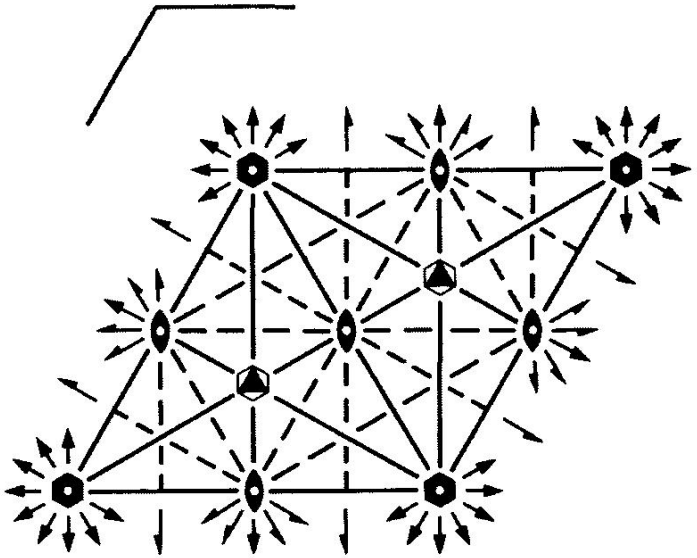
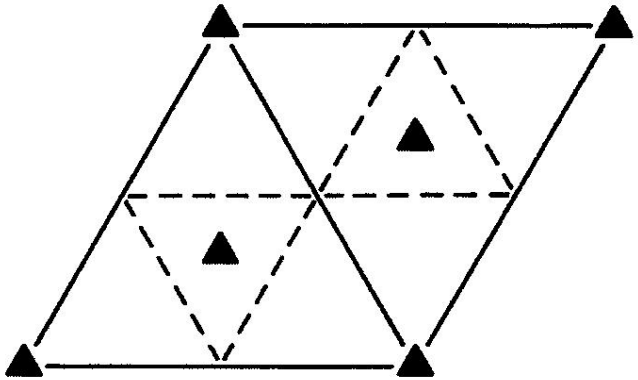
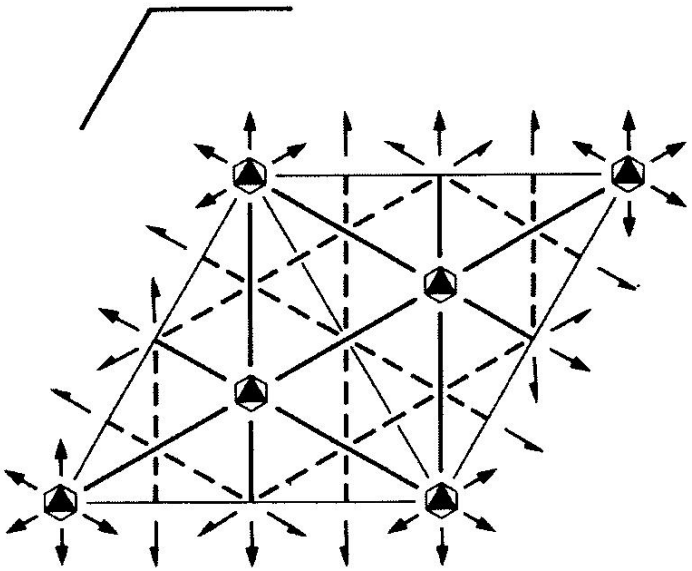
Построение графиков пространственных групп

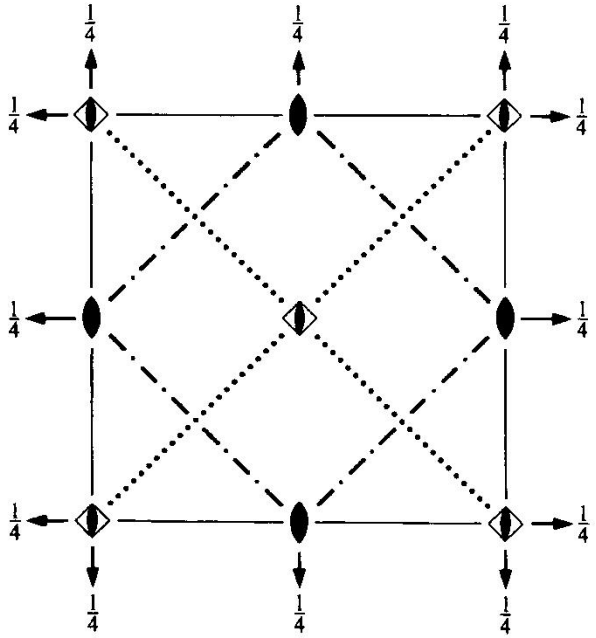
Сингонии и решетки Браве в трехмерном случае

Сингония	кристаллографические классы		Параметры ячейки	Тип центриров.
	голоэдр.группы	подгруппы		
триклинная	$\bar{1}$	1	a,b,c,α,β,γ– произвольные	P
моноклинная	2/m	2, m	a,b,c – любые, α=γ=90° ≠β	P, C (A)
ортогональная	mmm	mm2, 222	a,b,c – любые α=β=γ=90°	P, A (B,C), I, F
тетрагональная	4/mmm	4, $\bar{4}$, 4/m, 4mm, 422, $\bar{4}$2m	a=b≠c α=β=γ=90°	P, I
тригональная	$\bar{3}$m	3, $\bar{3}$, 3m, 32	a=b=c, α=β=γ ≠90°	P или «гексагон»R
гексагональная	6/mmm	6, $\bar{6}$, 6/m, 6mm 622, $\bar{6}$m2	a=b≠c α=β=90°, γ=120°	P
кубическая	m $\bar{3}$ m	23, m $\bar{3}$, $\bar{4}$3m, 432	a=b=c α=β=γ=90°	P, I, F





