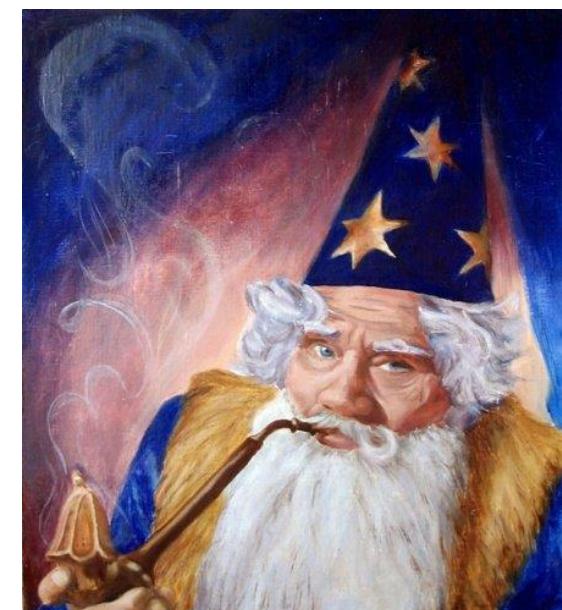


Занятие 2

Волшебная симметрия кристаллического микромира

или

основы кристаллографической магии



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

Анализу подвергаются только магловские позиции!!

Волшебные элементы симметрии не оставляют точку на месте!!

Центр комплекс $3/m$ и т. д.

Ось 2, 3, 4, 6

Плоскость m

Точка без элементов симметрии (1) – 3 степени свободы

- 0 степеней свободы
- 1 степень свободы
- 2 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 - 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

$I\bar{4}2d$

$$\text{ВСГ} = 2 * 8 = 16$$

$R\bar{3}c$

$$\text{ВСГ} = 3 * 12 = 36$$

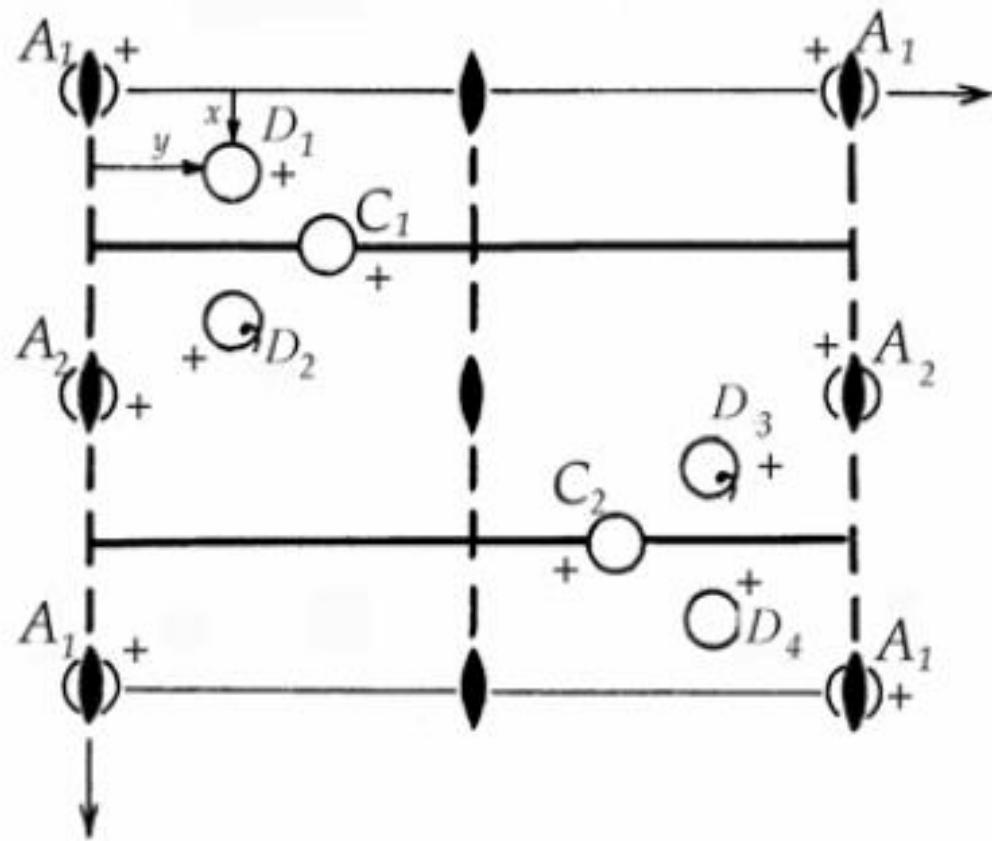
$Fd\bar{3}m$

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

$Fddd$

$$\text{ВСГ} = 4 * 8 = 32$$

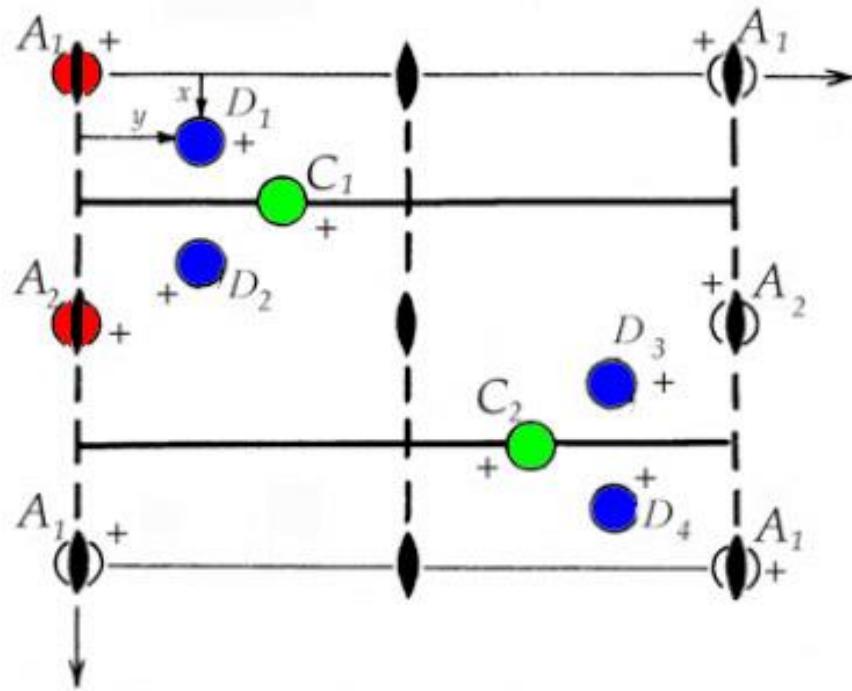
Правильные системы точек



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

Pma2

$$BCG = 1 * 4 = 4$$



Законы,
работающие
при любом
x y z!



Позиция	Симметрия позиции	Величина симметрии	Число степеней свободы	Кратность $BCG = 1 * 4 = 4$	Координаты
D 	1	1	$3_{(x,y,z)}$	$4 : 1 = 4$	
A 	2	2	$1_{(z)}$	$4 : 2 = 2$	$00z$,
C 	m	2	$2_{(y,z)}$	$4 : 2 = 2$	

Законы, работающие при любом x y z !

