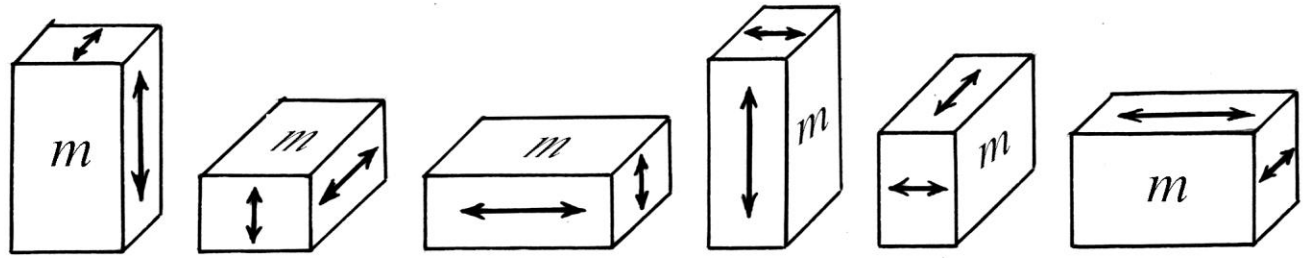
Вывод пространственных групп ромбической голоэдрии, подчиненных точечной *mmm.*

Пространственные группы точечного класса ***mm2,*** которые вывели, являются подгруппами голоэдрической группы ***mmm,*** которая есть надгруппа по отношению к ним.

Если раньше одно особое направление было известно (осевое), то теперь возникает определенная проблема, поскольку название плоскостей и символ группы зависят от ориентации ячейки. На рисунке одна и та же ячейка изображена в 6-ти возможных ориентациях с разным написанием группы, хотя это одна и та же группа. Одна из ориентаций будет стандартной ***Pbcm,*** в то время, как остальные не стандартными. В силу этого общий перебор вариантов будет исключительно трудоемким и для вывода нужен рациональный путь.



$$Pmca = Pcam = Pbcm = Pcmb = Pbma = Pmab$$

Применим как и ранее комбинаторный вывод Н.В.Белова с разделением плоскостей на
«удобные» - не меняют своего наименования при разных ориентациях и «неудобные» со сменой названия. Единственную в своем роде плоскость ставим на последнее место в символе (горизонтально).

1) все три плоскости «удобные» и комбинируем из двух по три: ***Pmmm, Pnnn, Pmmn, Pnnm***

2) две «удобные», одна «неудобная»: ***Pmma, Pnna, Pmna (≠Pmnb), Pnma***

3) одна удобная, две «неудобные» однотипные ***Pccm, Pccn, Pbam, Pban*** или разного типа скольжения ***Pbcm, Pbcn***

4) «удобных» нет, есть две однотипных ***Pcca*** и все разные взаимно перпендикулярные ***Pbca.***

Итого 16 групп с решеткой P.

Введение дополнительных векторов центрированных решеток приводит к чередованиям плоскостей и уменьшением независимых, как и раньше для групп гемиэдрии.

В решетке ***C*** чередуются вертикальные ***m(a,b), c(n),*** горизонтальные ***m≡n, a≡b*** и получаем

Cmmm, Cmcm, Cccm, Cmma, Cmca, Ccca.

Их можно получить из групп с решеткой ***A*** и затем поменять ориентацию.

В решетке ***I*** для вертикальных позиций ***m(n), a,b(c),*** горизонтальной ***a(b)*** и имеем группы

Immm, Imma, Ibam, I b(c) a(c) a(b) = Ibca.

В решетке ***F*** число вариантов минимально:

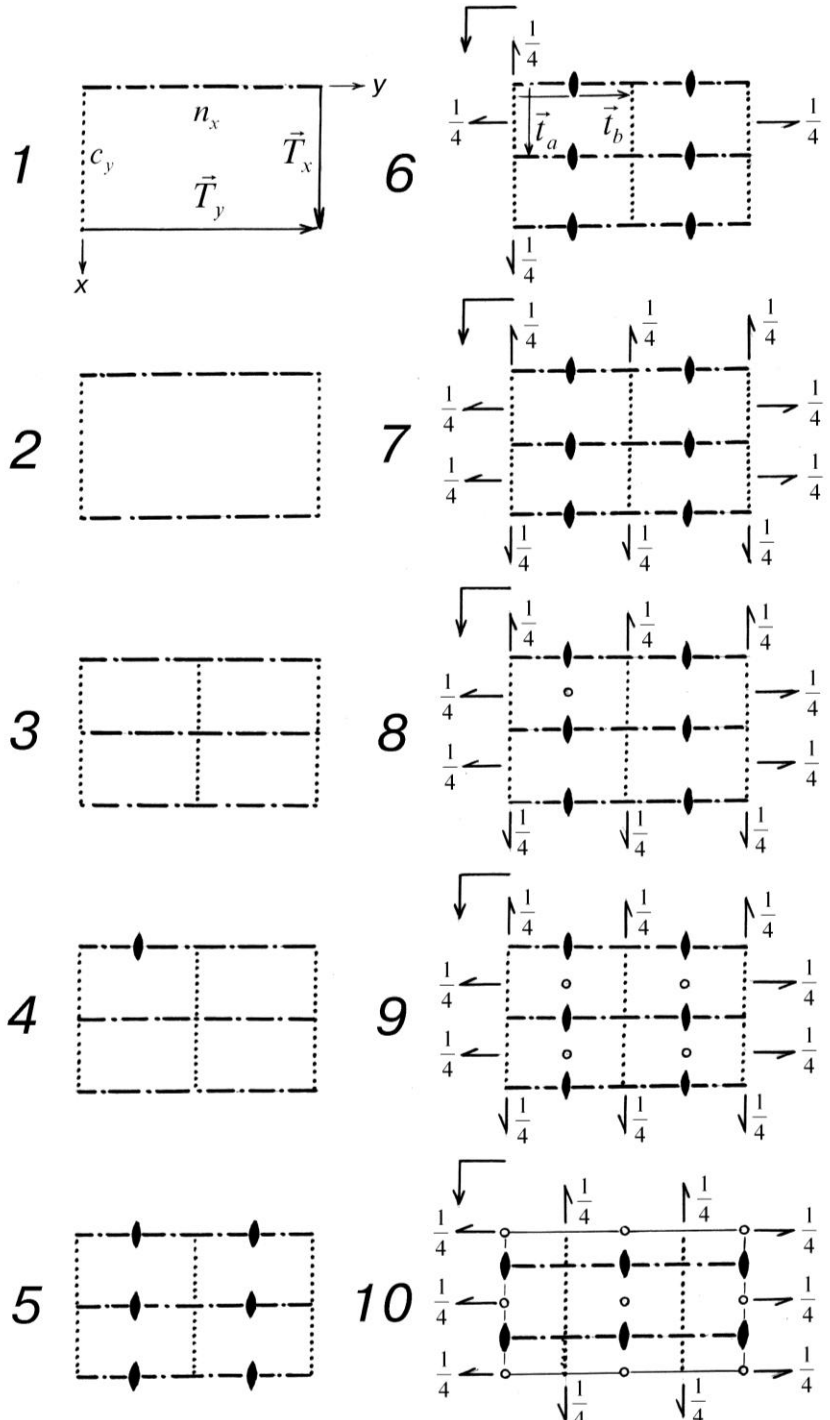
F m≡n(b≡c) m≡n(a≡c) m≡n(a≡b) и ***Fddd***