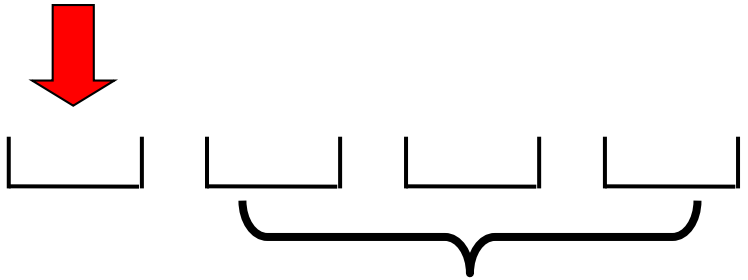




Примеры графиков пространственных групп средней категории.
На сингонию указывает набор элементов симметрии (каких именно?)

Международный символ пространственной группы: трансляции + другие элементы симметрии

тип центрирования:
P, A (B,C), I, F или R



Порождающие элементы симметрии кристалла
Порядок записи элементов связан с осями координат и зависит от категории симметрии

Если **в символе группы** только закрытые элементы – **симморфные** пространственные группы.

Если **в символе группы** есть открытые элементы – **несимморфные** пространственные группы

73 Симморфные пространственные группы

Сочетания 32 кристаллографический классов с допустимыми для каждой сингонии типами решеток Браве:

P1, P $\bar{1}$, P2, Pm, P2/m, C2,..., I4/m, F m $\bar{3}$m и т.д.

ЗАДАНИЕ: выпишите все симморфные группы. Сколько групп у вас получилось?

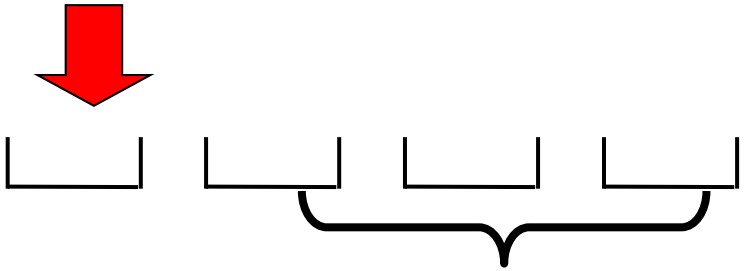
146 Несимморфных пространственных групп
получаются из симморфных –
заменой некоторых или всех
закрытых элементов симметрии
соответствующими открытыми элементами

$P2_1/c$, $Pna2_1$, $P4/nmm$, $P6_3mc$, $Fd\bar{3}m$ и т.д)

219 геометрически различных групп
+ **11** энантиоморфов
($P3_1$ и $P3_2$, $P6_122$ и $P6_522$, и т.д.)
230 пространственных (федоровских) групп

Символ пространственной группы

тип центрирования решетки
P, A (B,C), I, F или R

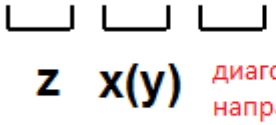


главные элементы симметрии кристалла по Герману–Могену

Низшая категория

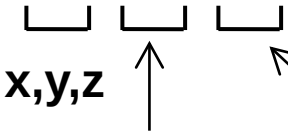


Средняя категория



диагональное направление: угол 180/n с координатным

Высшая категория



3 или $\bar{3}$

Диагональные направления

Информация в символе пространственной группы

Для групп низшей категории элементы симметрии связаны с осями X,Y, Z. В данном примере плоскость ***b*** – расположена перпендикулярно осиX, Плоскость ***c*** – перпендикулярно Y, плоскость **a** – перпендикулярно Z

P bca ⟶ **mmm**

примитивная решетка

кристаллографический класс *mmm, отвечает низшей категории,* орторомбическая сингония

Кратность общей орбиты $8 \times 1 = 8$

Кратность общей орбиты = *порядок кристаллографической точечной группы с учетом множителя, равному количеству узлов в решетке*

Информация в символе пространственной группы

$$I\,4_1/amd \longrightarrow 4/mmm$$

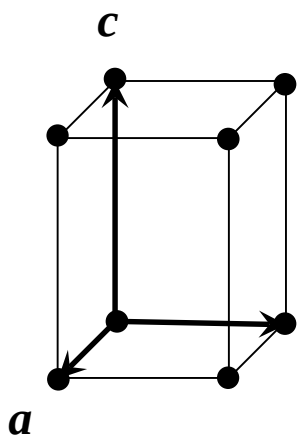
объемноцентрированная решетка (×2)

тетрагональная сингония

кратность общей орбиты 16 × 2 = 32

Кратность общей орбиты = *порядок кристаллографической точечной группы x количество узлов в решетке*

Число узлов в элементарной ячейке при разных центрировках решетки



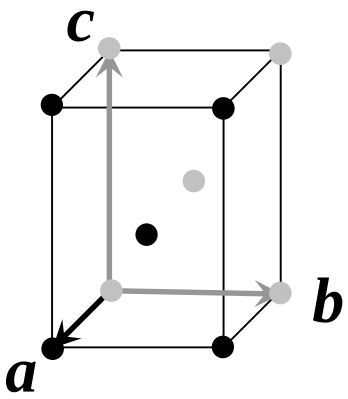
Примитивная

P

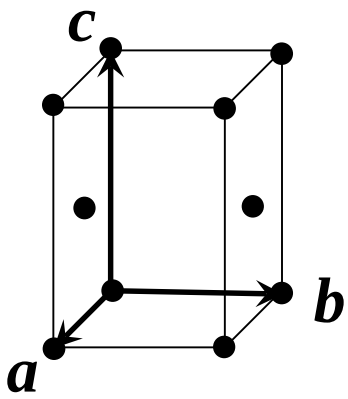
K = 1

Бокоцентрированная
(базоцентрированная)