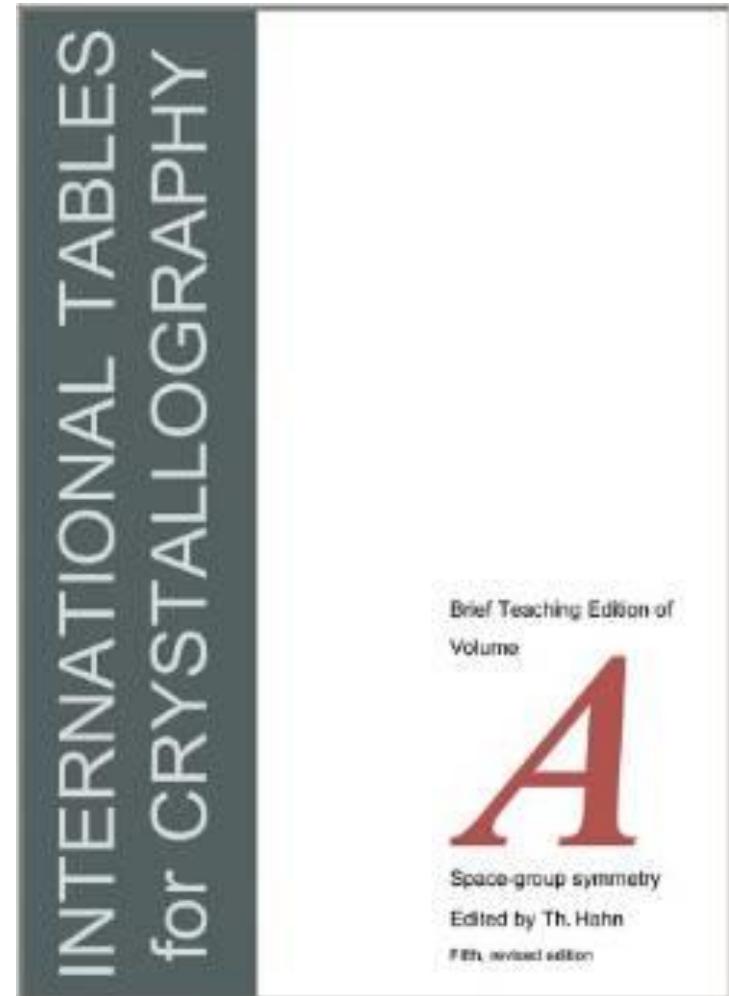
Что такое $-x$?

