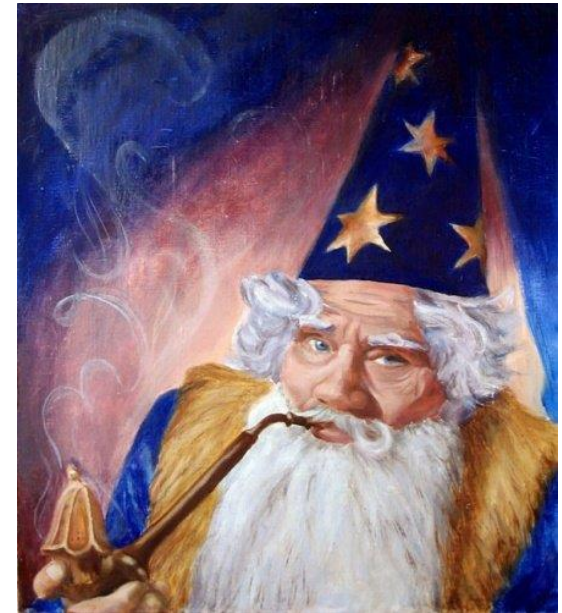


Занятие 2

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.	– 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 - 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

$$\text{ВСТ/ВСП} = \text{кратность}$$

Важная формула 2: ВСТ =

Число граней общей простой формы макроаналога
×

Размножающую способность решетки Браве

Потренируемся

$I\bar{4}2d$

$$\text{ВСТ} = 2 * 8 = 16$$

$R\bar{3}c$

$$\text{ВСТ} = 3 * 12 = 36$$

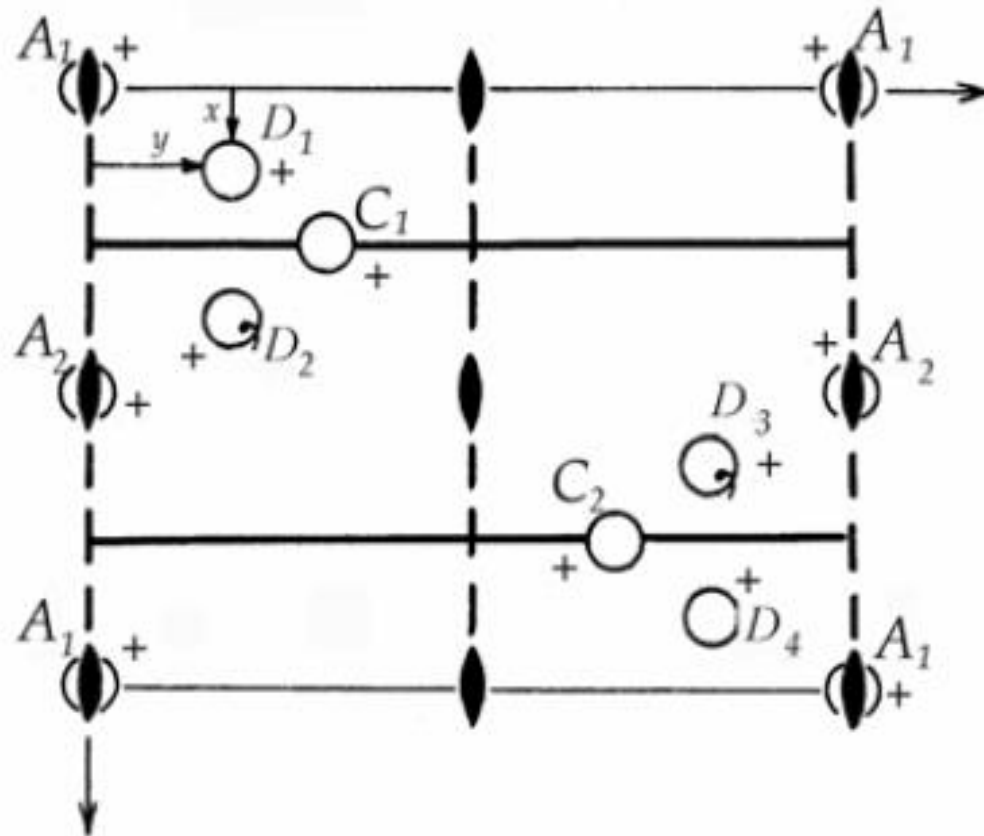
$Fd\bar{3}m$

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

$Fddd$

$$\text{ВСТ} = 4 * 8 = 32$$

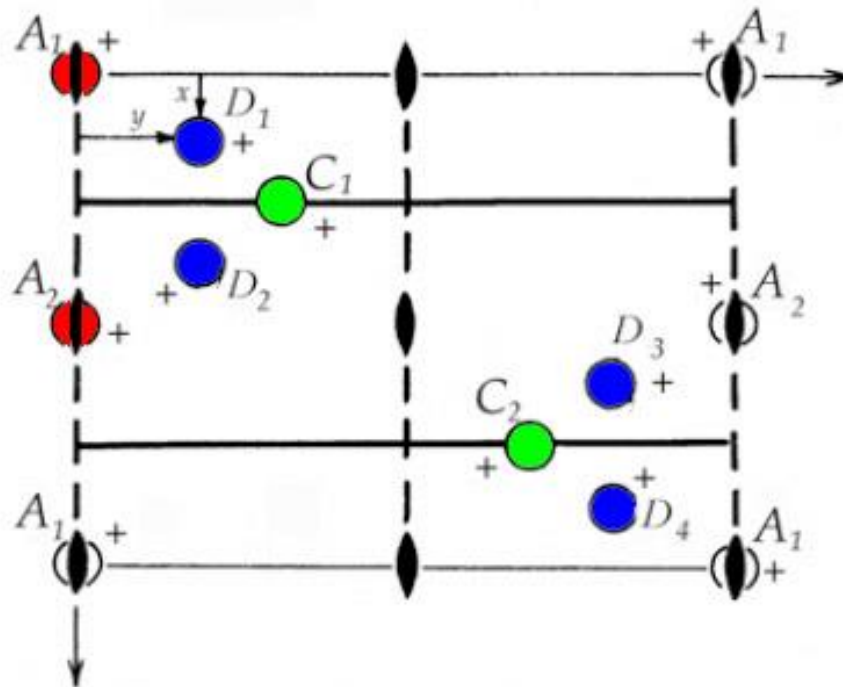
Правильные системы точек



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


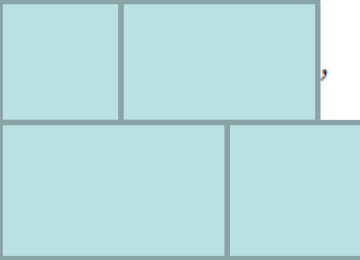

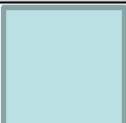

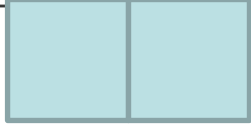
Pma2

$$BC\Gamma = 1 * 4 = 4$$



Законы,
работающие
при любом
x y z!



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

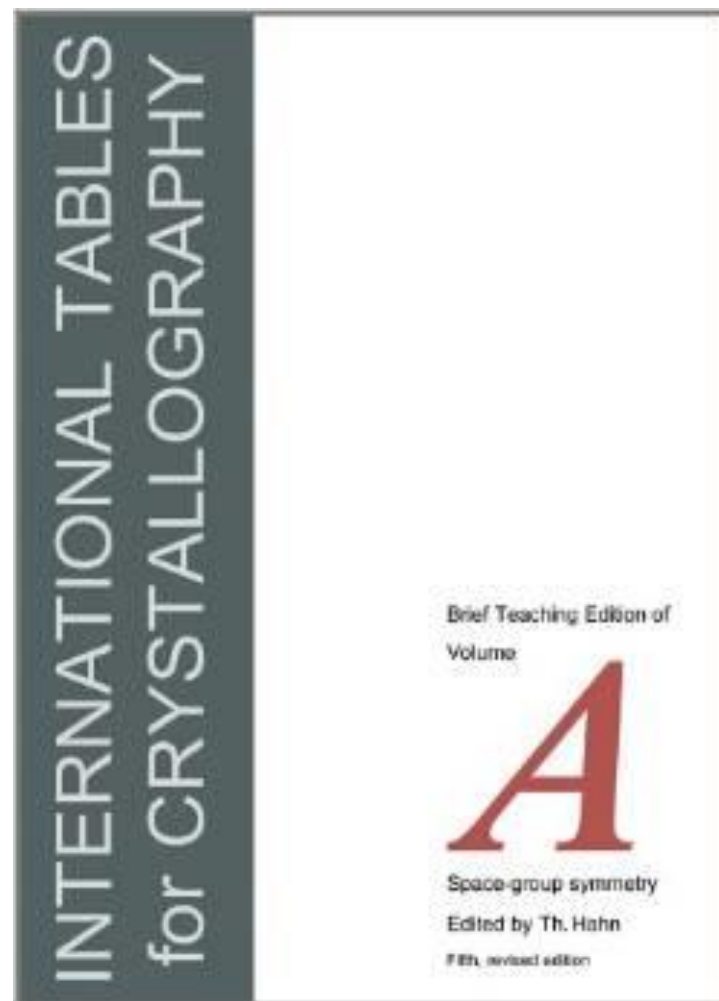
Законы, работающие при любом x y z !