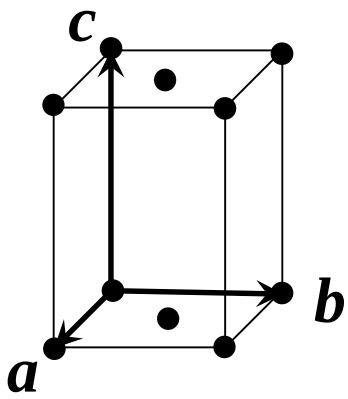
K = 2



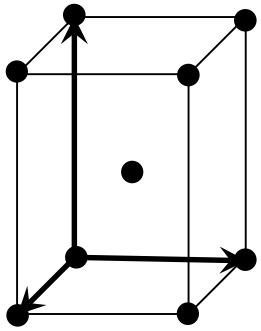
A



B



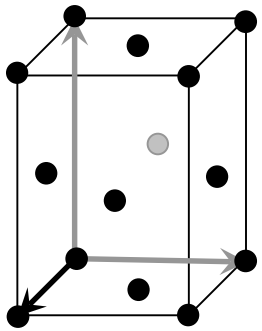
C



I

K = 2

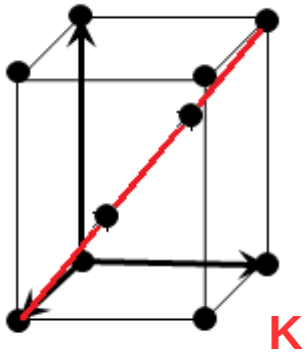
Объемноцентрированная



F

K = 4

Гранецентрированная



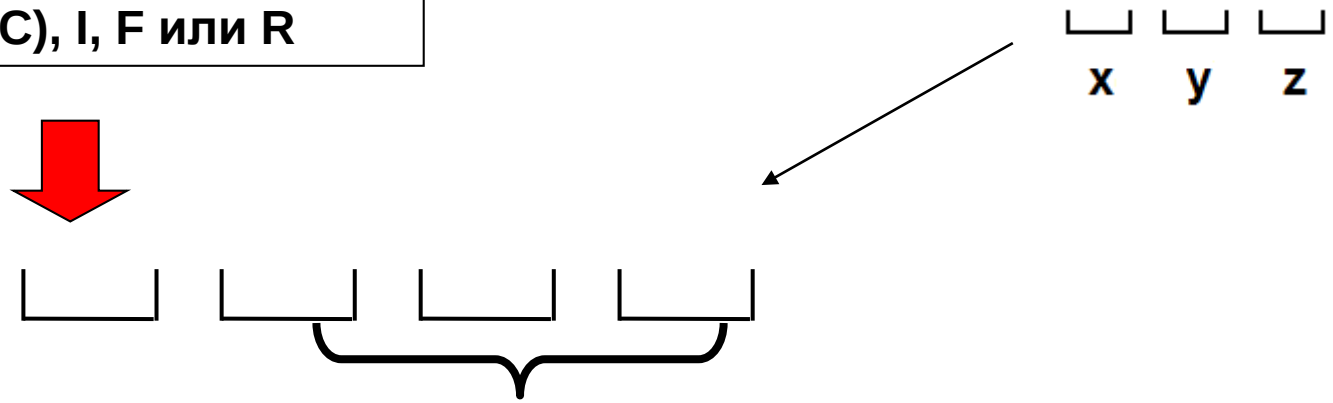
R

K = 3

Дваждыобъемно
центрированная

Низшая категория

тип центрирования решетки
P, A (B,C), I, F или R



главные элементы симметрии кристалла по Герману–Могену

P 1 2 1 = P2

C 2/m 2/m 2/m = Cmmm

График пространственной группы - расположение элементов симметрии в элементарной ячейке кристалла

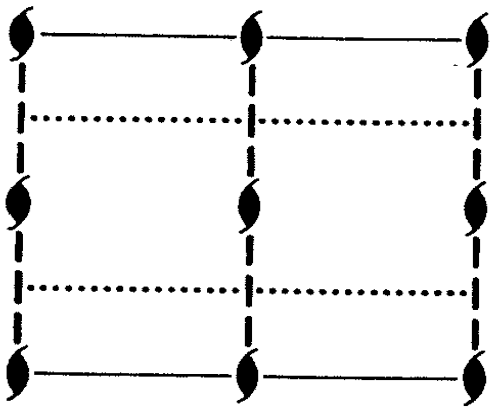
Элемент симметрии 2-го порядка

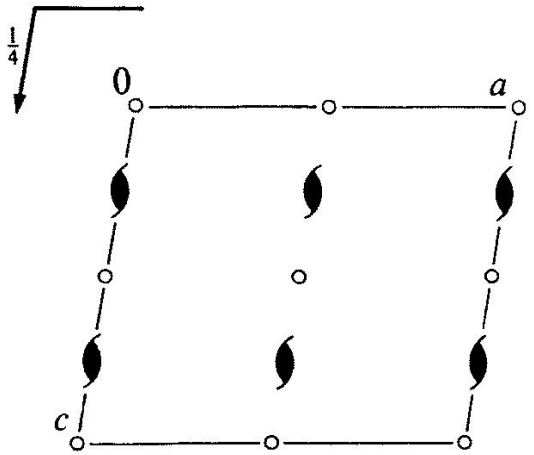
(m, 2, $\bar{1}$, 2_1, a, b, c, n, d, e)