Итого 12 групп с решетками и всего 16+12=28 групп голоэдрии

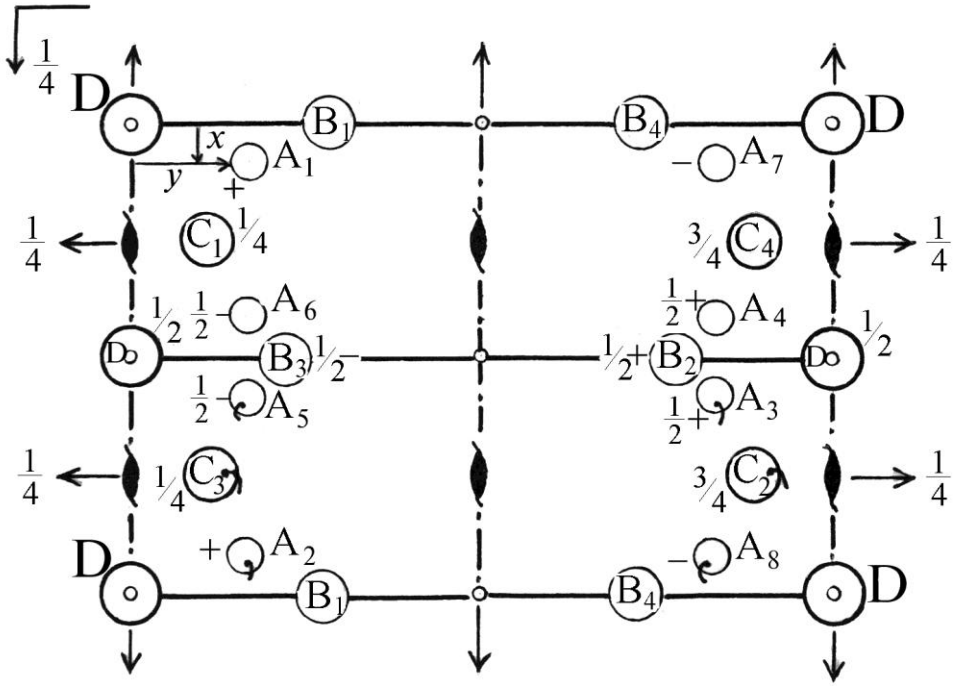
Осевые группы выводятся путем замены осей двумя плоскостями, поскольку каждая ось является произведением двух плоскостей симметрии, и здесь этот вывод мы опускаем. Можно вывести группы также путем перебора, поскольку разнообразие определяется типом осей ***2*** или $\boldsymbol{2_1}$ (число сочетаний из двух по три) и получаем **4 группы**:

$\boldsymbol{P222, P2_12_12_1, P222_1, P2_12_12.}$ С решетками имеются две $\boldsymbol{C222, C222_1, I222, I2_22_12_1,}$ ***F222,*** **Итого еще 4+5=9 групп.**

Все ромбические группы составляют 22+28+9=59 групп



На данном рисунке представлены этапы построения графика группы ***Pnca (Pbcn)*** ромбической голоэдрии.
Из исходного расположения плоскостей получаем трансляционные и плоскости на половине базовой трансляции.
Находим положения результирующей вертикальной оси и ее тип ***2*** и затем располагаем на трансляциях и на половинах трансляций. Находим положения результирующих горизонтальный осей и их тип $\boldsymbol{2_1}$.
Находим положения результирующих центров инверсии и все их полоэения через трансляции и половины трансляций. Выбираем начало в ячейке в самой неподвижной точке – центре инверсии и перечерчиваем график..

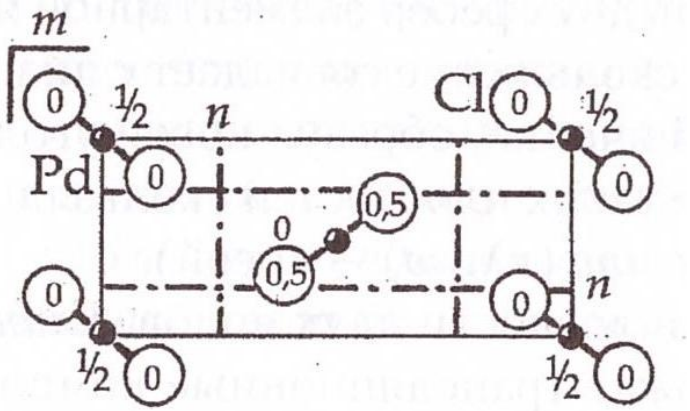


В группе ***Pmna*** есть общее А-положение xyz, размножаемое по ячейке A_1–A_8 на 8 точек с величиной симметрии 1 и кратностью 8; есть частное B_1-B_4 положение 0yz на плоскости ***m***, с двумя степенями свободы, величиной симметрии 2 и кратностью 8/2=4; есть частное С-положение 1/4y 1/4 на оси 2_y с одной степенью свободы, величиной симметрии 2 и кратностью 4 и D-положение 000 в центре инверсии с нулем степеней свободы, величиной симметрии 2 и кратностью 8/2=4.

