Лекция 7.

Основы кристаллографической магии. Часть 2

Правильные системы точек

Совокупность эквивалентных точек, то есть все точки, связанные элементами симметрии группы

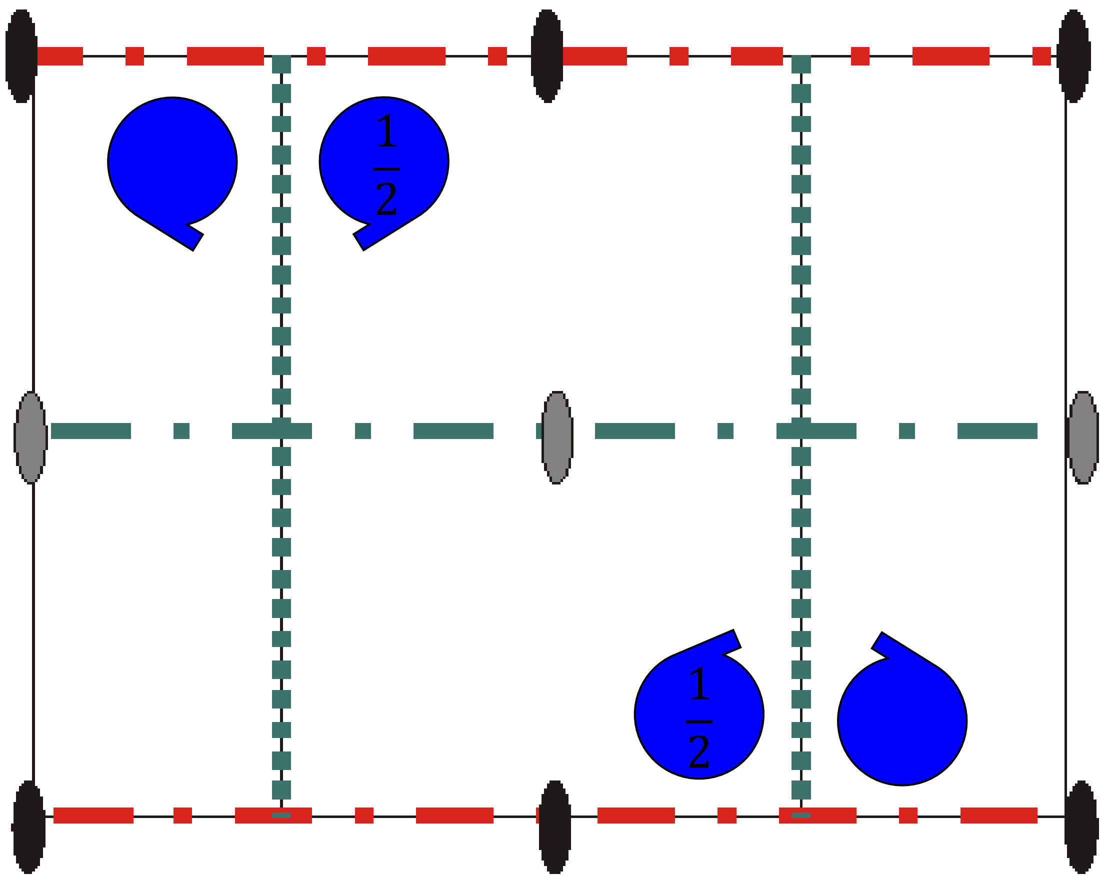


График группы *Pnc*2

Характеристики правильных систем точек

- ***Число степеней свободы (ЧСС)***
- ***Симметрия позиции (СП)***
- ***Величина симметрии позиции (ВСП)***
- ***Кратность***

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!!

Особая точка инверсионной оси	– 0 степеней свободы
Ось	– 1 степень свободы
Плоскость *m*	– 2 степени свободы
Точка без элементов симметрии (1)	– 3 степени свободы

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!!!

32 КЛАССА СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

Категория	НИЗШАЯ $a \neq b \neq c$			СРЕДНЯЯ $a = b \neq c$				ВЫСШАЯ $a = b = c$	
Сингония	Триклинная $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	Моноклинная $\alpha = \beta = 90°$ $\gamma \neq 90°$	Ромбическая $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	Тетрагональная $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	Гексагональная $\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$			Кубическая $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	
					Тригональная подсингония	Гексагональная подсингония			
C_n	L_1 C_1 1 моноэдр	L_2 C_2 2 осевой диэдр		L_4 C_4 4 тетрагональная пирамида	L_3 C_3 3 тригональная пирамида		L_6 C_6 6 гексагональная пирамида	Обозначения Символ Браве — Символ Шенфлиса Стереографическая проекция класса симметрии Международный символ — Форма общего положения	
C_{ni} (S_n)	Ł$_1$/C C_i/S_2 $\bar{1}$ пинакоид	Ł$_2$/P C_s/S_1 m плоскостной диэдр		Ł$_4$ C_{4i}/S_4 $\bar{4}$ тетрагональный тетраэдр	Ł$_3$ C_{3i}/S_6 $\bar{3}$ ромбоэдр		Ł$_6$ C_{6i}/S_3 $\bar{6}$ тригональная бипирамида		
C_{nh}		L_2PC C_{2h} $\frac{2}{m}$ ромбическая призма		L_4PC C_{4h} $\frac{4}{m}$ тетрагональная бипирамида		Ł$_6$ C_{3h} $\bar{6}$ тригональная бипирамида	L_6PC C_{6h} $\frac{6}{m}$ гексагональная бипирамида		
C_{nv}			L_22P C_{2v} $mm2$ ромбическая пирамида	L_44P C_{4v} $4mm$ дитетрагональная пирамида	L_33P C_{3v} $3m$ дитригональная пирамида		L_66P C_{6v} $6mm$ дигексагональная пирамида		
D_n			$3L_2$ D_2 222 ромбический тетраэдр	L_44L_2 D_4 422 тетрагональный трапецоэдр	L_33L_2 D_3 32 тригональный трапецоэдр		L_66L_2 D_6 622 гексагональный трапецоэдр	$3L_24L_3$ T 23 пентагон-тритетраэдр	$3L_44L_36L_2$ O 432 пентагон-триоктаэдр
D_{nd}				Ł$_4$$2L_22P$ D_{2d} $\bar{4}m2$ тетрагональный скаленоэдр	L_33L_23PC D_{3d} $\bar{3}m$ тригональный скаленоэдр			3Ł$_4$$4L_36P$ T_d $\bar{4}3m$ гекса-тетраэдр	
D_{nh}			$3L_23PC$ D_{2h} mmm ромбическая бипирамида	L_44L_25PC D_{4h} $\frac{4}{m}mm$ дитетрагональная бипирамида		L_33L_24P D_{3h} $\bar{6}m2$ дитригональная бипирамида	L_66L_27PC D_{6h} $\frac{6}{m}mm$ дигексагональная бипирамида	$3L_24L_33PC$ T_h $m\bar{3}$ дидодекаэдр	$3L_44L_36L_29PC$ O_h $m\bar{3}m$ гекса-октаэдр

***Величина симметрии позиции* (ВСП)** - число точек, на которые разделится одна точка, выведенная из данной позиции.

Кратность - число точек, приходящихся на одну элементарную ячейку. **кратность= ВСГ/ВСП**

