International Tables for X-ray Crystallography Volume A

Обозначение и действие элементов симметрии.
Графики 230 пространственных групп и их системы эквивалентных позиций (ПСТ).
Погасания рефлексов, вызванные симметрией.
И многое другое.

International Tables
for X-ray Crystallography
Volume A

краткий международный символ Pnma

символ группы по Шёнфлису: D_{2h}^{16}

Pnma D_{2h}^{16} *mmm* класс Orthorhombic сингония

No. 62

$P\ 2_1/n\ 2_1/m\ 2_1/a$

Patterson symmetry *Pmmm*

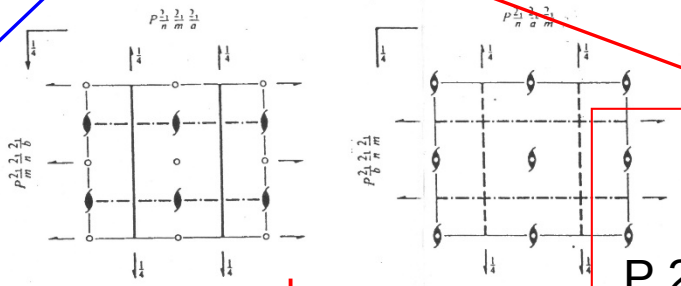
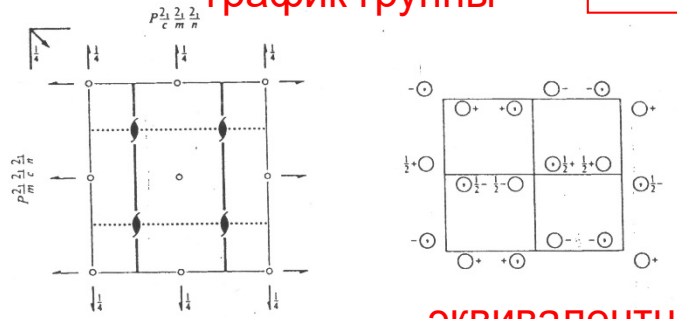


график группы

полный символ
P 2_1/n 2_1/m 2_1/a



эквивалентные позиции

Origin at $\bar{1}$ on 12_11

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{2}$; $0 \le y \le \frac{1}{4}$; $0 \le z \le 1$

Symmetry operations

(1) 1 (2) $2(0,0,\frac{1}{2})$ $\frac{1}{4},0,z$ (3) $2(0,\frac{1}{4},0)$ $0,y,0$ (4) $2(\frac{1}{4},0,0)$ $x,\frac{1}{4},\frac{1}{4}$
(5) $\bar{1}$ 0,0,0 (6) a $x,y,\frac{1}{4}$ (7) m $x,\frac{1}{4},z$ (8) $n(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ $\frac{1}{4},y,z$

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			
8	*d* 1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}$	(4) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$
		(5) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$	(6) $x+\frac{1}{2},y,\bar{z}+\frac{1}{2}$	(7) $x,\bar{y}+\frac{1}{2},z$	(8) $\bar{x}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$
4	*c* .*m*.	$x,\frac{1}{4},z$	$\bar{x}+\frac{1}{2},\frac{3}{4},z+\frac{1}{2}$	$\bar{x},\frac{3}{4},\bar{z}$	$x+\frac{1}{2},\frac{1}{4},\bar{z}+\frac{1}{2}$
4	*b* $\bar{1}$	$0,0,\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,0$	$0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$
4	*a* $\bar{1}$	0,0,0	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$	$0,\frac{1}{2},0$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$

Reflection conditions

General:

