Михаил Владимирович Морозов
кафедра минералогии, кристаллографии и петрографии
Санкт-Петербургский горный институт

morozov.minsoc.ru

Кристаллохимия

лекция 3.
Пространственные группы симметрии.
П. гр. ромбической сингонии.

специальность «Прикладная геохимия, минералогия, петрология», 3 семестр
2011

Фёдоровские (пространственные) группы симметрии

Симметрия кристаллического многогранника:
32 точечных группы
(1 точка – центр тяжести – инвариантна).

Симметрия кристаллической структуры:
230 пространственных групп
(инвариантно только пространство целиком).

Открытие: Е.С.Фёдоров (1890), поэтому п.гр. называют также фёдоровскими группами.

Независимо и почти одновременно: А.Шёнфлис.

«Группа» – математическое понятие, подразумевает наличие определённых алгебраических операций (взаимодействий) между членами группы.

Теория групп

Группа = множество элементов a,b,c…, для которого:

1) определена однозначная операция «умножения»:
$a \cdot b = c$

2) $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$

3) существует элемент группы e:
$a \cdot e = e \cdot a = a$

4) для каждого элемента существует обратный a^{-1} и:
$a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$

Теория групп

Для групп **симметрии**:

- элемент группы: операция симметрии
- групповое умножение: их последовательное действие
- единичный элемент: тождество

П. гр. ромбической сингонии

Принцип обозначения пространственной группы:

Бxyz

тип решётки Браве   э.с. ⊥ или || коорд. осям

плоскости с.   оси с.

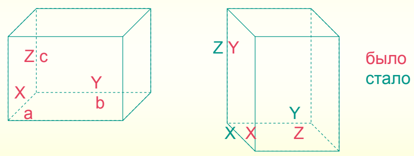
пример: ***Pman***

примитивная ячейка
⊥x → *m*
⊥y → *a*
⊥z → *n*

Аспекты пространственных гр.

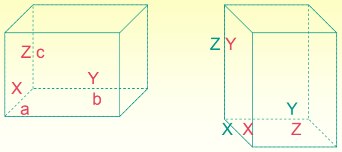
Ромб. синг.: прямоугольная э.я.

Формально мы можем установить её произвольно, т.е. выбрать X, Y, и Z вдоль любых рёбер.



Всего может быть до 6 вариантов установок (в случае ромбической сингонии – когда можно менять местами любые оси).

Аспекты пространственных гр.



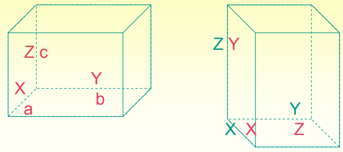
было
стало

Возможные ориентировки э.с., характеризующих п.группу, относительно координатных осей называют аспектами этой п.гр.

Стандартная ориентировка принята МСК и опубликована в **Международных таблицах по кристаллографии** («кристаллографическая» установка).

Исторически для минералов м.б. распространены другие аспекты («минералогическая» установка).

Аспекты пространственных гр.



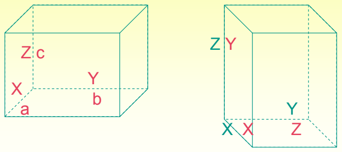
было
стало

Обозначения аспектов п .гр.:

	1-я ось	2-я ось	3-я ось	обозн.
стандартный	X	Y	Z	abc
	X	Z	Y	acb
	Z	X	Y	cab

и т.п.

Аспекты пространственных гр.

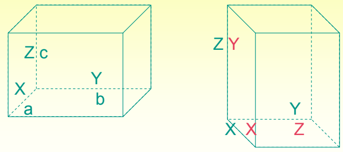


было
стало

Каждая п.гр. обозначается ***номером*** по МТК.

Группа 53:	аспект	обозначение группы
	a,-c,b	***Pman***
	b,c,a	***Pncm***
	-c,b,a	***Pcnm***
	c,a,b	***Pbmn***
	b,a,-c	***Pnmb***
	a,b,c	***Pmna***

Аспекты пространственных гр.



было
стало

Для перехода между аспектами нужно менять местами координаты атомов:

аспект	*координаты i-го атома*		
abc	$X_i = 0$	$Y_i=0.5$	$Z_i=0.32$
cab	$X_i = 0.32$	$Y_i=0$	$Z_i=0.5$

П. гр. ромбической сингонии

пример: построение графика простр. группы

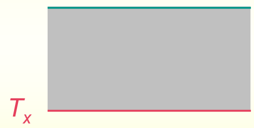
Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка
п.гр.: *Pmm2*

сначала обводим контуры будущей ячейки КАРАНДАШОМ волнистой линией

П. гр. ромбической сингонии

пример: построение графика простр. группы

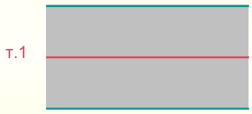
Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка
п.гр.: *Pmm2*



П. гр. ромбической сингонии

пример: построение графика простр. группы

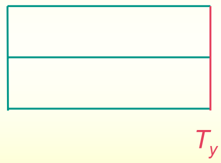
Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка
п.гр.: *Pmm2*