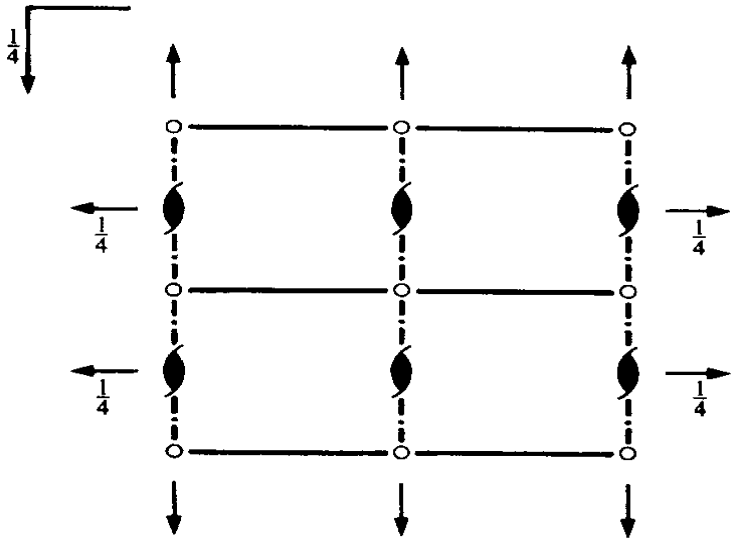
+ координатная трансляция $t_\perp$ =

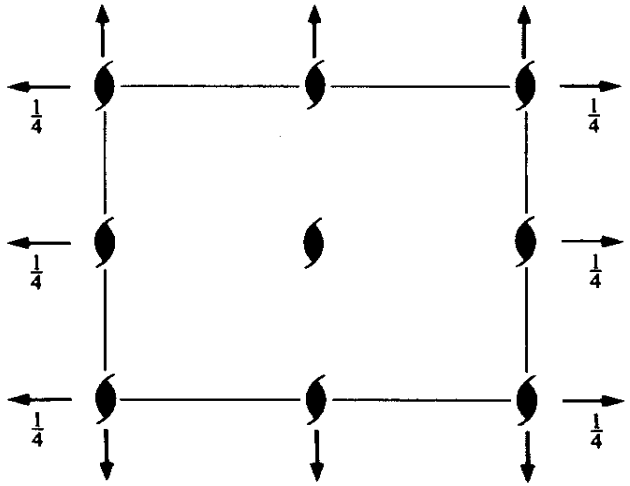
перенос элемента + появление такого же элемента на середине $t_\perp$

Примеры графиков групп низшей категории. К каким кристаллическим классам относятся данные группы?



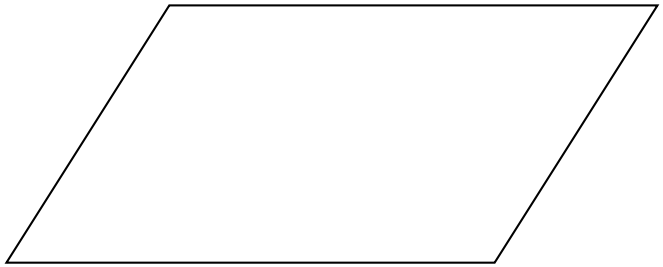




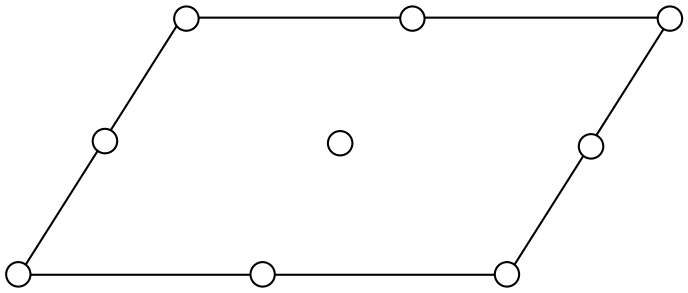


Триклинная сингония

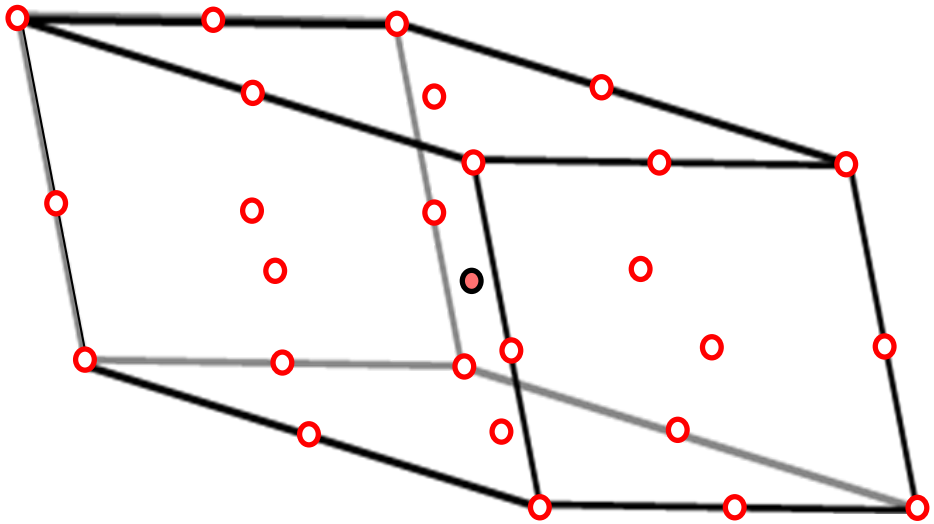
косоугольные проекции:



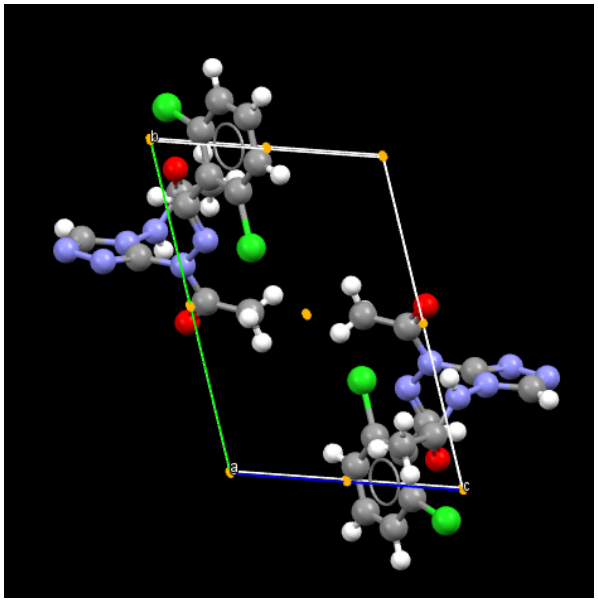
группа P 1



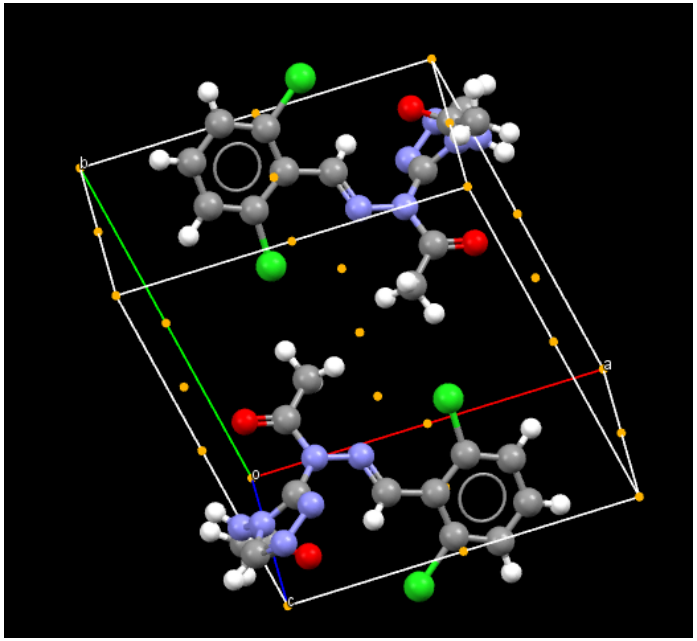
группа P $\bar{1}$

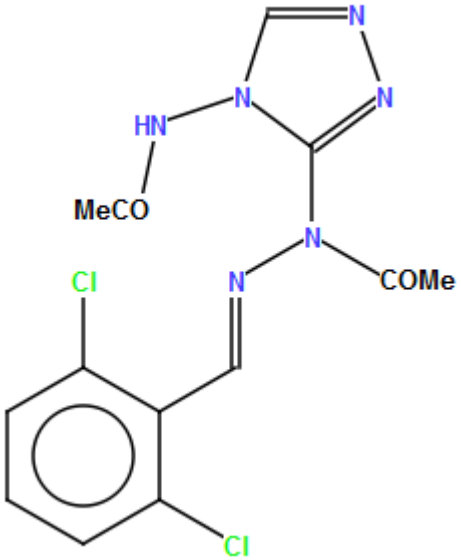


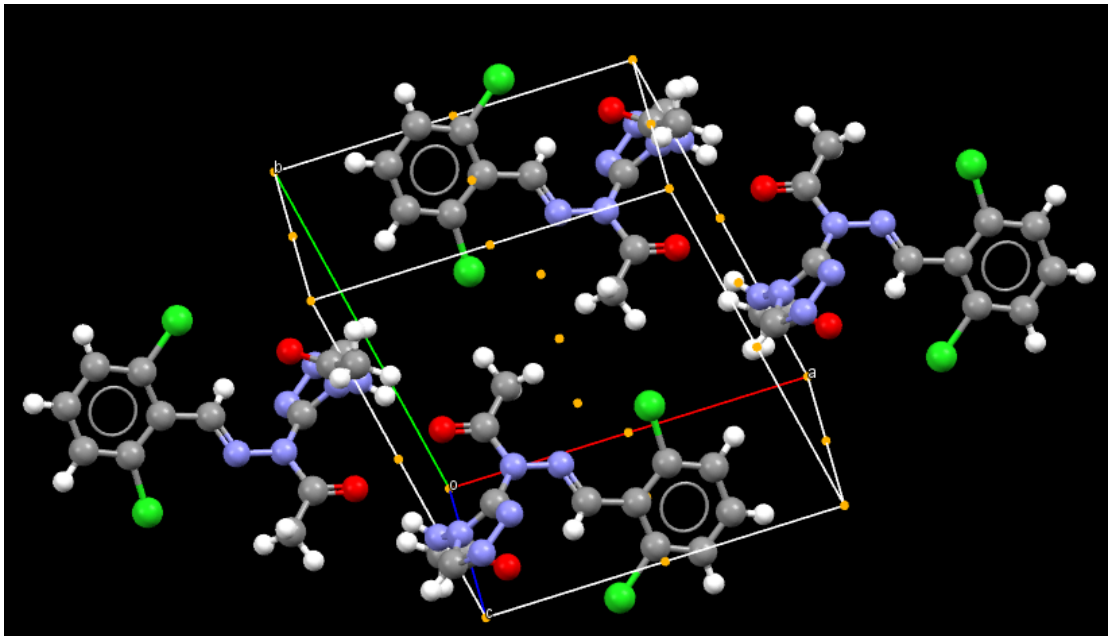
Расположение центров инверсии в элементарной ячейке группы P $\bar{1}$ (**восемь** симметрически независимых центров)