ВСГ (Величина **С**имметрии **Г**руппы =

Величина симметрии (размножающая способность) подрешеточного комплекса

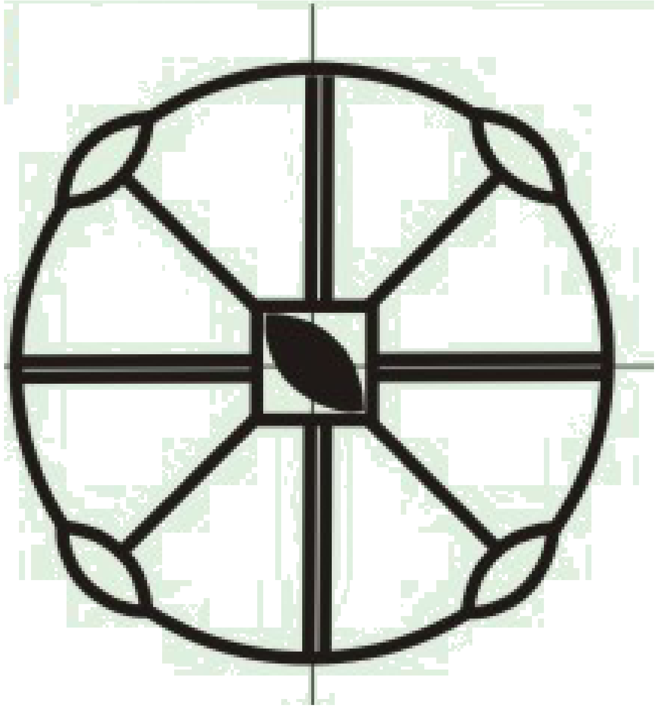
×

Размножающую способность решетки Браве

Потренируемся

$I\bar{4}2d$

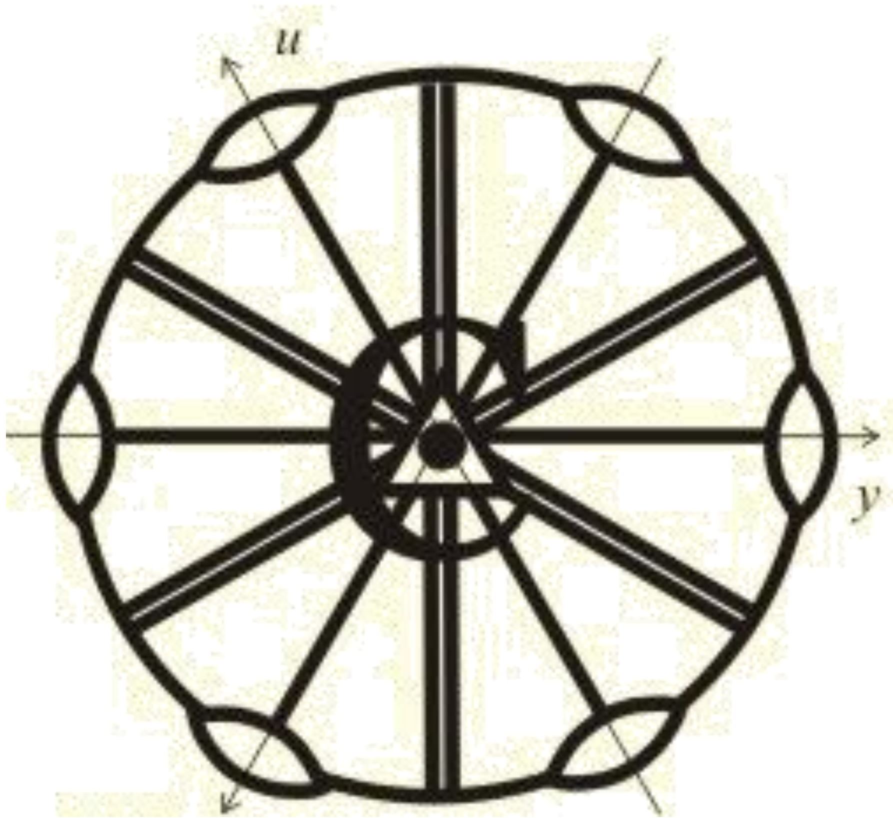
ВСГ = 2 * 8 = 16



Потренируемся

$R\bar{3}c$

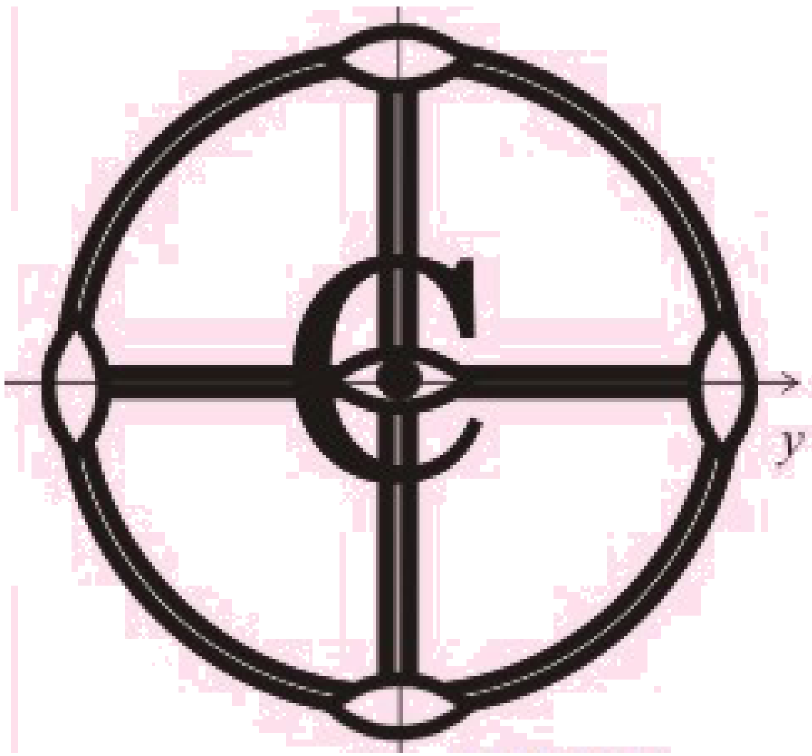
ВСГ = 3 * 12 = 36



Потренируемся

Fddd

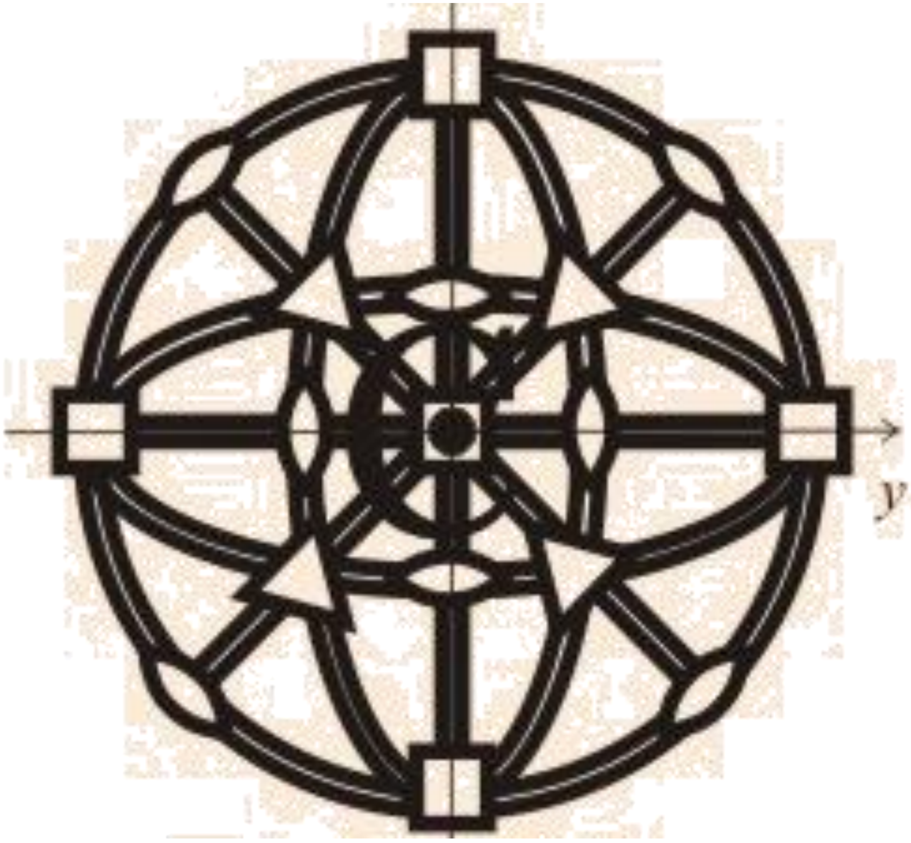
ВСГ = 4 * 8 = 32



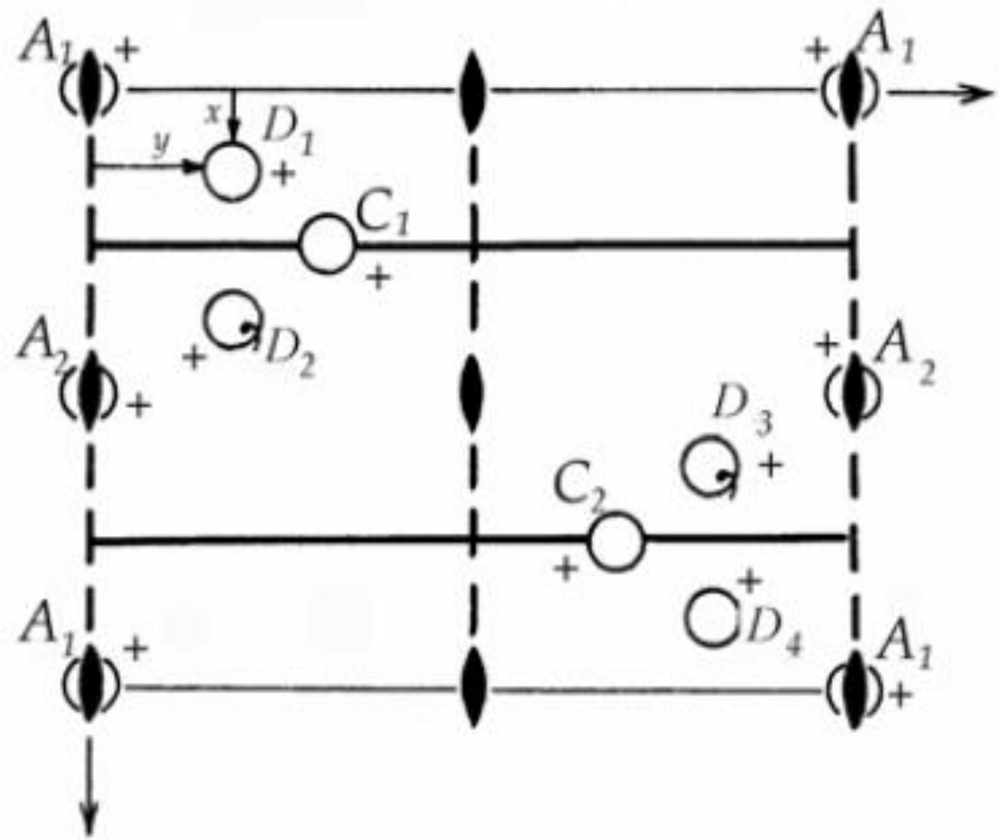
Потренируемся

$Fd\bar{3}m$

ВСГ = 4 * 48 = 192 Ой!