П. гр. ромбической сингонии

пример: построение графика простр. группы

Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка
п.гр.: *Pmm2*



П. гр. ромбической сингонии

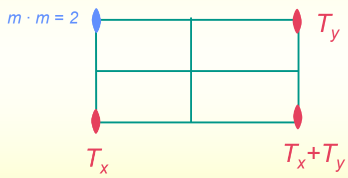
пример: построение графика простр. группы

Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка
п.гр.: *Pmm2*

П. гр. ромбической сингонии

пример: построение графика простр. группы

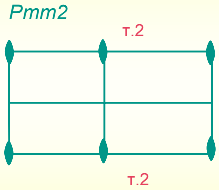
Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка
п.гр.: *Pmm2*



П. гр. ромбической сингонии

пример: построение графика простр. группы

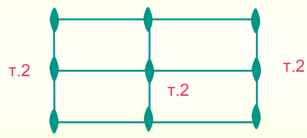
Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка
п.гр.: *Pmm2*



П. гр. ромбической сингонии

пример: построение графика простр. группы

Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка
п.гр.: *Pmm2*



итого 4 неэквивалентных системы плоскостей *m*

П. гр. ромбической сингонии

Класс (т.гр.) *mm2*, примитивная ячейка:
другие возможные п. гр.

P x y (2)
m m
b a
c c
n n

итого: 4 x 4 = 16 комбинаций

но некоторые из них являются аспектами одной п.гр.
например: *Pma2* = *Pbm2*

Если обе плоскости содержат *t* || Z ось 2,
если лишь одна из них – результирующая ось 2_1.

→ в классе *mm2* (ячейка *P*) возможно 10 пр. групп

П. гр. ромбической сингонии

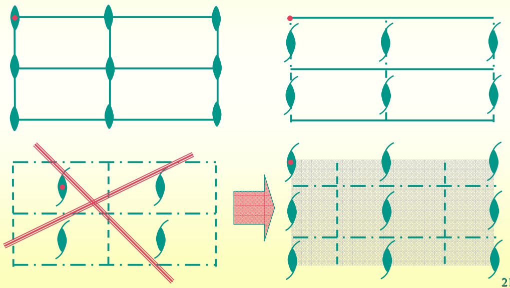
→ в классе *mm2* (ячейка *P*) возможно 10 п. групп

Pmm2
Pma2 = *Pbm2*
$Pmc2_1 = Pcm2_1$
$Pmn2_1 = Pnm2_1$
Pnn2
$Pna2_1 = Pbn2_1$
Pnc2 = *Pcn2*
Pcc2
$Pca2_1 = Pbc2_1$
Pba2

зная п. гр. можно определить точечную гр. (класс), убрав из элементов симметрии их трансляционные компоненты

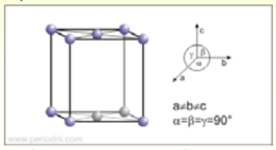
Выбор начала координат

(0,0,0) = точка с наибольшей симметрией
(важно для рентгеновского структурного анализа).
В *mm2*: на 2, если нет – *m* ∩ *п.с.о.*, если нет – на 2_1.

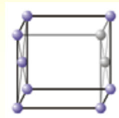


Базо- и бокоцентрированные ячейки

В ромбической сингонии возможны A-, B-, C-ячейки:



базоцентрированная C-ячейка



бокоцентрированная B-ячейка

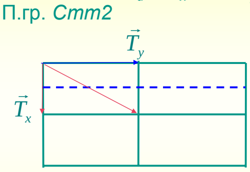
Обычно A- и B-ячейки сводят к аспектам C-ячейки.

Но не в классе *mm2* ! (2 || Z должно быть).

Из двух равноценных аспектов (A- и B-) выбирают A:
Amm2 *Ama2* *Abm2* *Aba2*
неэквивалентны для A-

Взаимодействие плоскости с диагональной трансляцией

Ячейка C: $T_d = T_x / 2 + T_y / 2$
П.гр. *Cmm2*



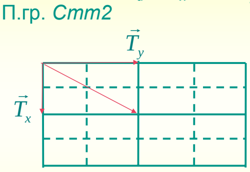
$T_d = T_x / 2 + T_y / 2 =$
$= t_{||} + t_{\perp}$
для плоскости *m*

$t_{\perp}$ сдвигает её на t/2 (т.1)

$t_{||}$ придаёт ей компонент трансляции, т.е. превращает её в п.с.о. (т.4)

Взаимодействие плоскости с диагональной трансляцией

Ячейка C: $T_d = T_x / 2 + T_y / 2$
П.гр. *Cmm2*



$T_d = T_x / 2 + T_y / 2 =$
$= t_{||} + t_{\perp}$
для плоскости *m*

$t_{\perp}$ сдвигает её на t/2 (т.1)

$t_{||}$ придаёт ей компонент трансляции, т.е. превращает её в п.с.о. (т.4)

m обязательно чередуется с *a* или *b*
запись: *m*(*a*,*b*)

c обязательно чередуется с *n*
запись: *c*(*n*)

Обязательность чередования *m*(*a*,*b*), *c*(*n*) сокращает число групп в *C*-ячейке по сравнению с *P*: остаются только сочетания *mm*, *mc* и *cc*