поз.	сим.	вел.	ч.ст.	кратн.	коорд.
	поз.	сим.	своб.		
A	1	1	3	8	xyz
B	***m***	2	2	4	0yz
C	***2***	2	1	4	1/4 y 1/4
D	-1	2	0	4	000

Под буквами A, B, C и D могут быть те или иные атомы структуры.

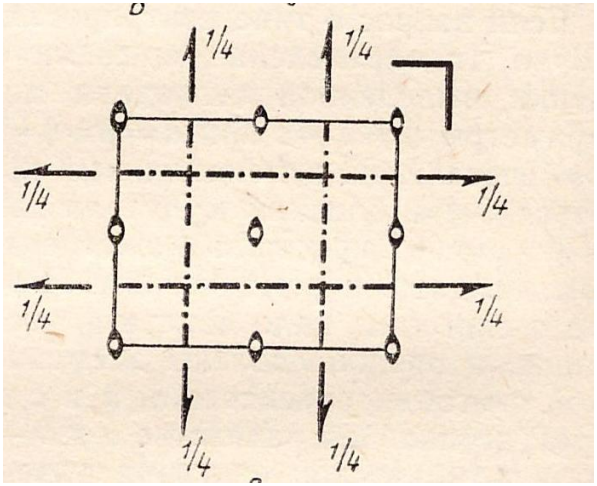
При описании структуры в той или иной пространственной группе для каждого атома в той или иной правильной системе точек (орбите) должна быть охарактеризована **симметрия позиции**, **величина ее симметрии**, **число степеней свободы** (ось - одна степень свободы перемещения с сохранением позиции, плоскость - две степени свободы или общее положение - три степени свободы, нет никакой фиксации), **кратность позиции** или число точек в одной ячейке как определяется как отношение максимального числа точек общего положения, отвечающего кратности группы, к величине симметрии частного положения, и наконец **координаты x,y,z.**

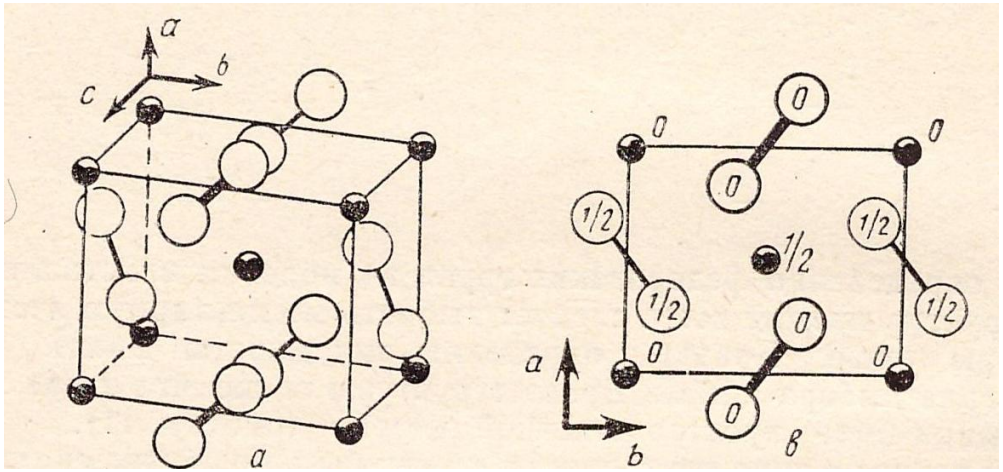


Структура $PdCl_2$, пр. гр. ***Pnnm***

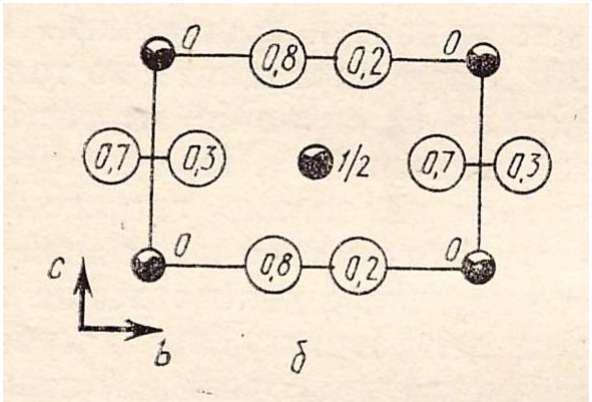
поз.	сим.поз.	вел.симм.поз.	ч.ст.своб.	кратн.	коорд.
Pd	***2/m***	4	0	2	0 0 1/2, 1/2 1/2 0
Cl	***m***	2	2	4	xy0, 1/2-x 1/2+y 1/2, -x -y 0, 1/2+x 1/2-y 1/2

Минерал марказит FeS_2 –ромбическая модификация пирита кристаллизуется в той же, что и **$PdCl_2$** пр. группе ***Pnnm.*** Позиция атома Fe совпадает с позицией Pd и отвечает ***2/m***, а позиция серы S хотя и в том же положении на плоскости ***m,*** но имеет другие координаты xy0.