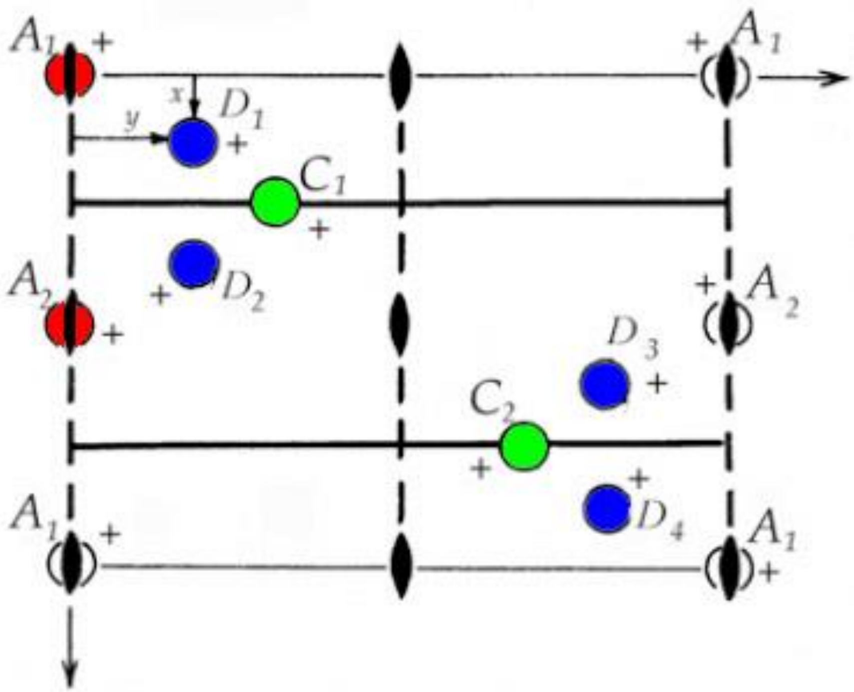
В одной группе нетривиальной симметрии существует более одной правильной системы



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	,
A	*2*	2	$1_{(z)}$	4 : 2 = 2	00*z*,
C	*m*	2	$2_{(y,z)}$	4 : 2 = 2	

Законы, работающие при любом x y z!

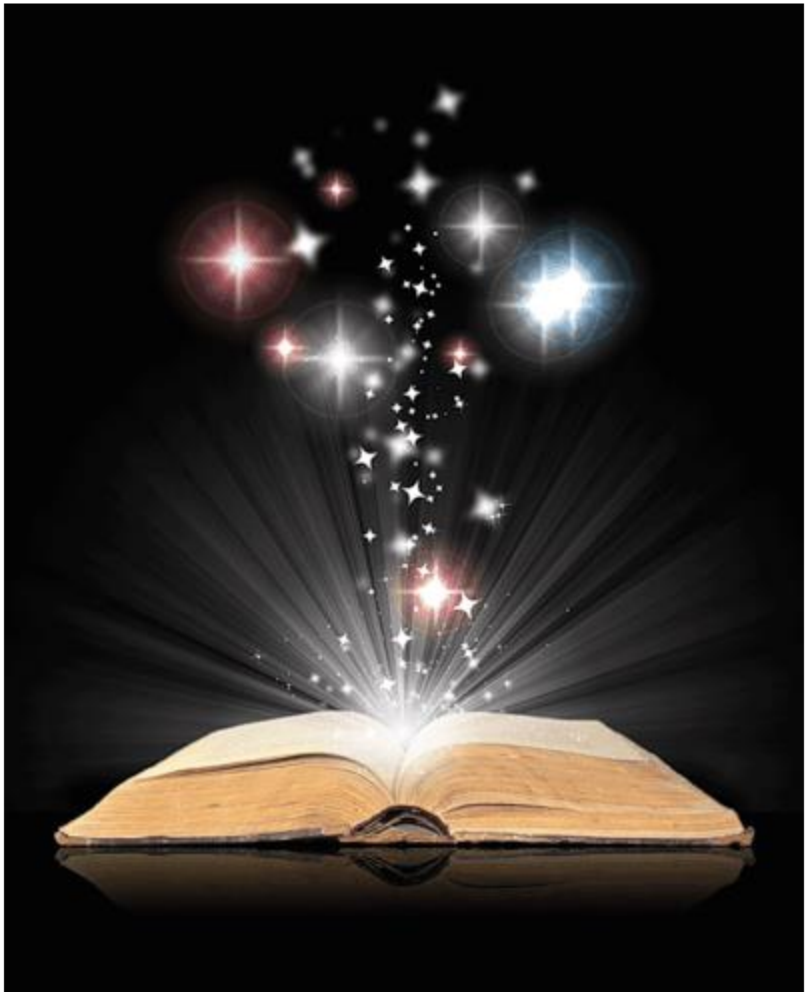
Что такое -x?

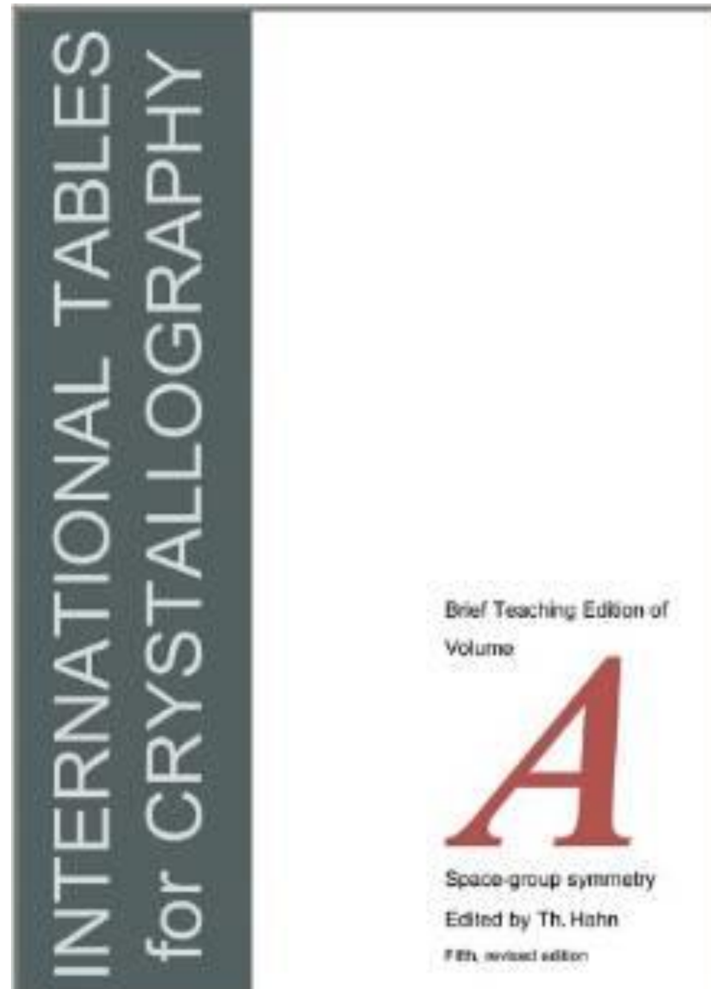
Допустим, x=0,1

Тогда -x = -0,1 = 0,9!!!