$0kl$: $k+l=2n$
$hk0$: $h=2n$
$h00$: $h=2n$
$0k0$: $k=2n$
$00l$: $l=2n$

погасания рефлексов

Special: as above, plus

no extra conditions

hkl : $h+l,k=2n$

hkl : $h+l,k=2n$

Symmetry of special projections

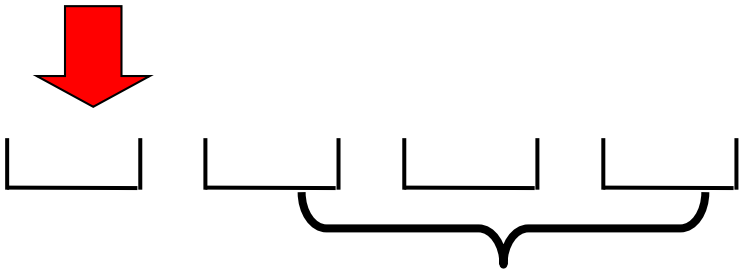
Along [001] *p*2*gm*

Along [100] *c*2*mm*

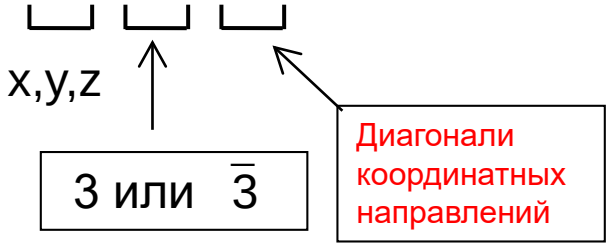
Along [010] *p*2*gg*

Высшая категория

тип центрирования решетки
P, I, F

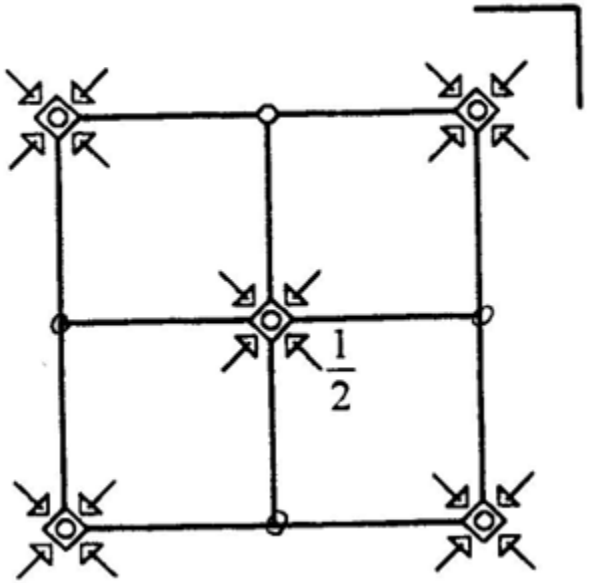


главные элементы симметрии
кристалла по Герману–Могену



Кристаллический класс m $\bar{3}$ m



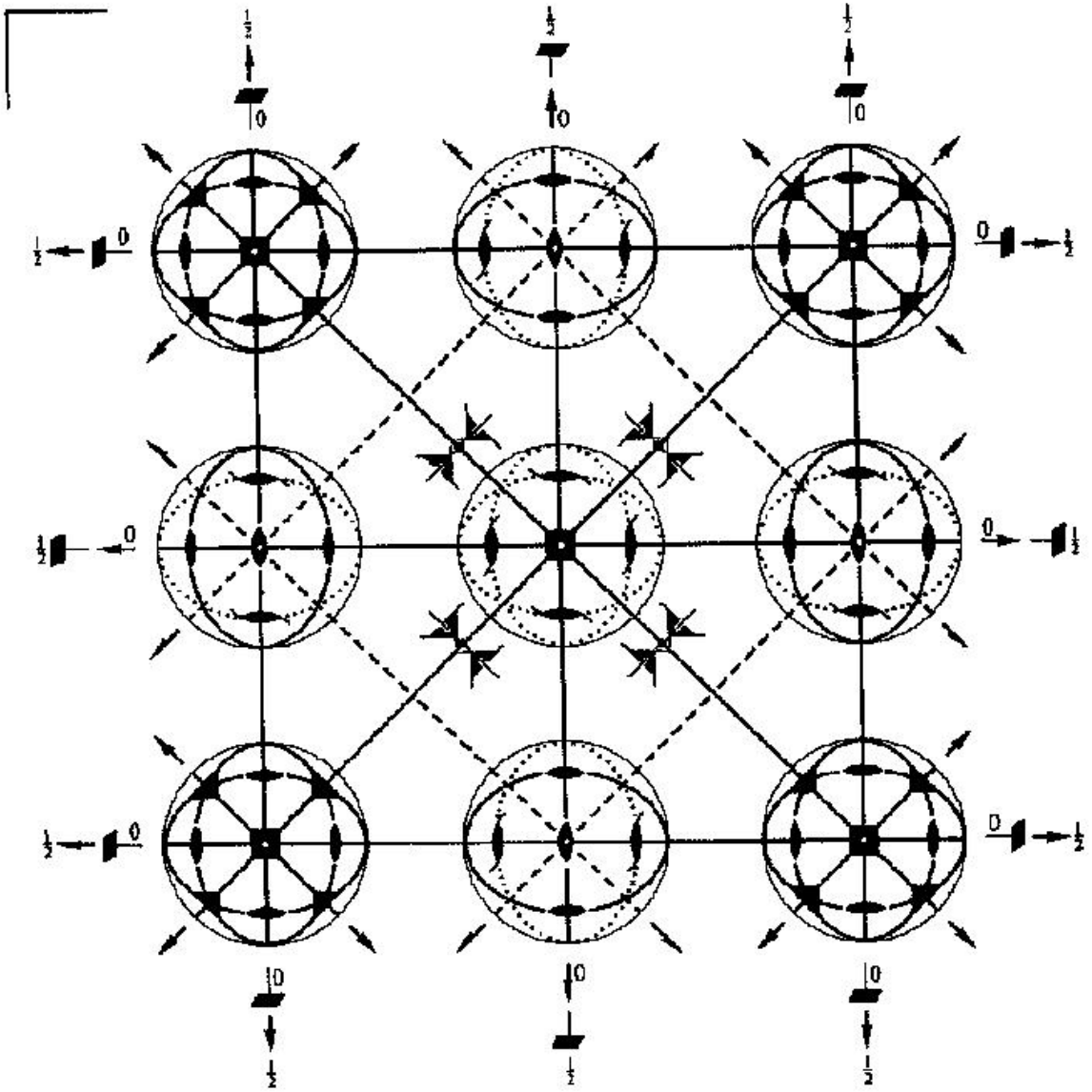


Показаны некоторые элементы группы P m-3m:
Вертикальные оси 4, наклонные оси 3,
координатные плоскости, центры инверсии.
Высота ½ указывает, что элементы
пересекаются в центре ячейки