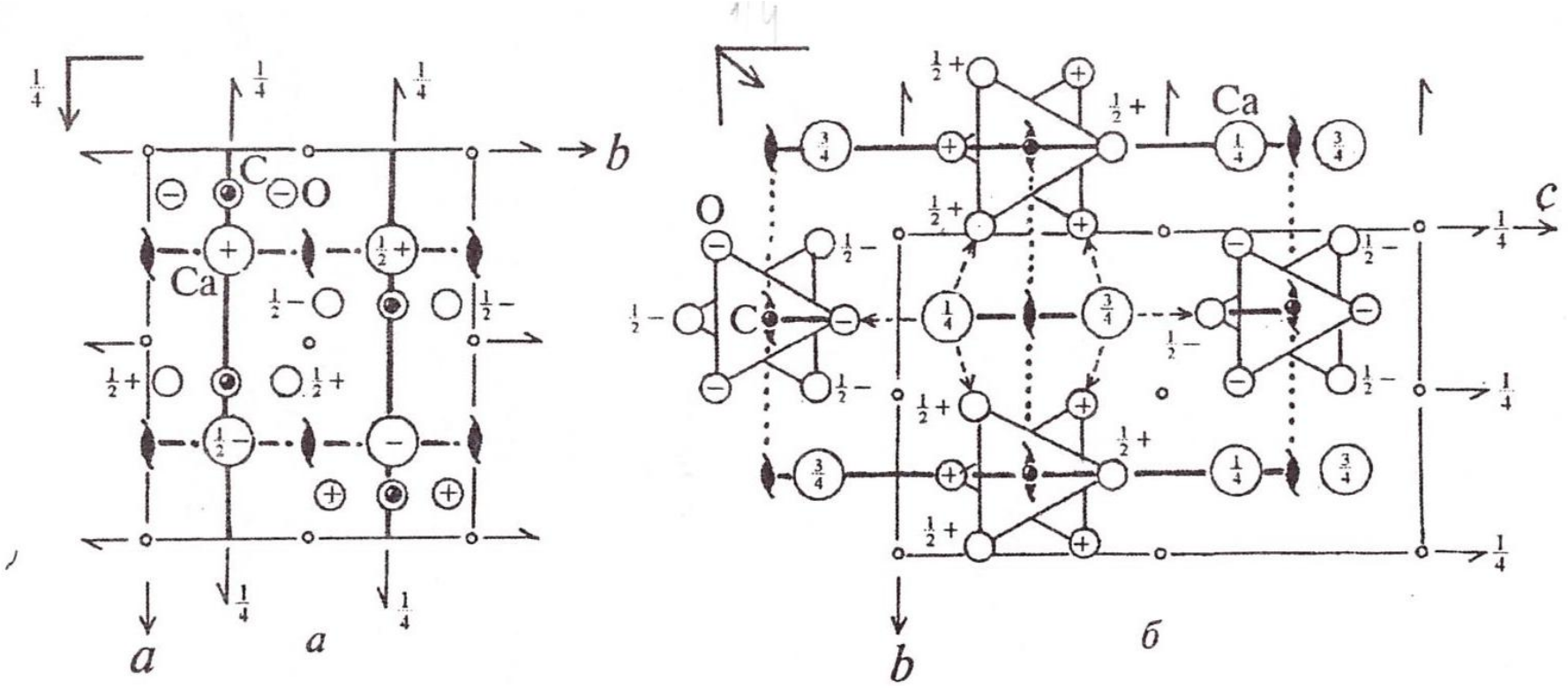


поз.	сим.поз.	вел.с.поз.	ч.ст.св.	кратн.	коорд.
Fe	***2/m***	4	0	2	0 0 0, 1/2 1/2 1/2
S	***m***	2	2	4	xy0,-x-y0, 1/2+x1/2-y1/2, 1/2-x –y 1/2



Описание структуры…

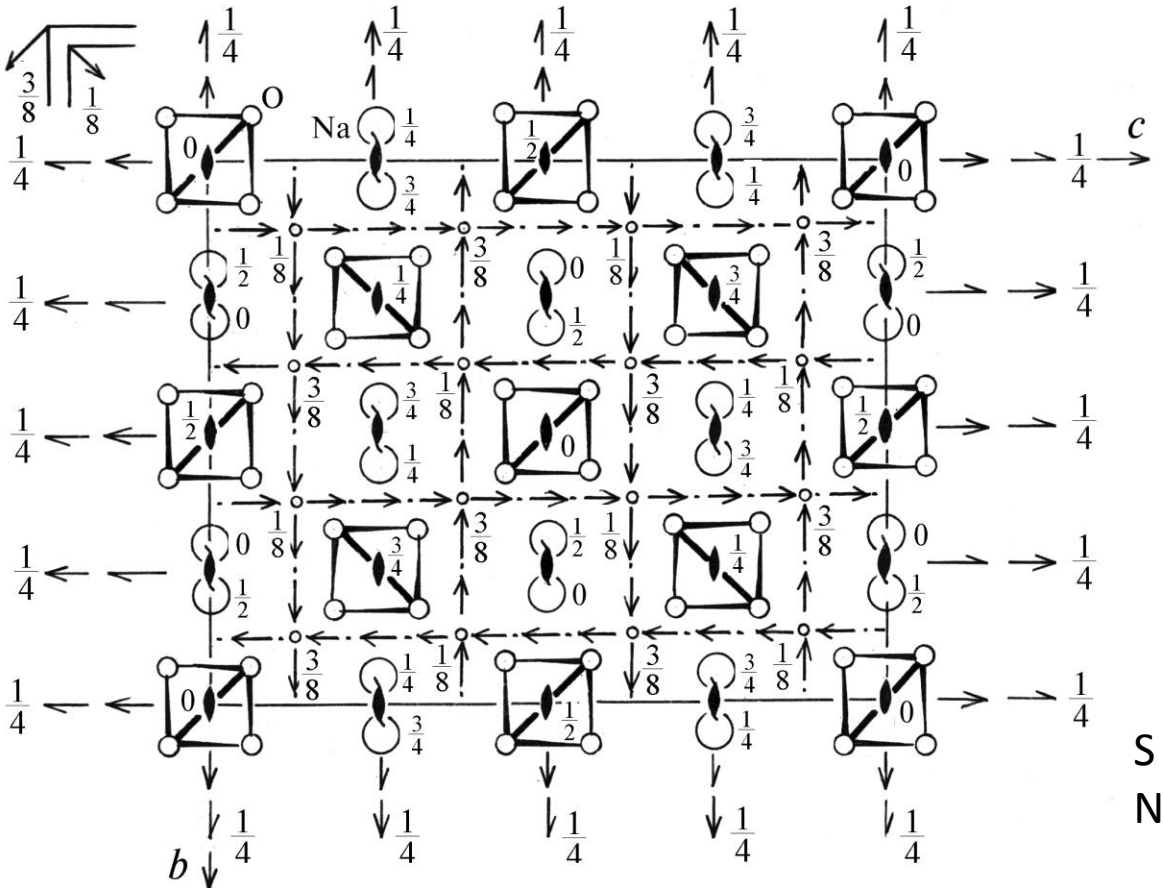
Кристаллическая структура арагонита $CaCO_3$. пр. группа *Pnma,* проекции *ab* и *bc*