Магическая книга кристаллографа - International Tables for X-Ray Crystallography

Volume A, Space-group Symmetry

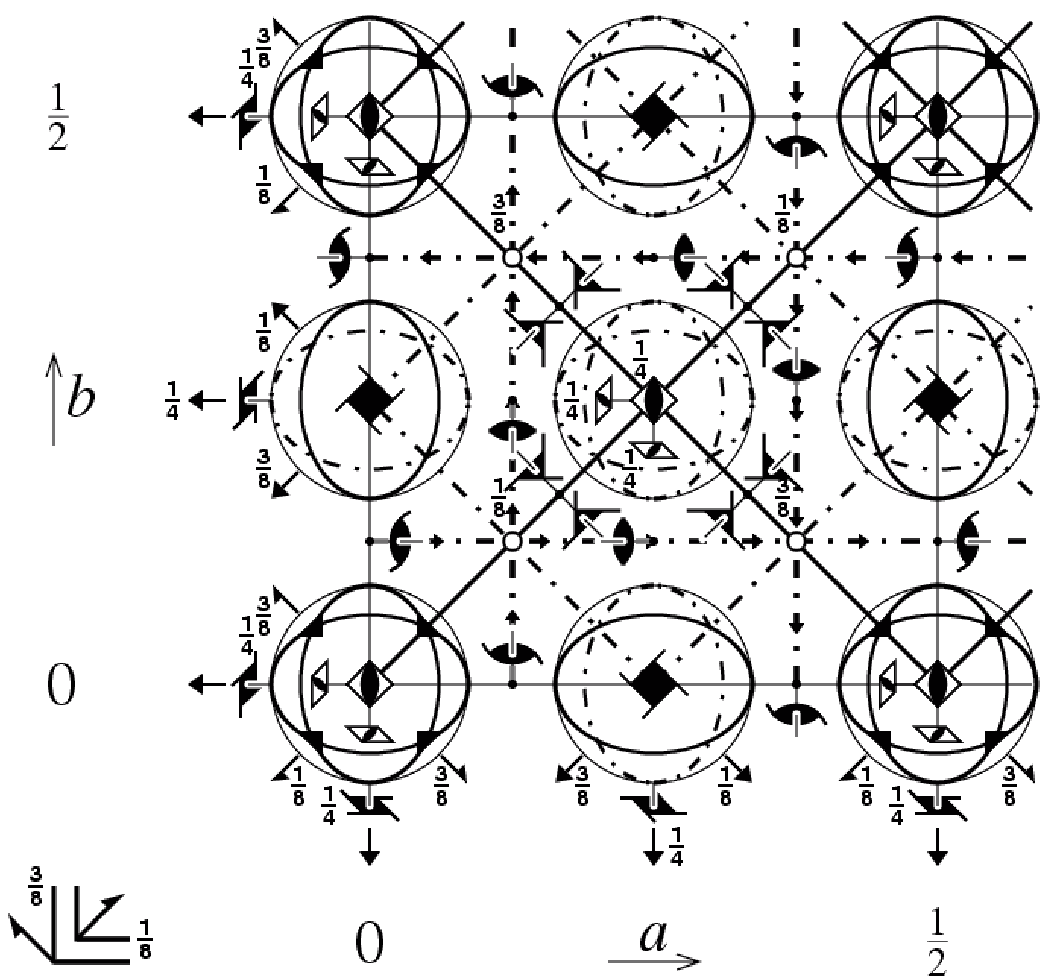




International Tables for X-Ray Crystallography

Volume A, Space-group Symmetry

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



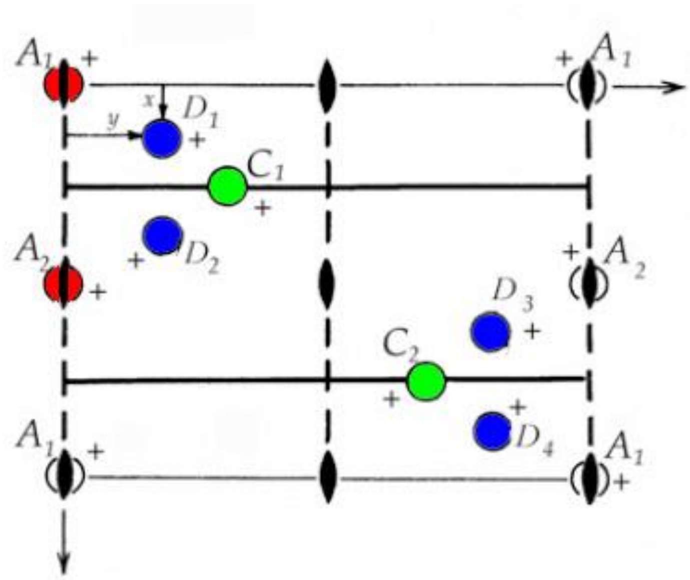
1	x, y, z	25	$\frac14-x, \frac14-y, \frac14-z$
2	$x, \bar{y}, \bar{z}$	26	$\frac14-x, \frac14+y, \frac14+z$
3	$\bar{x}, y, \bar{z}$	27	$\frac14+x, \frac14-y, \frac14+z$
4	$\bar{x}, \bar{y}, z$	28	$\frac14+x, \frac14+y, \frac14-z$
5	z, x, y	29	$\frac14-z, \frac14-x, \frac14-y$
6	$\bar{z}, \bar{x}, y$	30	$\frac14+z, \frac14+x, \frac14-y$
7	$z, \bar{x}, \bar{y}$	31	$\frac14-z, \frac14+x, \frac14+y$
8	$\bar{z}, x, \bar{y}$	32	$\frac14+z, \frac14-x, \frac14+y$
9	y, z, x	33	$\frac14-y, \frac14-z, \frac14-x$
10	$\bar{y}, z, \bar{x}$	34	$\frac14+y, \frac14-z, \frac14+x$
11	$\bar{y}, \bar{z}, x$	35	$\frac14+y, \frac14+z, \frac14-x$
12	$y, \bar{z}, \bar{x}$	36	$\frac14-y, \frac14+z, \frac14+x$
13	$\frac14+x, \frac14-z, \frac14+y$	37	$\bar{x}, z, \bar{y}$
14	$\frac14+x, \frac14+z, \frac14-y$	38	$\bar{x}, \bar{z}, y$
15	$\frac14-x, \frac14-z, \frac14-y$	39	x, z, y
16	$\frac14-x, \frac14+z, \frac14+y$	40	$x, \bar{z}, \bar{y}$
17	$\frac14+z, \frac14+y, \frac14-x$	41	$\bar{z}, \bar{y}, x$
18	$\frac14-z, \frac14+y, \frac14+x$	42	$z, \bar{y}, \bar{x}$
19	$\frac14-z, \frac14-y, \frac14-x$	43	z, y, x
20	$\frac14+z, \frac14-y, \frac14+x$	44	$\bar{z}, y, \bar{x}$
21	$\frac14-y, \frac14+x, \frac14+z$	45	$y, \bar{x}, \bar{z}$
22	$\frac14+y, \frac14-x, \frac14+z$	46	$\bar{y}, x, \bar{z}$
23	$\frac14-y, \frac14-x, \frac14-z$	47	y, x, z
24	$\frac14+y, \frac14+x, \frac14-z$	48	$\bar{y}, \bar{x}, z$

$+ (0,\frac12,\frac12), (\frac12,0,\frac12), (\frac12,\frac12,0)$

Позиции Уайкоффа

Positions

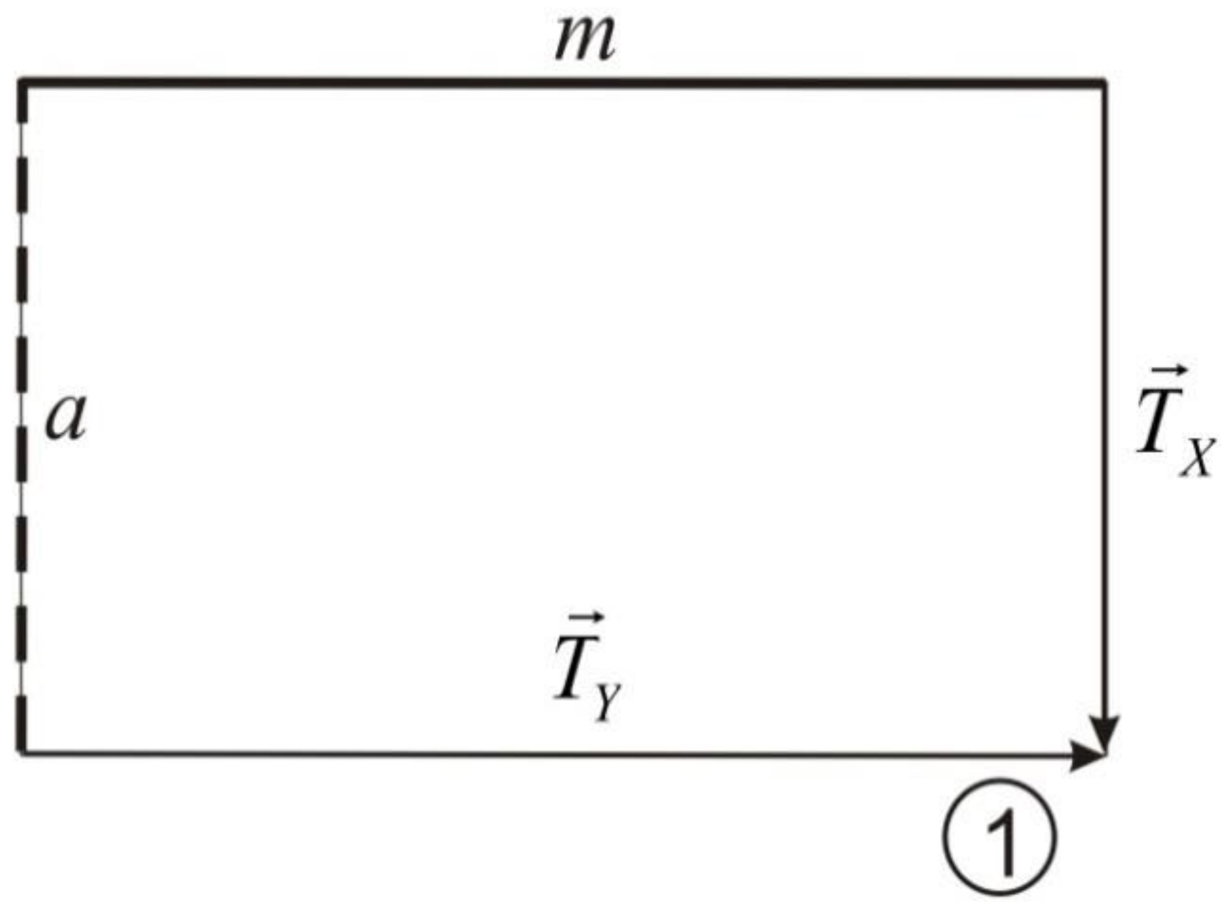
Multiplicity, Wyckoff letter. Sire symmetry			Coordinates			
4	*d*	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},\bar{y},z$	(3) $x+½,\ \bar{y},z$	(4) $\bar{x}+½,y,z$
2	*c*	*m* . .	$¼,y,z$	$½,\bar{y},z$		
2	*b*	. . 2	$0,½,z$	$½,½,z$		
2	*a*	. . 2	$0,0,z$	$½,0,z$		