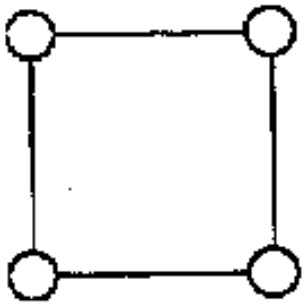
$Pm\bar{3}m$ O_h^1 $m\bar{3}m$

No. 221 $P\ 4/m\ \bar{3}\ 2/m$



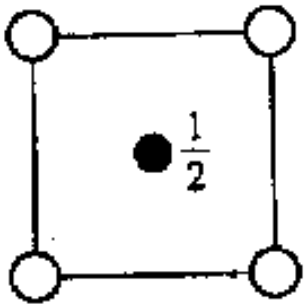
Примеры кристаллических структур класса m $\bar{3}$ m

α-Po



$Pm\bar{3}m$

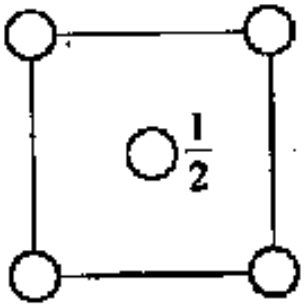
CsCl



○ Cs ○ Cl

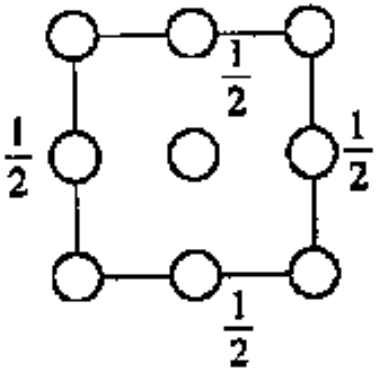
$Pm\bar{3}m$, $Z = 1$

α-Fe



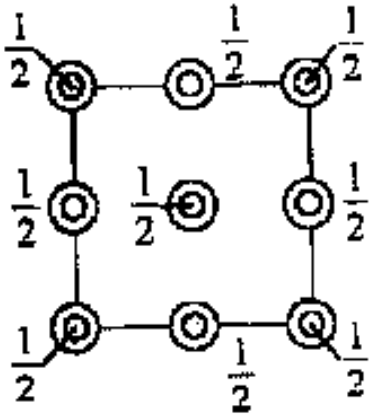
$Im\bar{3}m$, $Z = 2$

Cu



$Fm\bar{3}m$, $Z = 4$

NaCl



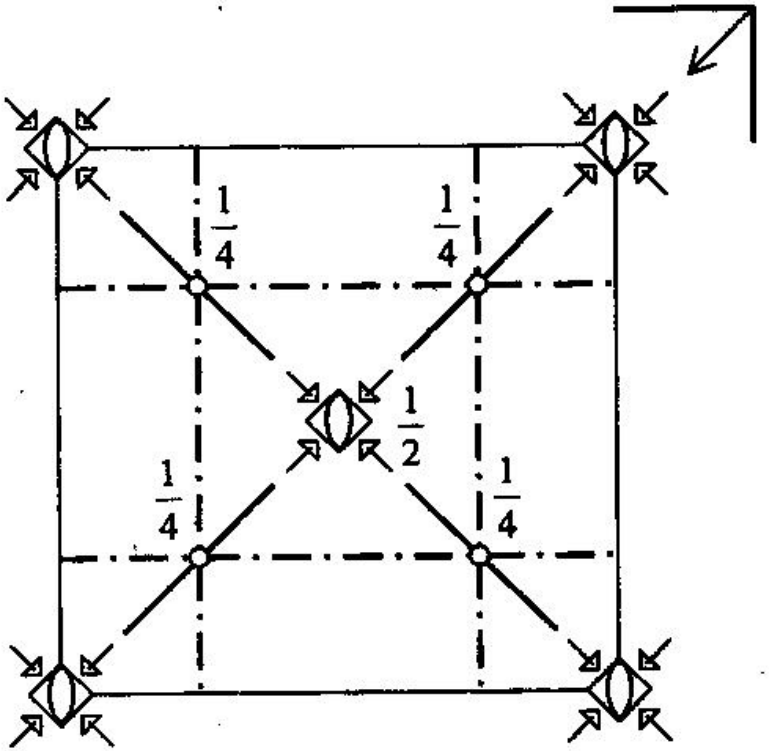
○ Na ○ Cl

$Fm\bar{3}m$, $Z = 4$

Группа $Pn\bar{3}m$

(группа относится к кристаллографическому классу $m\bar{3}m$)

Возможны два способа выбора начала координат: в позиции с симметрией $\bar{4}3m$ или в центре симметрии, точнее, в позиции с симметрией $\bar{3}m$