поз.	сим.поз.	вел.с.поз.	ч.ст.св.	кратн.	коорд.
Ca	***m***	2	2	4	x 1/4 z
C	***m***	2	2	4	x 1/4 z
O1	***m***	2	2	4	x 1/4 z
O2	1	1	3	8	x y z

Описание структуры…

Кристаллическая структура тенардита Na_2SO_4 пр.гр. $Fddd$ $\left(D_{2h}^{24}\right)$



S – 8 (*a*) *222* : $000,\ \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$

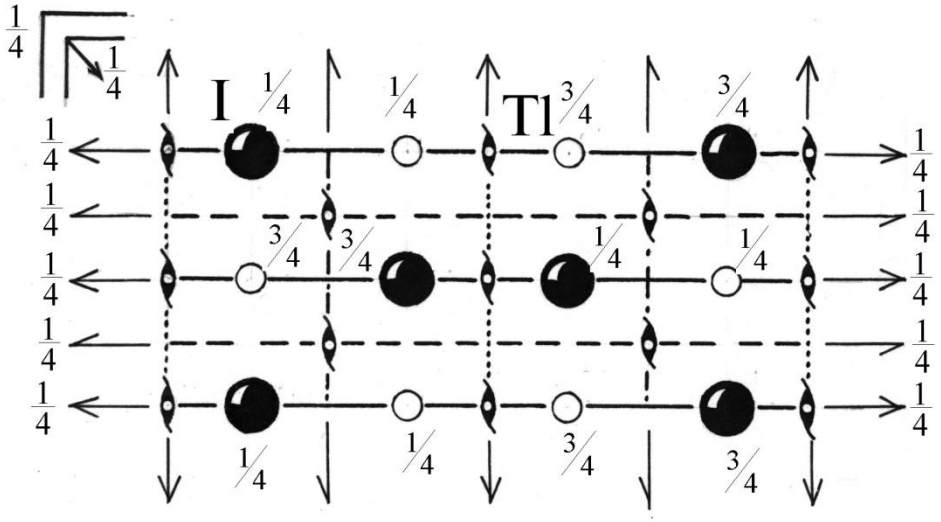
Na – 16 (*f*) *2* :

$$0y0,\ 0\bar{y}0,\ \frac{1}{4}\left(\frac{1}{4}-y\right)\frac{1}{4},\ \frac{1}{4}\left(\frac{1}{4}+y\right)\frac{1}{4};$$

O – 32 (*h*) *1* :

$$xyz,\ \bar{x}y\bar{z},\ \left(\frac{1}{4}-x\right)\left(\frac{1}{4}-y\right)\left(\frac{1}{4}-z\right),\ \left(\frac{1}{4}+x\right)\left(\frac{1}{4}-y\right)\left(\frac{1}{4}+z\right),$$

Кристаллическая структура TlI пр.гр. $Cmcm\ \left(D_{2h}^{17}\right)$



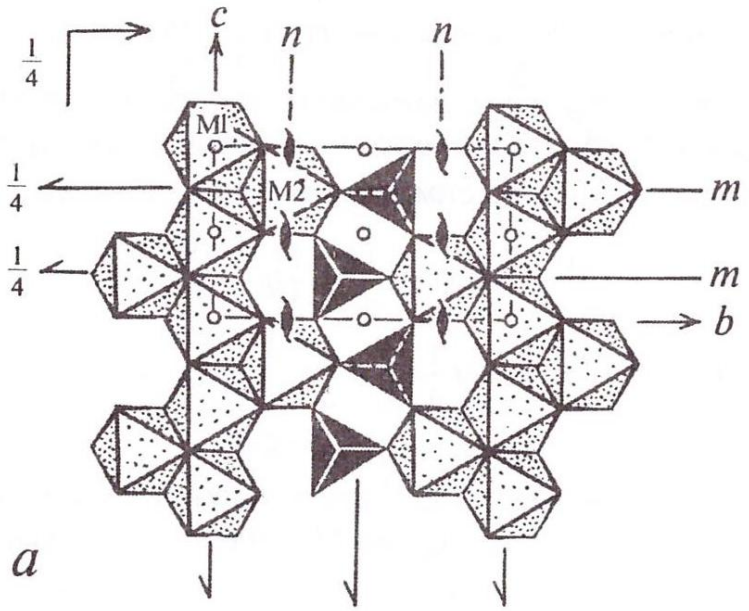
Развернутый символ пр.гр. с чередованием плоскостей из-за решетки ***C*** :

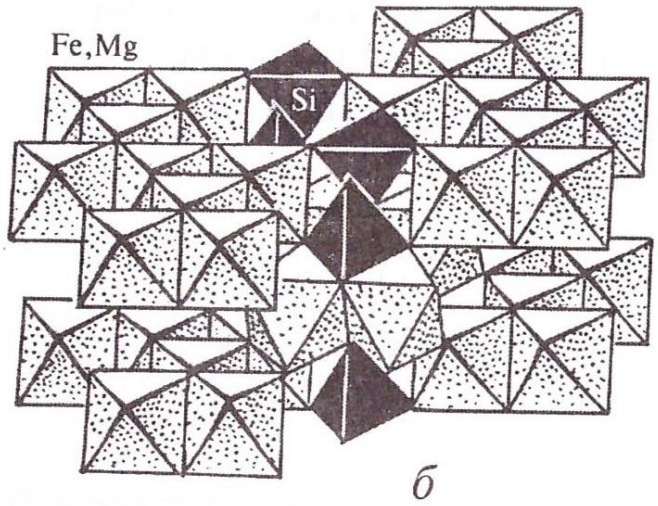
$$C\ \frac{2\left(2_1\right)}{m\left(b\right)}\ \frac{2\left(2_1\right)}{c\left(n\right)}\ \frac{2_1\left(2_1\right)}{m \equiv n}.$$

$\left.\begin{matrix}\text{Tl}\\ \text{I}\end{matrix}\right\}$ – 4 (*c*) *mm2* : $0y\,\frac{1}{4},\ \ 0\bar{y}\,\frac{3}{4},$ где $y_{\text{Tl}} \approx 3/8,\ \ y_{\text{I}} \approx 1/8$

Далее координаты размножены решеткой ***C*** $\left(000,\ \frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)+$