Что такое $-x$?

Допустим, $x=0,1$

Тогда $-x = -0,1 = 0,9!!!$

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



International Tables for X-Ray Crystallography

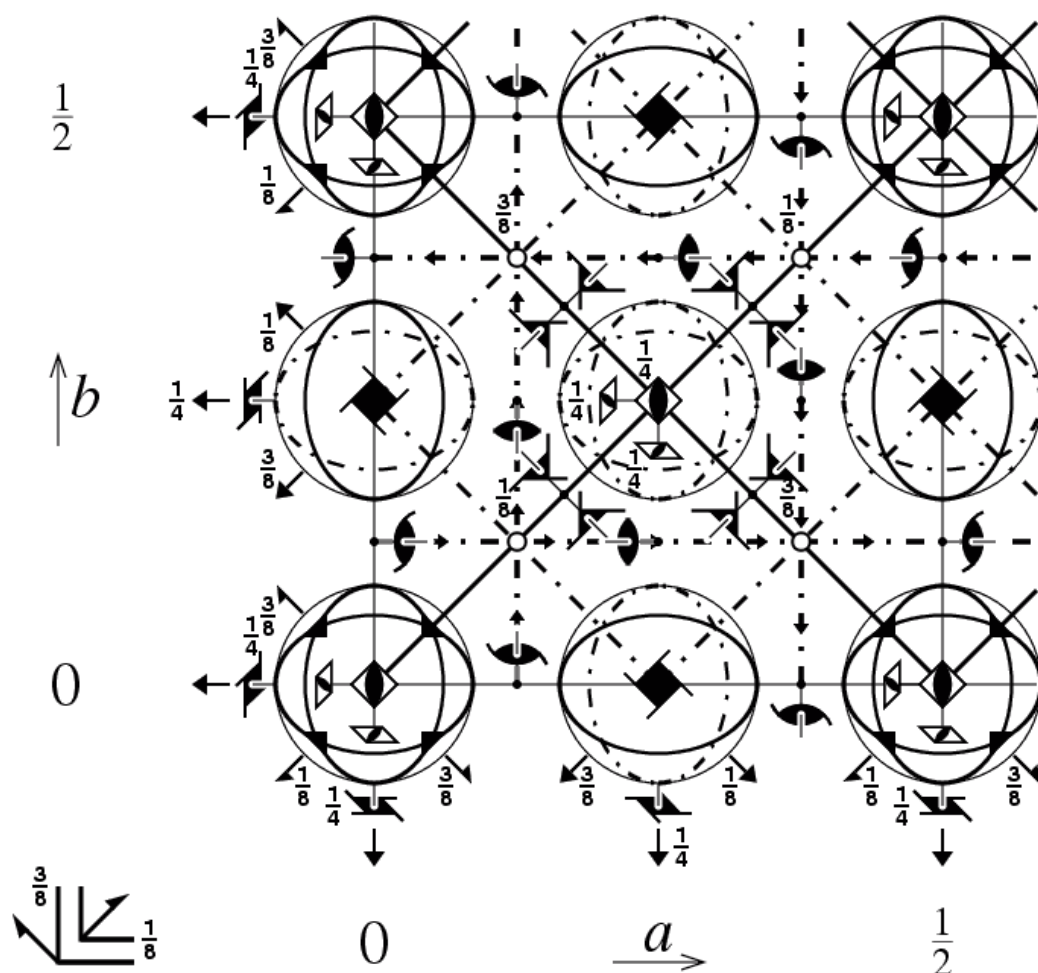
Volume A, Space-group Symmetry

$Fd\bar{3}m$

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

$m\bar{3}m$

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 |

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



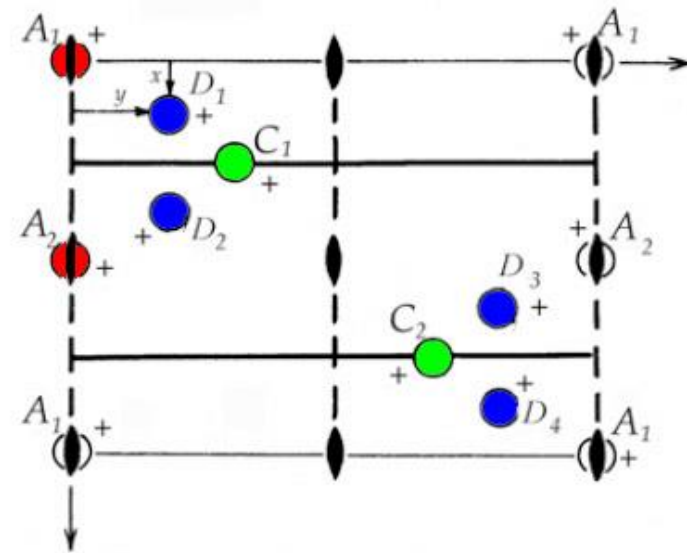
Позиции Уайкоффа

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter.
Site symmetry

Coordinates

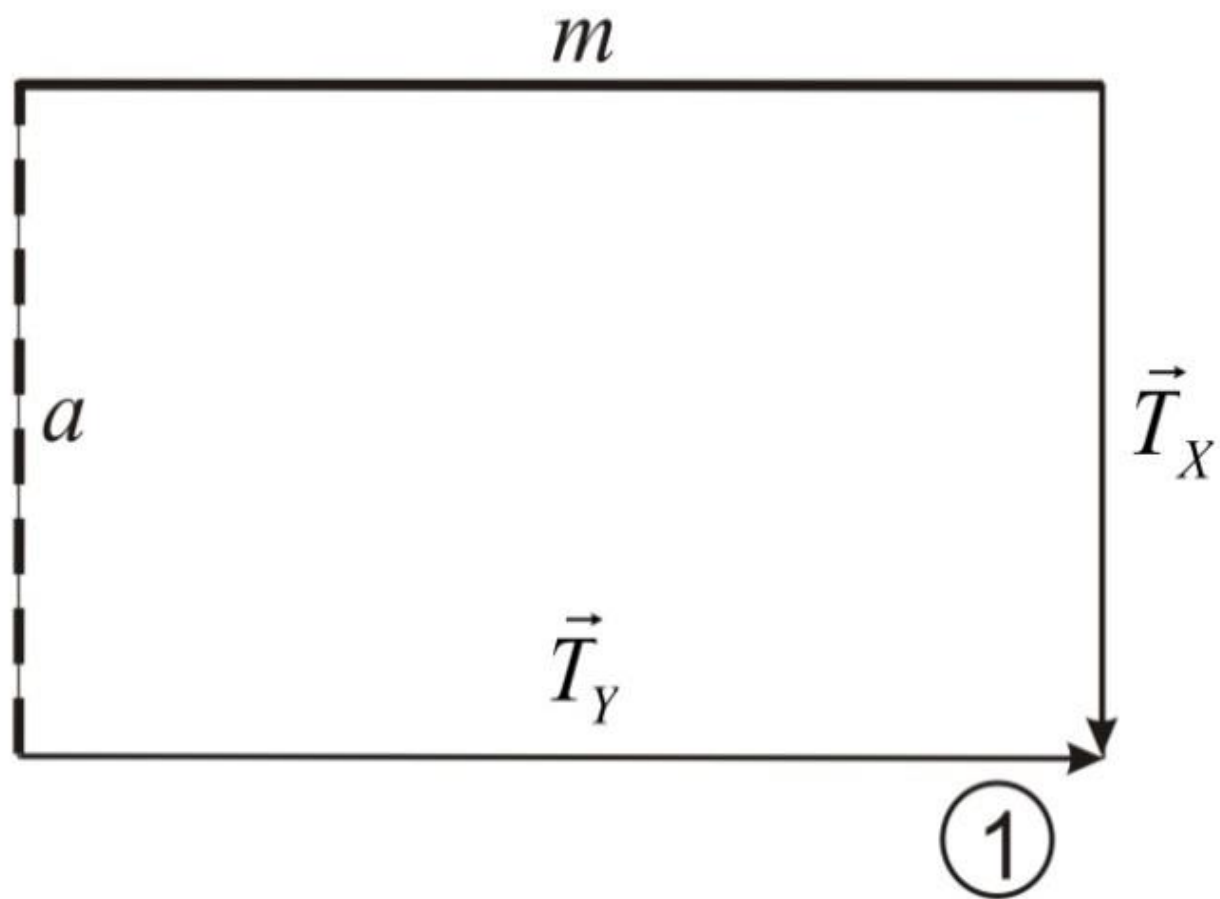
4	<i>d</i>	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) $x + \frac{1}{2}, \bar{y}, z$	(4) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y, z$
2	<i>c</i>	$m \dots$	$\frac{1}{4}, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$		
2	<i>b</i>	$\dots 2$	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$		
2	<i>a</i>	$\dots 2$	$0, 0, z$	$\frac{1}{2},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