Допустим, $x=0,1$

Тогда $-x = -0,1 = 0,9!!!$

Магическая книга кристаллографа - International Tables for X-Ray Crystallography

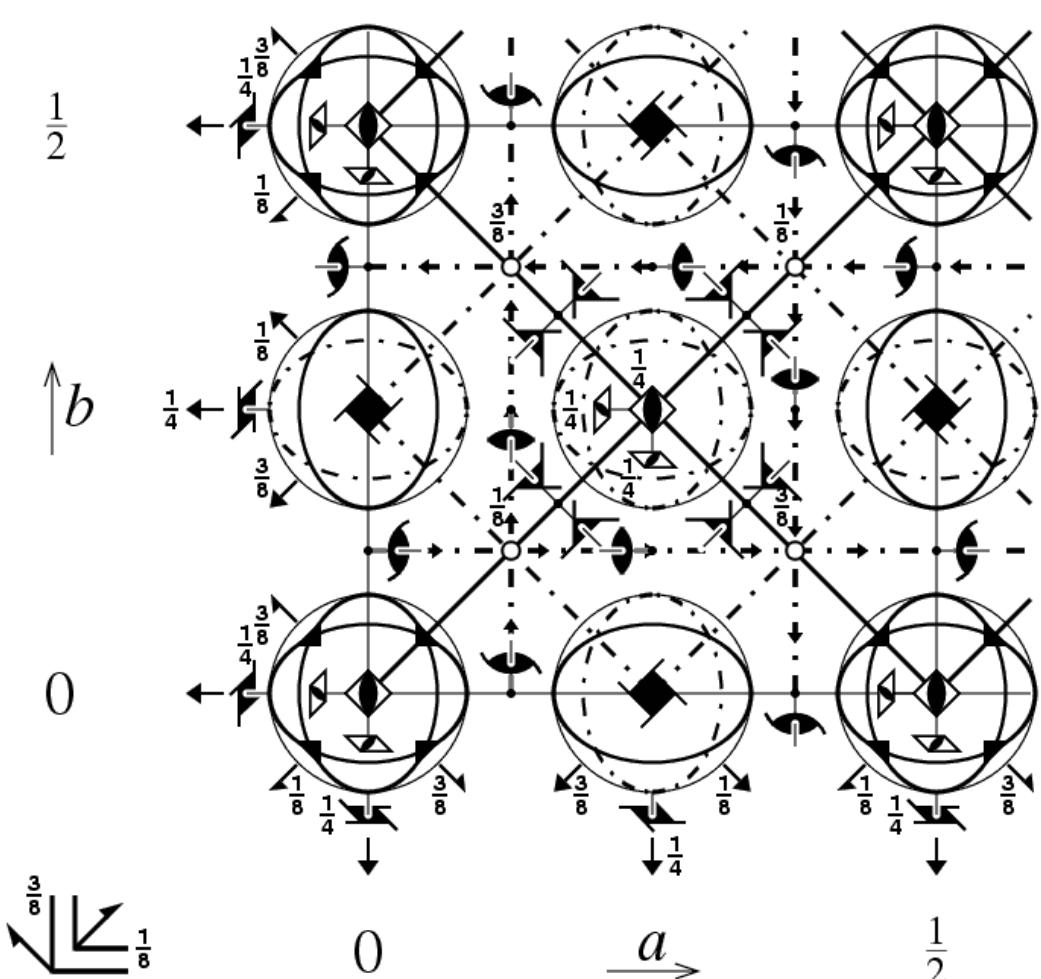
Volume A, Space-group Symmetry



International Tables for X-Ray Crystallography

Volume A, Space-group Symmetry

Fd $\bar{3}m$



*F*4₁/*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

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

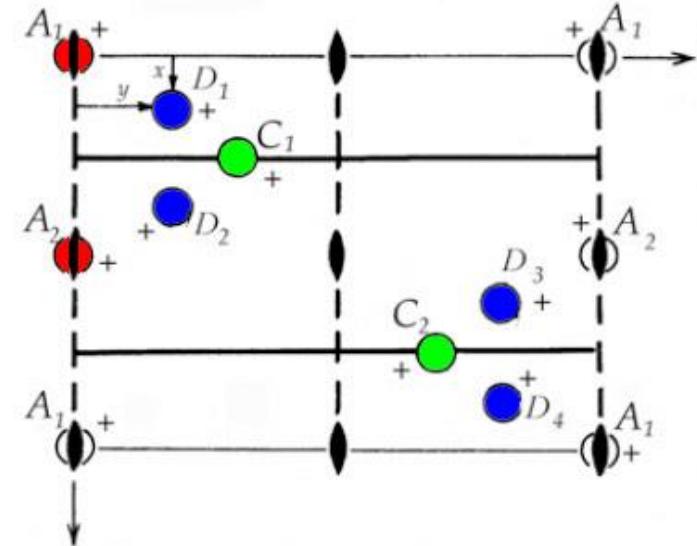


Позиции Уайкоффа

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter.
Sire symmetry

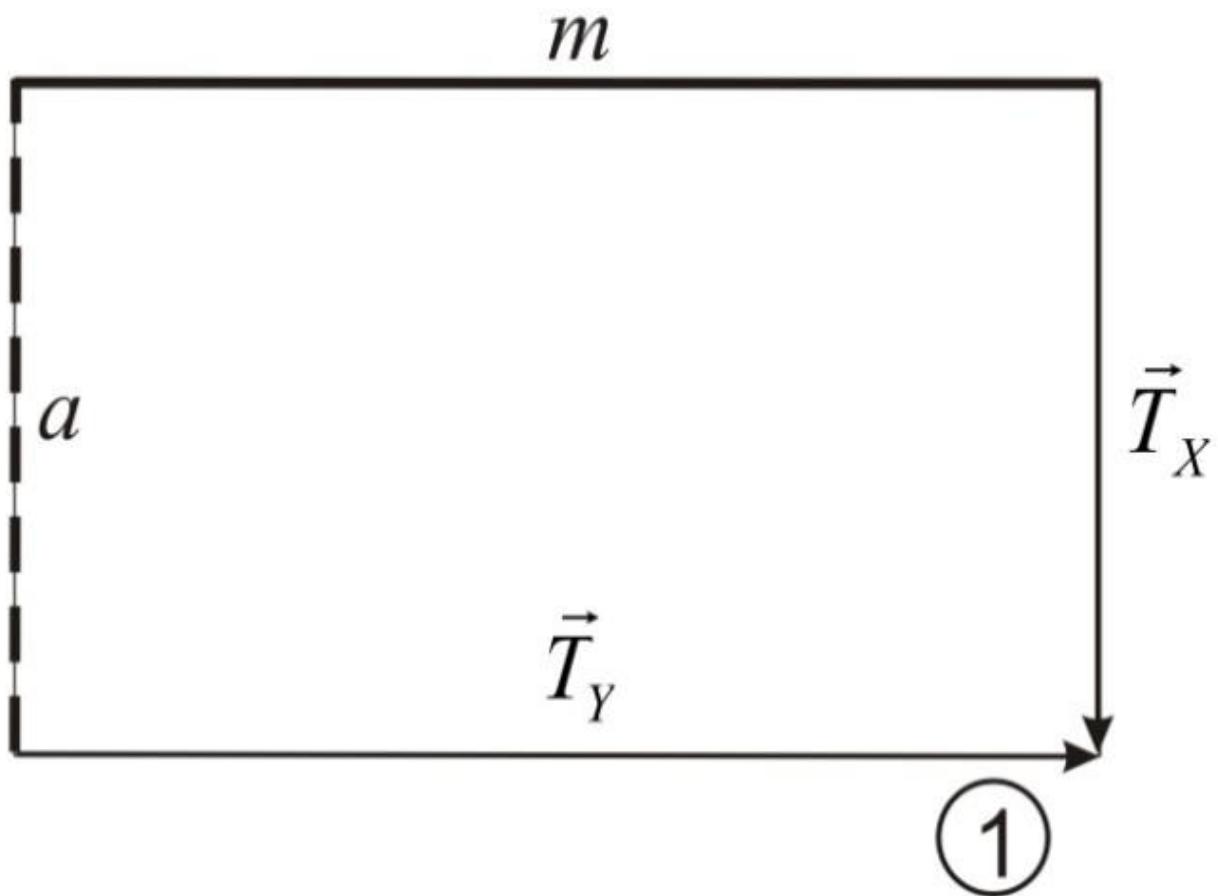
			Coordinates
4	<i>d</i>	1	(1) x, y, z (2) \bar{x}, \bar{y}, z (3) $x + \frac{1}{2}, \bar{y}, z$ (4) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y, z$
2	<i>c</i>	<i>m</i> ..	$\frac{1}{4}, y, z$ $\frac{1}{2}, \bar{y}, z$
2	<i>b</i>	.. 2	$0, \frac{1}{2}, z$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$
2	<i>a</i>	.. 2	$0, 0, z$ $\frac{1}{2},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



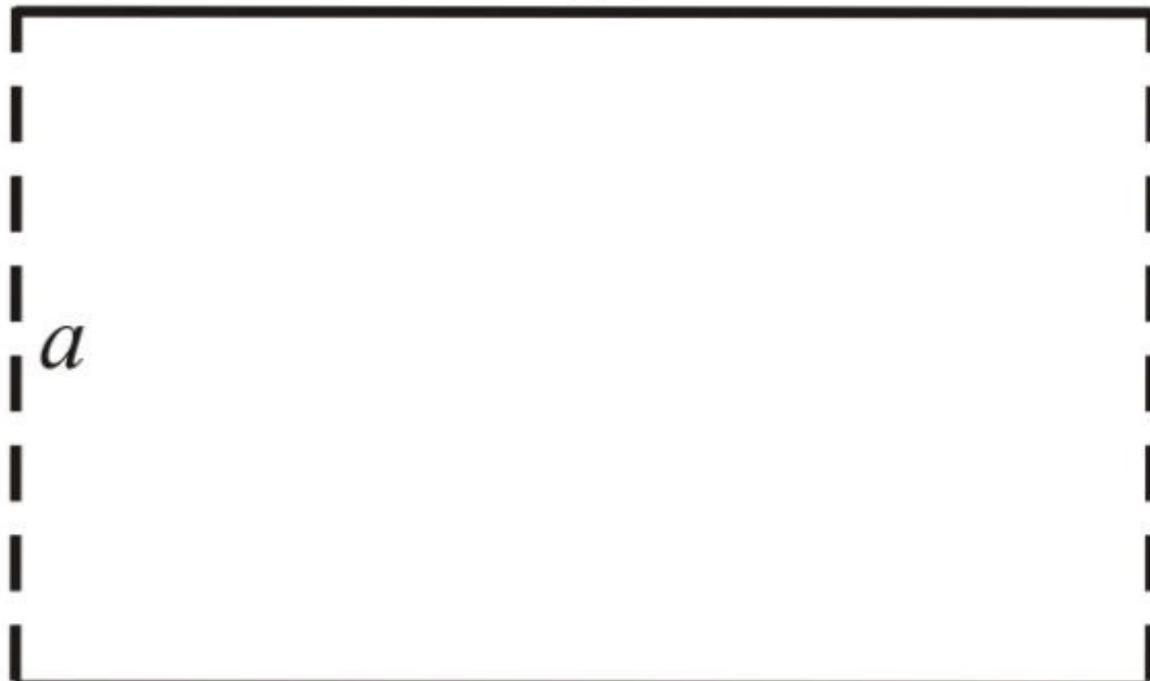
В Интернациональных таблицах в характеристику ПСТ входит еще *позиция Уайкоффа (Wyckoff)* буквенное обозначение. Самая симметричная позиция (с минимальной кратностью) обозначается буквой *a*. В символе Уайкоффа независимые позиции даже с одинаковыми характеристиками, различающиеся лишь координатами,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

Этапы построения графика группы *Ptab*

Начнем с
Pta?