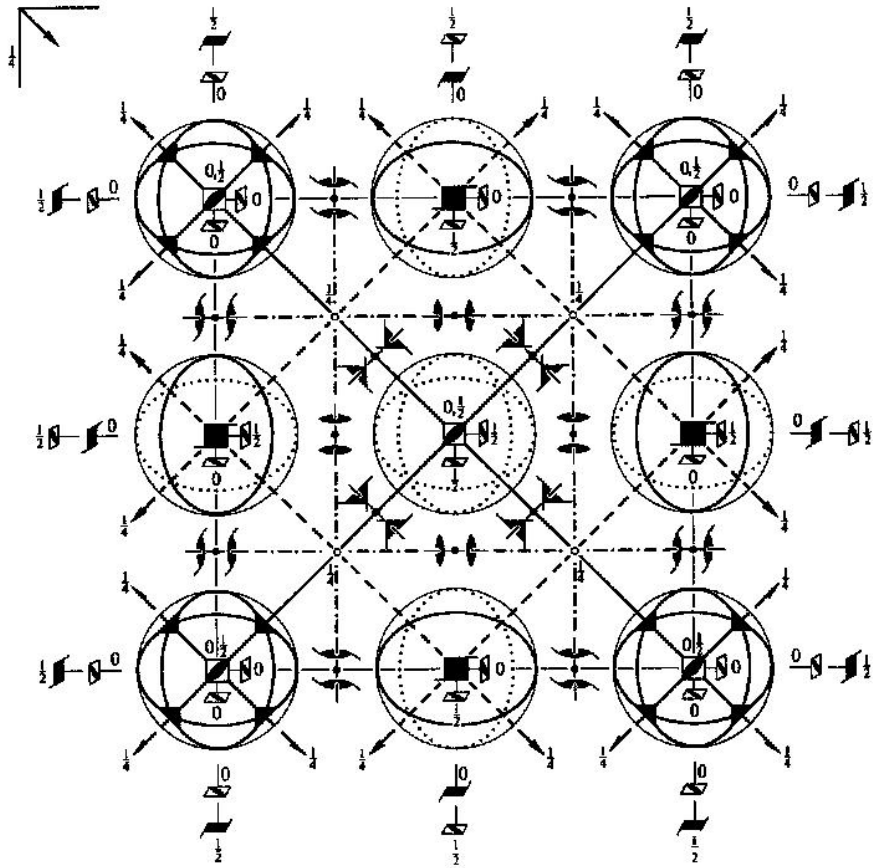


На рисунке начало координат выбрано в позиции $\bar{4}3m$. Изображена лишь часть важнейших элементов симметрии. Показаны: наклонные оси 3 (они проходят через точки с координатами 0, 0, 0 и 1/2, 1/2, 1/2), вертикальные оси $\bar{4}$, координатные плоскости *n*, две из шести диагональных плоскостей *m* и центры инверсии.

