

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

 morozov.minsoc.ru 

Кристаллохимия

лекция 6.
Правильные системы точек.

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

ИТОГИ

зачем нужно разбираться в пространственных группах?

подобно тому, как элементы симметрии точечных групп связывают друг с другом грани кристалла,

элементы симметрии пространственных групп связывают друг с другом атомы

В итоге, зная все элементы пространственной группы, можно определить расположение всех атомов в элементарной ячейке и положение атомов относительно элементов симметрии


2

ИТОГИ

зачем нужно знать положение атома относительно элемента симметрии?
пример: центр инверсии

возьмем раствор CuSO_4 – там хаос, нет э.с.

в спектре раствора мы можем найти линию меди и определять по ней концентрацию Cu:

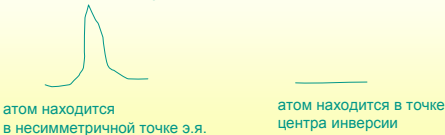


3

ИТОГИ

зачем нужно знать положение атома относительно элемента симметрии?
пример: центр инверсии

у кристалла тоже получится спектр, но «проявленность» в нем химического элемента зависит не только от концентрации, но и от положения, в котором находится атом !!!!



4

Правильная система точек

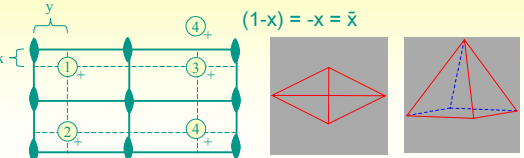
(ПСТ)

= совокупность точек, полученных размножением произвольной точки соответствующими элементами симметрии

5

Пример: ромб. сингон., $Pmm2$

$(1-x) = -x = \bar{x}$



формула размножения	точка	координаты
m_x ($m.$)	1	x, y, z
m_y ($.m.$)	2	\bar{x}, y, z
2 ($..2$)	3	x, \bar{y}, z
	4	\bar{x}, \bar{y}, z

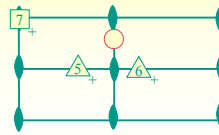
$\Sigma = 4$ – это кратность данной ПСТ

x, y, z – произвольное положение = точка **общего** положения
→ **общая правильная система точек**

Частные ПСТ

7

Частные ПСТ



$Pmm2$, точка на $mm2$

m_y	5	$\frac{1}{2}, y, z$
(.m.)	6	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$
(..2)	6	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$
	кратность = 2	

аналогично – на границе ячейки, на m_y (.m.)

7 0, 0, z
частная ПСТ, кратность = 1

8

Характеристики ПСТ:

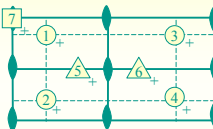
- 1) кратность,
- 2) формула размножения

9

Характеристики ПСТ:

- 3) симметрия позиции

= комплекс эл. с., которые не размножают данную точку



т. 5 m_x $m..$

т. 7 $mm2$ $mm2$

т. 1 (общ. ПСТ) 1 1
(т.е. таких элементов нет) международное обозначение!

10

Характеристики ПСТ:

- 3) симметрия позиции

важно:

некая точка находится на пересечении m и 2
следовательно симметрия её позиции = $2/m$

NB! $2/m$ подразумевает $\bar{1}$
но не наоборот!

поэтому писать симметрию этой позиции как $\bar{1}$ неверно!

11

Характеристики ПСТ:

- 3) симметрия позиции

как правильно определить симметрию позиции:

с.п. это эл.с., которые не размножают данную точку
⇒

- эл.с. с трансляциями отпадают (abcd, винт.оси)
- точка находится на самом пересечении эл.с., которые образуют симметрию позиции

⇒ полный набор этих эл.с. должен образовывать точечную группу симметрии

⇒ с.п. имеет вид одной из 32-х точечных групп!

12

Характеристики ПСТ: 3) симметрия позиции

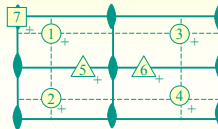
физический смысл понятия «симметрия позиции»:

атом на позиции в центре инверсии имеет особые спектральные свойства (сильнее или слабее взаимодействует со светом и другими видами электромагнитного излучения)

13

Характеристики ПСТ: 4) число степеней свободы

= число координат, которые можно менять



т. 1	3 (x, y, z)
т. 5	2 (y, z)
т. 7	1 (z)