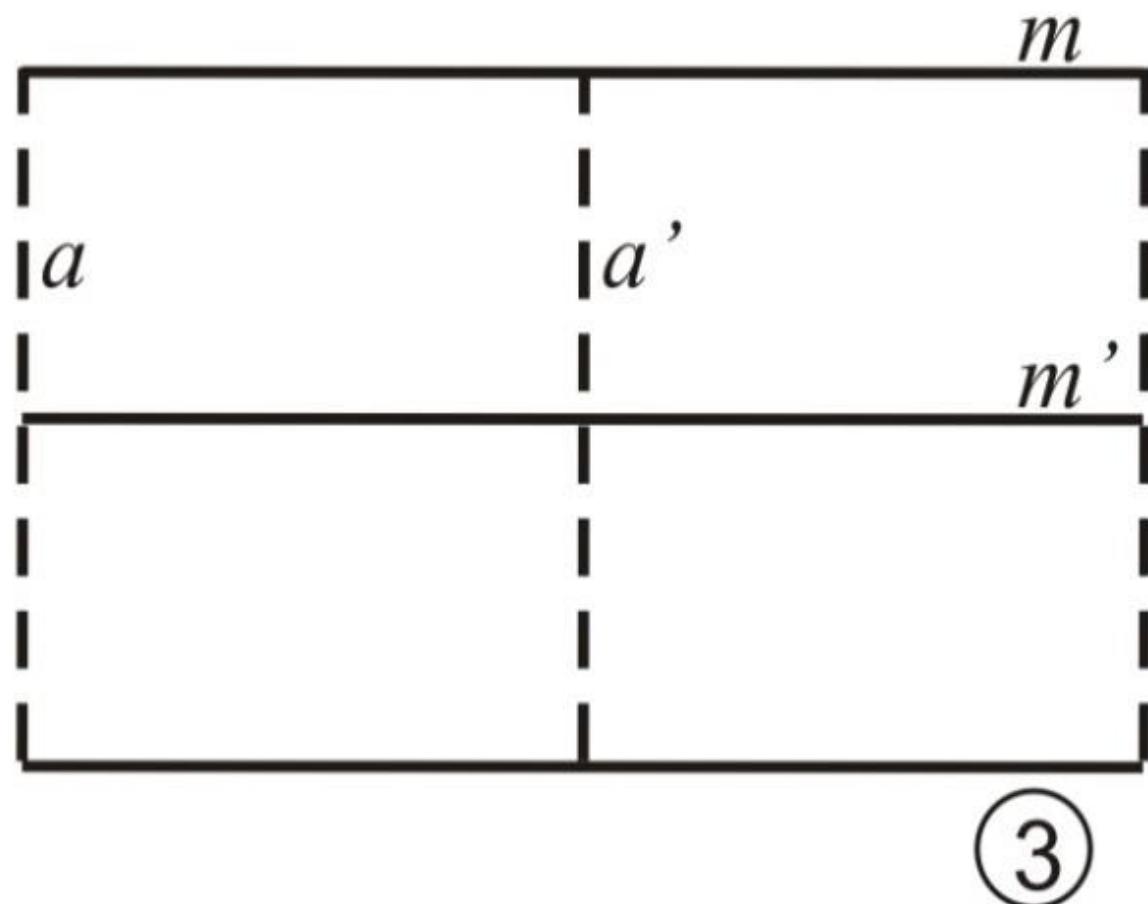


m



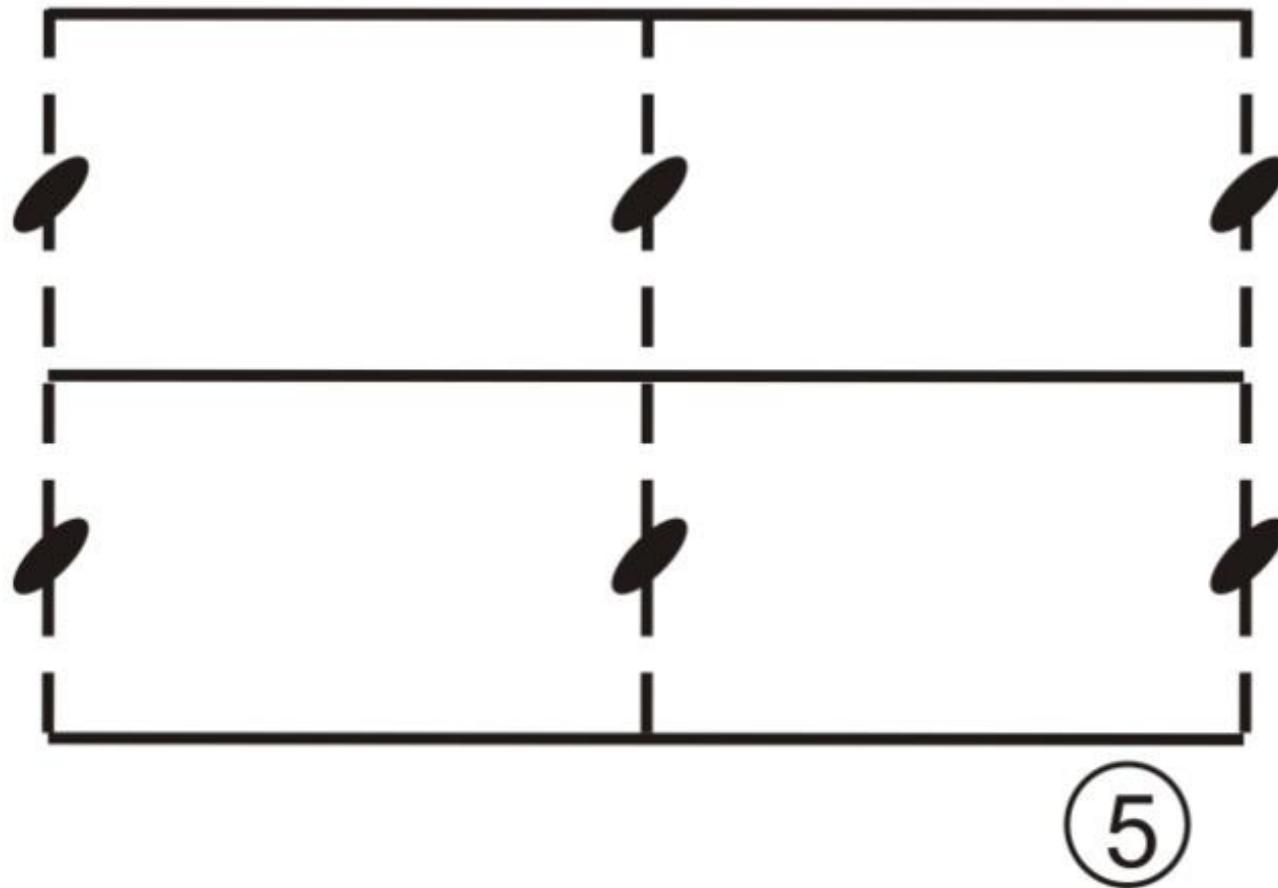
a

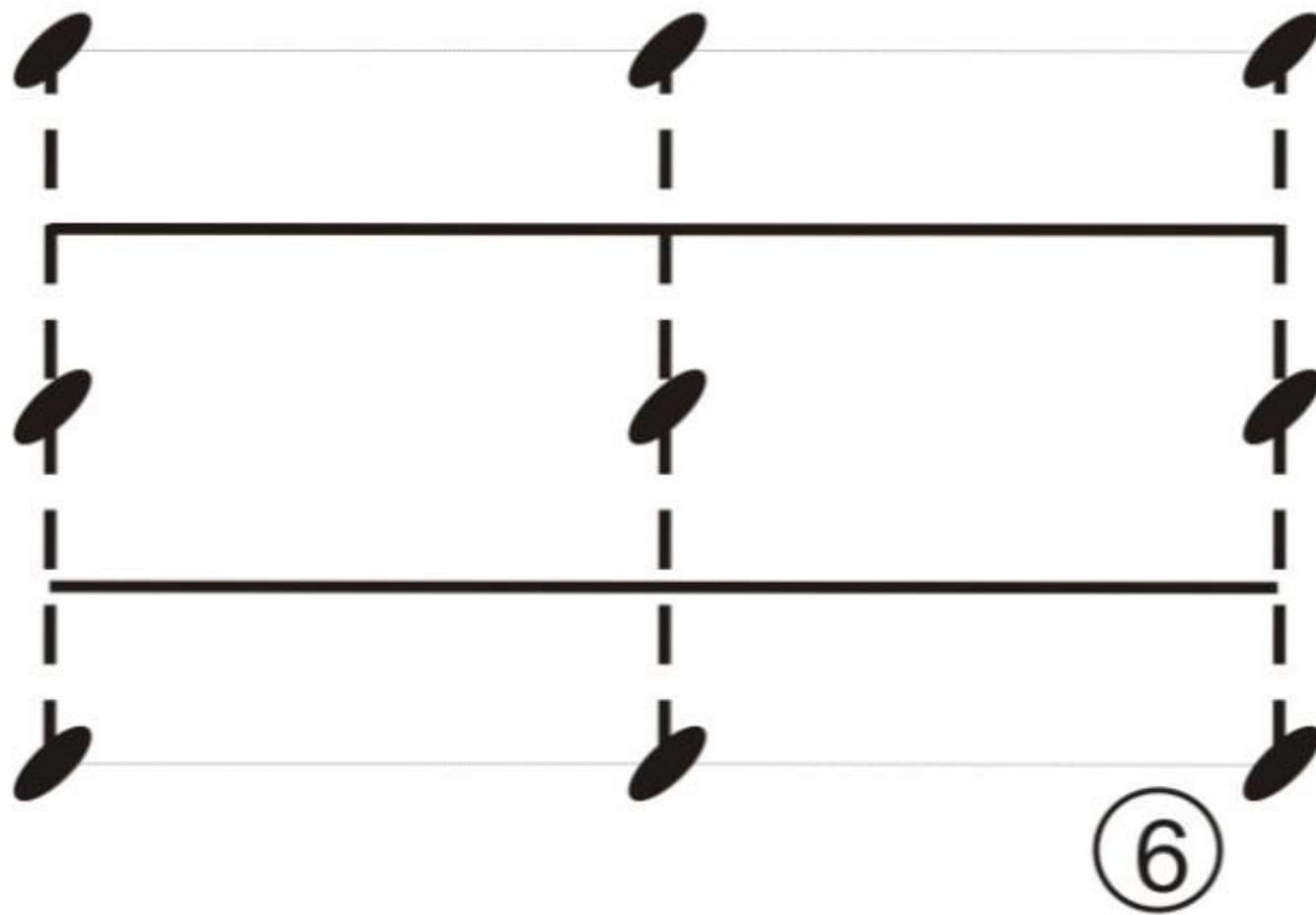
②

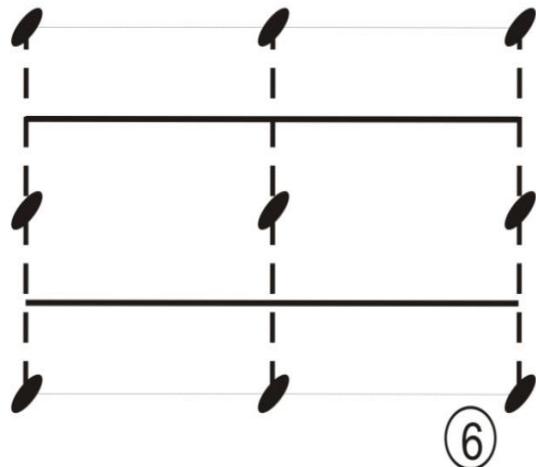




④