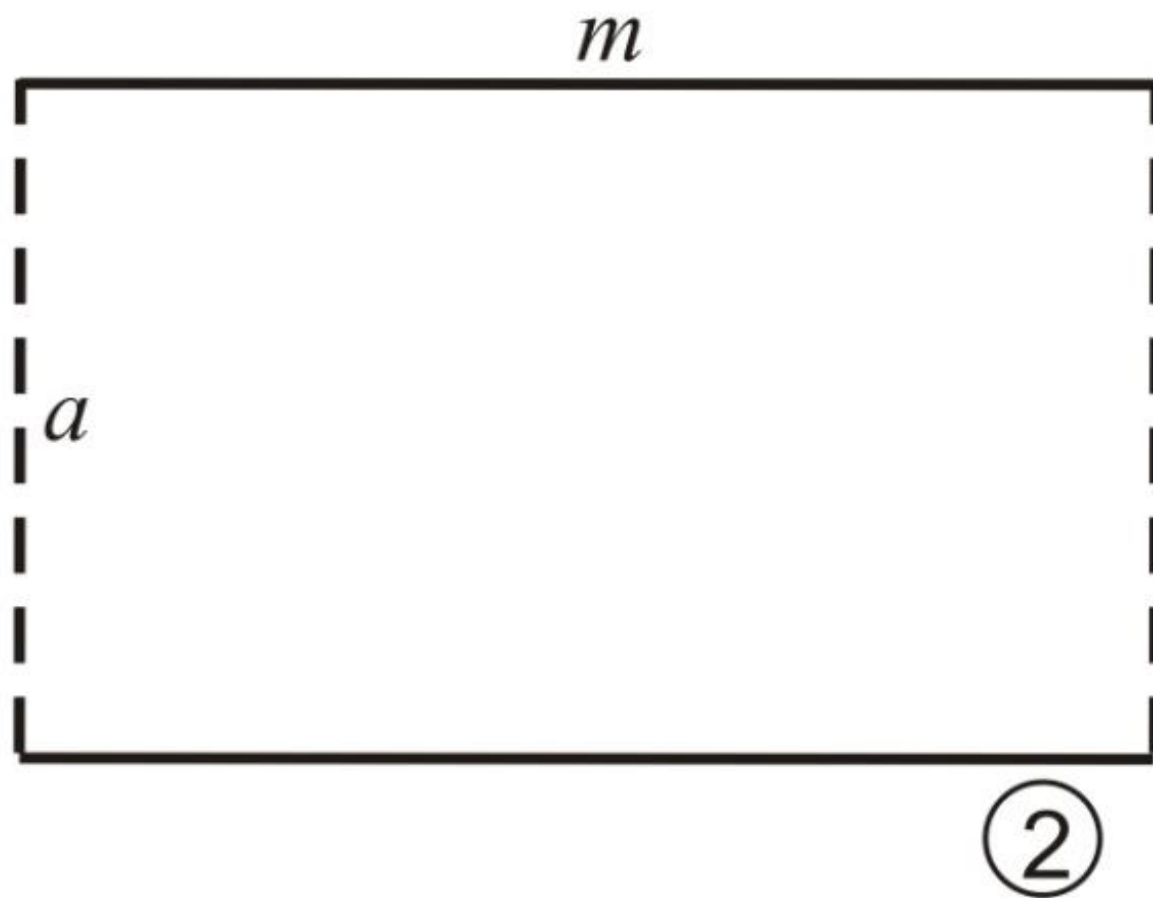


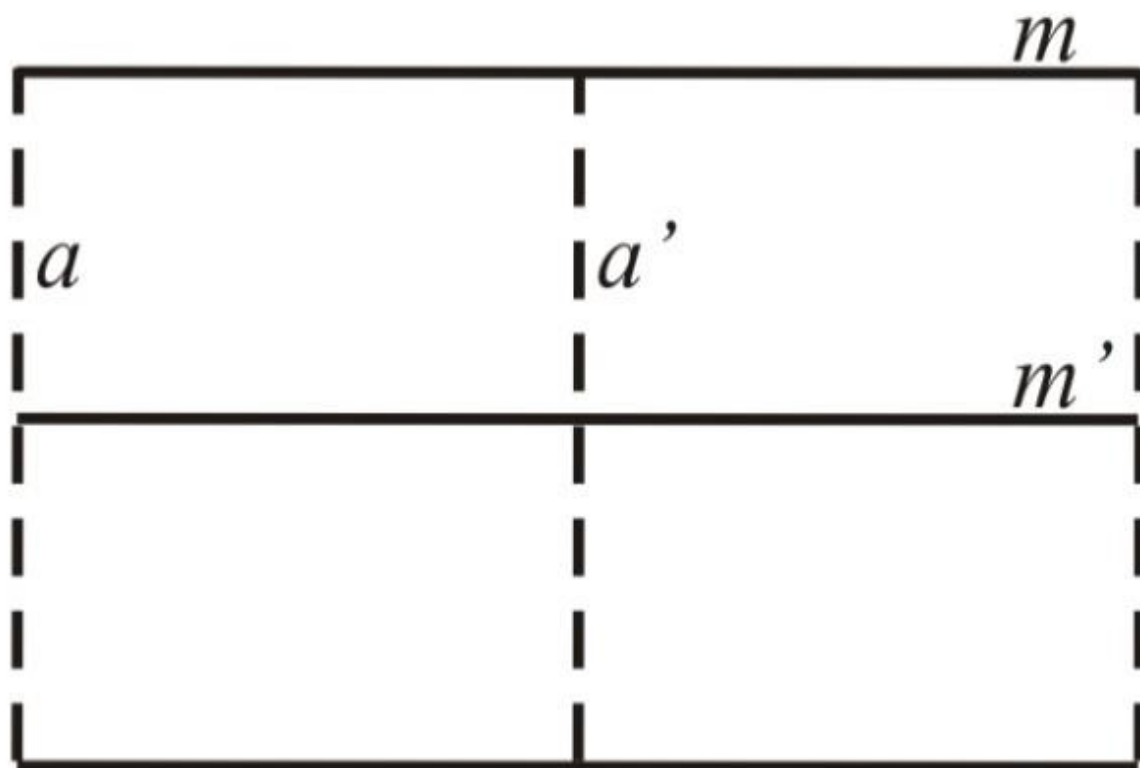
В Интернациональных таблицах в характеристику ПСТ входит еще *позиция Уайкоффа (Wyckoff)* буквенное обозначение. Самая симметричная позиция (с минимальной кратностью) обозначается буквой *a*. В символе Уайкоффа независимые позиции даже с одинаковыми характеристиками, различающиеся лишь координатами,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