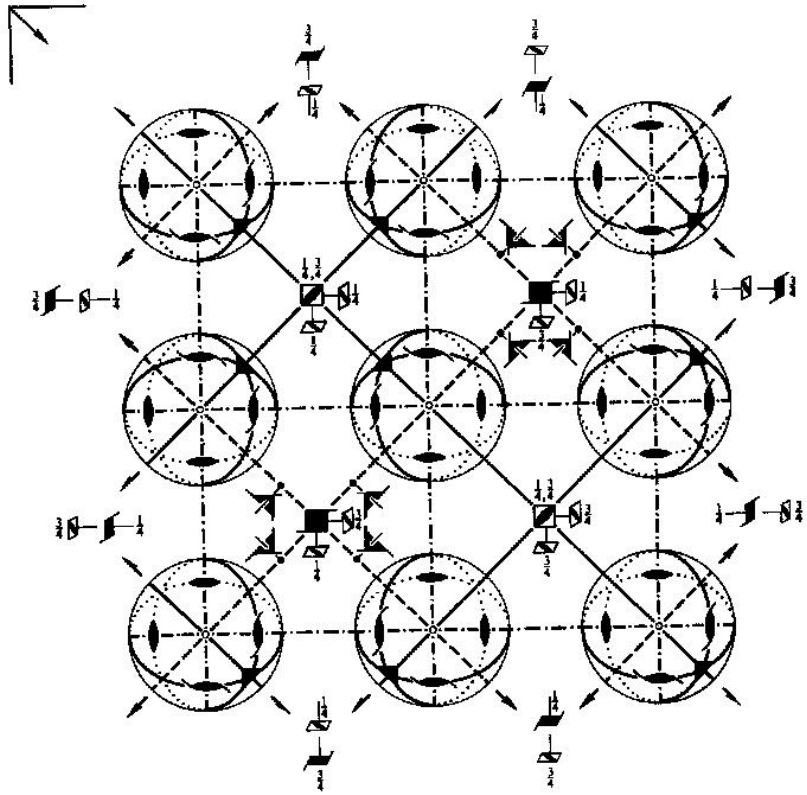
$Pn\bar{3}m$ O_h^4 $m\bar{3}m$

No. 224 $P\ 4_2/n\ \bar{3}\ 2/m$

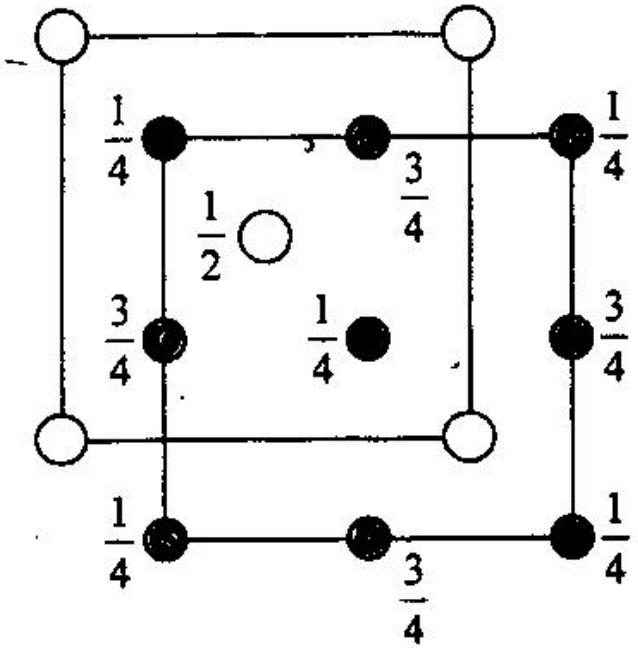
ORIGIN CHOICE 1



IN CHOICE 2



Куприт Cu_2O

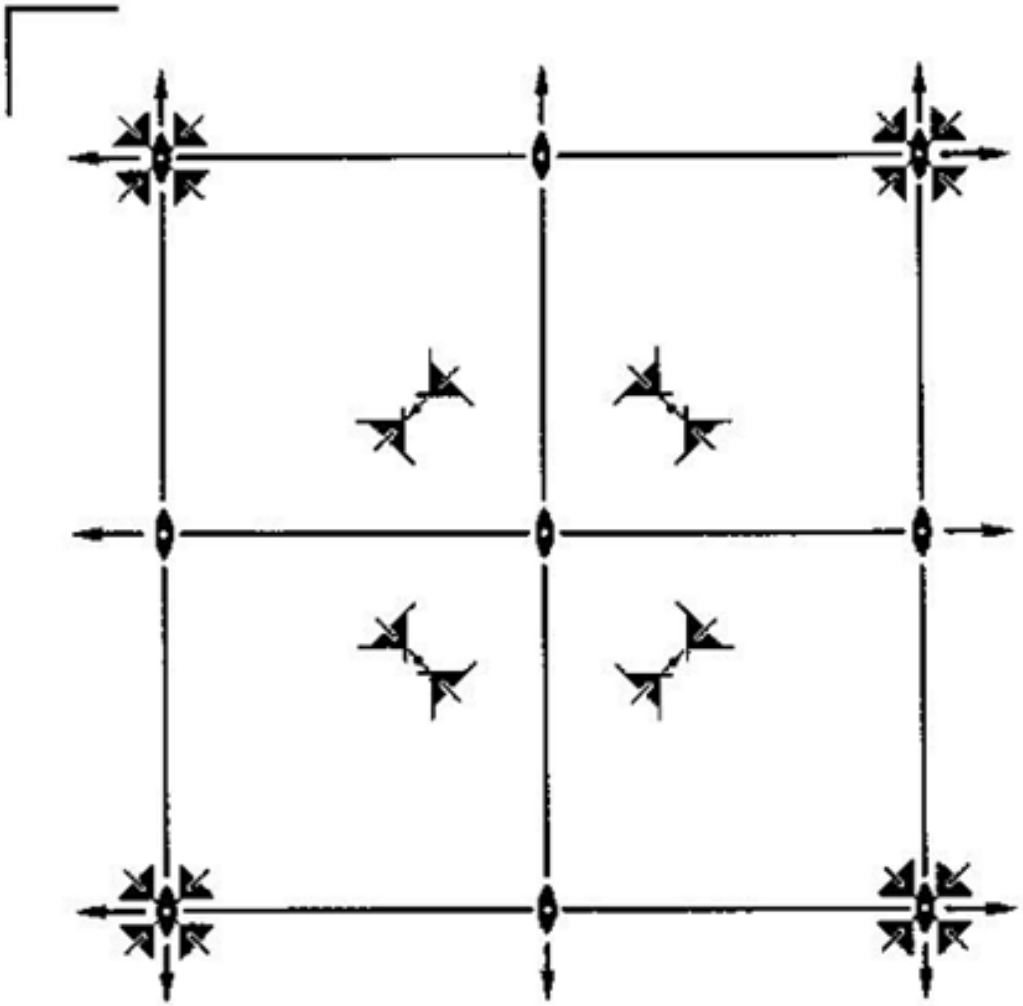


● Cu ○ O

Показаны два способа выбора элементарной ячейки (соответственно двум способам выбора начала координат).