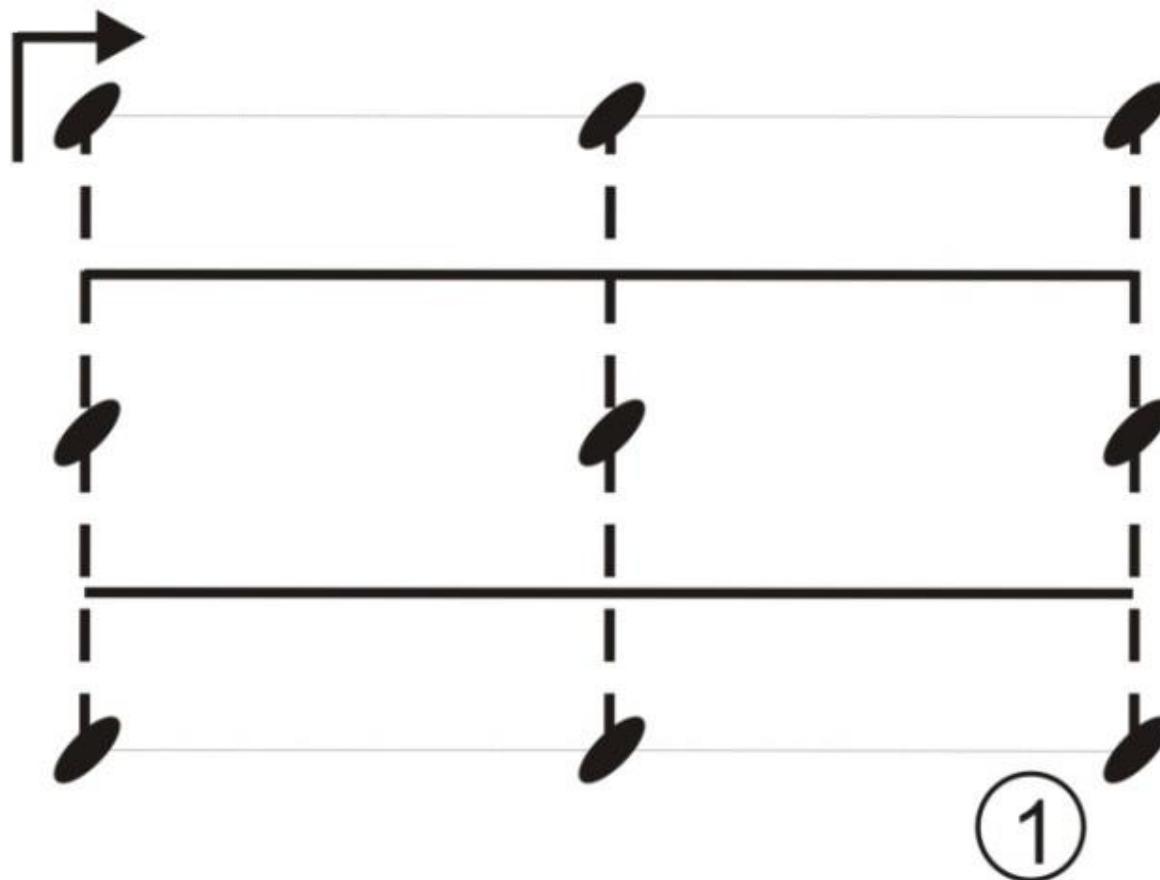


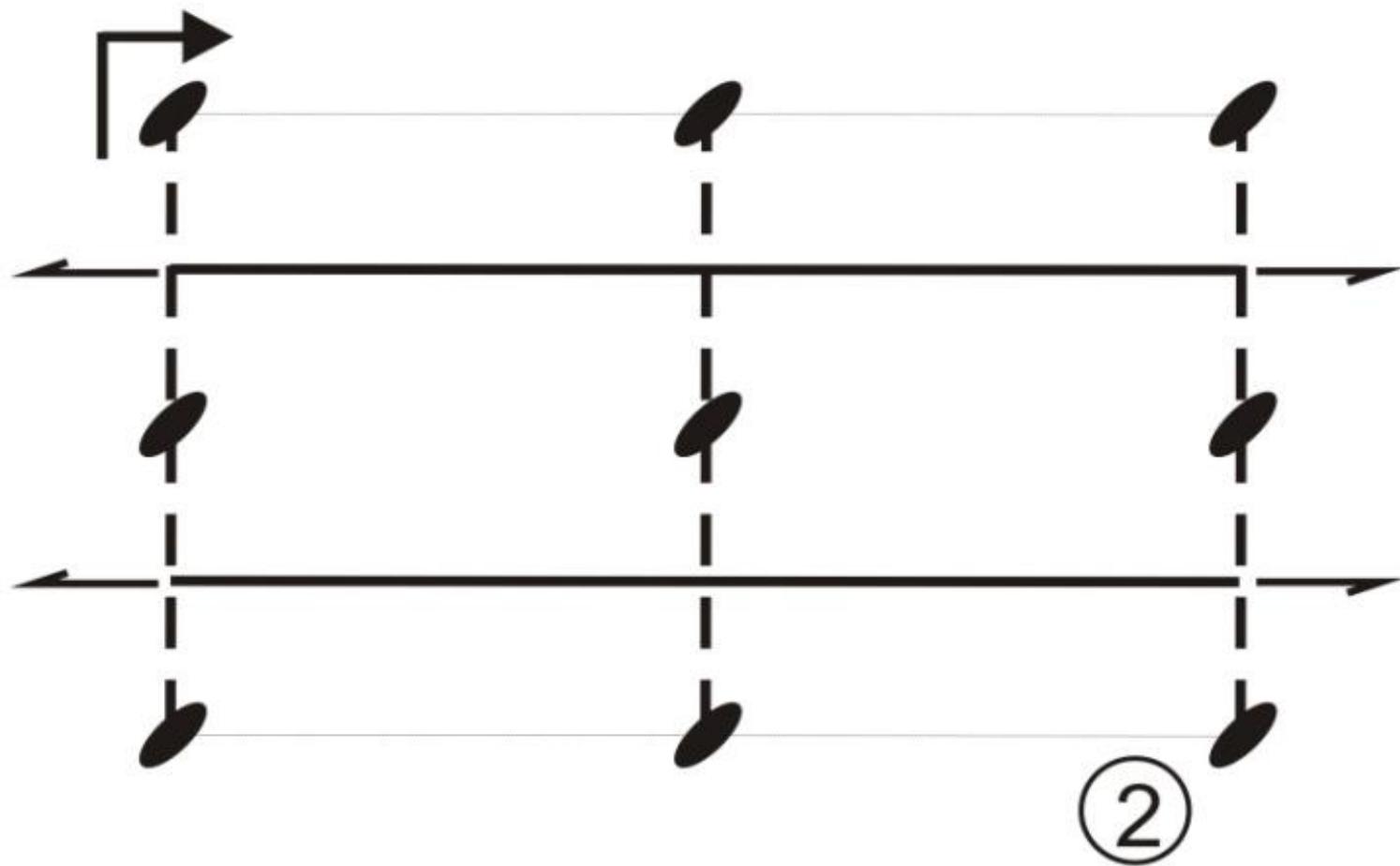
Теперь необходимо дать характеристику всем правильным системам точек этой группы. Для этого необходимо заполнить таблицу

