

Лекция 10.

Второе занятие по

Волшебной симметрии кристаллического микромира

(основам кристаллографической магии)



По плану основ кристалло- графической магии



Сегодня у нас:



- **Характеристики правильных систем точек**
- **Магическая книга кристаллографа**
- **Позиция Уайкоффа – что это еще такое?**
- **Как найти трижды в одном месте центр в группах *ттт*. Разбор группы *Rtab***
- **Ромбические группы, повернутые набор – дубли или клоны? Ищем **БАМ!****

Характеристики
правильных систем
точек
(кристаллографических
орбит)

Микро-аналог
простых форм кристаллов

Число степеней свободы точки

ЧСС



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

Аналізу подвергаються тільки магловські позиції!!
Волшебные элементы симметрии не оставляют точку на месте!!

Центр комплекс $3/m$ и т. д.	– 0 степеней свободы
Ось 2, 3, 4, 6	– 1 степень свободы
Плоскость m	– 2 степени свободы
Точка без элементов симметрии (1)	– 3 степени свободы

Характеристики правильных систем точек

Симметрия позиции - комплекс макроэлементов 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 (ВСП) - число точек, на которые разделится одна точка, выведенная из данной частной позиции в общую с симметрией 1.

Кратность - число точек, приходящихся на одну элементарную ячейку.

Важная формула 1

$$\text{ВСГ/ВСП} = \text{кратность}$$

Важная формула 2: ВСГ =

Число граней общей простой формы макроаналога

×

Размножающую способность решетки Браве (1,2,3,4)

Потренируемся

$I\bar{4}2d$

$$\text{ВСТ} = 2 * 8 = 16$$

$R\bar{3}c$

$$\text{ВСТ} = 3 * 12 = 36$$

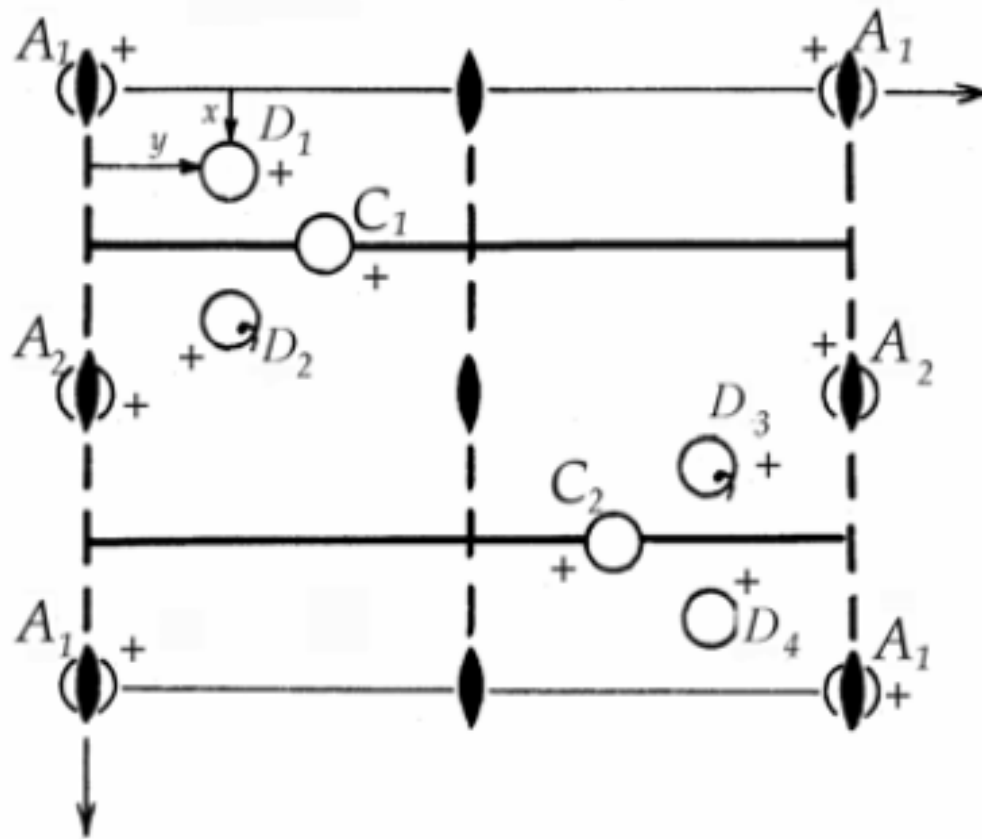
$Fd\bar{3}m$

$$\text{ВСТ} = 4 * 48 = 192 \text{ Ой!}$$

$Fddd$

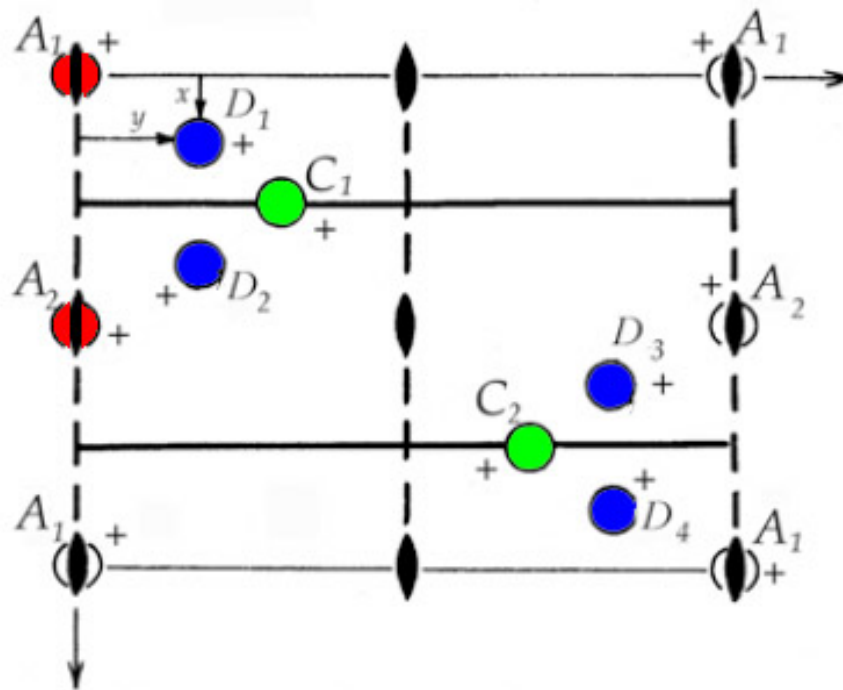
$$\text{ВСТ} = 4 * 8 = 32$$

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

Рма2
 $BC\Gamma = 1 * 4 = 4$



Законы,
работающие
при любом
x y z!

Позиция	Симметрия позиции	Величина симметрии	Число степеней свободы	Кратность $BC\Gamma = 1 * 4 = 4$	Координаты
D 	<i>l</i>	1	$3_{(x,y,z)}$	$4 : 1 = 4$	 , 
A 	<i>2</i>	2	$1_{(z)}$	$4 : 2 = 2$	$00z,$ 
C 	<i>m</i>	2	$2_{(y,z)}$	$4 : 2 = 2$	 

Законы, работающие при любом x y z !

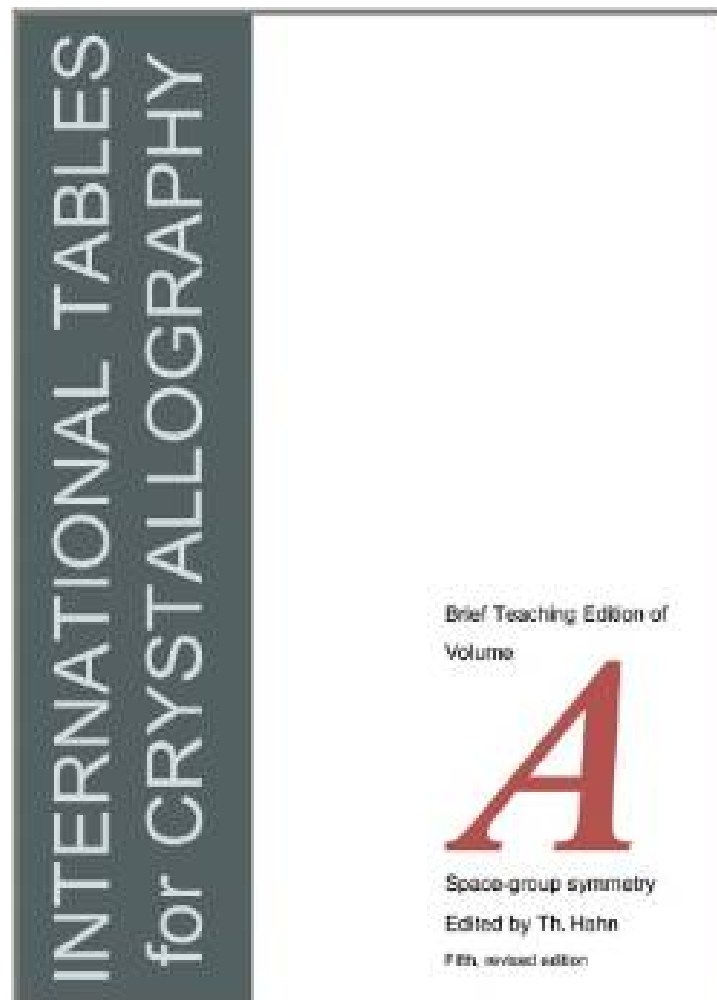
Что такое $-x$?