Кристаллическая структура оливина (Mg,Fe)[SiO_4], пр. группа *Pbnm* (*Pnma),* проекция *bc*





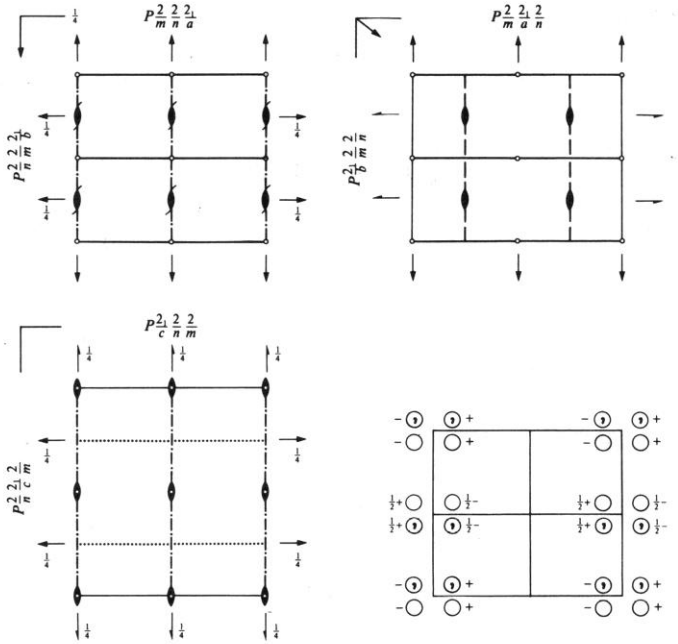
поз.	сим.поз.	вел.с.поз.	ч.ст.св.	кратн.	коорд.
Fe1	***-1***	2	0	4	0 0 0
Fe2	***m***	2	2	4	x y 1/4
Si	***m***	2	2	4	x y 1/4
O1	***m***	2	2	4	x y 1/4
O1	***m***	2	2	4	x y 1/4
O3	***1***	1	3	8	x y z

Описание структуры

Каждая из пространственных групп представлена в Интертаблицах так, как показано на рисунке для ромбической группы ***Pmna***: график группы в трех проекциях, размножение точек с помощью фигур, описание правильных систем точек, возможных в группе с обозначениями Уайкоффа, симметрии позиций и координат правильных систем точек.

$Pmna$ D_{2h}^{7} mmm Orthorhombic

No. 53 $P\,2/m\,2/n\,2_1/a$ Patterson symmetry $Pmmm$

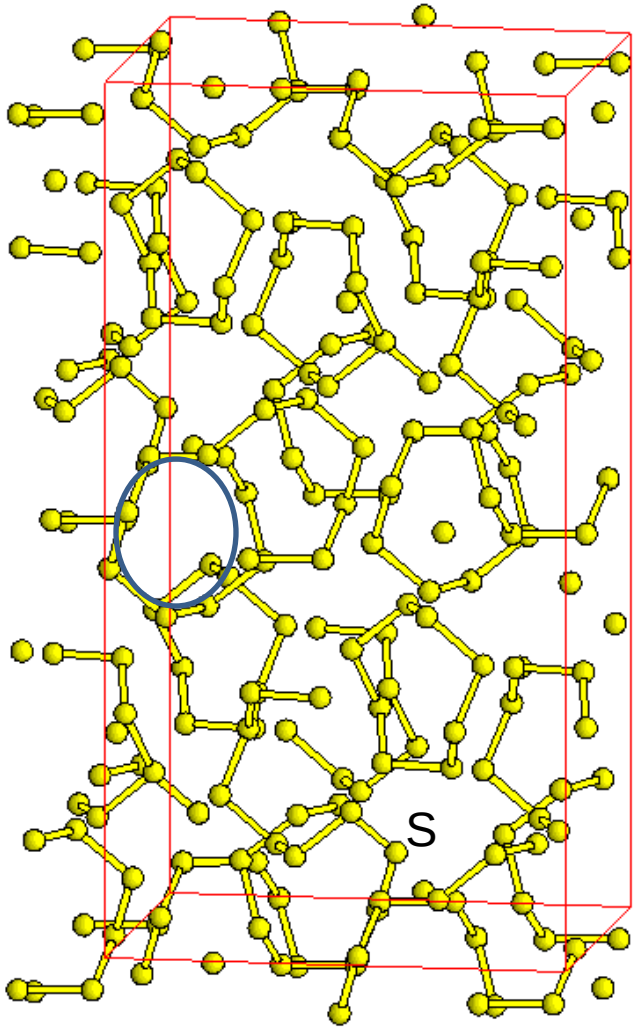


Origin at centre $(\frac{2}{m})$ at $2/m\,n\,1$

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates			
8	*i*	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x}+\frac{1}{2},y,\bar{z}+\frac{1}{2}$	(4) $x,\bar{y},\bar{z}$
			(5) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$	(6) $x+\frac{1}{2},y,\bar{z}+\frac{1}{2}$	(7) $x+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(8) $\bar{x},y,z$
4	*h*	$m\,.\,.$	$0,y,z$	$\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},y,\bar{z}+\frac{1}{2}$	$0,\bar{y},\bar{z}$
4	*g*	$.\,2\,.$	$\frac{1}{4},y,\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4},\bar{y},\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4},\bar{y},\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4},y,\frac{1}{4}$
4	*f*	$2\,.\,.$	$x,\frac{1}{4},0$	$\bar{x}+\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{2}$	$\bar{x},\frac{1}{4},0$	$x+\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{2}$
4	*e*	$2\,.\,.$	$x,0,0$	$\bar{x}+\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$	$\bar{x},0,0$	$x+\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$
2	*d*	$2/m\,.\,.$	$0,\frac{1}{4},0$	$\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{2}$		
2	*c*	$2/m\,.\,.$	$\frac{1}{2},\frac{1}{4},0$	$0,\frac{1}{4},\frac{1}{2}$		
2	*b*	$2/m\,.\,.$	$\frac{1}{2},0,0$	$0,0,\frac{1}{2}$		
2	*a*	$2/m\,.\,.$	$0,0,0$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$		