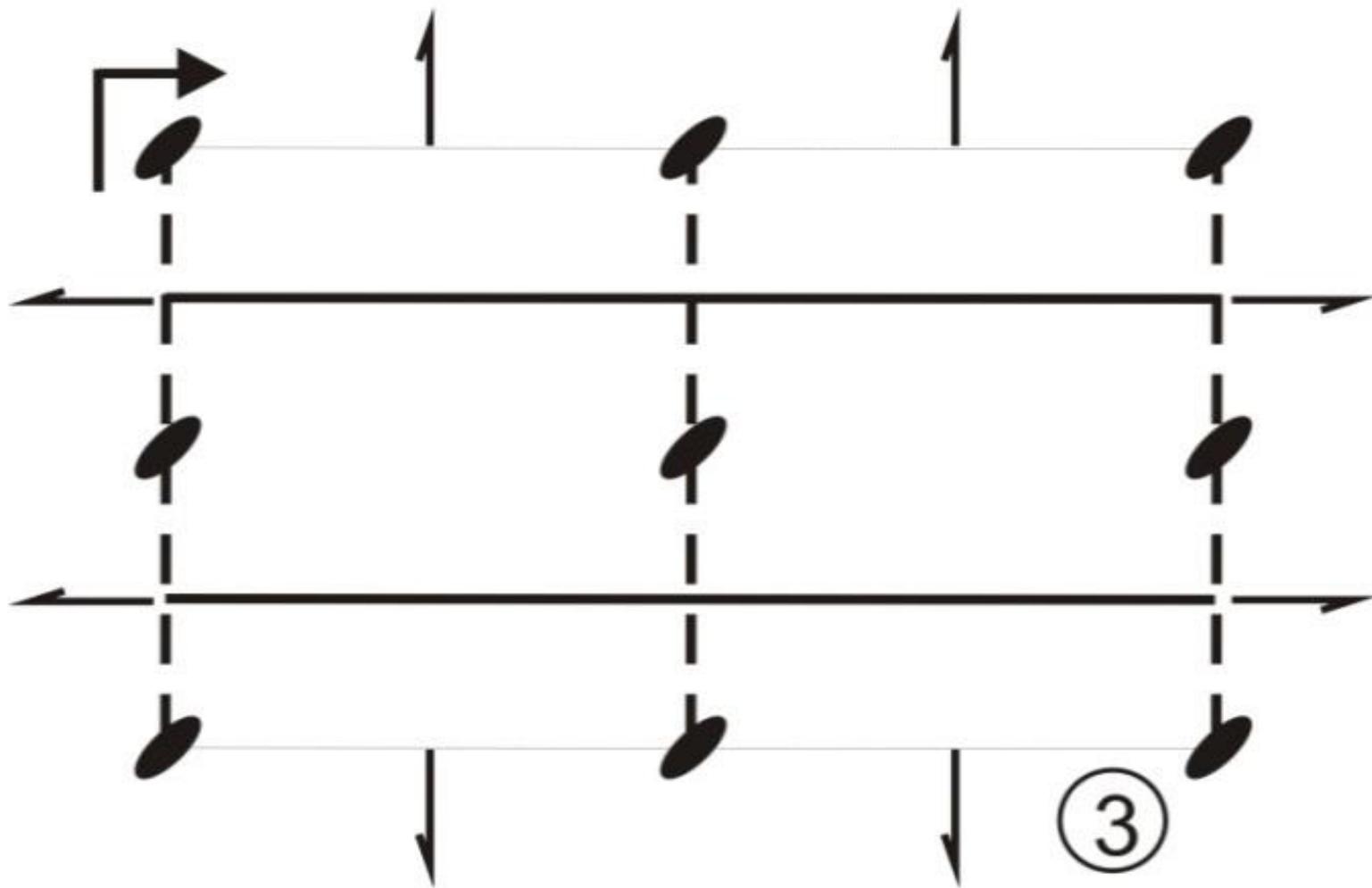
Как видно, в изучаемой группе существует три принципиально разные позиции:
- общего положения с симметрией 1,
- позиция на плоскости m с величиной симметрии 2
- позиция на оси второго порядка, также с симметрией 2.

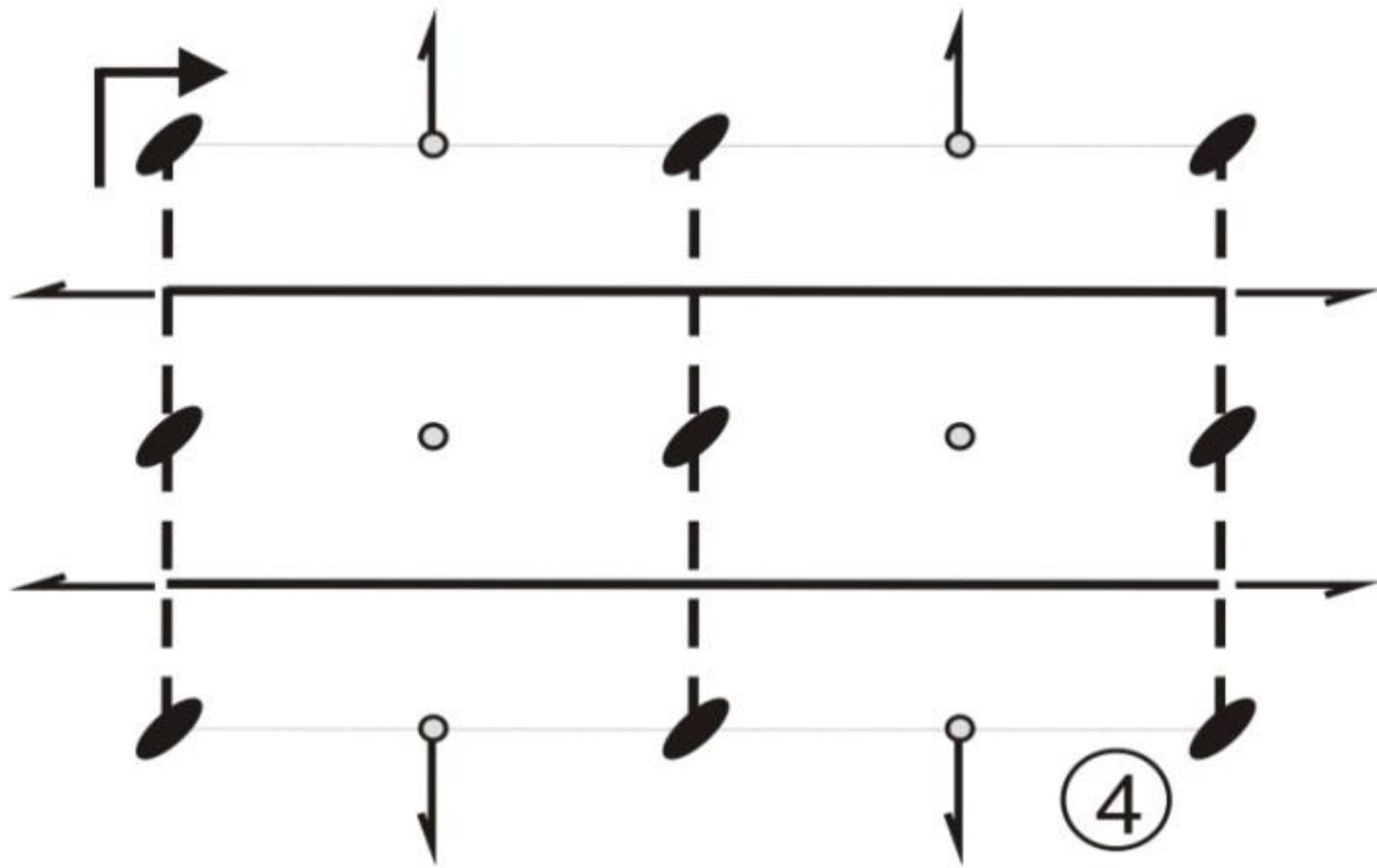
№ позиции	Собственная симметрия позиции (CCП)	Величина симметрии позиции (ВСП)	Число степеней свободы (ЧСС)	Кратность (Порядок группы / ВСП)	Координаты
1	1	1	3 (xyz)	4/1 = 4	
2	<i>m</i>	2	2(yz)	4/2=2	
3	2	2	1(z)	4/2=2	