Допустим, $x=0,1$

Тогда $-x = -0,1$ но мы живем от $[0$ до $1[$,

Для попадания в этот интервал
прибавляем 1 , следовательно $-x = 0,9!!!$

Магическая книга кристаллографа - International Tables for X-Ray Crystallography *Volume A, Space-group Symmetry*



International Tables for X-Ray Crystallography

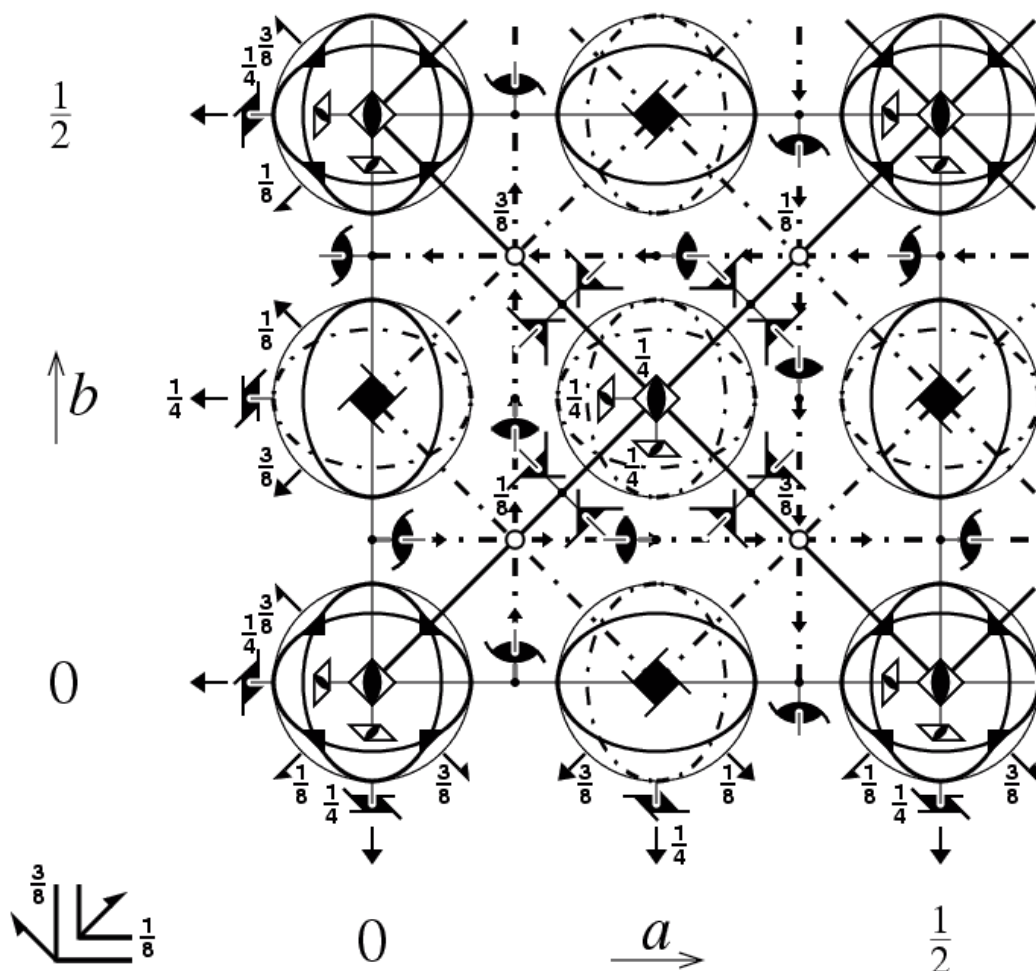
Volume A, Space-group Symmetry

$Fd\bar{3}m$

$F 4_1/d \bar{3} 2/m$

$m\bar{3}m$

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 |



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





Атлас пространственных групп кубической системы/ [Н. В. Белов [и др.]]: [отв. ред. М. А. Симонов]; АН СССР; Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова М.: Наука, 1980 66, [2] с.: ил. Авт. и отв. ред. указаны на обороте тит. л.

В атласе приводятся полные и наглядные диаграммы всех пространственных групп кубической системы, которые находят широкое применение в практике структурного анализа кристаллов и в других разделах кристаллографии, кристаллофизики и кристаллохимии. Вводная часть атласа знакомит со схемой вывода кубических пространственных групп и приемами построения их диаграмм, что позволяет использовать атлас не только как справочник, но и как оригинальное учебное пособие. Для специалистов в области химии и физики твердого тела.

кристаллы , 548(084.4); 3 , 548.713.021(084.4); 3
Белов Н. В./ 1891-1982: Николай Васильевич
Загальская Ю. Г.: Юдифь Герцевна
Литвинская Г. П.: Галина Петровна
Егоров-Тисменко Ю. К.: Юрий Клавдиевич



В атласе приводятся полные и наглядные диаграммы всех пространственных групп кубической системы, которые находят широкое применение в практике структурного анализа кристаллов и в других разделах кристаллографии, кристаллофизики и кристаллохимии. Вводная часть атласа знакомит со схемой вывода кубических пространственных групп и приемами построения их диаграмм, что позволяет использовать атлас не только как справочник, но и как оригинальное учебное пособие. Для специалистов в области химии и физики твердого тела.

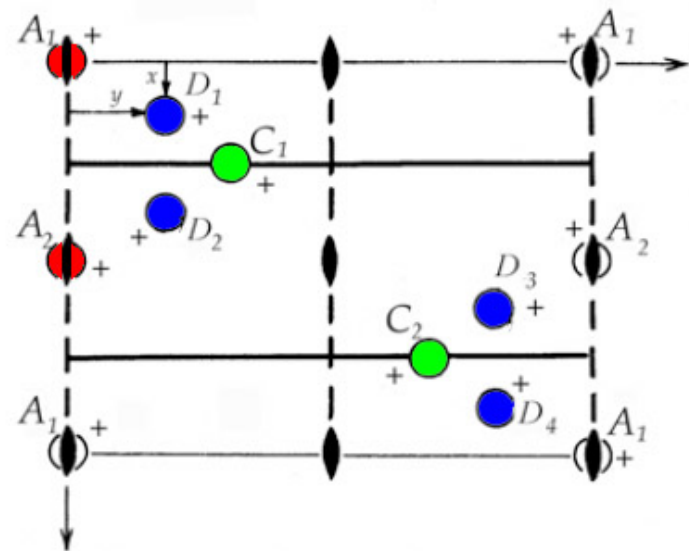
Позиции Уайкоффа

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

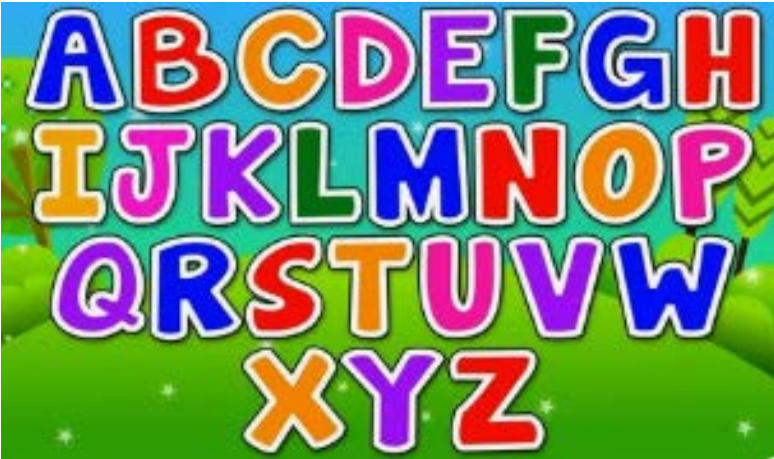
4	<i>d</i>	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) $x + \frac{1}{2}, \bar{y}, z$	(4) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y, z$
2	<i>c</i>	$m \dots$	$\frac{1}{4}, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$		
2	<i>b</i>	$\dots 2$	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$		
2	<i>a</i>	$\dots 2$	$0, 0, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$		



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

А хватит ли букв?

Обычно да...



Группа для изучения всего английского алфавита и даже первой буквы греческого...

CONTINUED

No. 47

Pmm

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

General:

no conditions

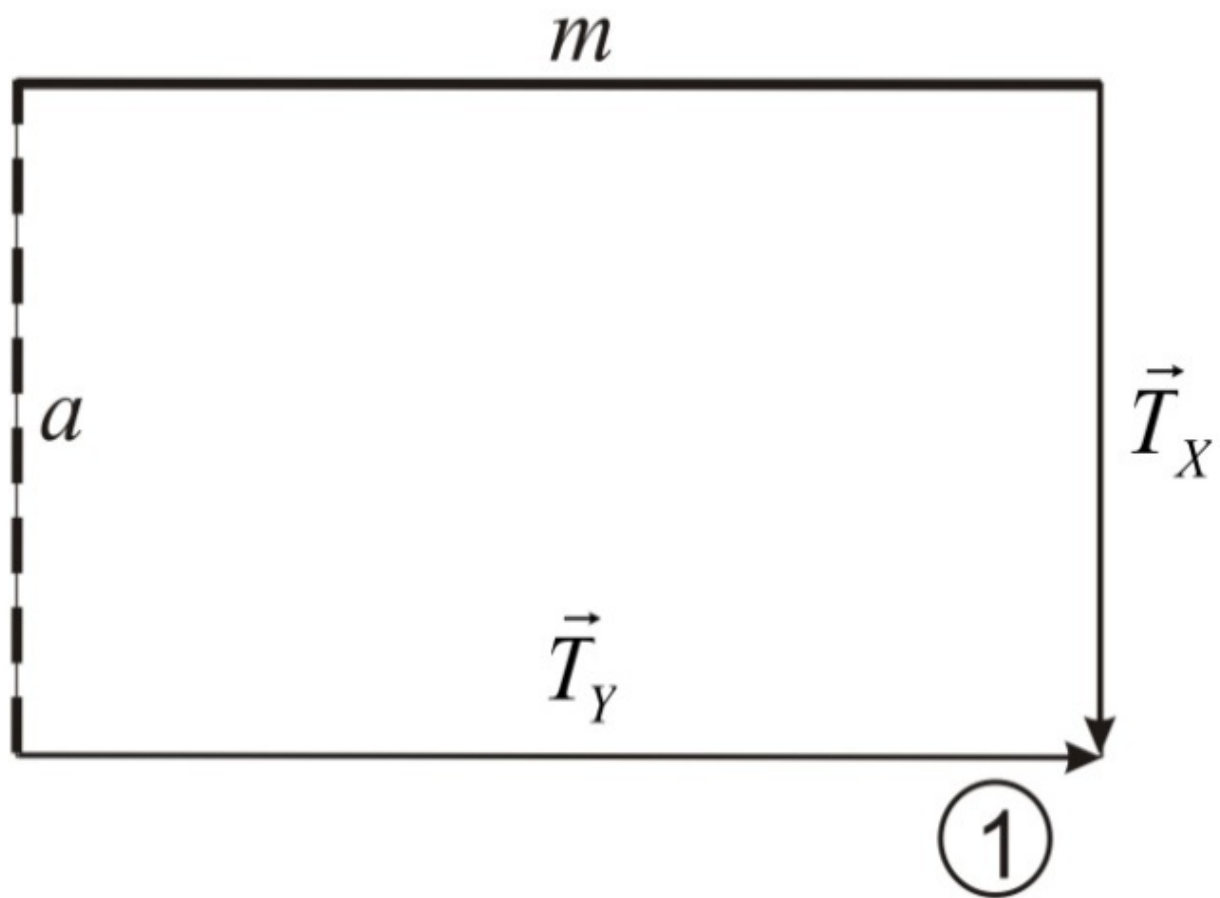
Special: no extra conditions

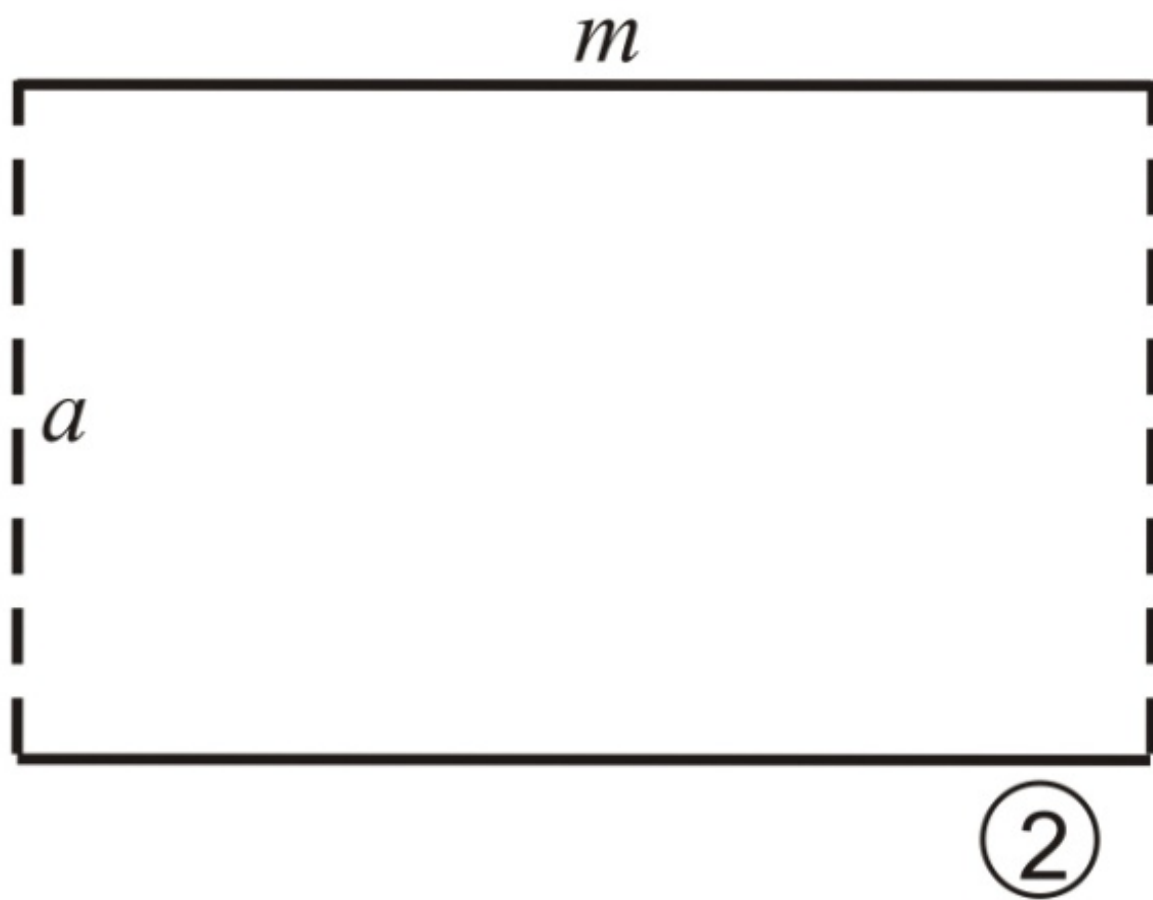
a 1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) \bar{x}, y, \bar{z}	(4) x, \bar{y}, \bar{z}
	(5) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(6) x, y, \bar{z}	(7) x, \bar{y}, z	(8) \bar{x}, y, z

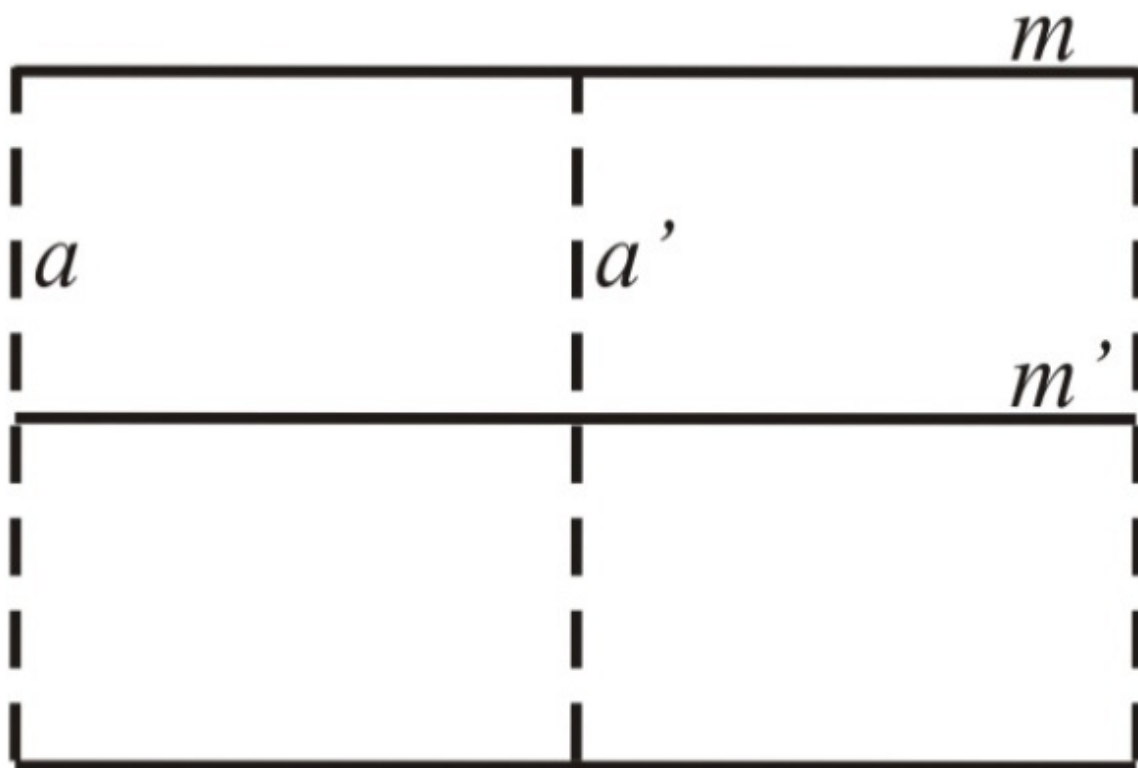
4	<i>z</i>	<i>. . m</i>	$x, y, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, y, \frac{1}{2}$	$x, \bar{y}, \frac{1}{2}$	
4	<i>y</i>	<i>. . m</i>	$x, y, 0$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$	$\bar{x}, y, 0$	$x, \bar{y}, 0$	
4	<i>x</i>	<i>. m .</i>	$x, \frac{1}{2}, z$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$x, \frac{1}{2}, \bar{z}$	
4	<i>w</i>	<i>. m .</i>	$x, 0, z$	$\bar{x}, 0, z$	$\bar{x}, 0, \bar{z}$	$x, 0, \bar{z}$	
4	<i>v</i>	<i>m . .</i>	$\frac{1}{2}, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$	$\frac{1}{2}, y, \bar{z}$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, \bar{z}$	
4	<i>u</i>	<i>m . .</i>	$0, y, z$	$0, \bar{y}, z$	$0, y, \bar{z}$	$0, \bar{y}, \bar{z}$	
2	<i>t</i>	<i>m m 2</i>	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z}$			
2	<i>s</i>	<i>m m 2</i>	$\frac{1}{2}, 0, z$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z}$			
2	<i>r</i>	<i>m m 2</i>	$0, \frac{1}{2}, z$	$0, \frac{1}{2}, \bar{z}$			
2	<i>q</i>	<i>m m 2</i>	$0, 0, z$	$0, 0, \bar{z}$			
2	<i>p</i>	<i>m 2 m</i>	$\frac{1}{2}, y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, \frac{1}{2}$			
2	<i>o</i>	<i>m 2 m</i>	$\frac{1}{2}, y, 0$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, 0$			
2	<i>n</i>	<i>m 2 m</i>	$0, y, \frac{1}{2}$	$0, \bar{y}, \frac{1}{2}$			
2	<i>m</i>	<i>m 2 m</i>	$0, y, 0$	$0, \bar{y}, 0$			
2	<i>l</i>	<i>2 m m</i>	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			
2	<i>k</i>	<i>2 m m</i>	$x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, 0$			
2	<i>j</i>	<i>2 m m</i>	$x, 0, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, 0, \frac{1}{2}$			
2	<i>i</i>	<i>2 m m</i>	$x, 0, 0$	$\bar{x}, 0, 0$			
1	<i>h</i>	<i>m m m</i>	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$				
1	<i>g</i>	<i>m m m</i>	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$				
1	<i>f</i>	<i>m m m</i>	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$				
1	<i>e</i>	<i>m m m</i>	$0, \frac{1}{2}, 0$				
1	<i>d</i>	<i>m m m</i>	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$				
1	<i>c</i>	<i>m m m</i>	$0, 0, \frac{1}{2}$				
1	<i>b</i>	<i>m m m</i>	$\frac{1}{2}, 0, 0$				
1	<i>a</i>	<i>m m m</i>	$0, 0, 0$				