Этапы построения
графика группы
Ptab

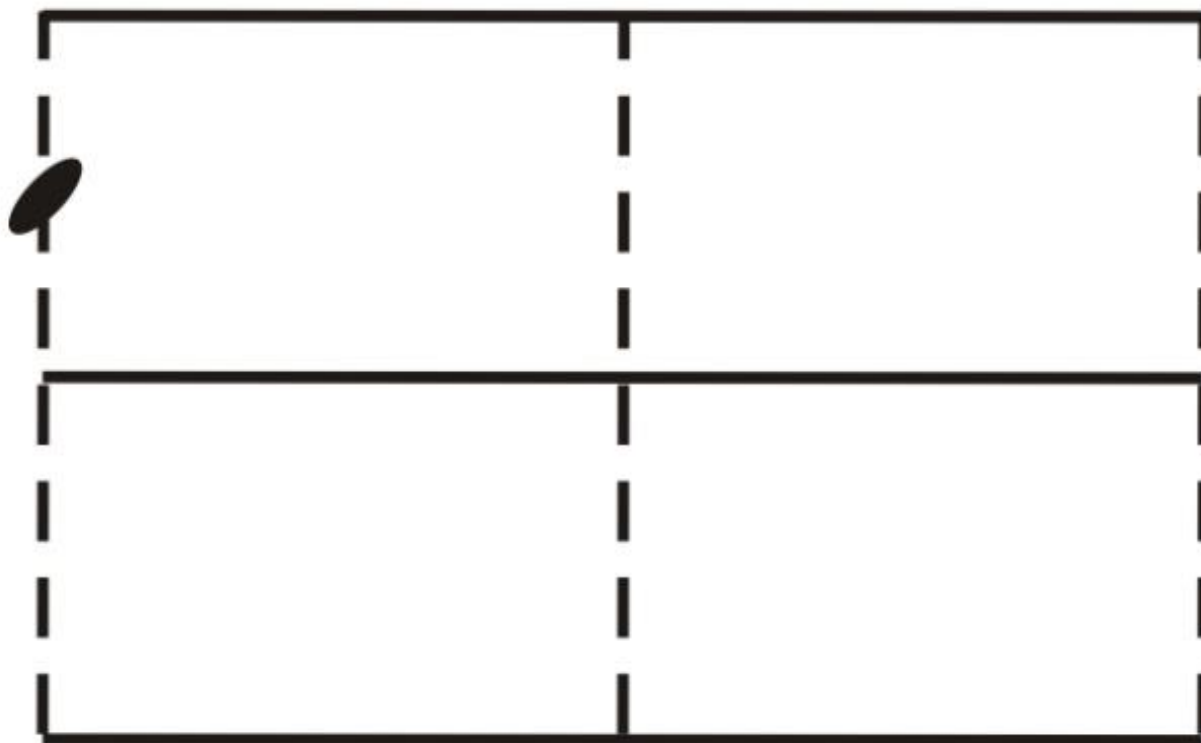
Начнем с
Pta?