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

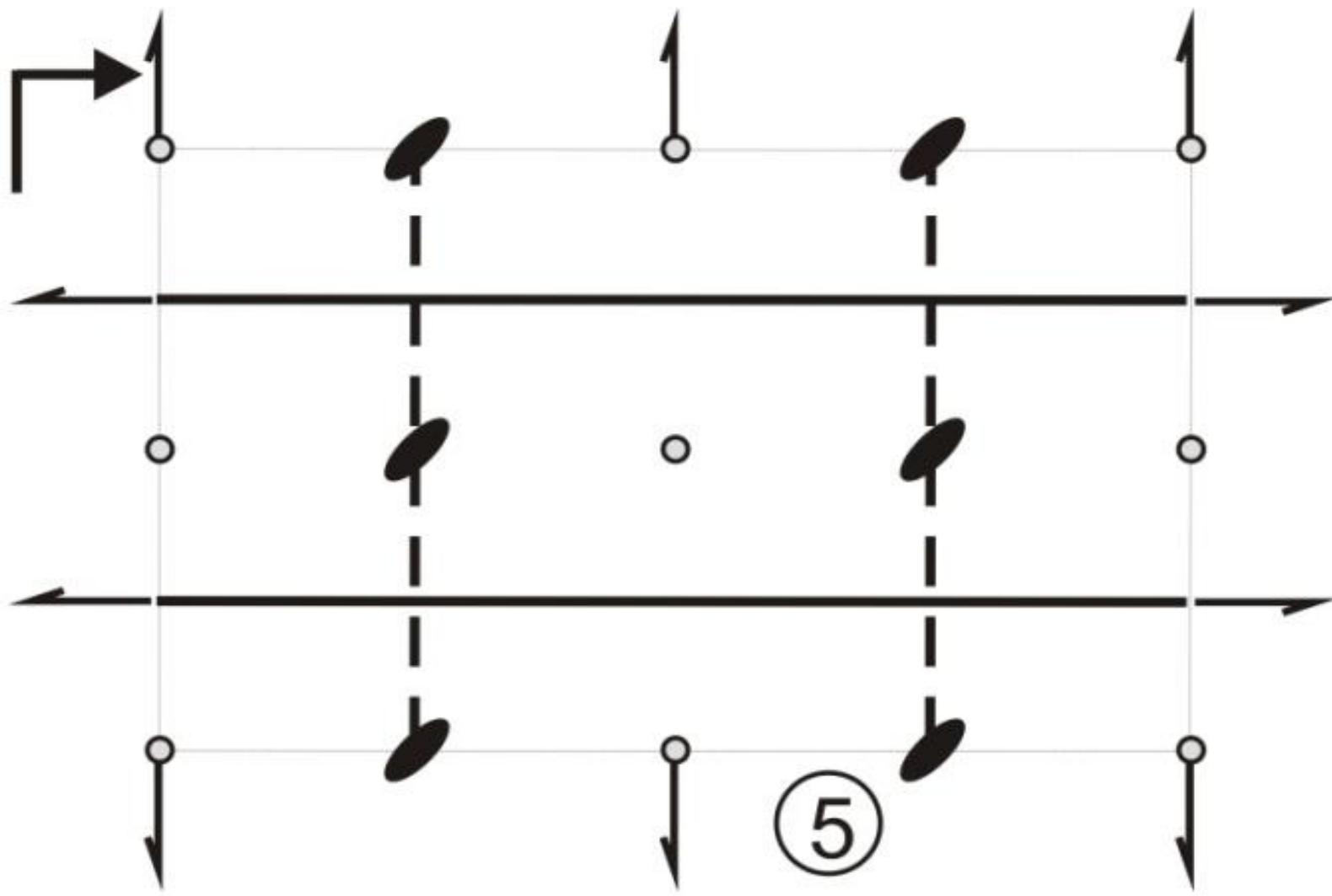


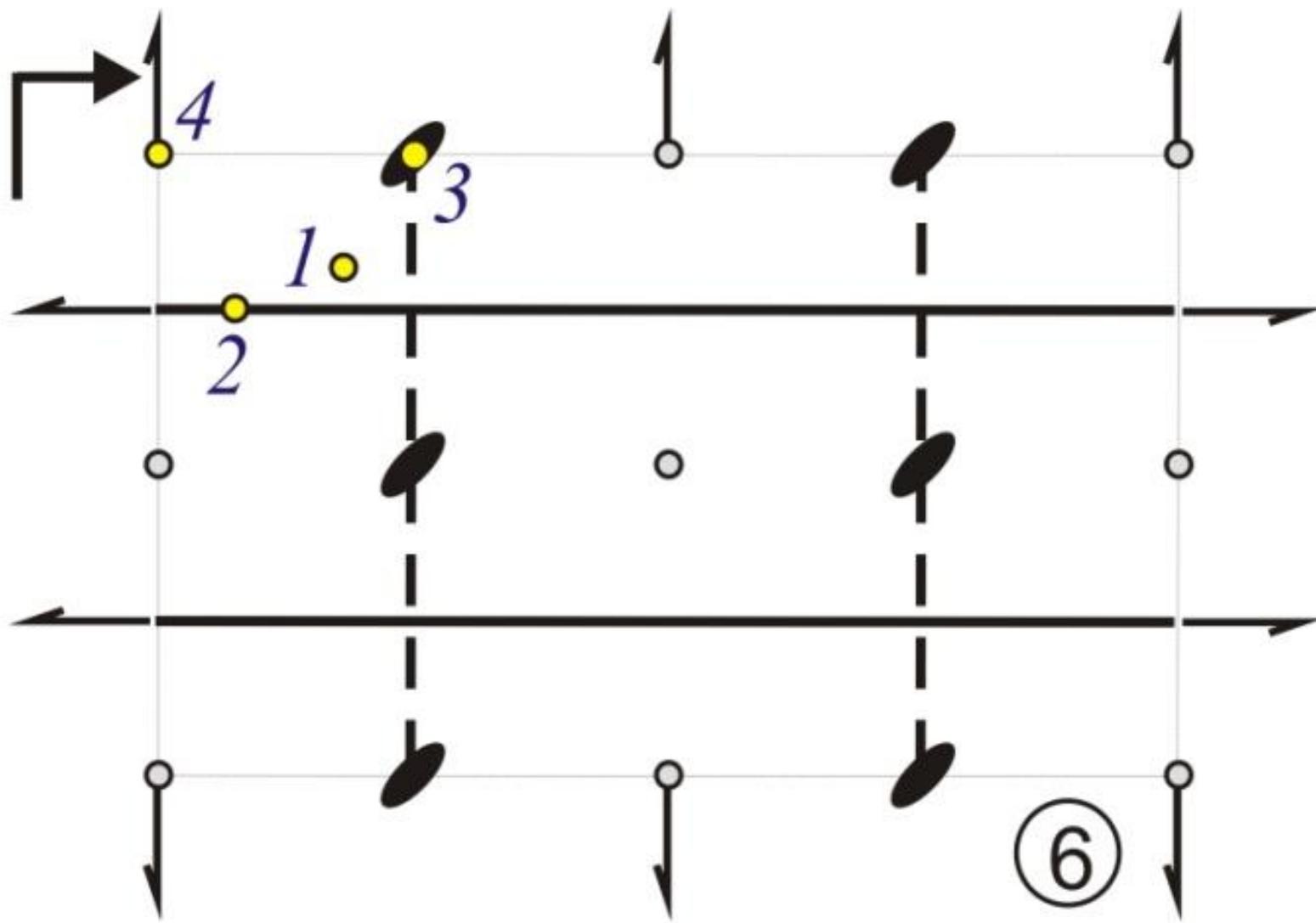


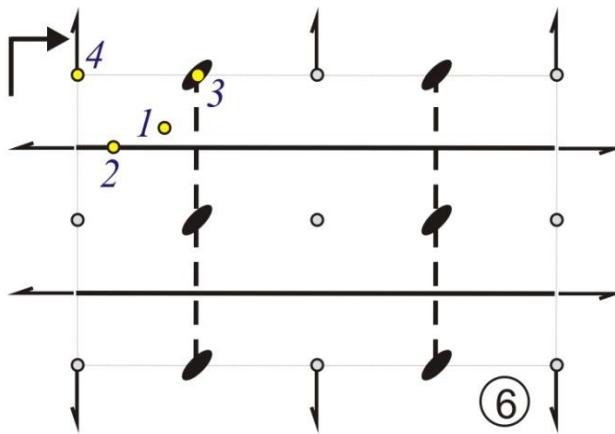




Следующим шагом является нахождение центра инверсии, который в этом классе должен неизбежно появиться три раза как результат взаимодействия $m_x \times 2_{1x}$, $b_z \times 2_z$ и $a_y \times 2_{1y}$. Для фиксации центра достаточно взять любую пару. Например, $b_z \times 2_z$