Этапы построения
графика группы
Ptab

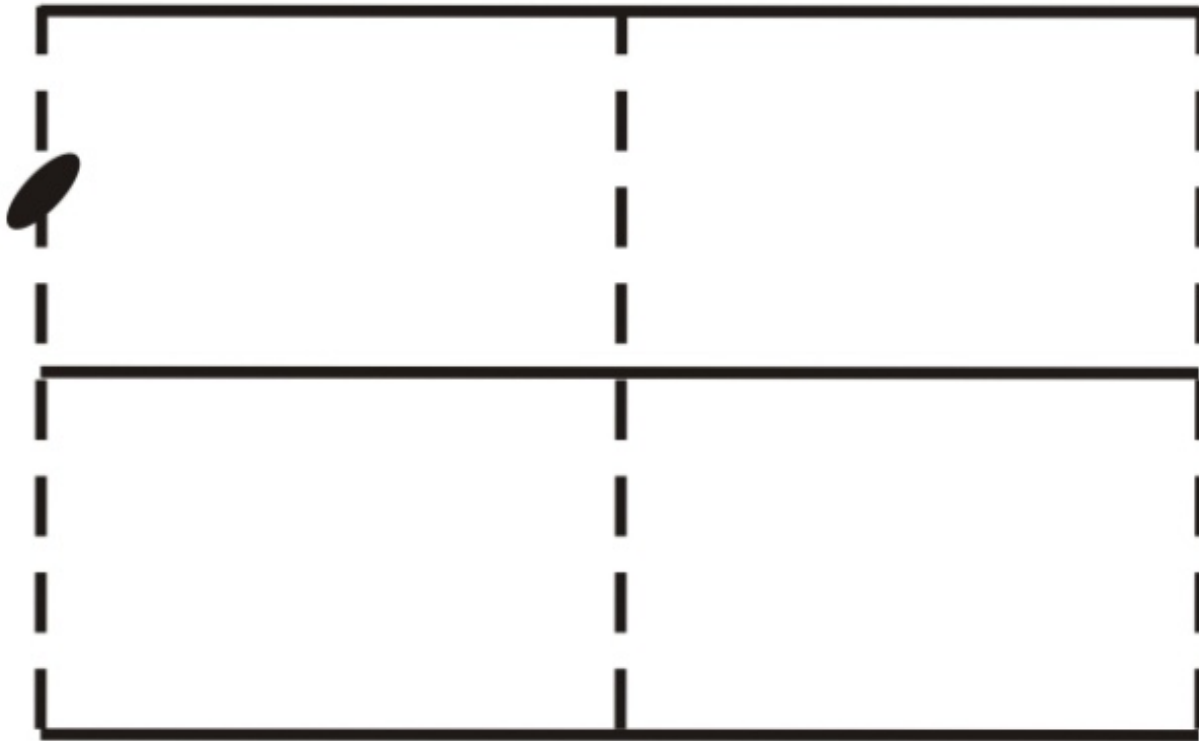
Начнем с уже
известной
Pta2



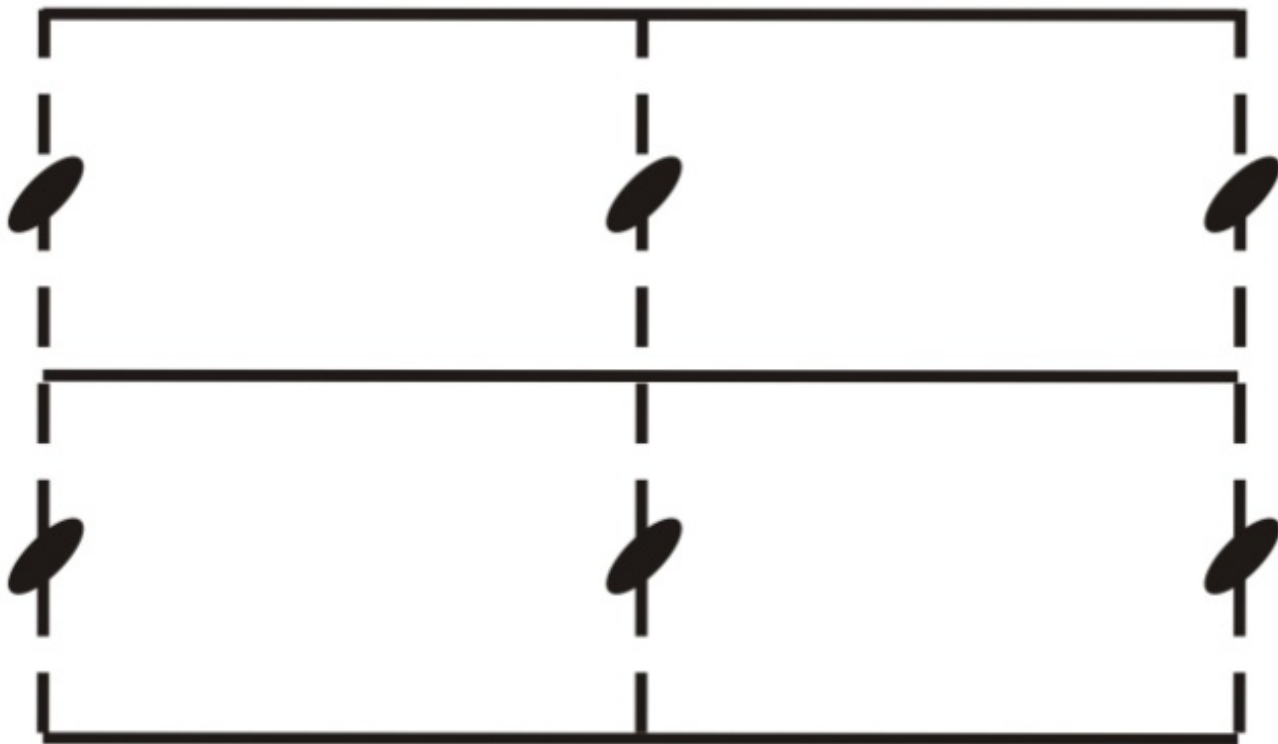