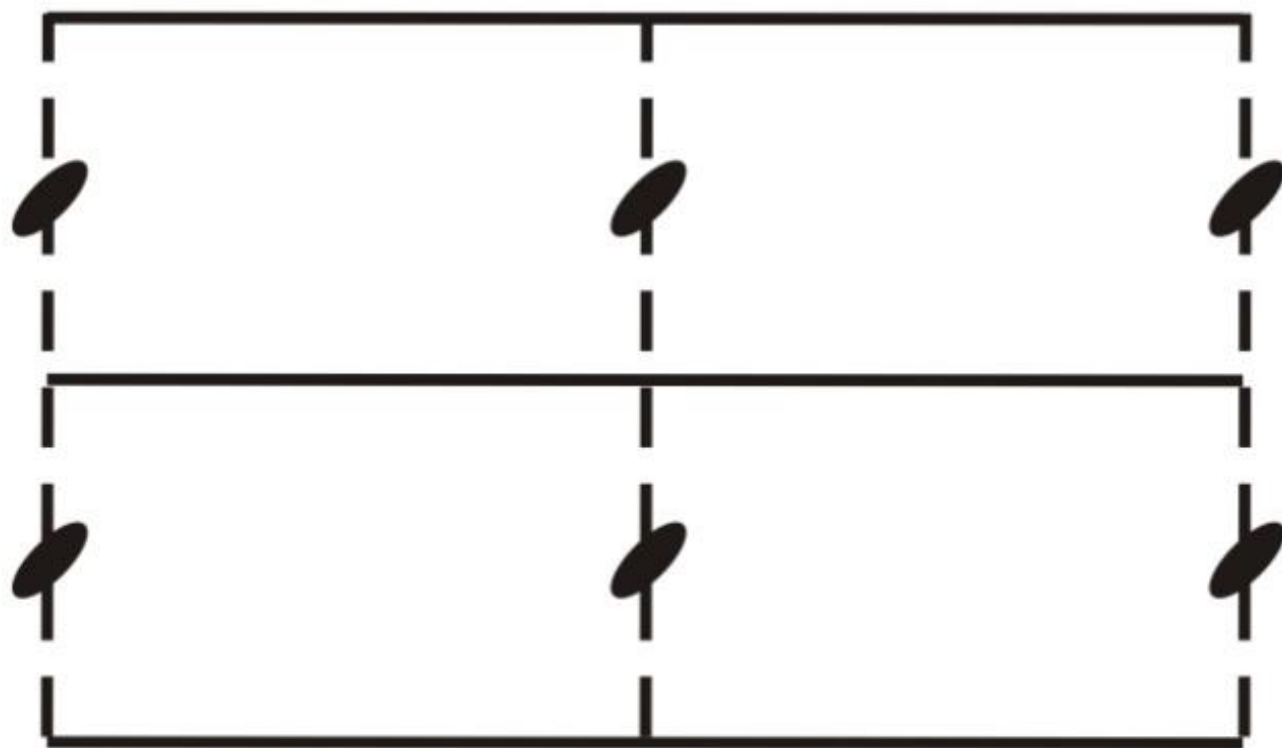




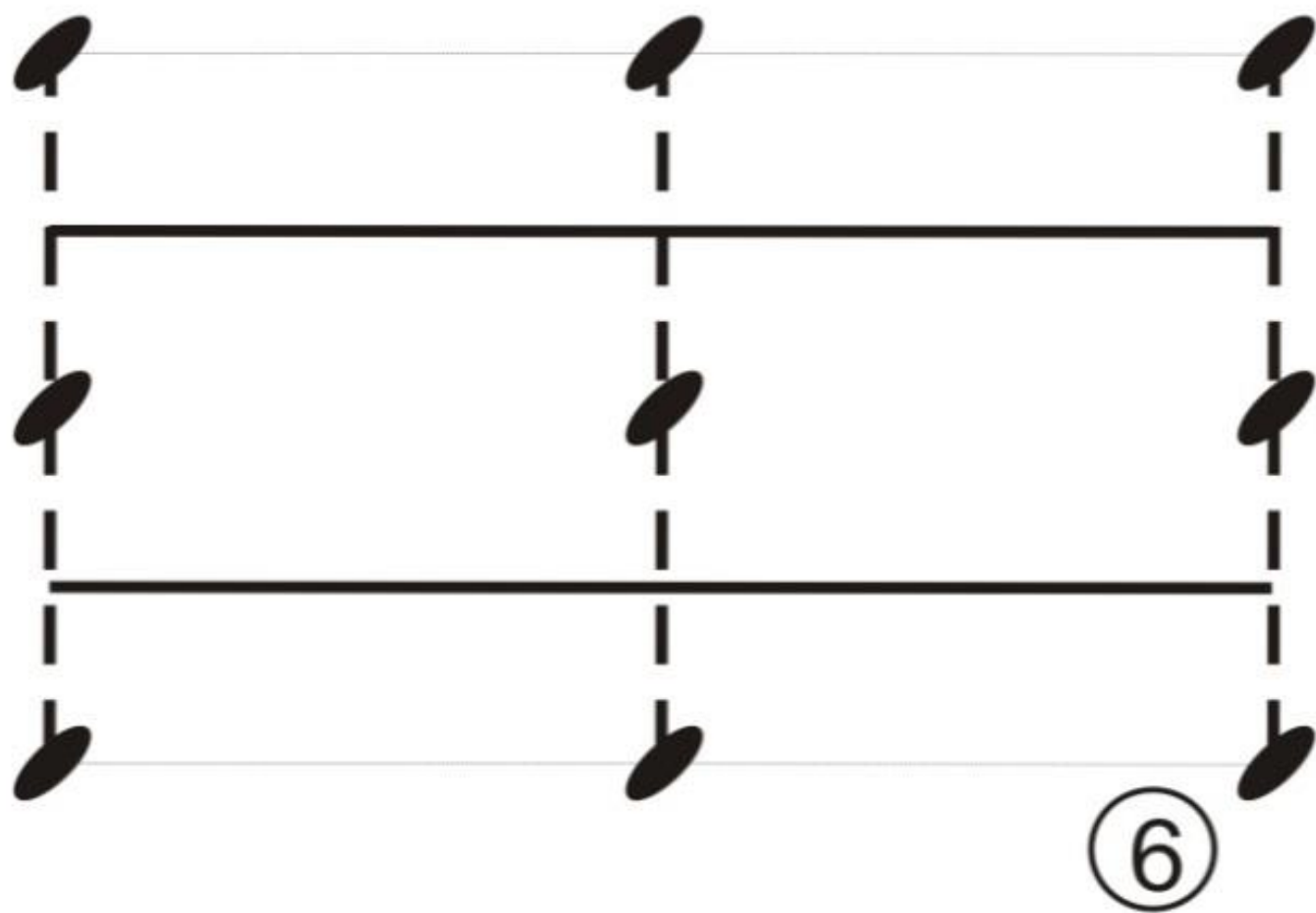
③

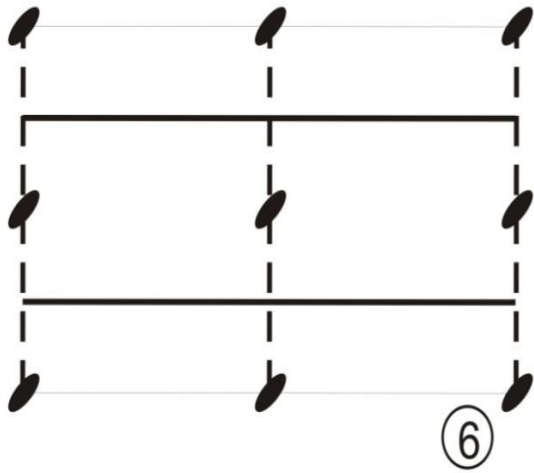


④



5





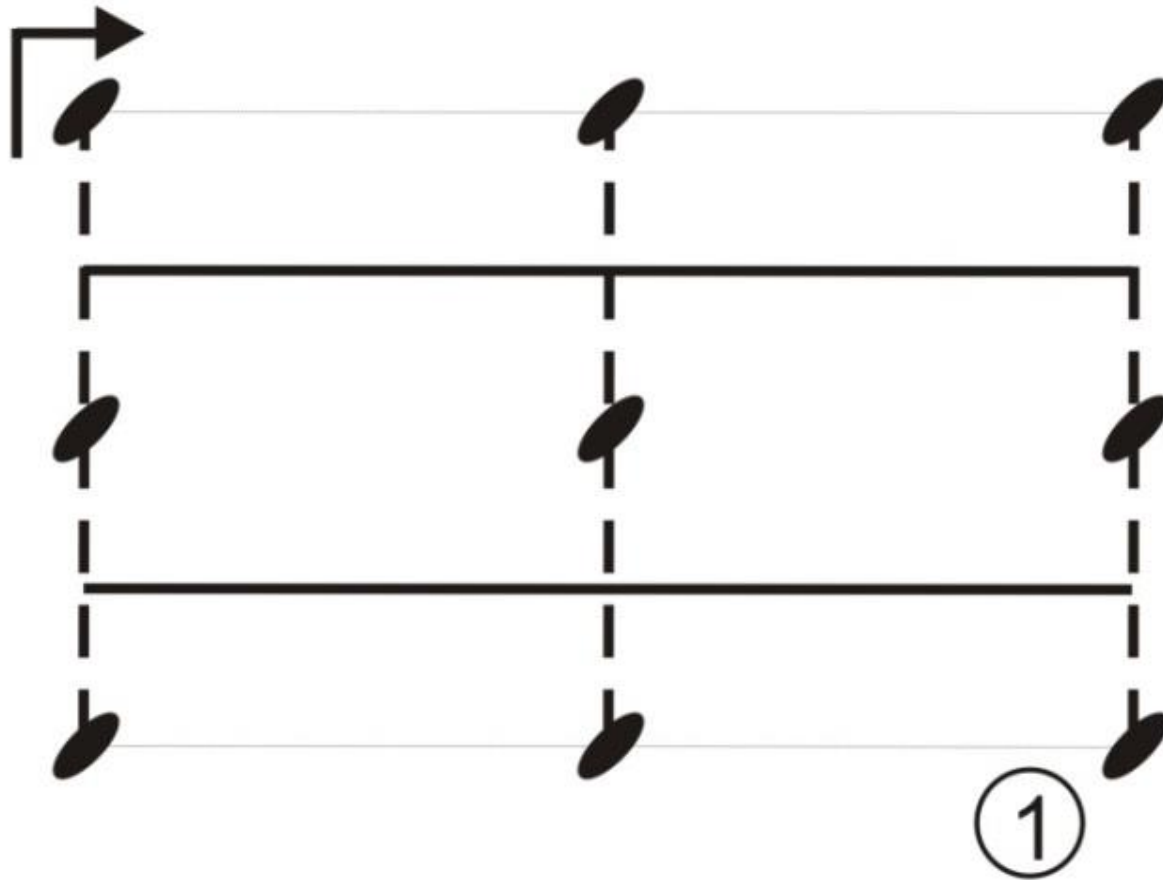
Теперь необходимо дать характеристику всем правильным системам точек этой группы. Для этого необходимо заполнить таблицу

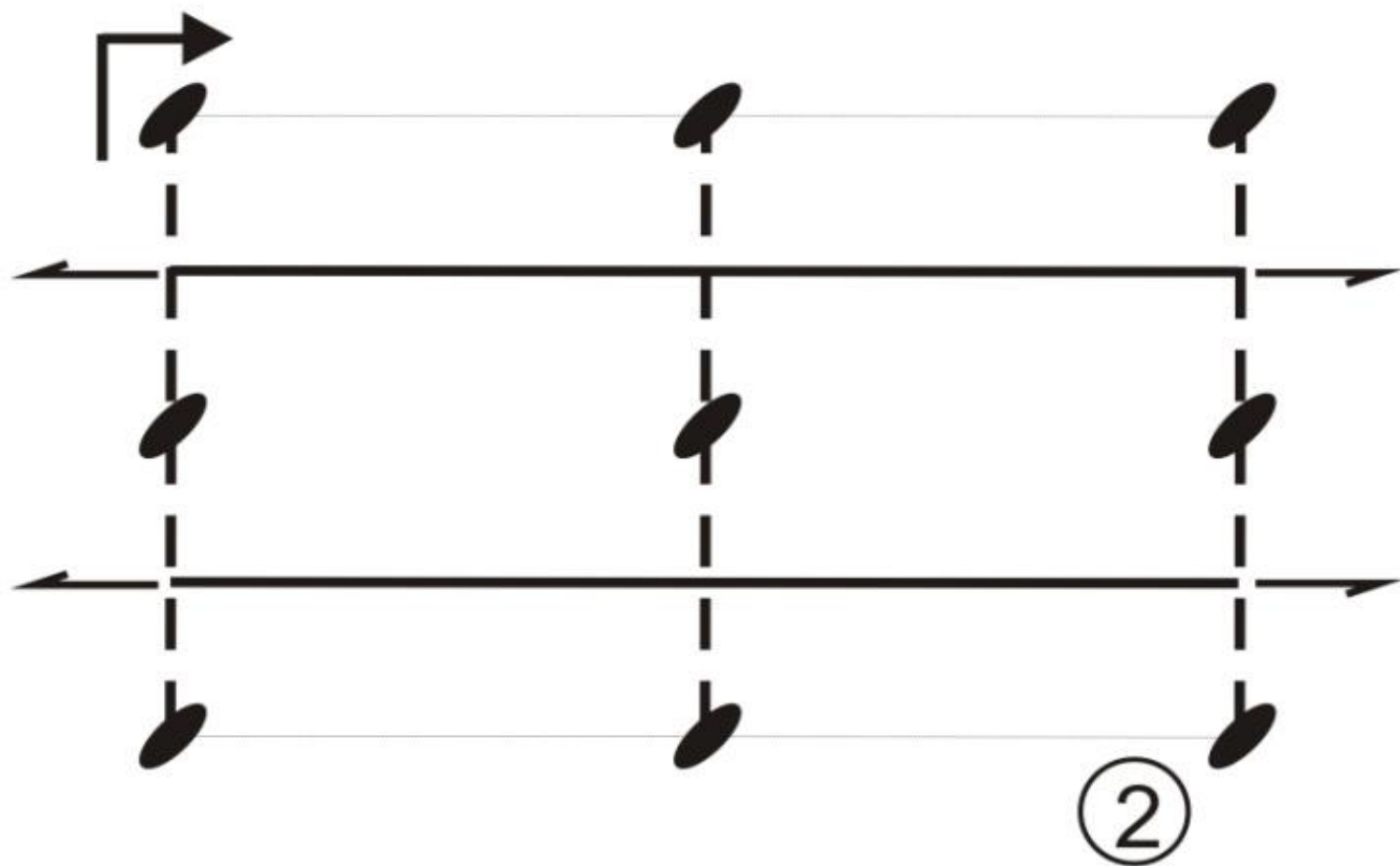
Как видно, в изучаемой группе существует три принципиально разные позиции:

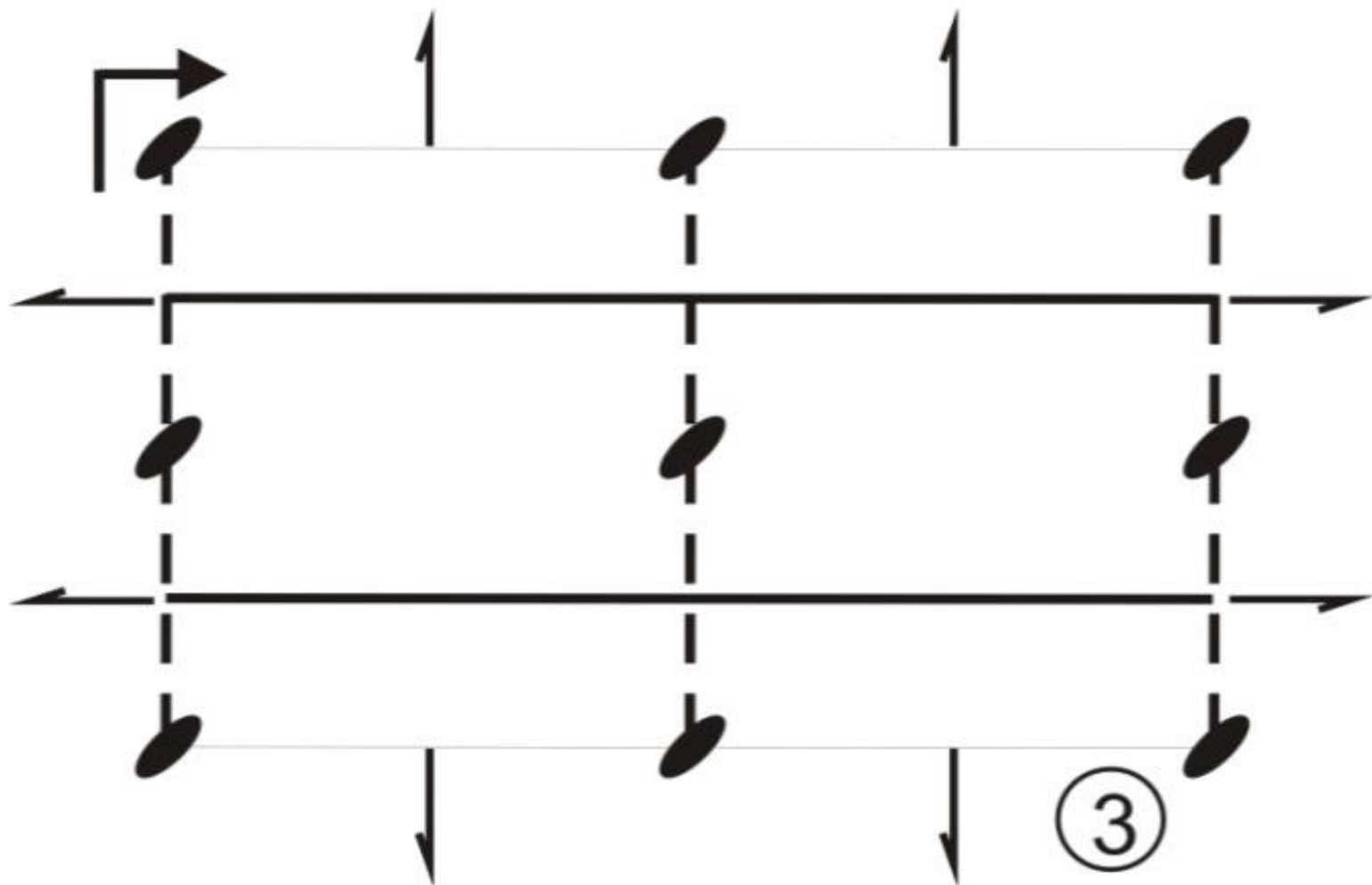
- общего положения с симметрией 1,
- позиция на плоскости m с величиной симметрии 2
- позиция на оси второго порядка, также с симметрией 2.

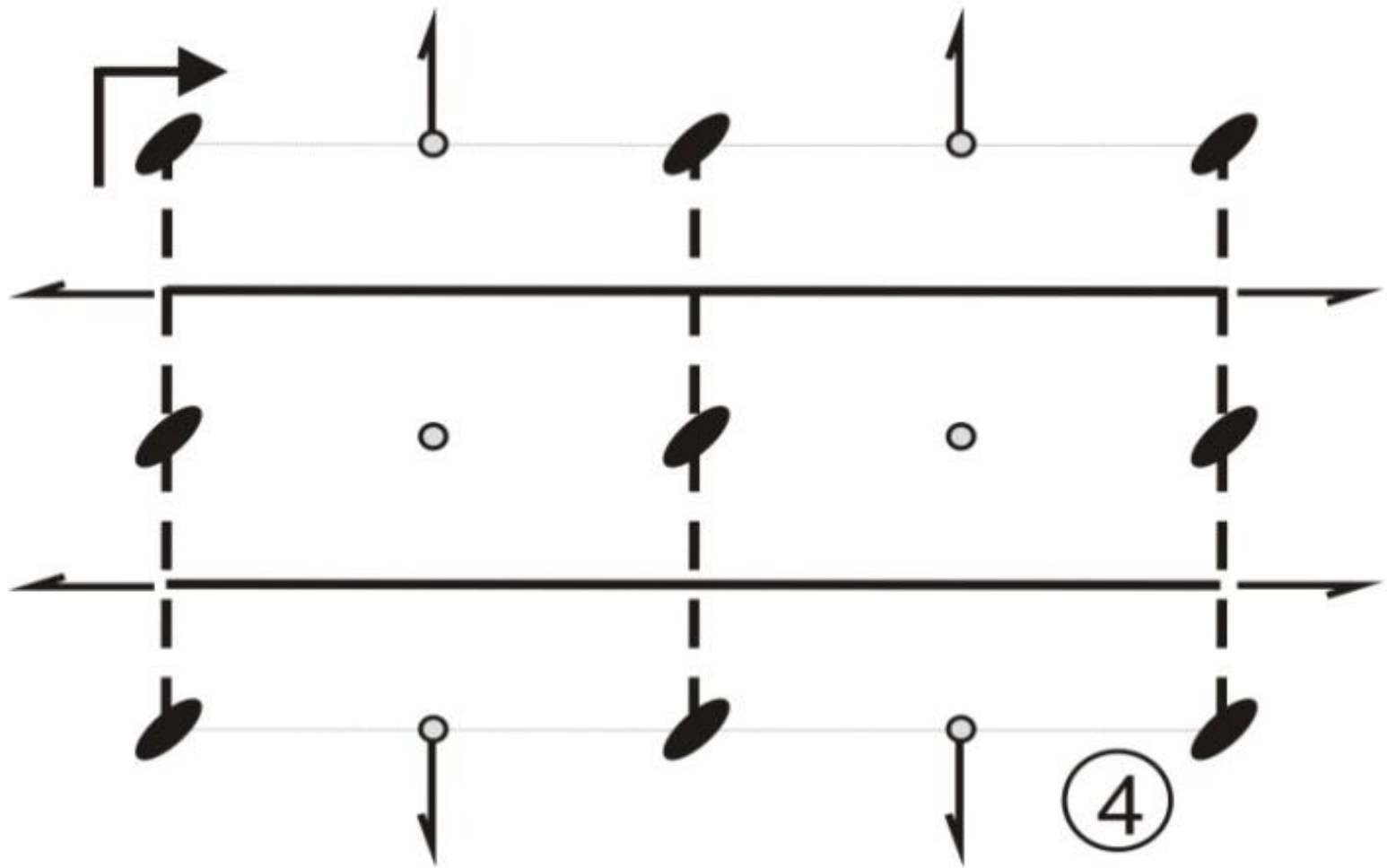
№ позиции	Собственная симметрия позиции (ССП)	Величина симметрии позиции (ВСП)	Число степеней свободы (ЧСС)	Кратность (Порядок группы / ВСП)	Координаты
1	1	1	3 (<u>xyz</u>)	4/1 = 4	
2	<i>m</i>	2	2(<u>yz</u>)	4/2=2	
3	2	2	1(z)	4/2=2	