14

Пример: ромб. сингон., $R\bar{3}m$

1	x, y, z
2	\bar{x}, y, z
3	$\frac{1}{2}x, \bar{y}, \frac{1}{2}z$
4	$\frac{1}{2}x, y, \frac{1}{2}z$
5	x, \bar{y}, \bar{z}
6	$\frac{1}{2}x, y, \frac{1}{2}z$
7	$\frac{1}{2}x, \bar{y}, \frac{1}{2}z$
8	$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$

ОПСТ
кратность = 8
симметрия позиций: 1
число ст. свободы = 3

ЧПСТ – на плоскости или оси, НО!
будут размножаться трансляциями, даже находясь на них (если винт или скольжение)

m
 n
 a
 $2..$
 $..2$
 2_1
 $\bar{1}$

16

Кратность ПСТ

соответствует числу граней простой формы для данной симметрии (на каждый вид узлов решётки)

пример:

mmm	ОПФ – ромбическая дипирамида	8 граней
$R\bar{3}m$	ОПСТ	8 точек
\uparrow		
1	независимый узел в э.я. (вершина ячейки)	$8 \times 1 = 8$
mmm	ОПФ – ромбическая дипирамида	8 граней
$Ibca$	ОПСТ	16 точек
\uparrow		
2	независимых узла в э.я. (вершина + центр)	$8 \times 2 = 16$

16

Кратность ПСТ

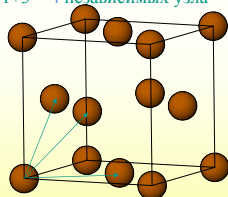
Максимальная кратность ПСТ

ПФ – гексоктаэдр ($m\bar{3}m$) 48

макс. число точек добавляют трансляции в F -ячейке ($Fm\bar{3}m$):

из 1-й \rightarrow 3 доп. узла ; $1+3 = 4$ независимых узла

итого $48 \times 4 = 192$ точки



17

Кратность ПСТ

Невозможная кратность ПСТ

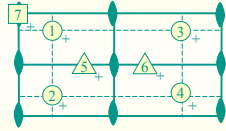
5, 7, 10 (нет ПФ с таким числом граней)

18

Кратность ПСТ

Вывод химической формулы через ПСТ

пример: соединение AB_2 в группе $Pmm2$



т.	кратность:
5	2
7	1
1 (об. ПСТ)	4

19

Кратность ПСТ

Вывод химической формулы через ПСТ

пример: соединение AB_2 в группе $Pmm2$

атом	кратность ПСТ	в эл. ячейке	формула

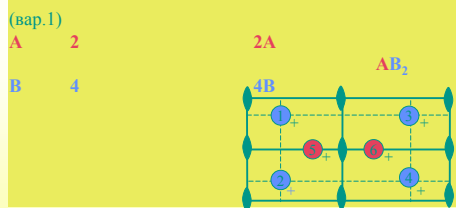
20

Кратность ПСТ

Вывод химической формулы через ПСТ

пример: соединение AB_2 в группе $Pmm2$

атом	кратность ПСТ	в эл. ячейке	формула
(вар.1)			



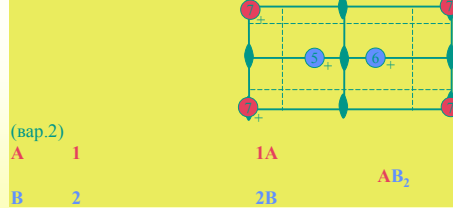
21

Кратность ПСТ

Вывод химической формулы через ПСТ

пример: соединение AB_2 в группе $Pmm2$

атом	кратность ПСТ	в эл. ячейке	формула
(вар.2)			



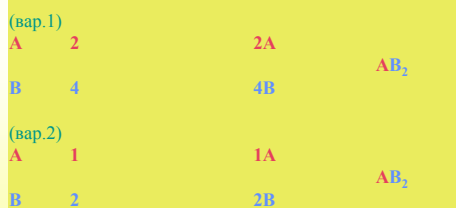
22

Кратность ПСТ

Вывод химической формулы через ПСТ

пример: соединение AB_2 в группе $Pmm2$

атом	кратность ПСТ	в эл. ячейке	формула
(вар.1)			



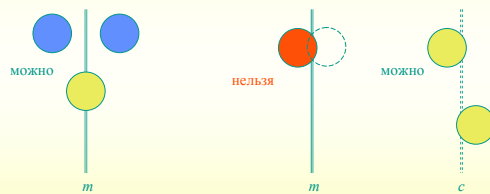
НО НЕ НАОБОРОТ !!!!!

23

Кратность ПСТ

Ограничение на ПСТ в реальных кристаллах

- конечный размер атомов (ионов) – расстояния между ними



поэтому распространены винтовые оси и плоскости скользящего отражения (смещают атомы)

24