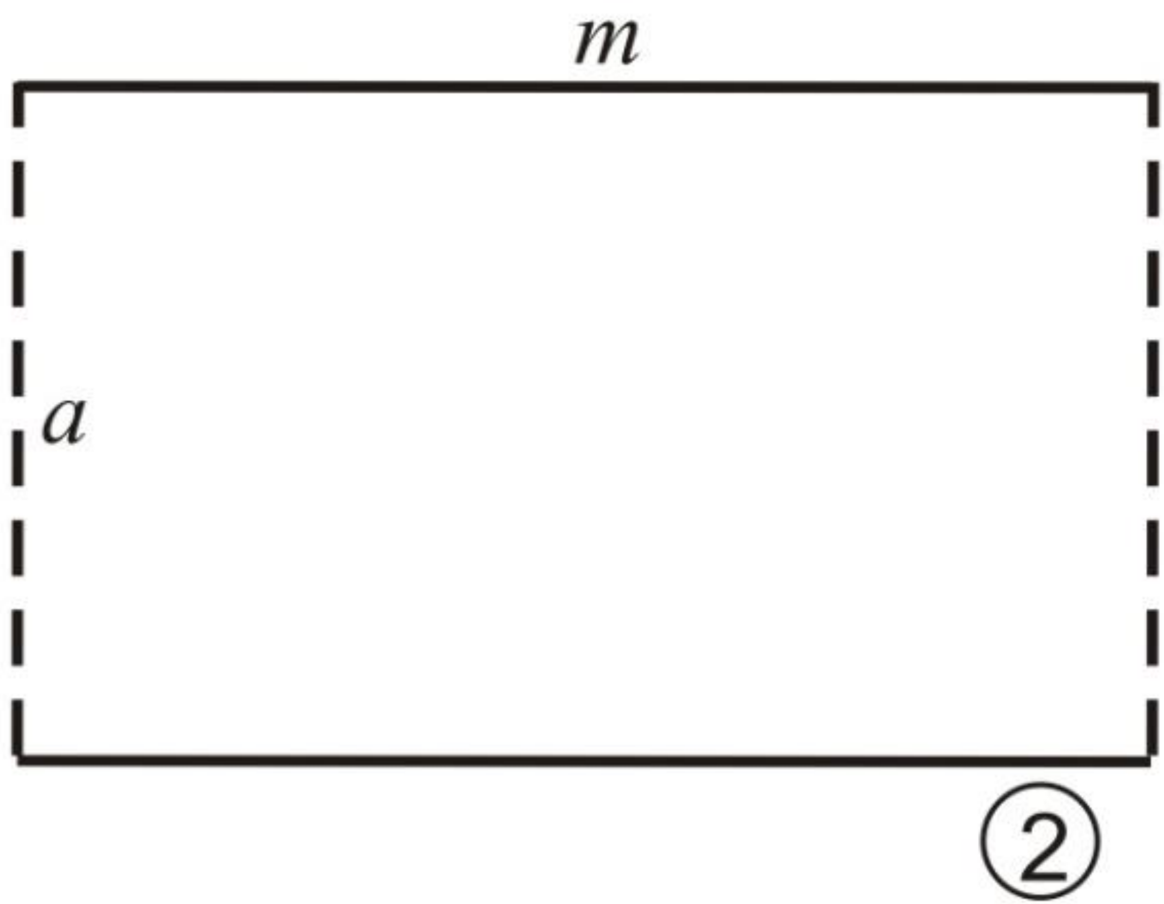
Еще одна характеристика правильной системы точек Интернациональных таблицах - *позиция Уайкоффа* (Wyckoff), обозначающаяся буквой. Самая симметричная позиция (с минимальной кратностью) обозначается буквой ***a***. Символ Уайкоффа отражает все неэквивалентные позиции (даже если они обладают одинаковыми характеристиками)