$Pm\bar{3}$ T_h^1 $m\bar{3}$

No. 200 $P2/m\bar{3}$

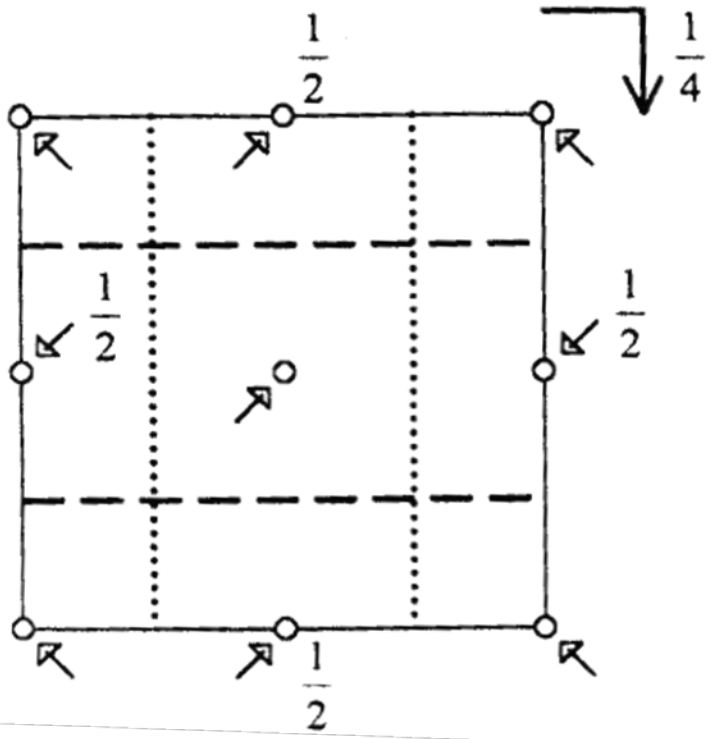


Группа $Pa\bar{3}$

(группа относится к кристаллографическому классу $m\bar{3}$)

Три плоскости скользящего отражения, параллельные координатным осям

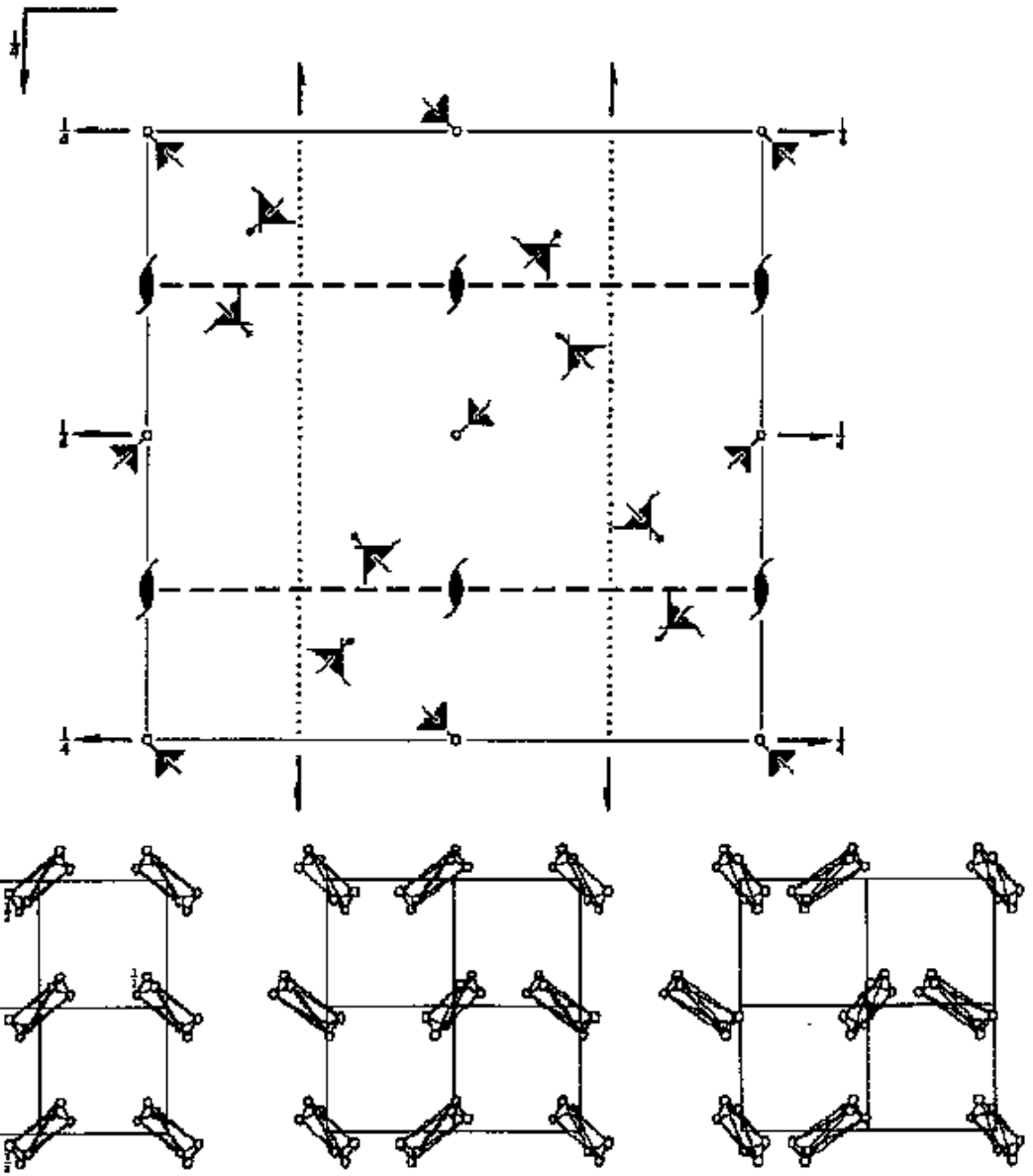
Четыре скрещивающиеся оси 3, параллельные объемным диагоналям ячейки