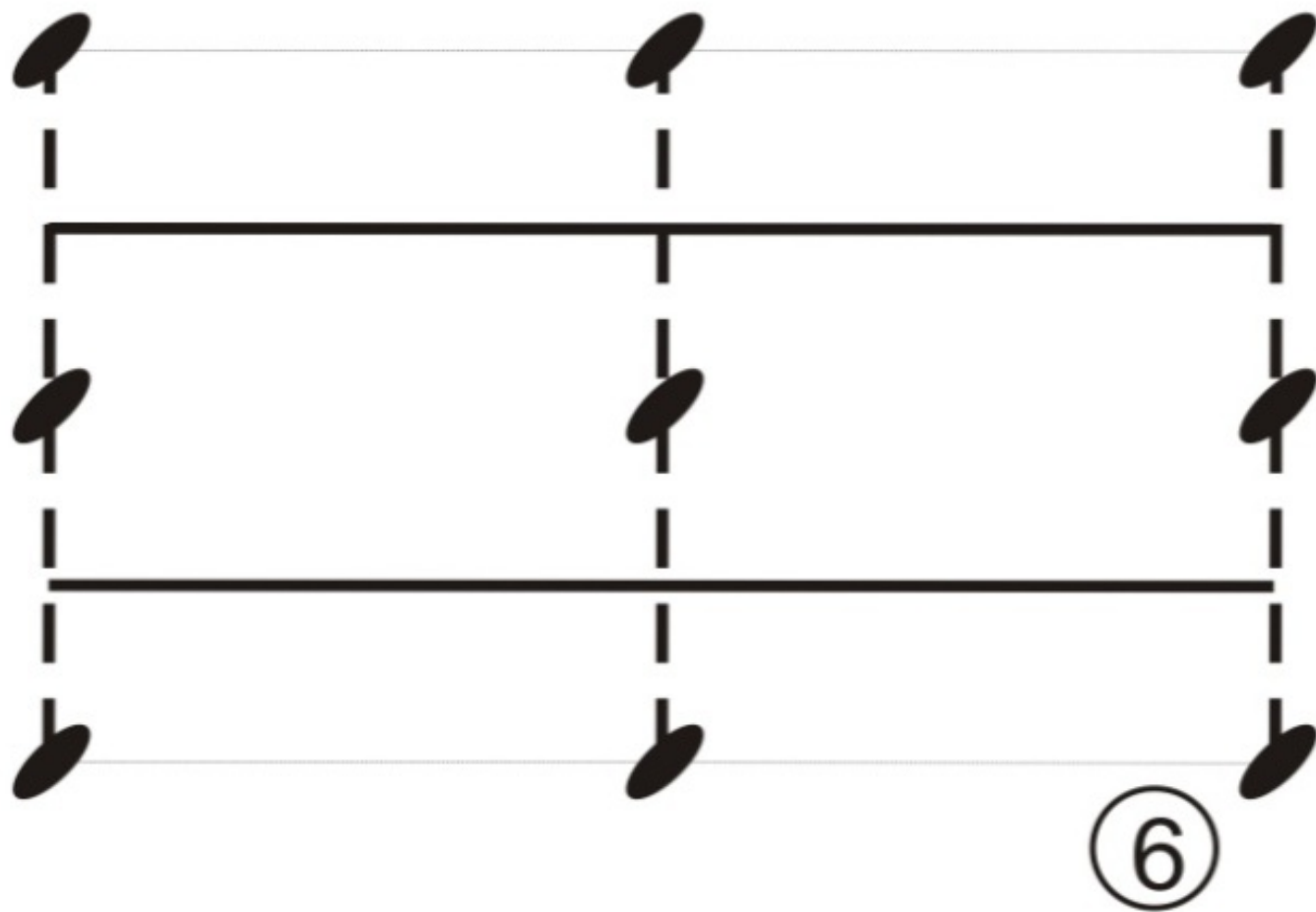
③



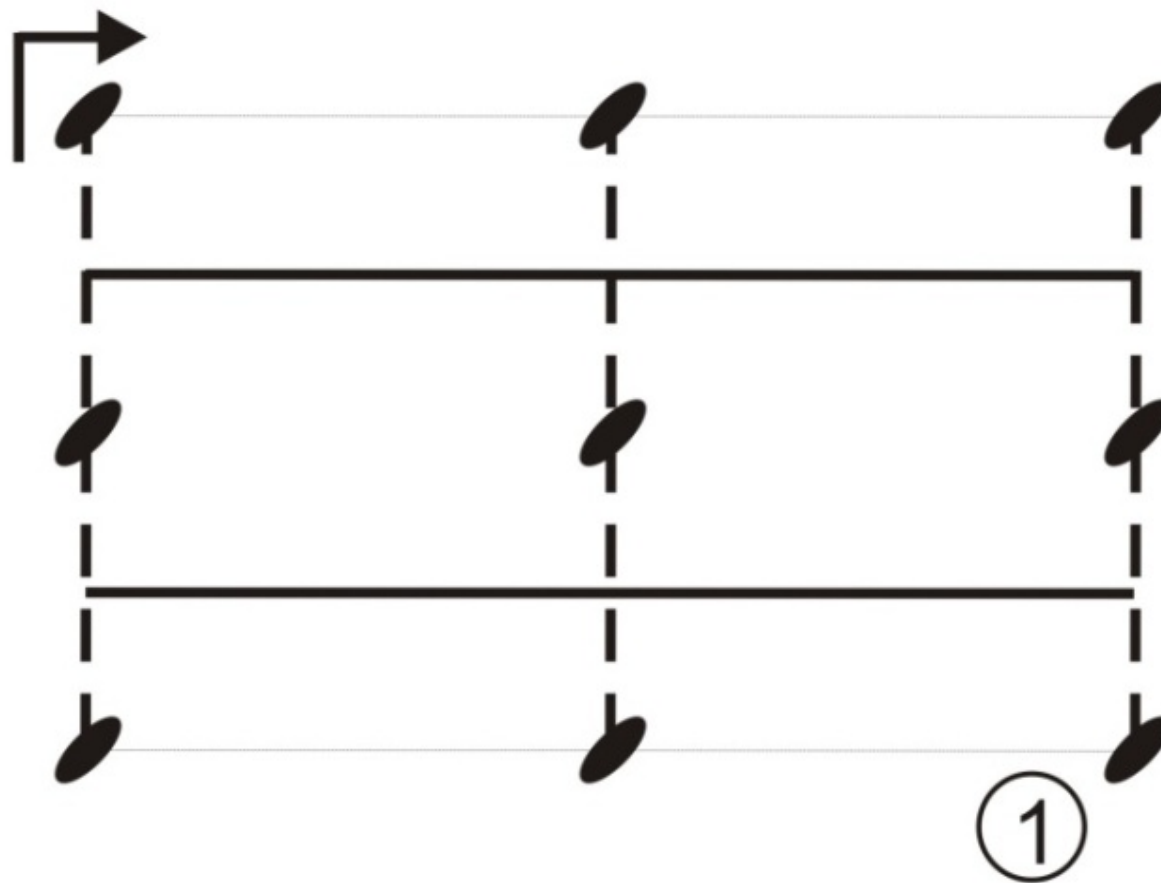
④

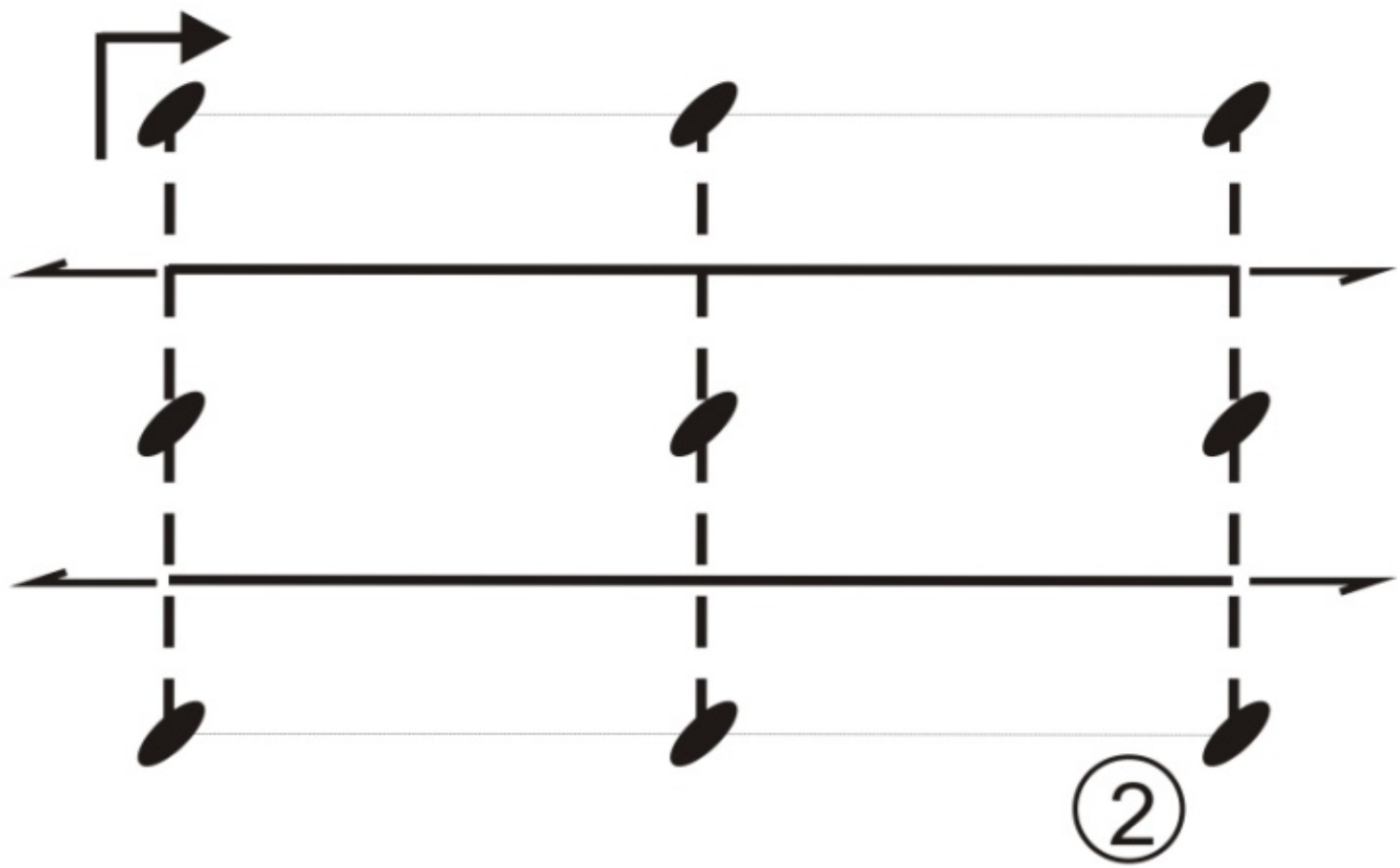


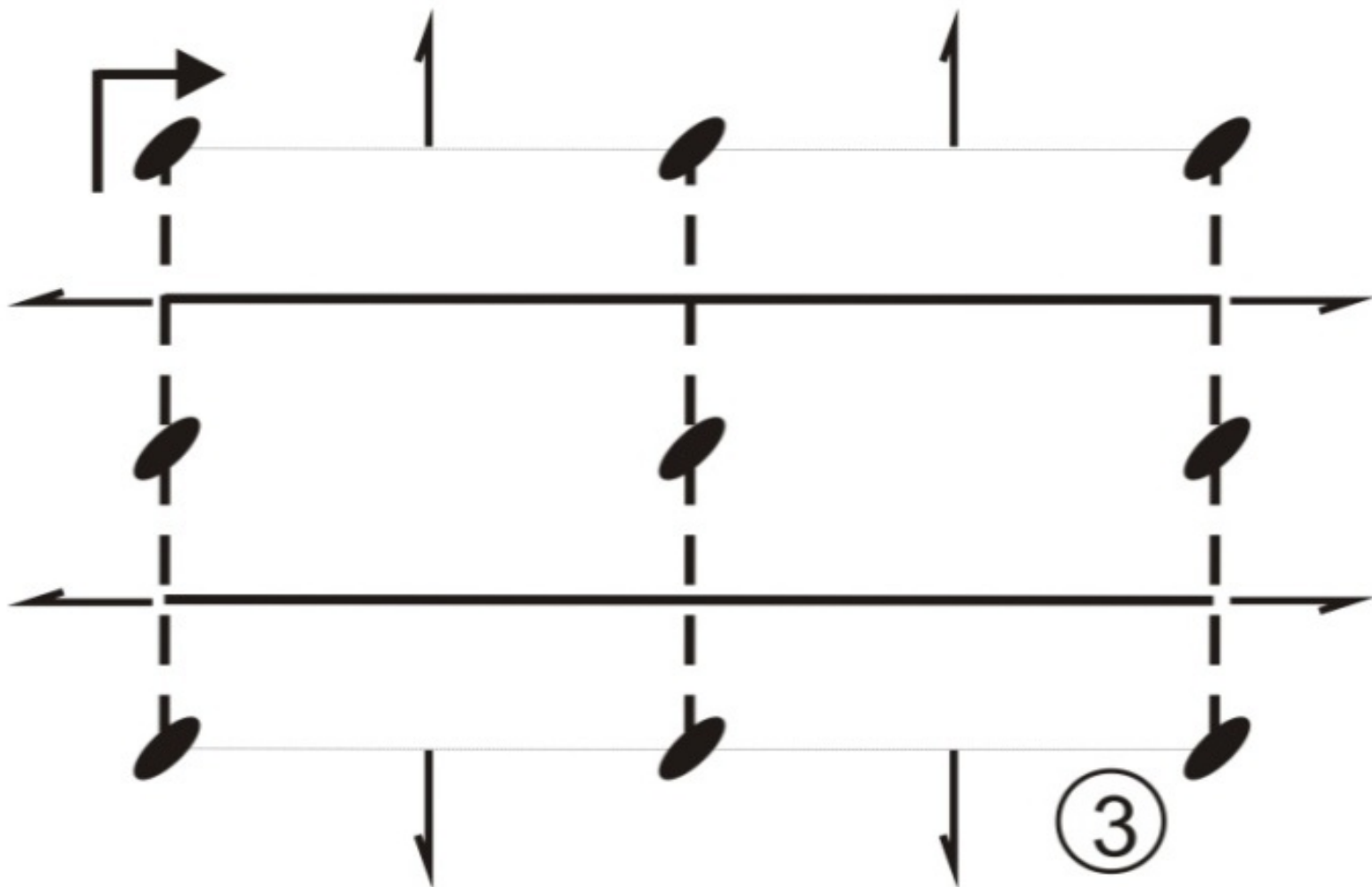
⑤