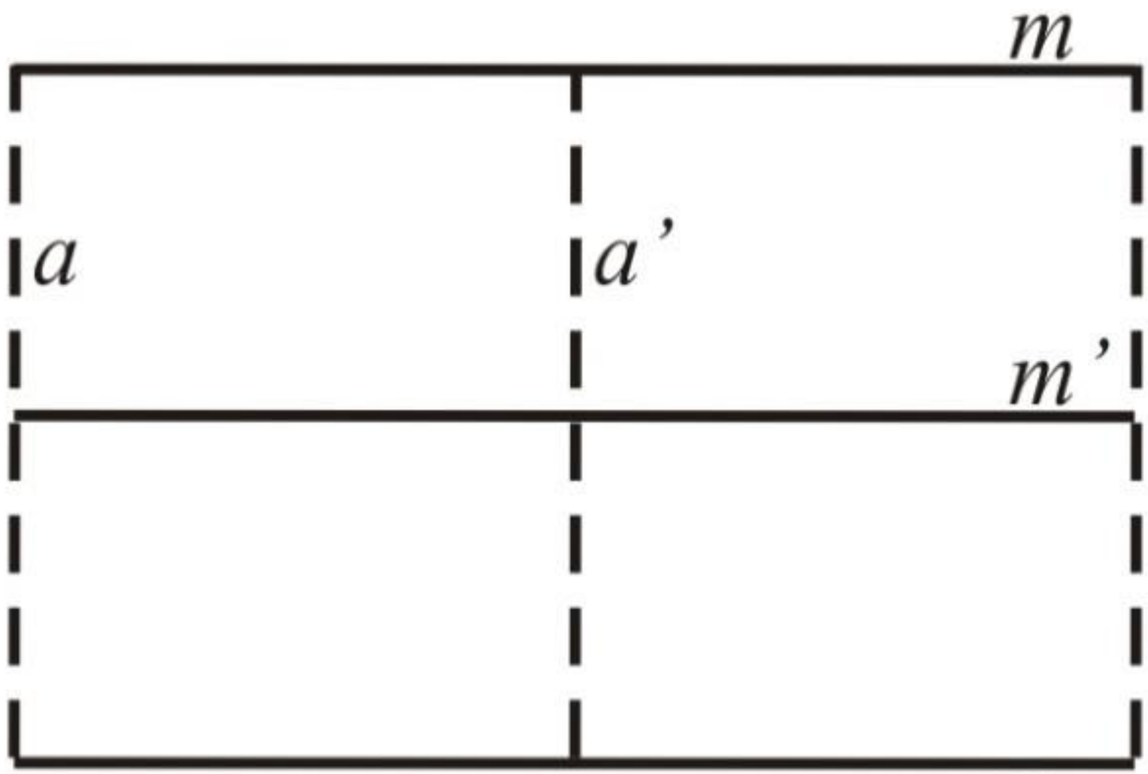
Этапы построения графика группы *Pmab*

Начнем с *Pma?*

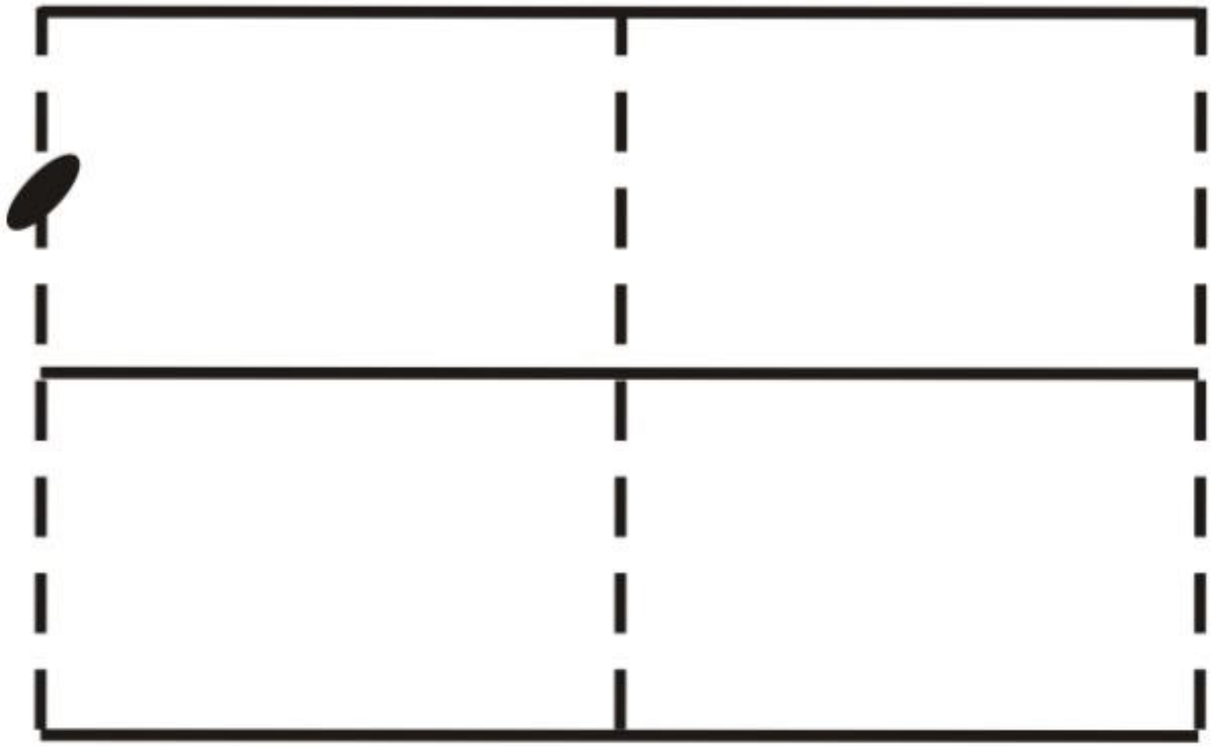


m
a
$\vec{T}_X$
$\vec{T}_Y$
1

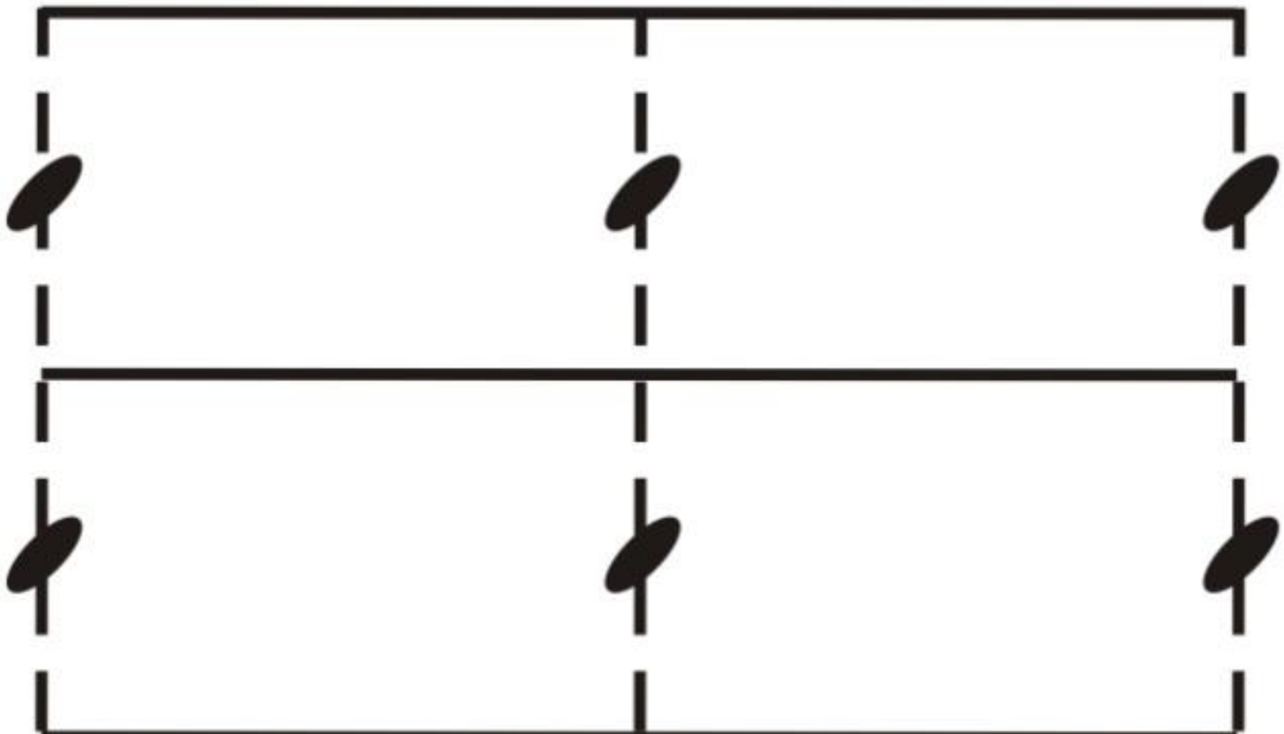

m
a
2



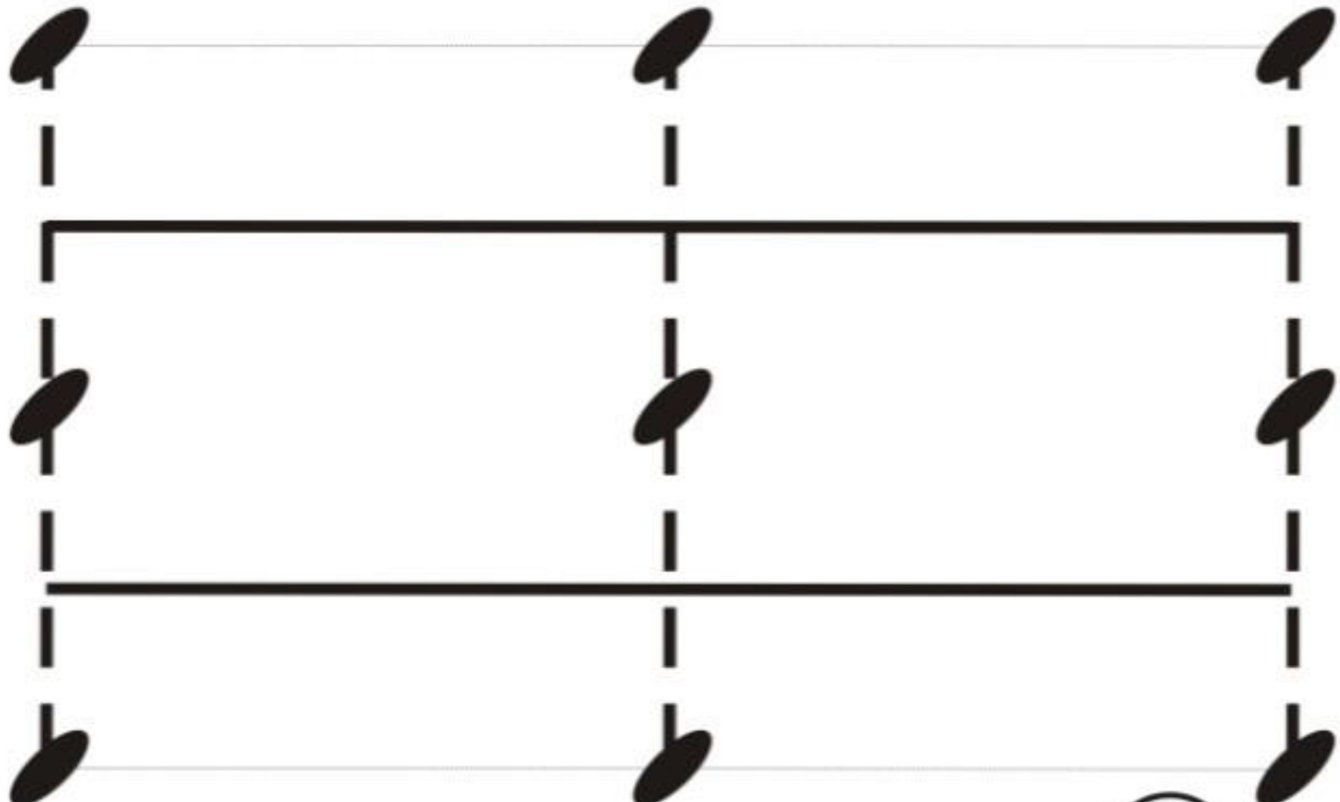