Группу $Ptab$ можно получить добавлением к уже разобранной группе $Pta2$ **горизонтальной** плоскости скользящего отражения b

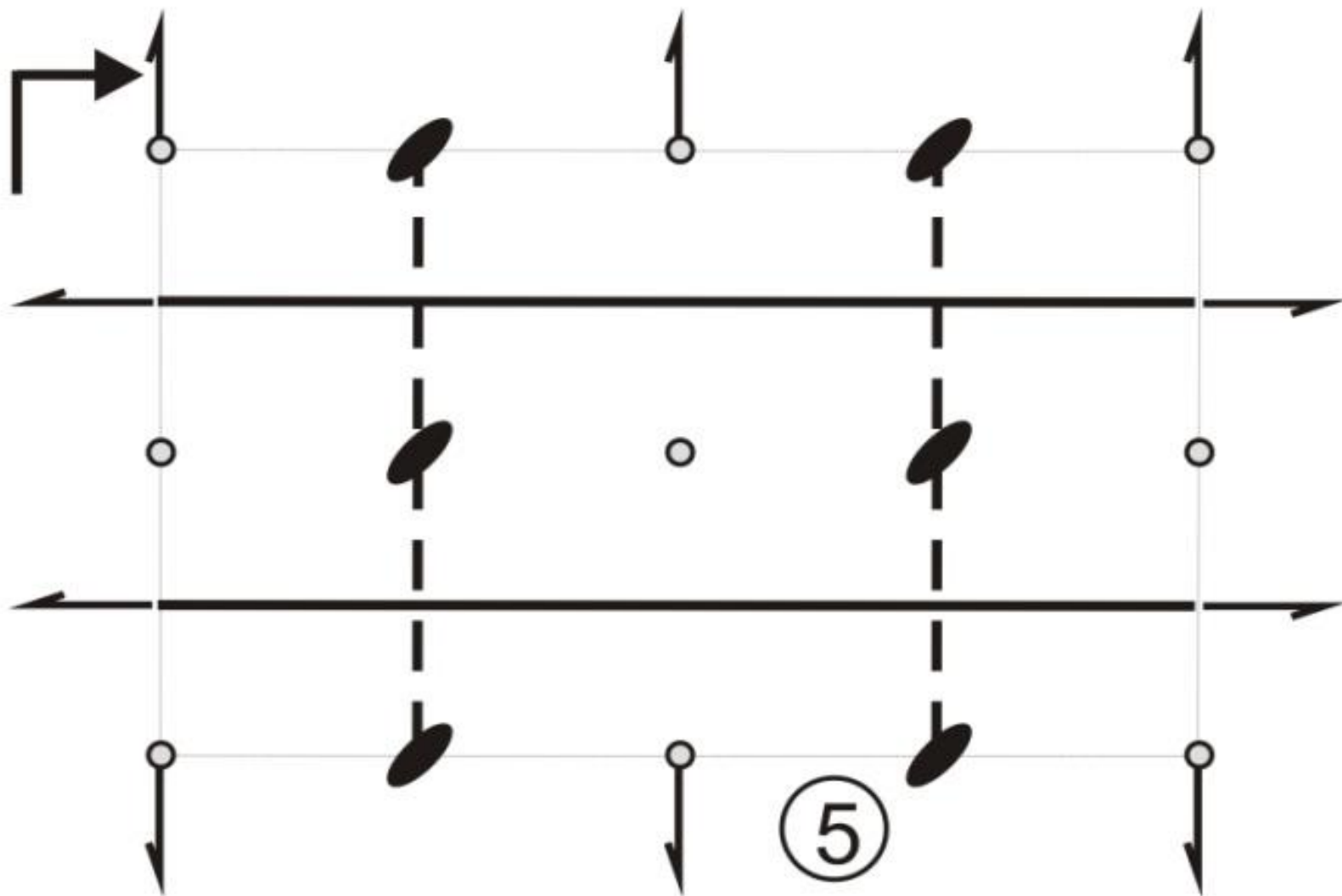


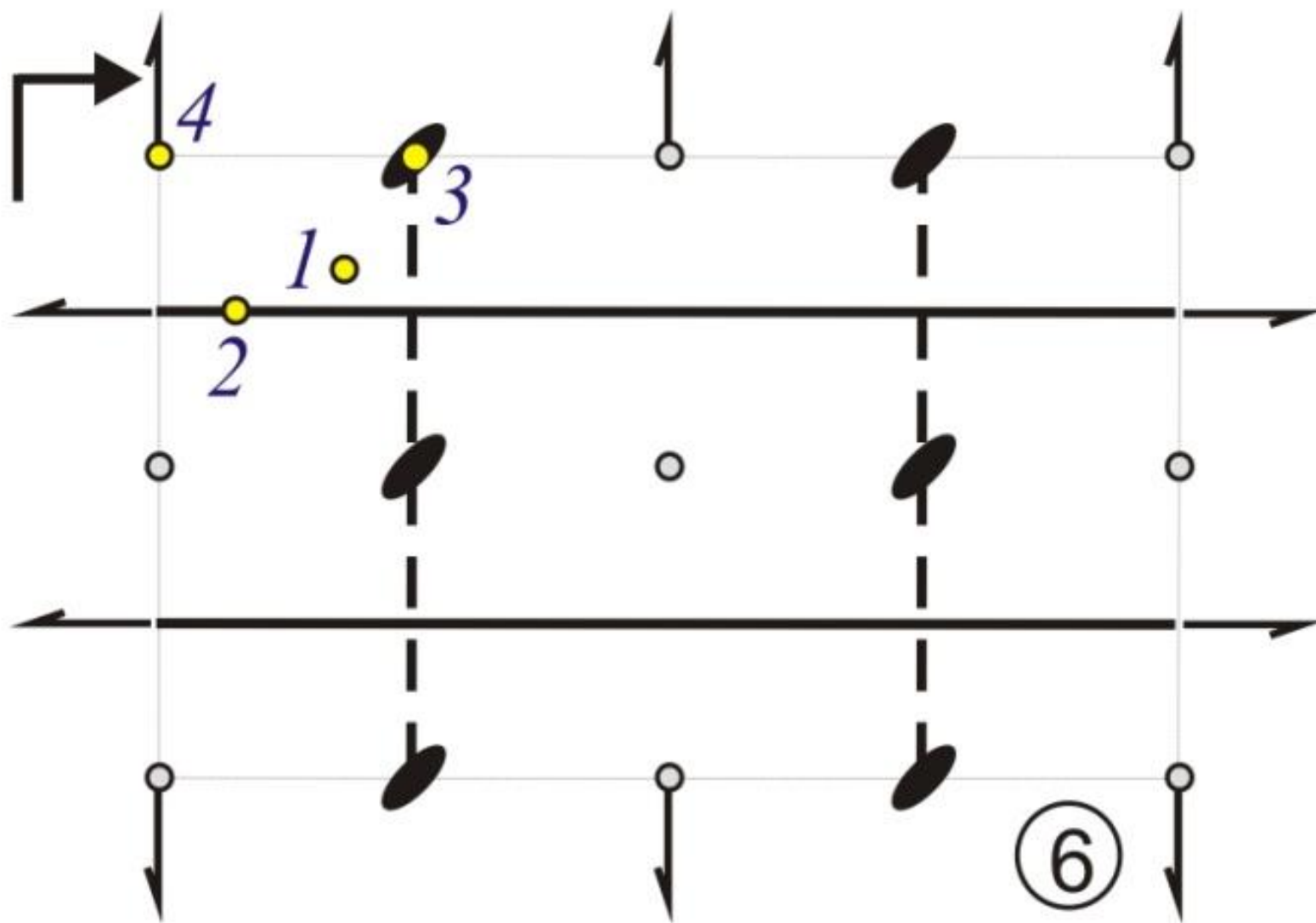


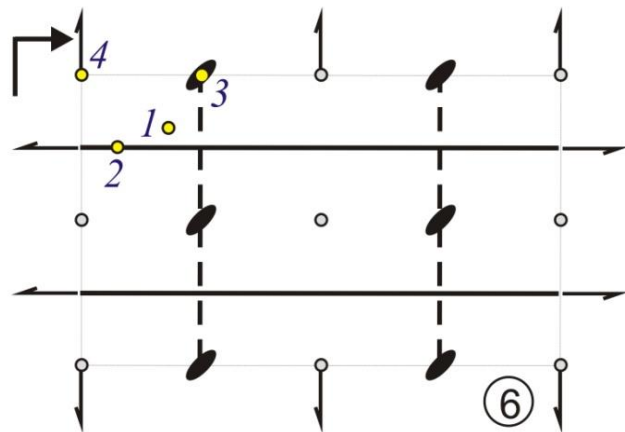




Следующим шагом является нахождение центра инверсии, который в этом классе должен неизбежно появиться три раза как результат взаимодействия $m_x \times 2_{1x}$, $b_z \times 2_z$ и $a_y \times 2_{1y}$. Для фиксации центра достаточно взять любую пару. Например, $b_z \times 2_z$

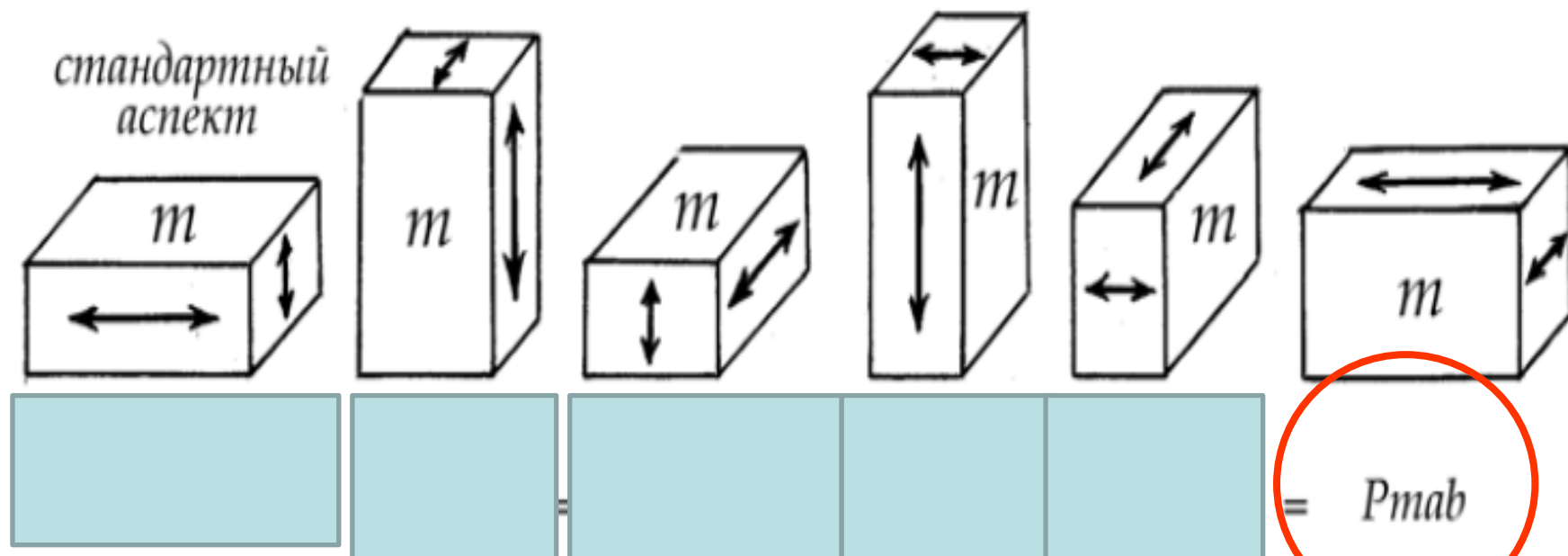






№ позиции	Собственная симметрия позиции (ССП)	Величина симметрии позиции (ВСП)	Число степеней свободы (ЧСС)	Кратность (Порядок группы / ВСП)	Координаты