группа P $\bar{1}$







Моноклинная сингония:

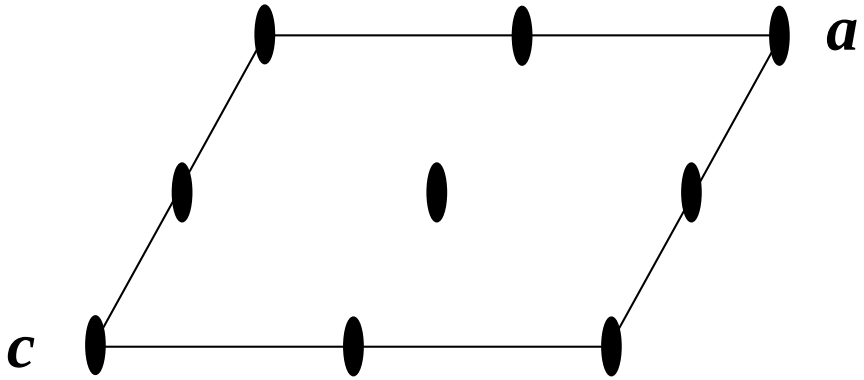


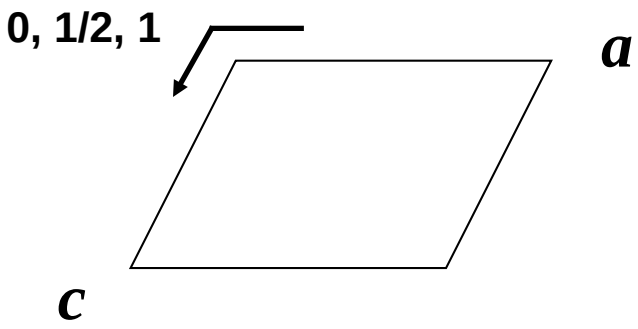
график группы P2 (проекция вдоль *b*)

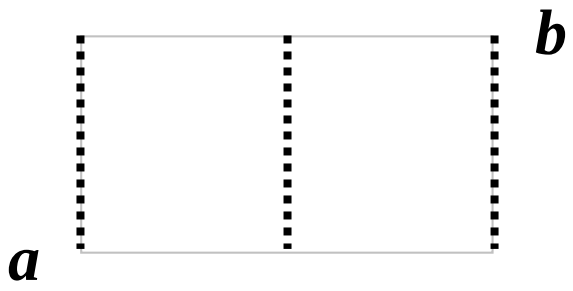
На занятии 16.03.2020 мы также изобразили график этой группы в двух других проекциях. И разобрали орбиты этой группы.

Самостоятельно: изобразить график график группы $P2_1$ (все проекции) и разобрать орбиты. Нанести на графики точки, принадлежащие разным орбитам.

Моноклинная сингония:

группа *Pc*





ЗАДАНИЕ: изобразить третью проекцию группы *Pc*
и разобрать орбиты этой группы.

ЗАДАНИЕ: с учетом того, что уже известны графики групп P2, $P2_1$, Pc, самостоятельно изобразить графики:
P2/m, $P2_1$/m, $P2_1$/c в 3-х проекциях, разобрать орбиты.

НОВЫЙ МАТЕРИАЛ: ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОСЕЙ 2 ПОРЯДКА И ПЛОСКОСТЕЙ С НАКЛОННОЙ ТРАНСЛЯЦИЕЙ

Элемент симметрии + наклонная трансляция

$\mathbf{t} = \mathbf{t}_{\parallel} + \mathbf{t}_{\perp}$:

$\mathbf{t}_{\parallel}$ «вливается», образуя новый элемент,

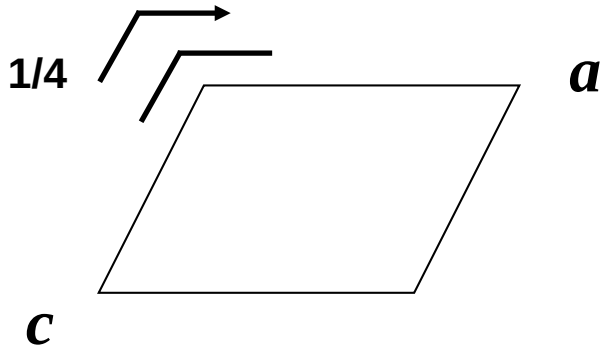
$\mathbf{t}_{\perp}$ переносит новый элемент на $t_{\perp}/2$

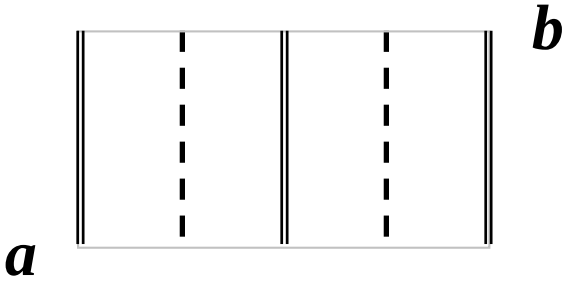
Моноклинные базоцентрированные C-решетки: появляется трансляция $t_C = a/2+b/2$