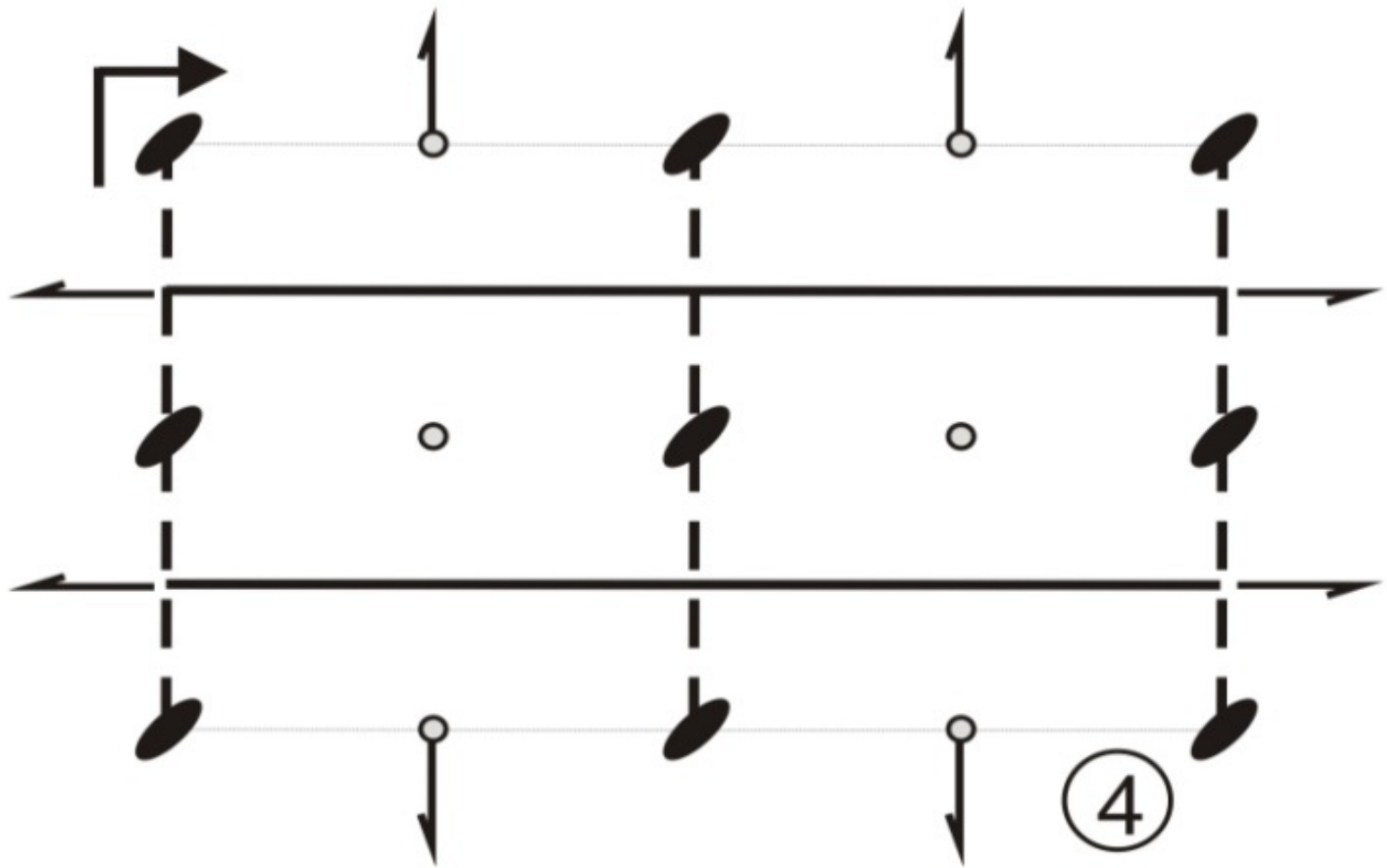


Группу P_{tab} можно получить добавлением к уже разобранный группе P_{ta2} **горизонтальной** плоскости скользящего отражения b