1	1	1	3 (<u>xyz</u>)	$8/1 = 8$	
2	m	2	2(<u>yz</u>)	$8/2 = 4$	
3	2	2	1(z)	$8/2 = 4$	
4	$\bar{1}$	2	0	$8/2 = 4$	

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

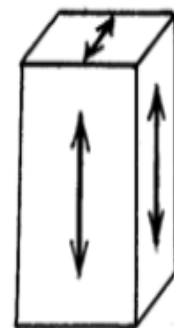


Плоскости скользящего отражения a , b и c с трансляционной компонентой, ориентированной вдоль одной из координатных осей, изменяют свои наименования в зависимости от той или иной ориентации их компонент.

Обозначения же плоскостей

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

Возьмите детский кубик и клейте на него стрелки!

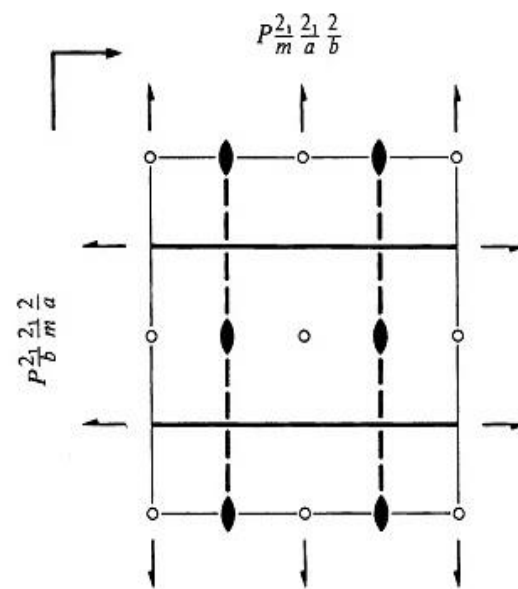
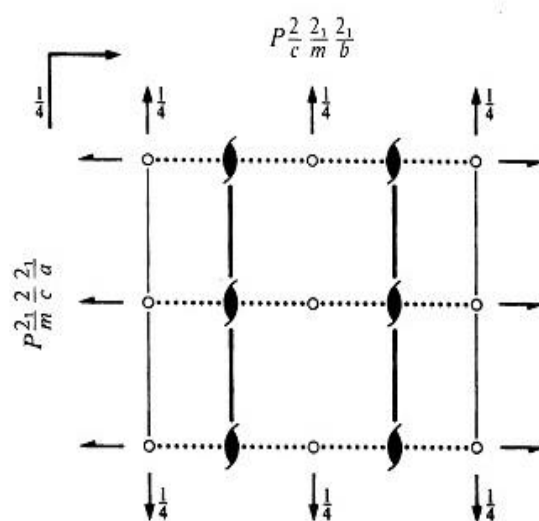
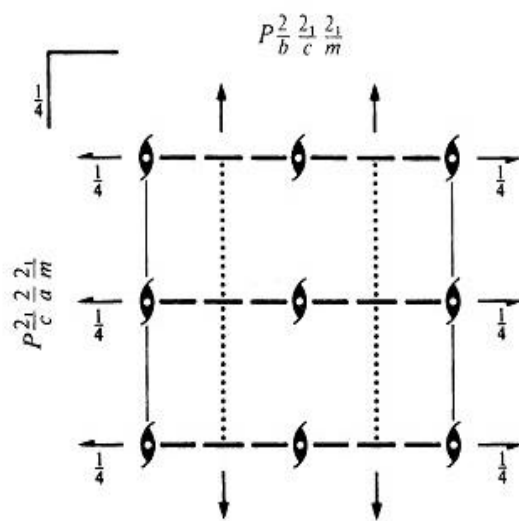


Pbcm

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!