Группа **Cm**: группа **Pm** + t_C

a/2 **+** пл-сть ***m*** → пл-сть ***a***

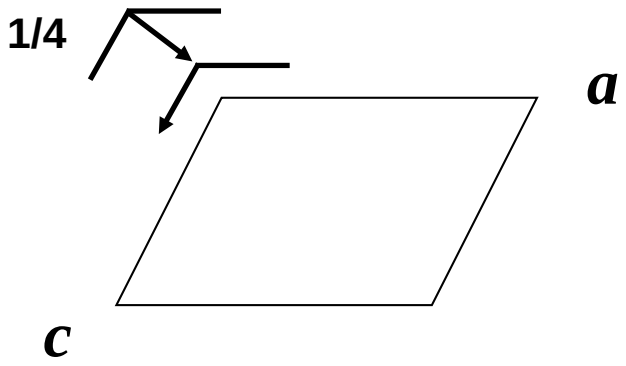
b/2 **+** пл-сть ***a*** → сдвиг на b/4



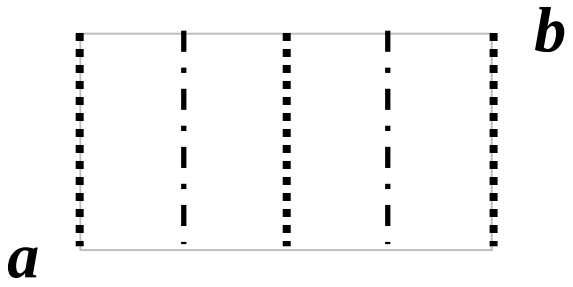


Группа **Cc**: группа **Pc** + t_C

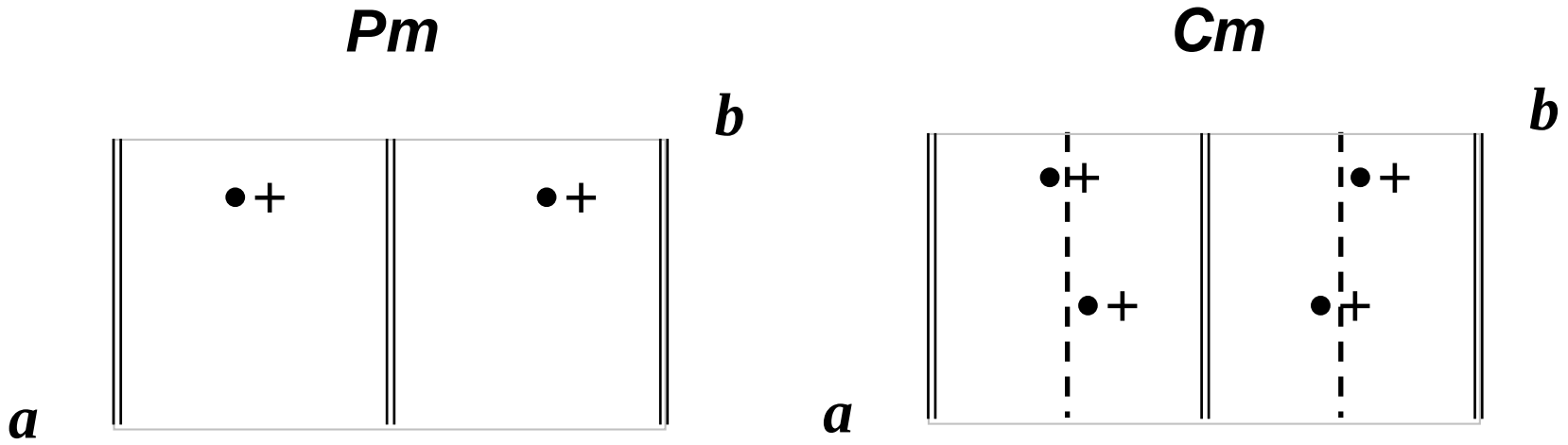
a/2 **+** пл-сть ***c*** → пл-сть ***n***



b/2 **+** пл-сть ***n*** → сдвиг на b/4



Общая орбита в примитивных и центрированных решетках



кратность общего положения в *Cm* вдвое выше, чем в *Pm*

A, B, C, I: кратность = порядок класса × 2

R: порядок класса × 3

F: порядок класса × 4

Орбиты пространственных групп

Pmm2

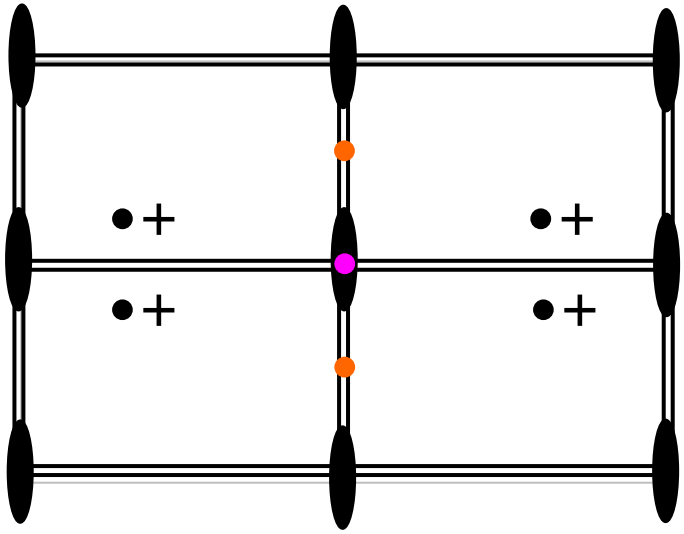
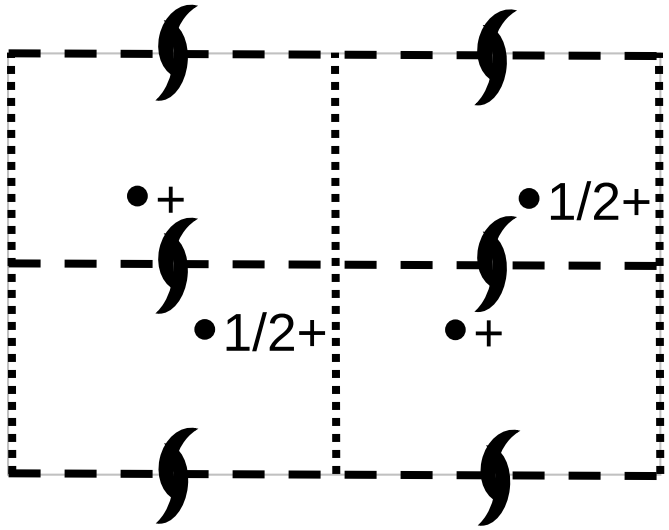