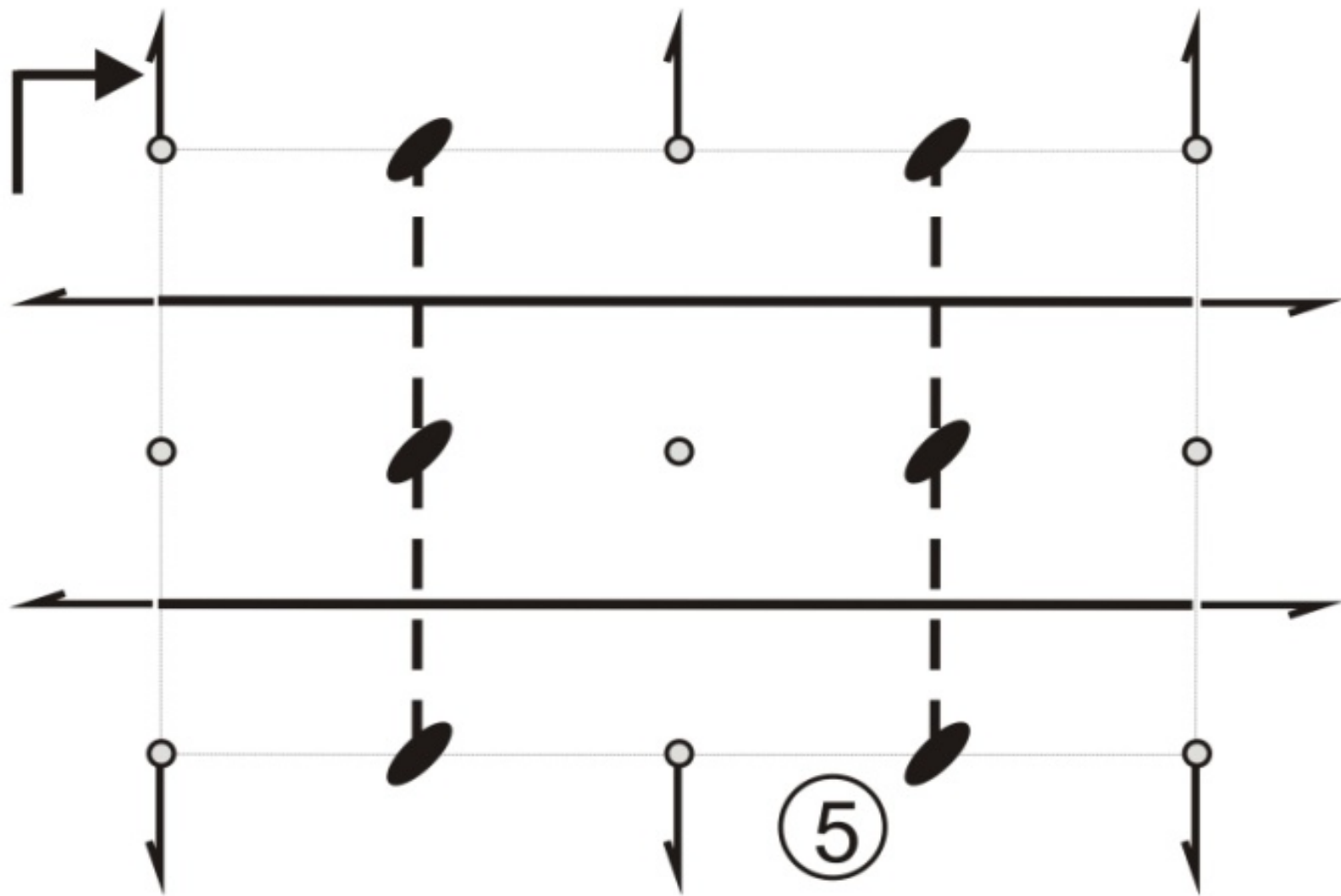


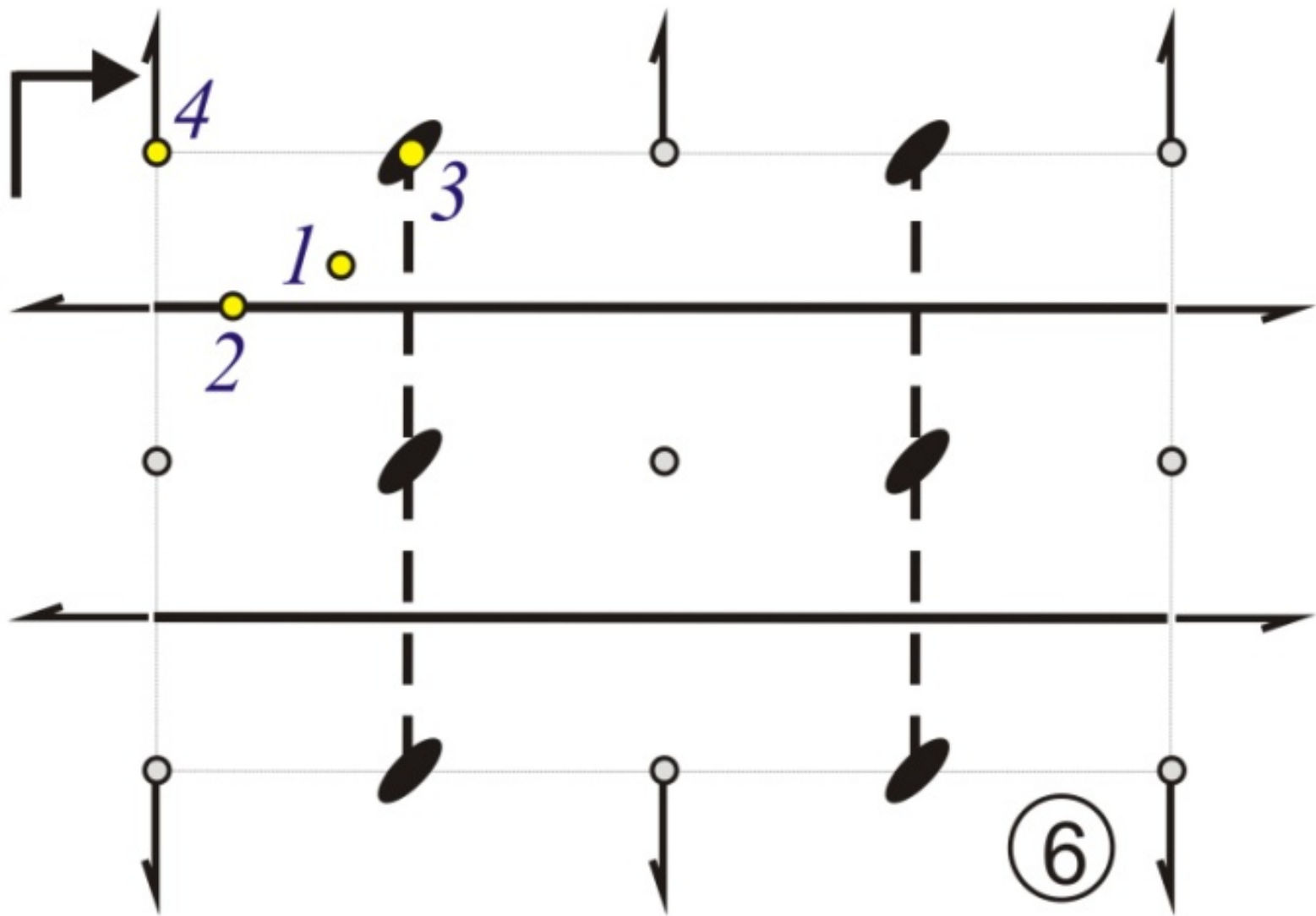


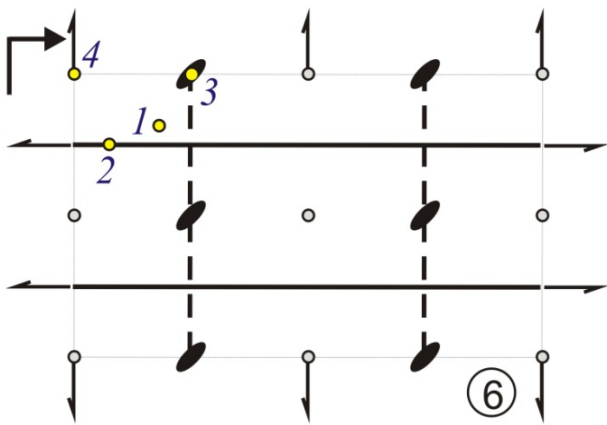




Следующим шагом является нахождение центра инверсии, который в этом классе должен неизбежно появиться три раза как результат взаимодействия $m_x \times 2_{1x}$, $b_z \times 2_z$ и $a_y \times 2_{1y}$. Для фиксации центра достаточно взять любую пару. Например, $b_z \times 2_z$







№ позиции	Собственная симметрия позиции (ССП)	Величина симметрии позиции (ВСП)	Число степеней свободы (ЧСС)	Кратность (Порядок группы / ВСП)	Координаты
1	1	1	3 (<u>xyz</u>)	8/1 = 8	
2	m	2	2(<u>yz</u>)	8/2 = 4	
3	2	2	1(z)	8/2 = 4	
4	$\bar{1}$	2	0	8/2 = 4	

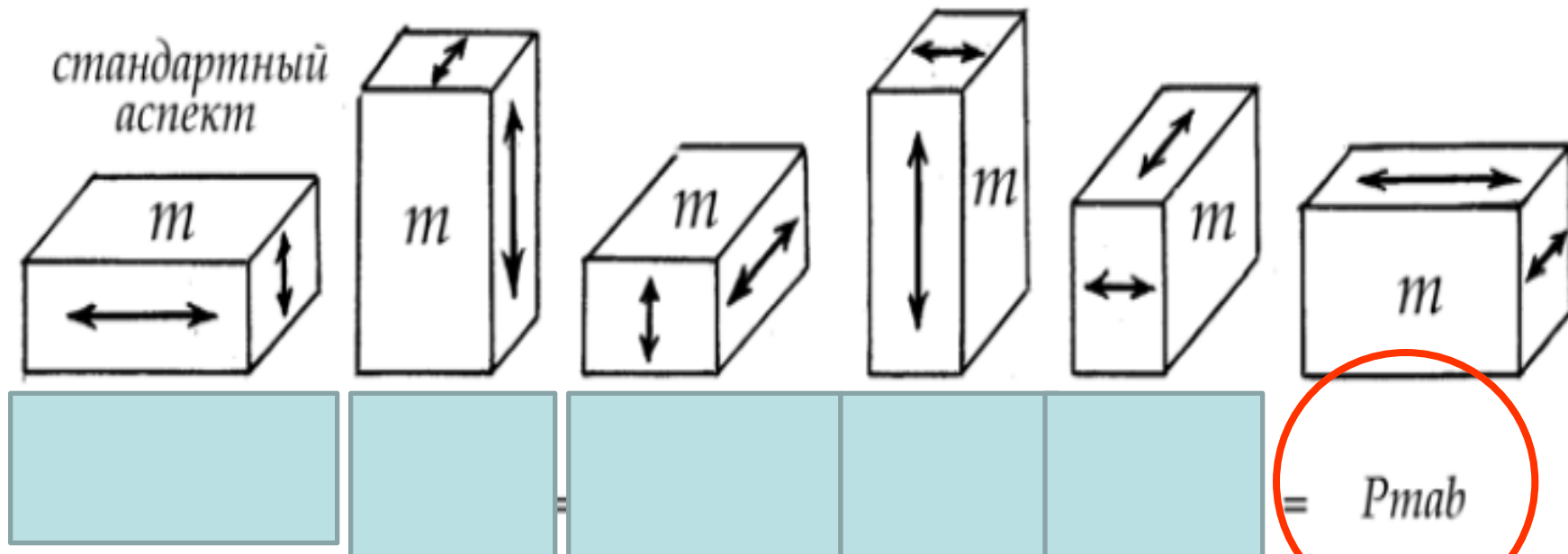
А если повернуть набор? *Ртаб* – 6 клонов!