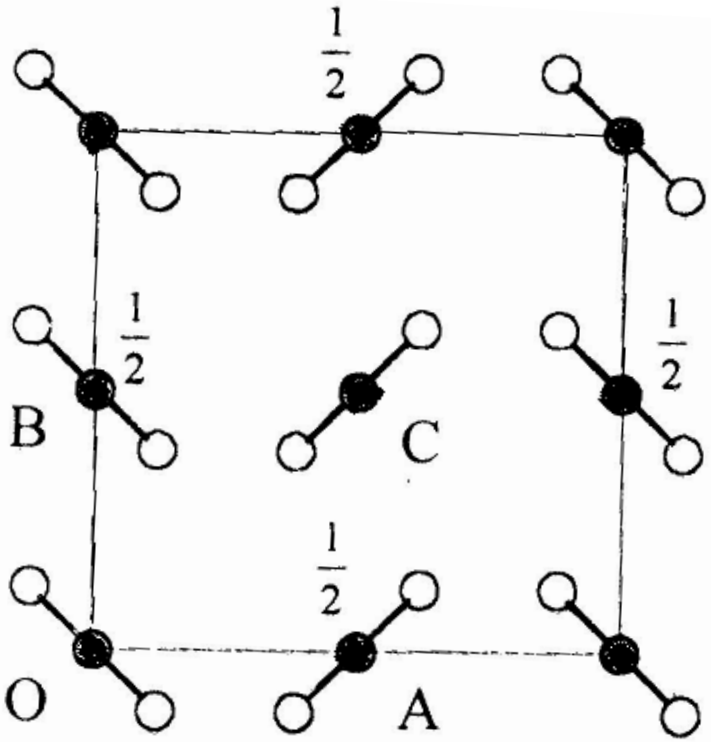


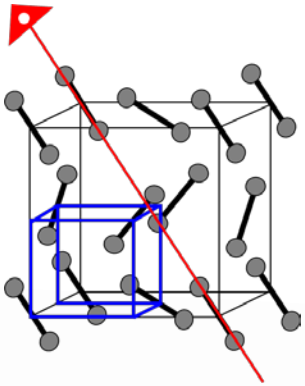
Изображены важнейшие ("порождающие") элементы симметрии: плоскости скользящего отражения и наклонные оси 3.