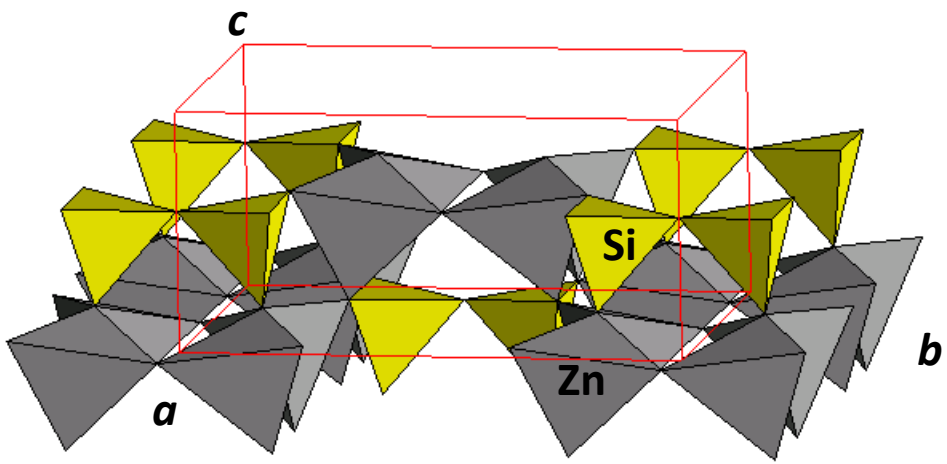
Кристаллическая структура серы: **S8**, пр. группа ***Fddd***



Структура построена из колец **S8,** внутри кольца связи ковалентные, между ними – Ван-дер Ваальсовы

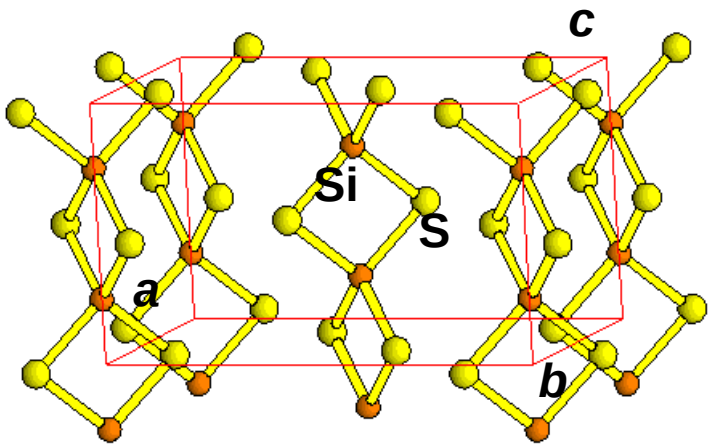
Кристаллическая структура каламина-гемиморфита $Zn_4[Si_2O_7](OH)_2$