таб

**Не спрятался ли тут
БАМ?**



А если повернуть набор? P_{tab} – 6 клонов!

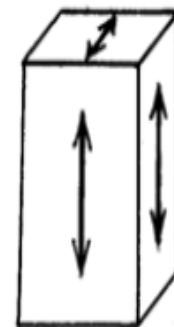


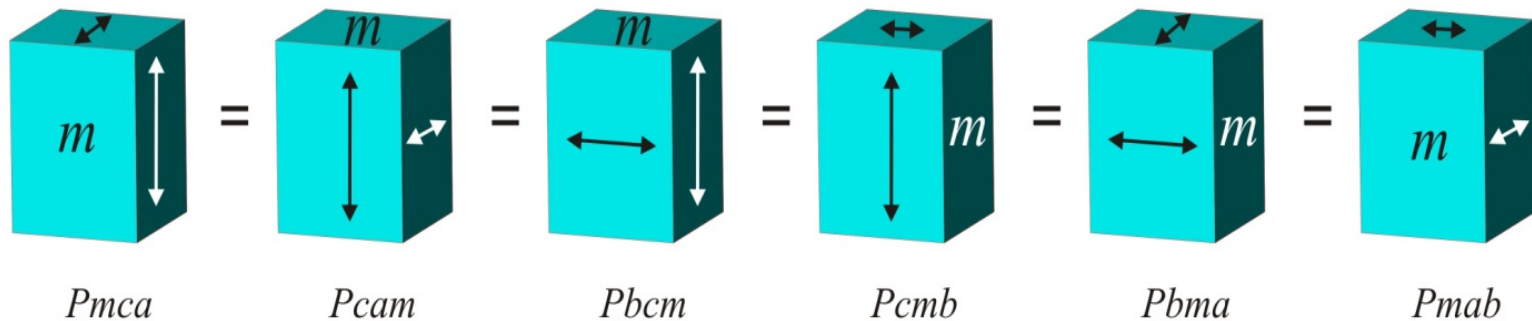
Плоскости скользящего отражения a , b и c с трансляционной компонентой, ориентированной вдоль одной из координатных осей, изменяют свои наименования в зависимости от той или иной ориентации их компонент.

Обозначения же плоскостей

n и m не меняются в зависимости от их ориентации относительно координатных направлений

Возьмите детский кубик и клейте на него стрелки!
(Очень успокаивает нервы)





В Интер-таблицах рисуют не все установки... Иногда, увы, приходится включать мозги самому...

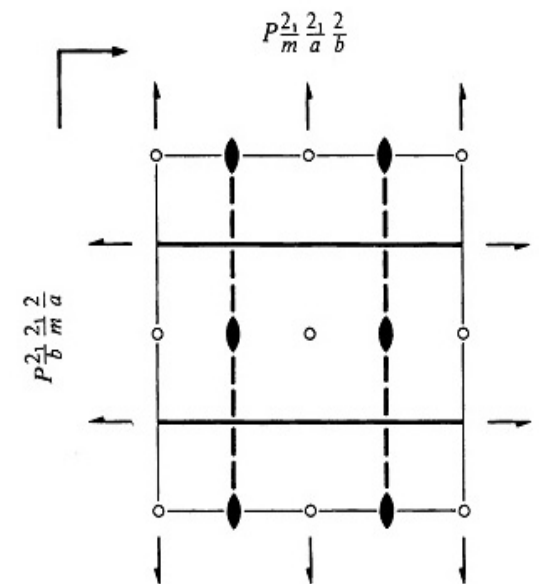
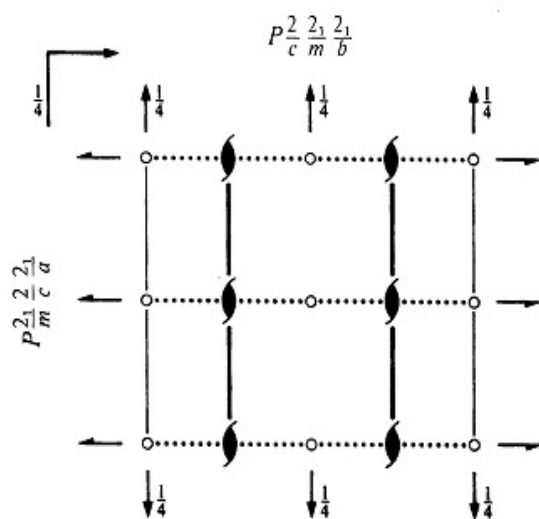
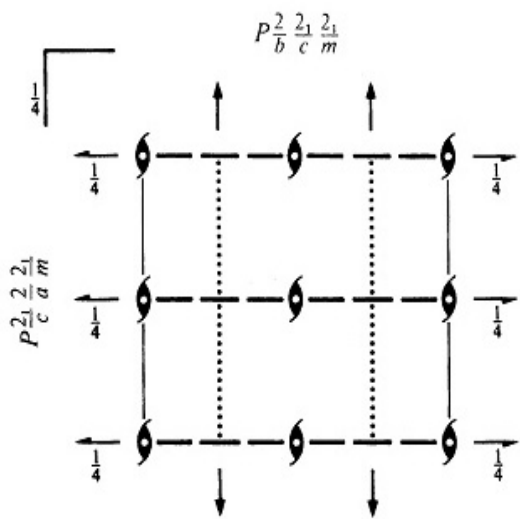


Pbcm

mmm

No. 57

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



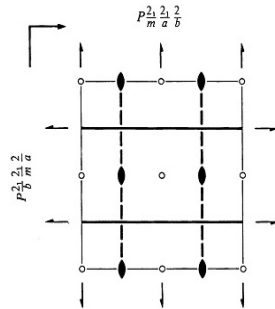
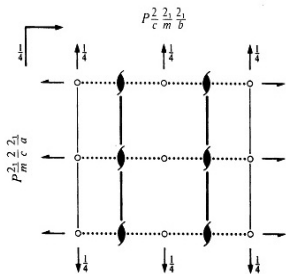
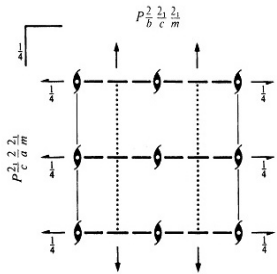


$Pbcm$

mmm

No. 57

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



**Здесь БАМа
нет**

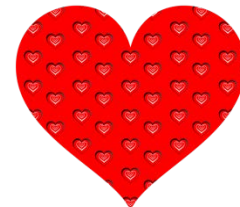
Задание на дом (факультативно, но на 10!! очков)



- 1) Начертить график пространственной группы *Pbam* (правильно выбрав начало координат!)
- 2) Размножить точку с координатами $0,1 \ 0,1 \ 0,1$ и привести координаты всех симметрично-связанных с ней точек в объеме элементарной ячейки.



Последняя лекция



- Теория плотнейших упаковок, ее использование для описания кристаллических структур
- Символика ПУ
- Симметрия гексагональной ПУ
- Как определить симметрию многослойной ПУ и структур на их основе




- Ура! Зачет открыт!
- До 13 мая будут регулярные обновления.
- Как увидите напротив своей фамилии надпись «зачет» - можно приходить с зачетной книжкой.

Подведение итогов курса с награждением отличившихся – 13 мая


← ↻ <https://cryst.geol.msu.ru/courses/mfk2/index.php>

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА, ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

 Кафедра кристаллографии и кристаллохимии


Информация о кафедре
 Исторический обзор
 Страница памяти
 Сотрудники, аспиранты
 Научная работа
 Публикации сотрудников
 Информация для аспирантов
 Информация для магистров
 Информация для студентов
 Учебный план
 Учебные курсы
 Учебные пособия
 Практики
 Абитуриенту
 Новости
 Конференции
 Полезные ресурсы
 Спорт на кафедре

4,273 Pageviews
 Mar 11th - Apr 11th



Rejting@mail.ru

Симметрия кристаллов



Предлагаемый межфакультетский курс «Симметрия кристаллов» представляет собой популярное изложение внутреннего строения. Лекции включают в себя основы классической кристаллографии с элементами кристаллохимии.

Содержание лекций :

1. [Лекция 01 от 11 февраля 2026 г.](#)
2. [Лекция 02 от 18 февраля 2026 г.](#)
3. [Лекция 03 от 25 февраля 2026 г.](#)
4. [Лекция 04 от 04 марта 2026 г.](#)
5. [Лекция 05 от 11 марта 2026 г.](#)
6. [Лекция 06 от 18 марта 2026 г.](#)
7. [Лекция 07 от 25 марта 2026 г.](#)
8. [Лекция 08 от 01 апреля 2026 г.](#)
9. [Лекция 09 от 08 апреля 2026 г.](#)

ЗАЧЕТ:

1. [Бонусные баллы за домашние работы \(на 8 апреля\)](#)
2. ВХОД В ЗАЧЕТ ПОКА ЗАКРЫТ

Справочный материал

1. ["32 класса симметрии" Плакат](#)
2. [Сетка Вульфа в формате BMP, радиусом 10 см с разрешением 300 dpi в архиве](#)
3. [Трафарет для рисования, радиус 8 см](#)
4. [Правила формирования международного символа](#)
5. [Правила формирования символа Шенфлиса](#)