$Pa\bar{3}$ T_h^6 $m\bar{3}$

No. 205 $P2_1/a\bar{3}$ Patterson symm



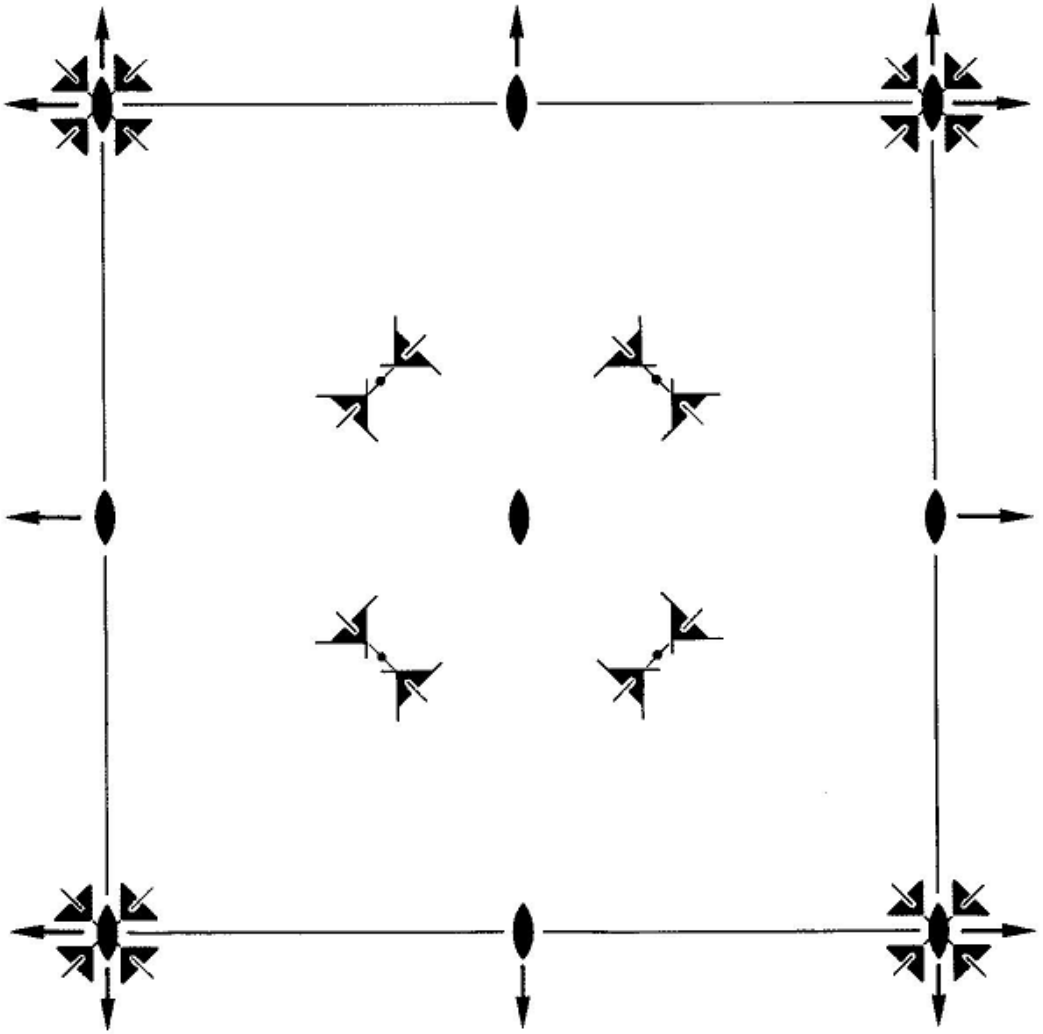


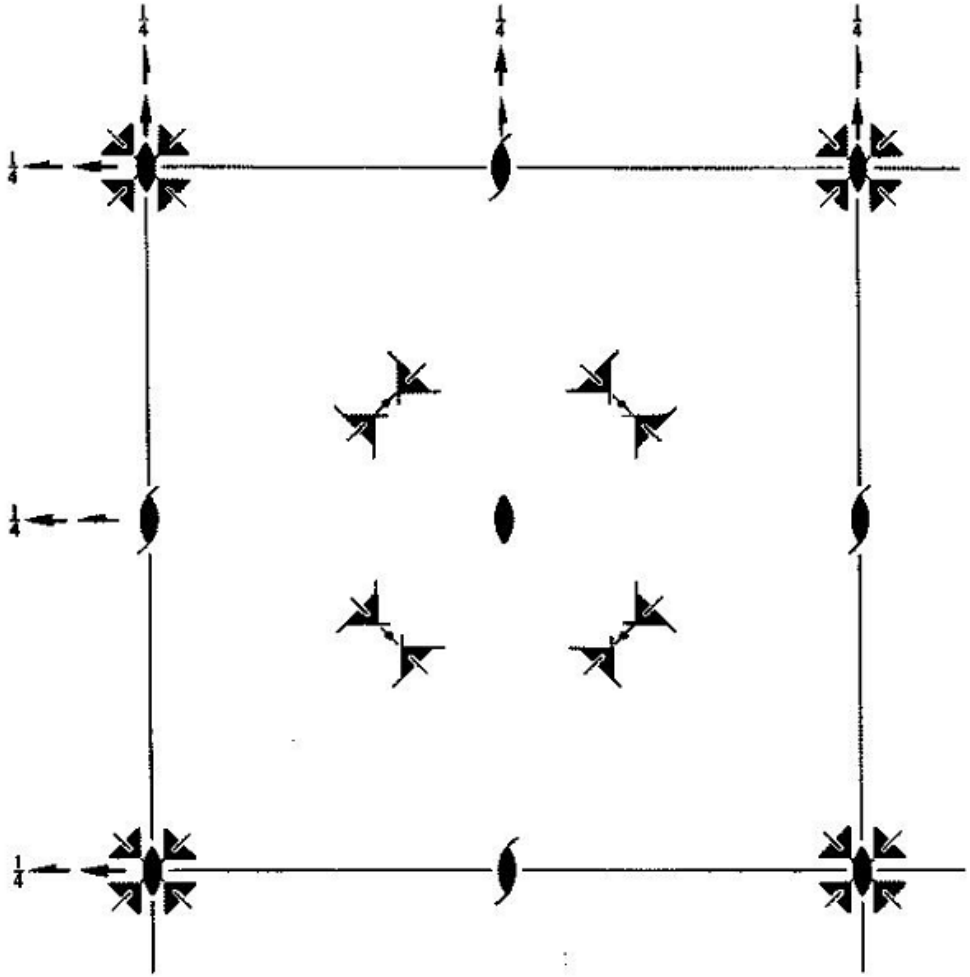


Молекулы O, A, B, C имеют разные ориентации (поэтому ячейка является примитивной); центры этих молекул расположены в точках с координатами 0, 0, 0; 1/2, 1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2.

Структура азота (α-форма) аналогична структуре CO_2 (те же ориентации молекул и координаты их центров).

No. 195 $P23$





Upper left quadrant only