Пространственная группа ***Imm2,*** полярное направление отвечает оси ***c***

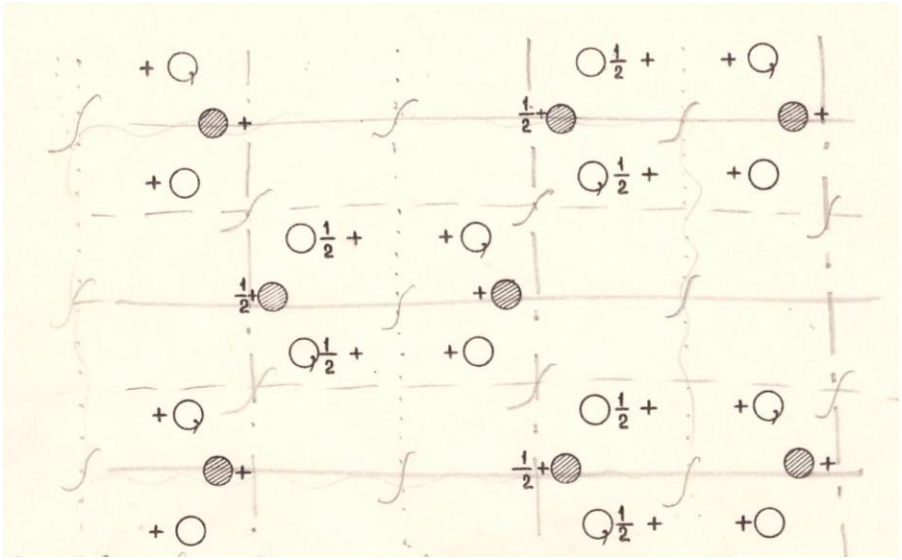


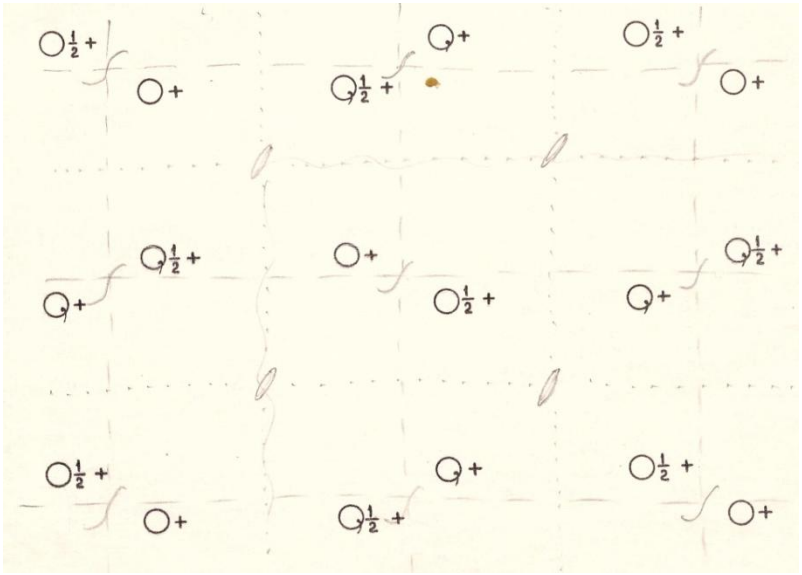
Кристаллическая структура SiS_2

Пространственная группа *Ibam*



Задача на восстановление структуры из проекции точек

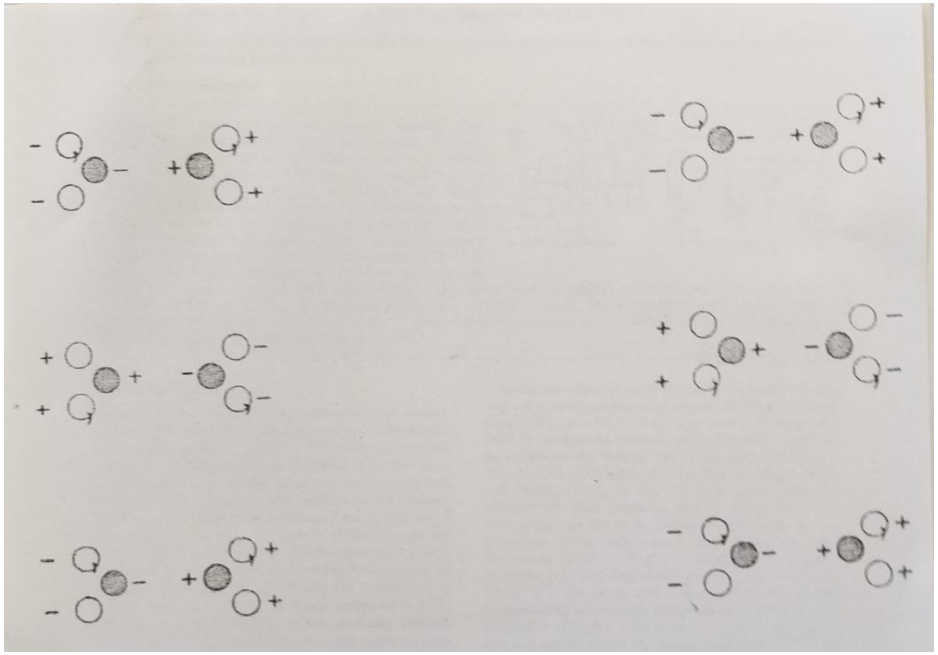




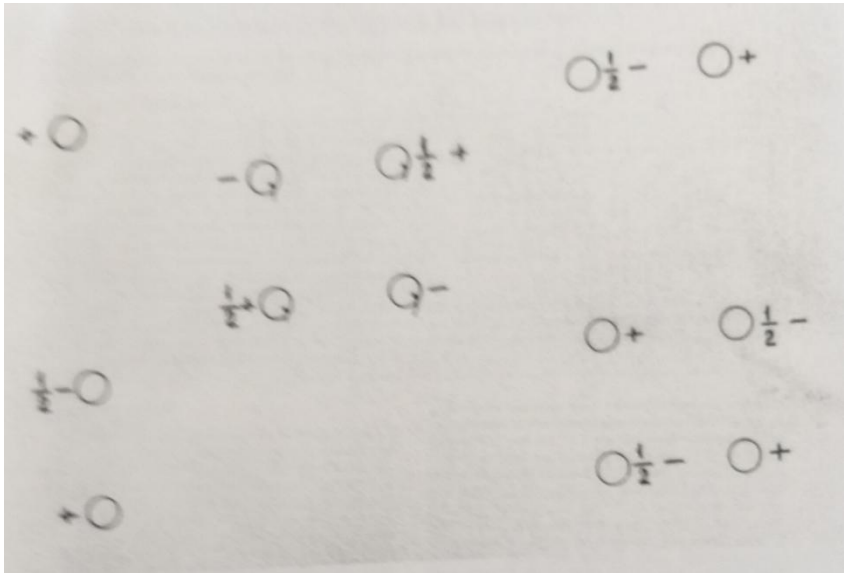
Вначале определяем зеркальную плоскость ***m,*** проходящую через серые атомы. Далее выделяем решетку ***C,*** плоскости ***c*** и все плоскости чередований по законам взаимодействий. Итоговая группа: ***Cm(a)n(c)2$_1$(2$_1$)***

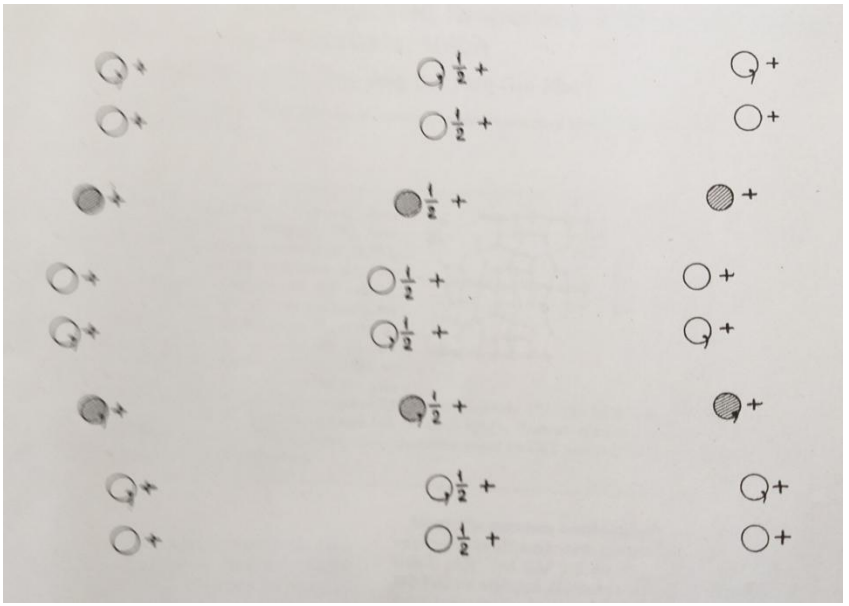
Здесь проще всего определяются как конгруентные операции макросимметрии оси ***2,*** затем две плоскости ***c,*** на линии пересечения которых – оси. Обнаруживаем оси ***2$_1$,*** из чего находим решетку ***I.*** Итоговая группа : ***Ib(c)a(c)2(2$_1$)***

Предлагается самостоятельно решить задачи на восстановление структуры и определение пространственной группы по следующим расположениям атомов:



Ход решения задачи: выделить ячейку по трансляциям,
выявить элементы симметрии,
проверить их взаимодействие,
определить ПСТ и подтвердить
размножение атомов





Определить две других структуры и их пространственные группы, учесть, что после выявления трансляций, их следует приложить к точкам, если они не все на чертеже