③



4

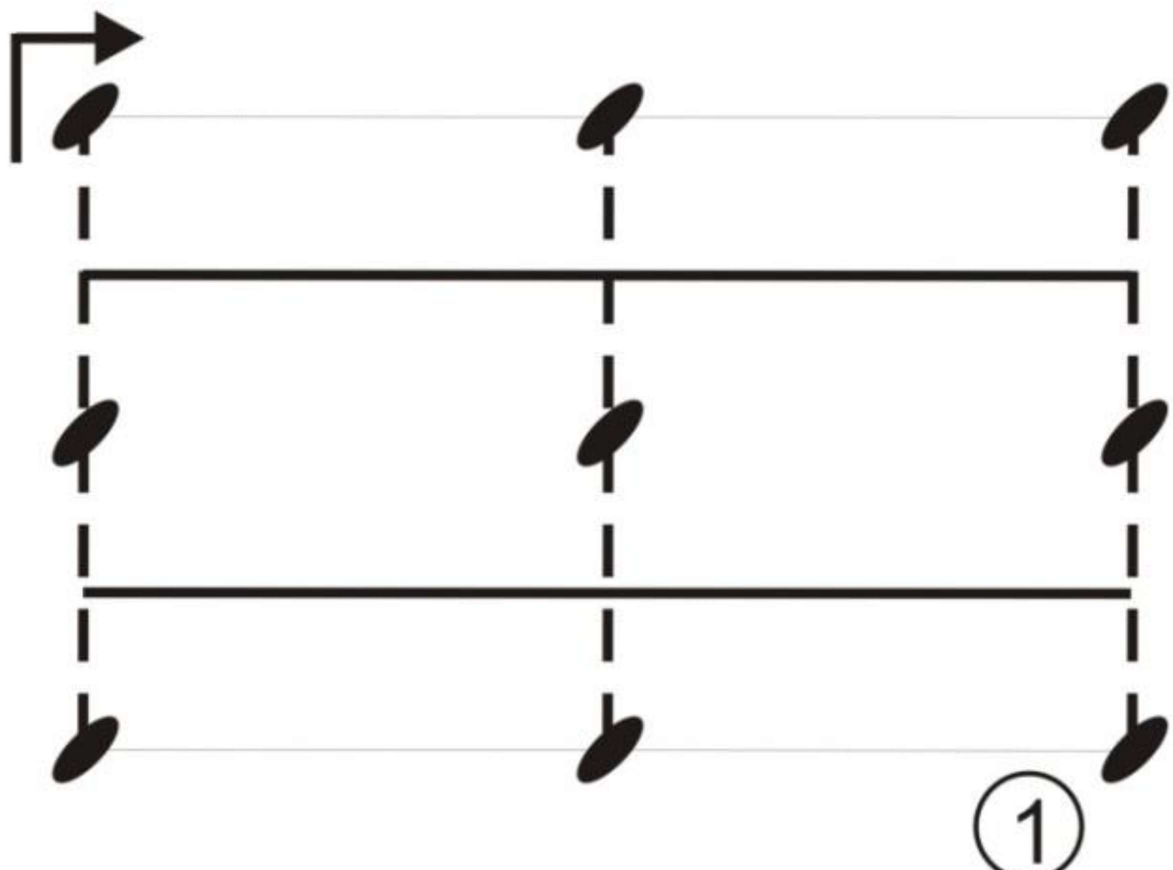


⑤

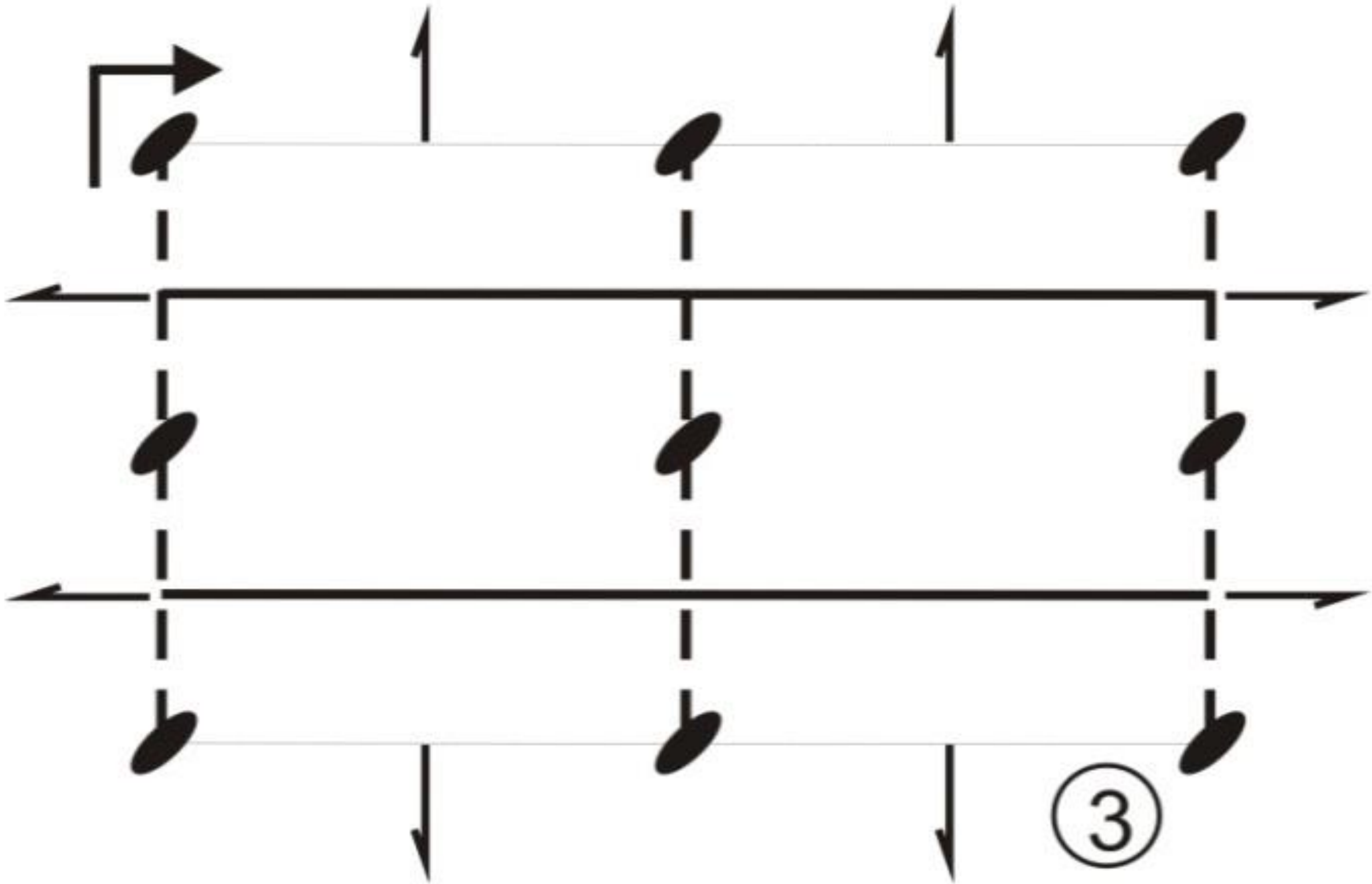


⑥

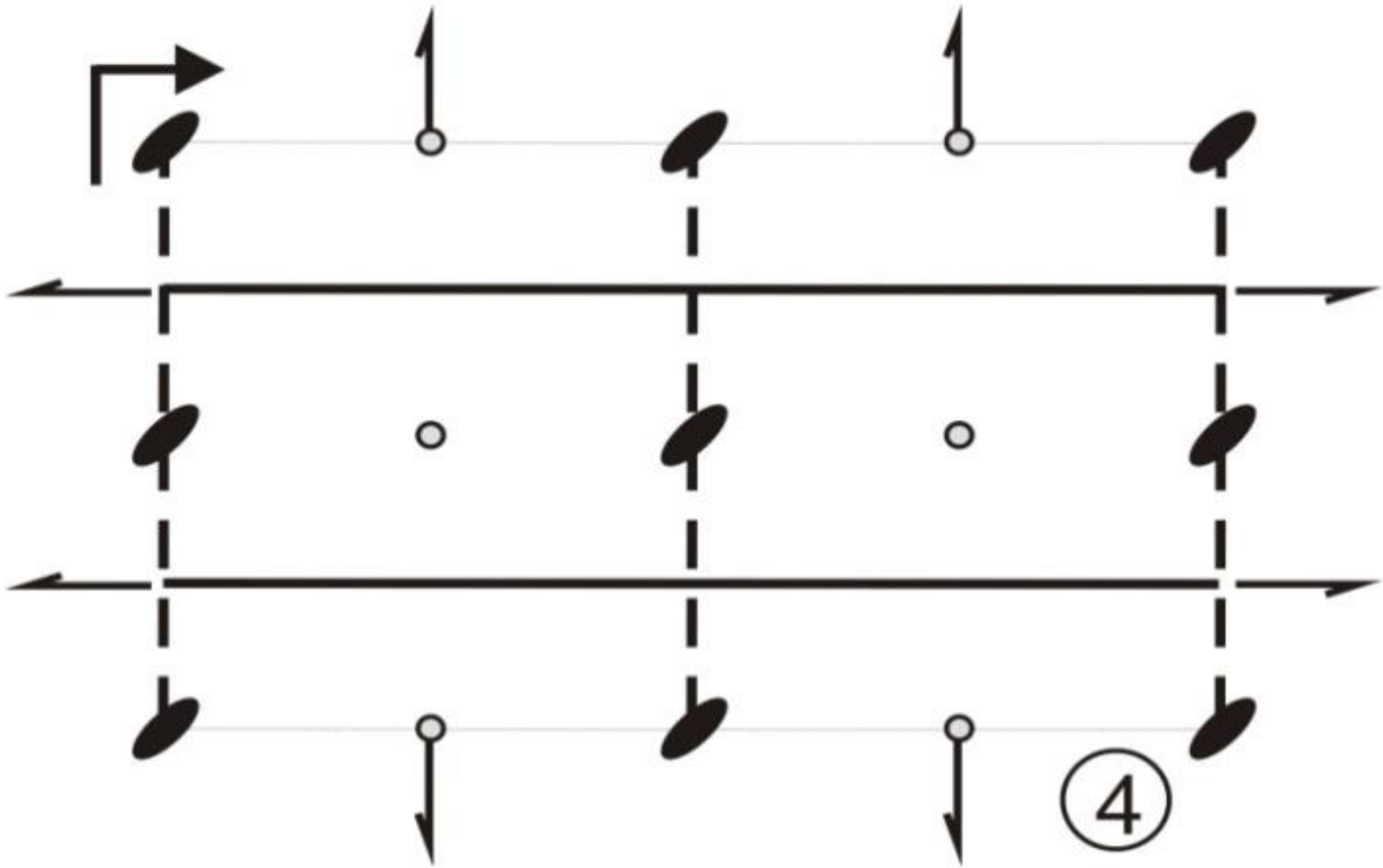
Группу *Pmab* можно получить добавлением к уже разобранной группе *Pma2* горизонтальной плоскости скользящего отражения *b*