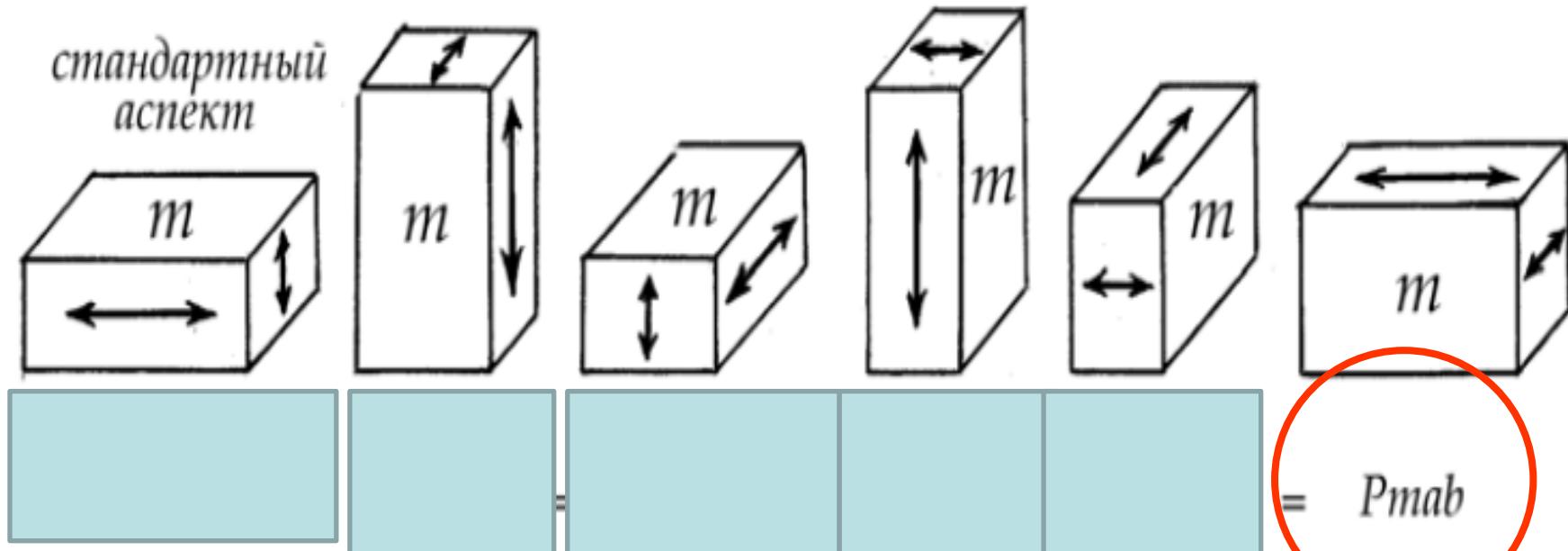






№ позиции	Собственная симметрия позиции (CCП)	Величина симметрии позиции (ВСП)	Число степеней свободы (ЧСС)	Кратность (Порядок группы / ВСП)	Координаты
1	1	1	3 (xyz)	8/1 = 8	
2	m	2	2(yz)	8/2 = 4	
3	2	2	1(z)	8/2 = 4	
4	$\bar{1}$	2	0	8/2 = 4	

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

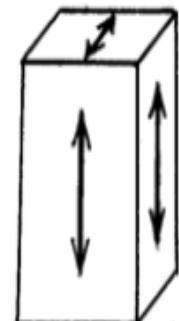


Плоскости скользящего отражения *a*, *b* и *c* с трансляционной компонентой, ориентированной вдоль одной из координатных осей, изменяют свои наименования в зависимости от той или иной ориентации их компонент.

Обозначения же плоскостей

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

**Возьмите детский кубик и клейте
на него стрелки!**

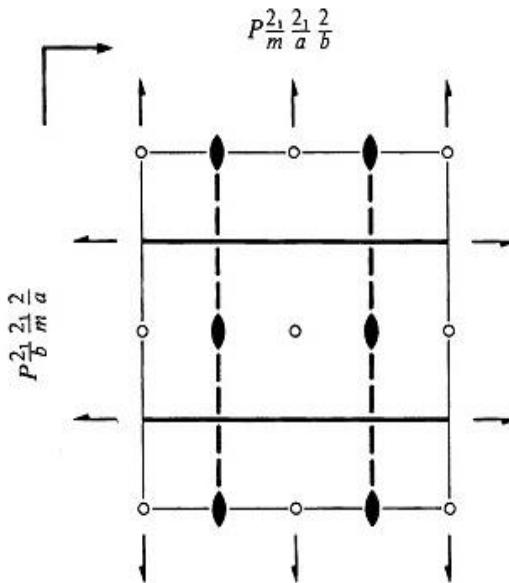
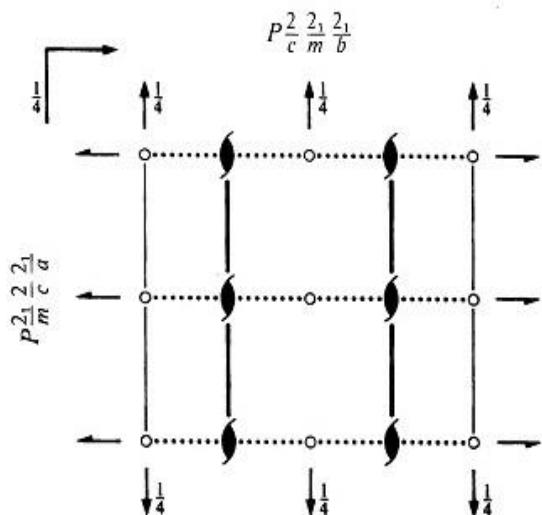
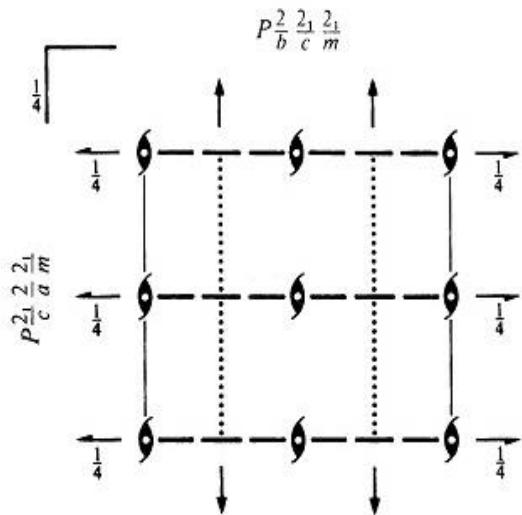


Pbcm

mmm

No. 57

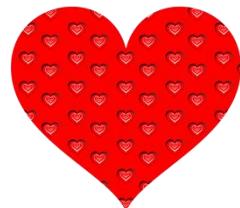
P 2/b 2₁/c 2₁/m



В следующий раз



- Криво расположенная к элементам симметрии трансляция.
- Найди волшебные плоскости в структуре.
- Я люблю марказит.



И многое другое. Будем много чертить и рисовать. А также считать! Берите калькуляторы или логарифмические линейки!

