

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

 morozov.minsoc.ru 

Кристаллохимия

лекция 5.
Пространственные группы
тригональной и гексагональной сингоний.

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

Связь между 3 и 6

Гексагональная и тригональная сингонии тесно связаны:

- одинаковая система координат
- ось 6 содержит в себе ось 3
- $3 \cdot m_{\perp} = \bar{6}$

тригон. с. = как бы «подсингония» гексагональной

2

Гексагональные ячейки

В гекс. сингонии возможна только *P*-ячейка:

S-ячейка. $V_S = 3V_P$
(наглядная)

ортогексагональная
ячейка $V_O = 2V_P$
(кристаллофизика)

H-ячейка. $V_H = 3V_P$
«минералогическая
установка»

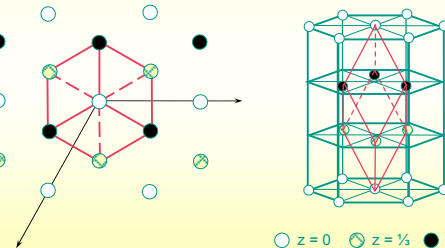
P-ячейка

проекция на XY

3

Тригональные ячейки

В тригональной сингонии возможны 2 ячейки:
P-ячейка и *R*-ячейка (ромбоэдрическая)



○ $z = 0$ ⊗ $z = \frac{1}{2}$ ● $z = \frac{2}{3}$

4

Тригональные ячейки

В тригональной сингонии возможны 2 ячейки:
P-ячейка и *R*-ячейка (ромбоэдрическая)

R-ячейку можно заменить
гексагональной, дважды
центрированной по объёму

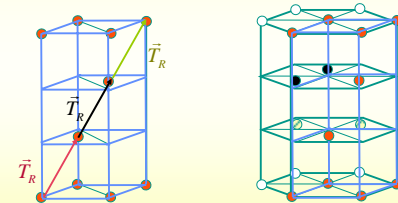
○ $z = 0$ ⊗ $z = \frac{1}{2}$ ● $z = \frac{2}{3}$

5

Тригональные ячейки

В тригональной сингонии возможны 2 ячейки:
P-ячейка и *R*-ячейка (ромбоэдрическая)

R-ячейку можно заменить
гексагональной, дважды
центрированной по объёму



○ $z = 0$ ⊗ $z = \frac{1}{2}$ ● $z = \frac{2}{3}$

6

Обозначение пространственной группы

1 2 3 4 5

Б О /пл. К А

ячейка Браве э.с., соотв.* апофемальному напр-ю
 главная ось симметрии э.с., соотв.* координатному напр-ю

пл-ть ⊥ гл. оси

* плоскость ⊥ направлению либо ось || направлению

пример: **$R6_3/mmc$**

7

Взаимодействие 3 с трансляцией

Теорема 8.
 При взаимодействии оси симметричности 3-го порядка с перпендикулярной к ней T возникает такая же ось, параллельная исходной и проходящая через центр правильного треугольника, стороной которого служит эта T .

8

Т.8 в ромбоэдрической ячейке

в R -ячейке имеется дополнительная диагональная трансляция на $1/3$ ячейки:

- компонент $t_R \perp$ оси 3-го порядка сдвигает ось по т.8
- компонент $t_R \parallel$ оси превращает 3 в 3_1 и 3_2

$$\vec{T}_R = \frac{\vec{T}_x}{3} + \frac{\vec{T}_y}{3} + \frac{\vec{T}_z}{3} = \vec{i}_{\parallel} + \vec{i}_{\perp}$$

$$\vec{i}_{\parallel} = \frac{\vec{T}_z}{3}$$

$$\vec{i}_{\perp} = \frac{\vec{T}_x}{3} + \frac{\vec{T}_y}{3}$$

9

Т.8 в ромбоэдрической ячейке

в R -ячейке имеется дополнительная диагональная трансляция на $1/3$ ячейки:

- компонент $t_R \perp$ оси 3-го порядка сдвигает ось по т.8
- компонент $t_R \parallel$ оси превращает 3 в 3_1 и 3_2

$$\vec{T}_R = \frac{\vec{T}_x}{3} + \frac{\vec{T}_y}{3} + \frac{\vec{T}_z}{3} = \vec{i}_{\parallel} + \vec{i}_{\perp}$$

$$\vec{i}_{\parallel} = \frac{\vec{T}_z}{3}$$

$$\vec{i}_{\perp} = \frac{\vec{T}_x}{3} + \frac{\vec{T}_y}{3}$$

10

Т.8 в ромбоэдрической ячейке

в R -ячейке имеется дополнительная диагональная трансляция на $1/3$ ячейки:

- компонент $t_R \perp$ оси 3-го порядка сдвигает ось по т.8
- компонент $t_R \parallel$ оси превращает 3 в 3_1 и 3_2

$$\vec{T}_R = \frac{\vec{T}_x}{3} + \frac{\vec{T}_y}{3} + \frac{\vec{T}_z}{3} = \vec{i}_{\parallel} + \vec{i}_{\perp}$$

$$\vec{i}_{\parallel} = \frac{\vec{T}_z}{3}$$

$$\vec{i}_{\perp} = \frac{\vec{T}_x}{3} + \frac{\vec{T}_y}{3}$$

11

Т.8 в ромбоэдрической ячейке

в R -ячейке имеется дополнительная диагональная трансляция на $1/3$ ячейки:

- компонент $t_R \perp$ оси 3-го порядка сдвигает ось по т.8
- компонент $t_R \parallel$ оси превращает 3 в 3_1 и 3_2

12

Ось 6 содержит в себе оси 3 и 2

эти «внутренние» оси взаимодействуют с трансляциями независимо

$P6$

13

Координатные и апофемальные направления

важнейшие направления в триг. и гекс. сингониях лежат в горизонтальной плоскости (\perp гл. оси):

а) координатные оси: 3 направления под $\angle 120^\circ$
 б) апофемальные направления ($\angle 30^\circ$ и 90° к X, Y, U)

14

Плоскости \parallel главной оси

Основные трансляции T_x и/или T_y по отношению к плоскостям \parallel главной оси проходят **под косым углом**.
 \Rightarrow их можно разложить на компоненты t_{\perp} и t_{\parallel} , которые обуславливают чередование плоскостей m ($b \equiv a$) или c (n)

$P6_3mc$

15

Плоскости \parallel главной оси

Основные трансляции T_x и/или T_y по отношению к плоскостям \parallel главной оси проходят **под косым углом**.
 \Rightarrow их можно разложить на компоненты t_{\perp} и t_{\parallel} , которые обуславливают чередование плоскостей m ($b \equiv a$) или c (n)

$P6_3mc$

16

Плоскости симметрии в тригональной сингонии

В тригональной сингонии НЕВОЗМОЖНО одновременное существование плоскостей симметрии, перпендикулярных, как координатным, так и апофемальным направлениям.

Чтобы указать положение пл. симм. в символе пространственной группы на месте отсутствующих плоскостей ставится единица:

примеры: $P3m1$ $P31m$

То же относится к осям симметрии в классе 32.

В группах с R-ячейкой возможны только плоскости \perp координатным направлениям, поэтому в их символах единица не ставится.

17

П. гр. кубической сингонии

Обозначение пространственной группы:

ячейка Браве / ось 3-го порядка / координатный э.с.

плоскости имеют преимущество перед осями

примеры: $P\bar{4}3n$
 $Fd\bar{3}m$

18