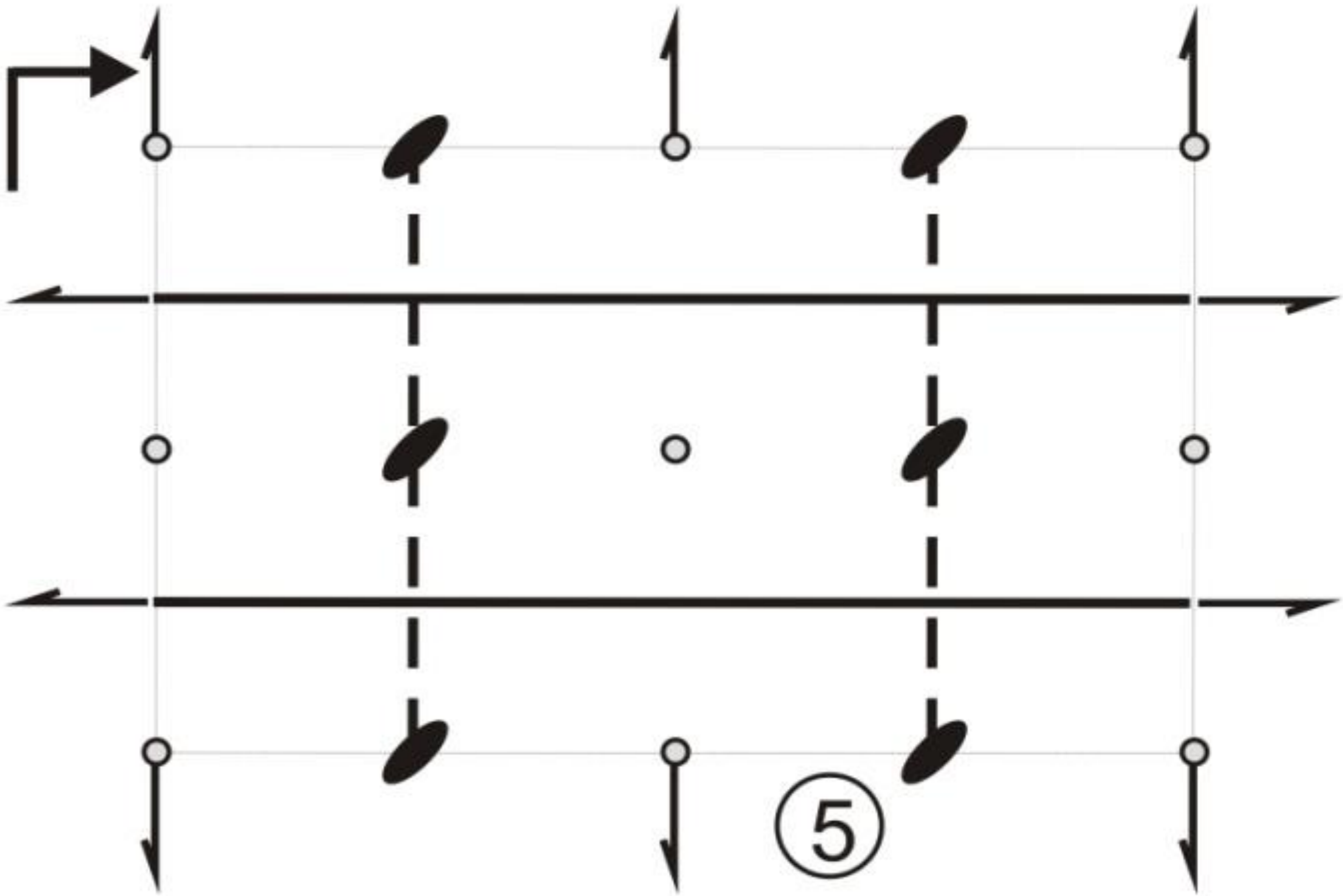
2



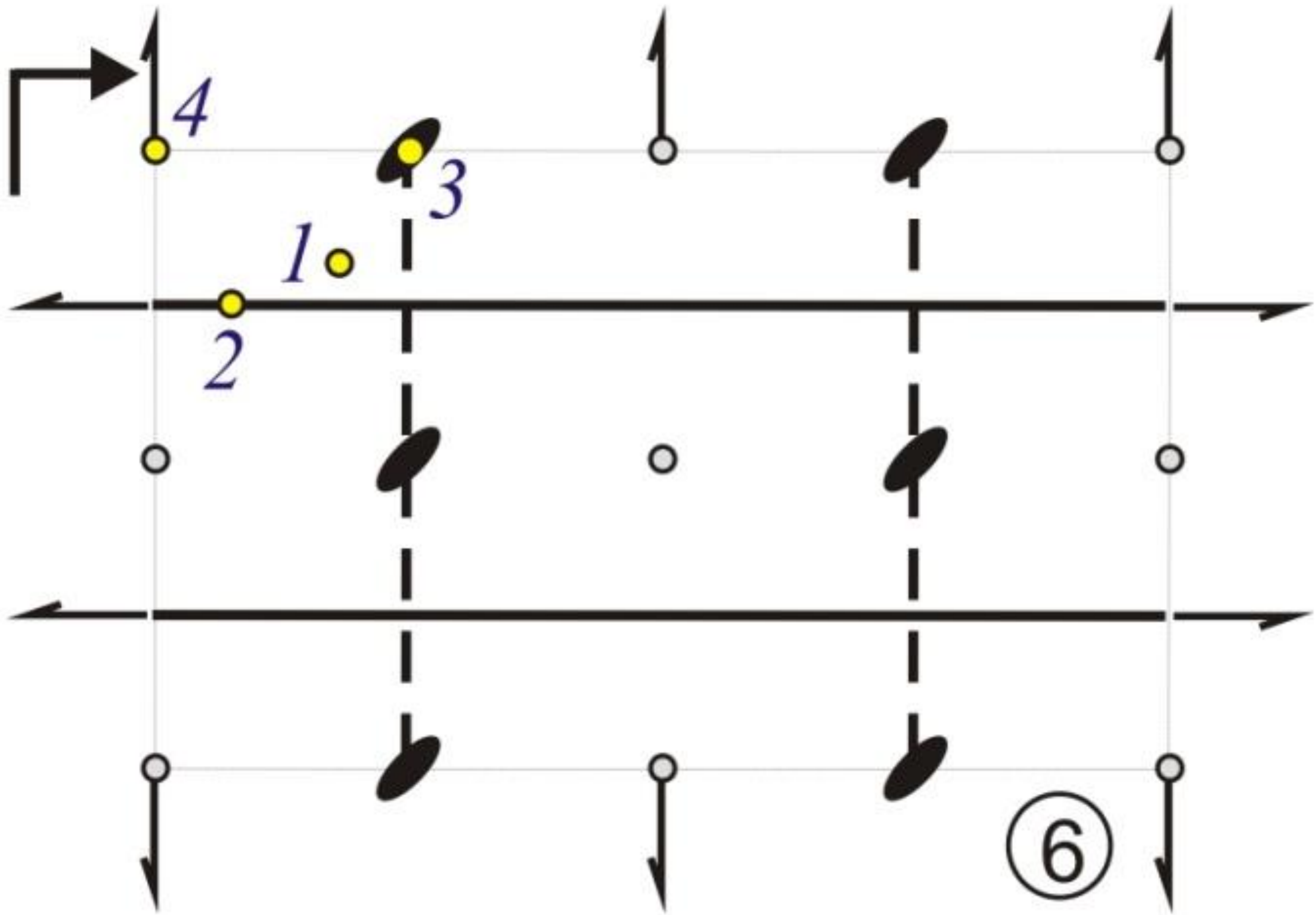
③

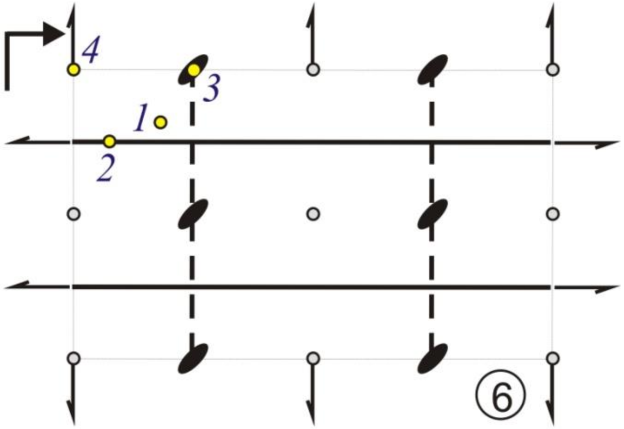


Следующим шагом является нахождение центра инверсии, который в этом классе должен неизбежно появиться три раза как результат взаимодействия $m_x \times 2_{1x}$, $b_z \times 2_z$ и $a_y \times 2_{1y}$. Для фиксации центра достаточно взять любую пару. Например, $b_z \times 2_z$



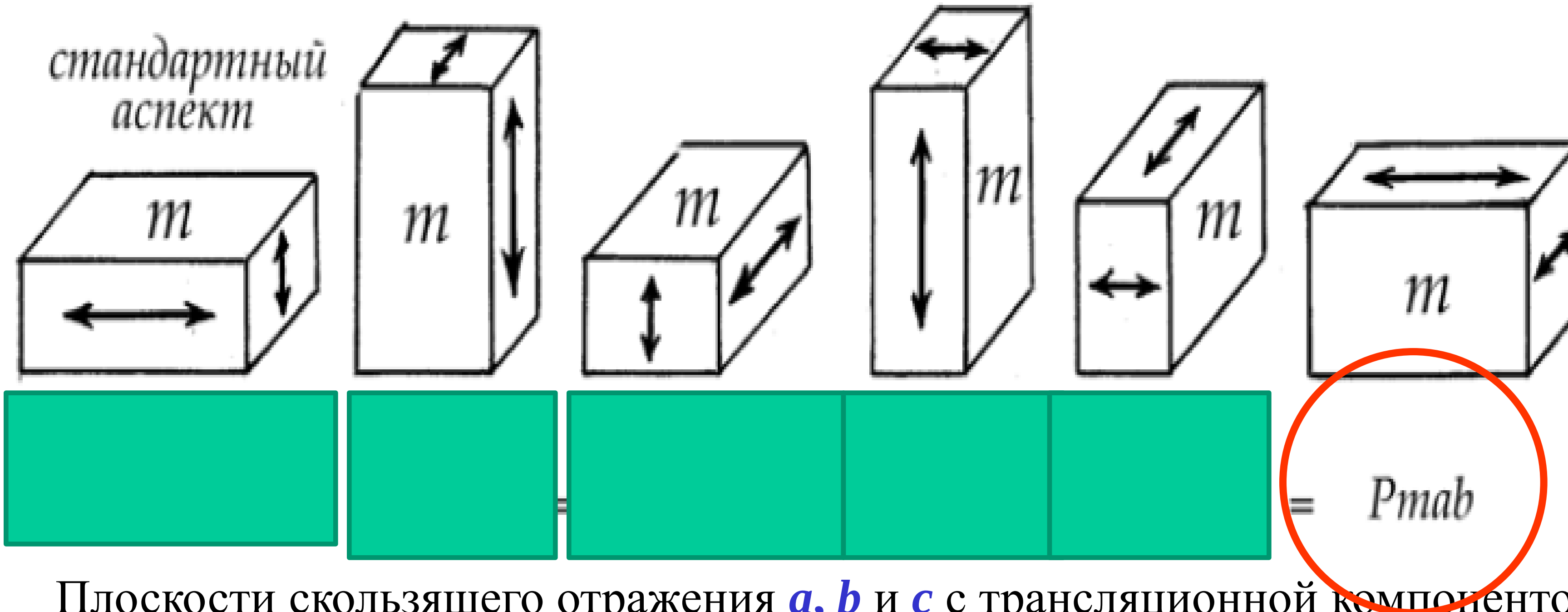
⑤


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	
2	*m*	2	2(yz)	8/2 = 4	
3	2	2	1(z)	8/2 = 4	
4	$\bar{1}$	2	0	8/2 = 4	

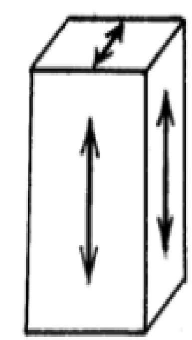
А если повернуть набок? *Pmab* – 6 клонов!



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 $P\ 2/b\ 2_1/c\ 2_1/m$