график группы

Pca2$_1$



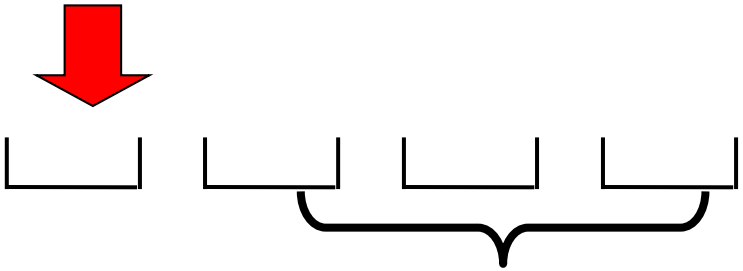
Позиции кратность

1	**4**	**общая**
m	**2**	} **частные**
mm2	**1**	

кратность общих позиций в группах с *P*-решеткой равна порядку кристаллического класса (т.е. группы mm2)

Средняя категория

тип центрирования решетки
P, A (B,C), I, F или R



главные элементы симметрии кристалла по Герману–Могену

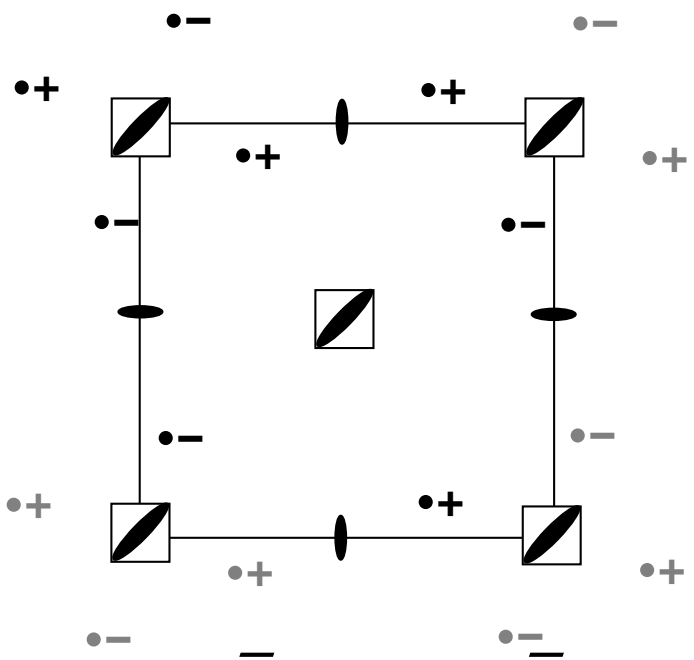


z **x(y)** диагональное направление: угол 180/n с координатным

Элемент симметрии + трансляция $t_{\perp}$: перенос + возникновение элемента

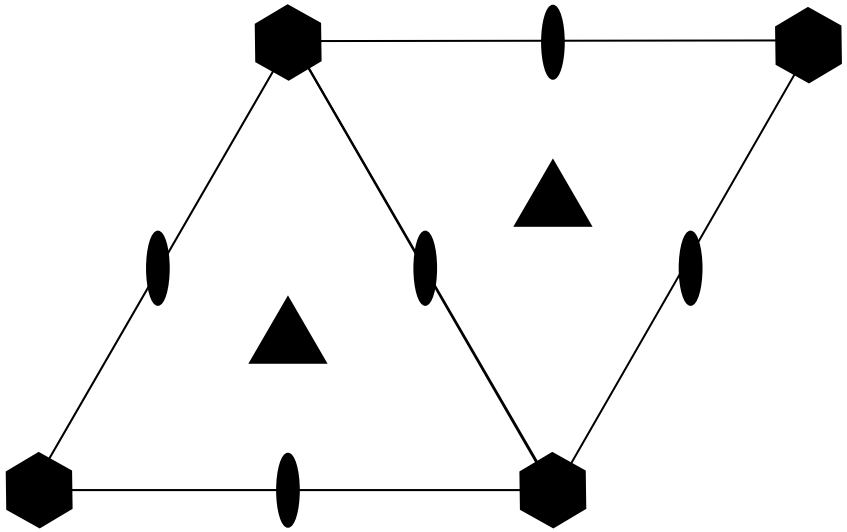
(а) для элементов 2-го порядка (*m*, 2, $\bar{1}$, 2_1, *a(b,c,n), d, e*)
(как закрытых, так и открытых) – такой же элемент на середине $t_{\perp}$

(б) для осей 3 – 6-го порядков – ось порядка n
в центре правильного n-угольника из
трансляций (n = 3, 4)



P $\bar{4}$ 1 1 = P $\bar{4}$

$\bar{4} \supset 2$



P 6

6 $\supset$ 3, 2

$P\,6_2$

$6_2 \supset 3_2, 2$

