



**Гуржий В.В**



# **КРИСТАЛЛОГРАФИЯ С ОСНОВАМИ КРИСТАЛЛОХИМИИ**

**Лекция 7**

---

# Элементы симметрии кристаллических структур

Кристаллические многогранники рассматриваются в рамках «закрытых» элементов симметрии (элементы симметрии неперiodических структур)

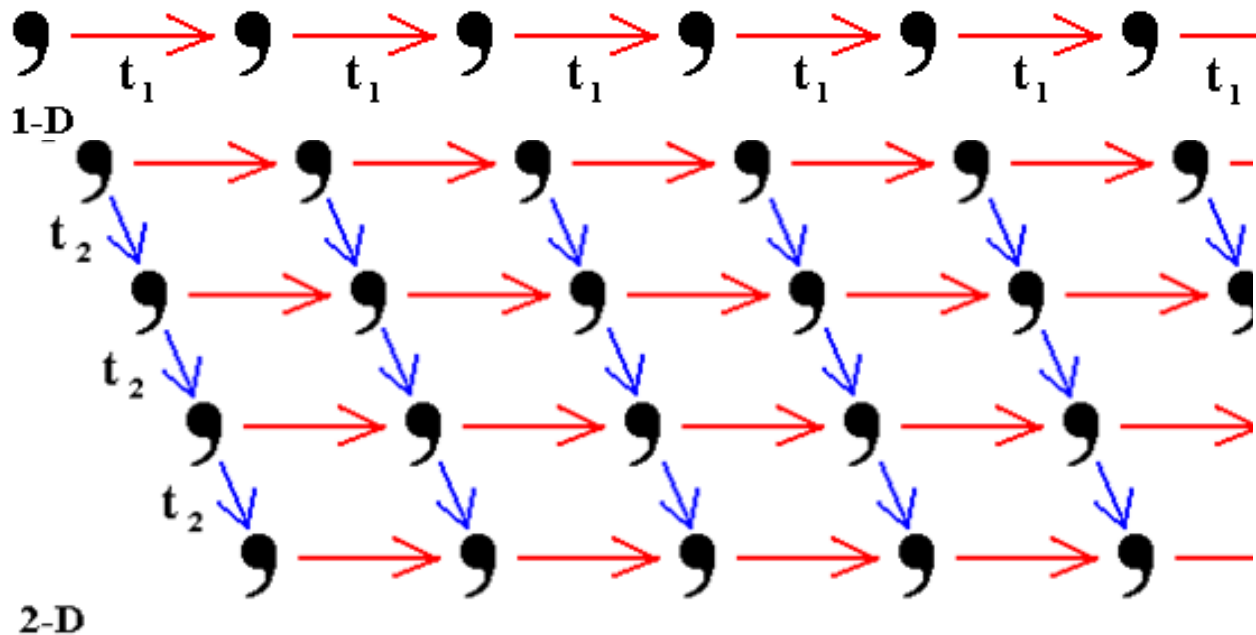
Но кристаллы состоят из атомов, закономерное распределение в пространстве (объеме) которых также описывается теорией симметрии

Для их описания применяют «открытые» элементы симметрии – соответствующие им симметрические операции содержат в себе поступательное движение

---

# Элементы симметрии кристаллических структур

**Трансляция** – симметрическая операция, представляющая собой поступательное перемещение на величину некоторого вектора  $\mathbf{t}$ .

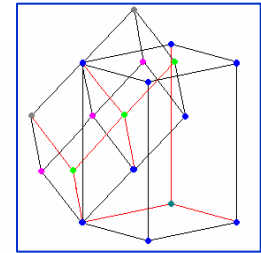
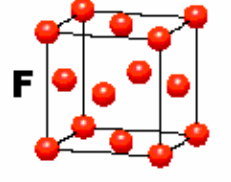
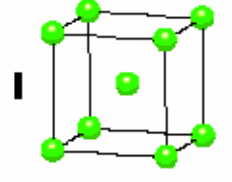
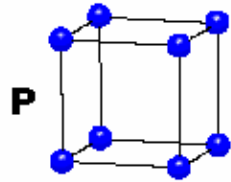


# Элементы симметрии кристаллических структур

## CUBIC

$$a = b = c$$

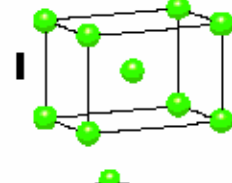
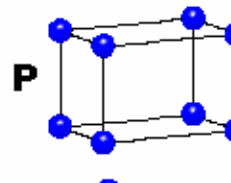
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



## TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

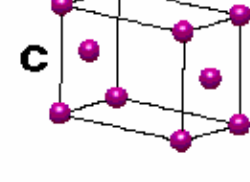
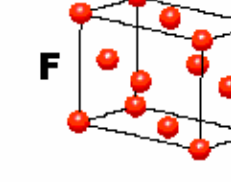
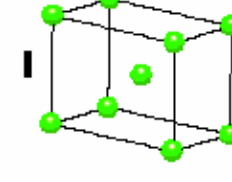
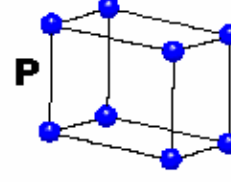


ромбоэдрическая ячейка  
в гексагональной  
установке

## ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

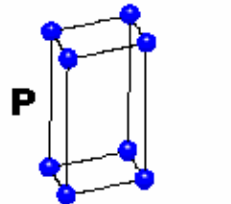


## HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

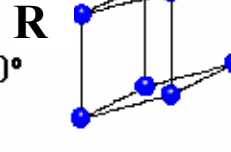
$$\gamma = 120^\circ$$



## TRIGONAL

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



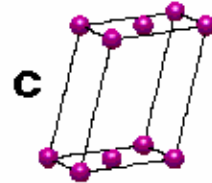
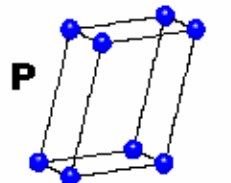
примитивная  
ромбоэдрическая  
ячейка

## MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

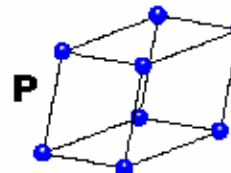
$$\beta \neq 120^\circ$$



## TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



### 4 Types of Unit Cell

**P** = Primitive

**I** = Body-Centred

**F** = Face-Centred

**C** = Side-Centred

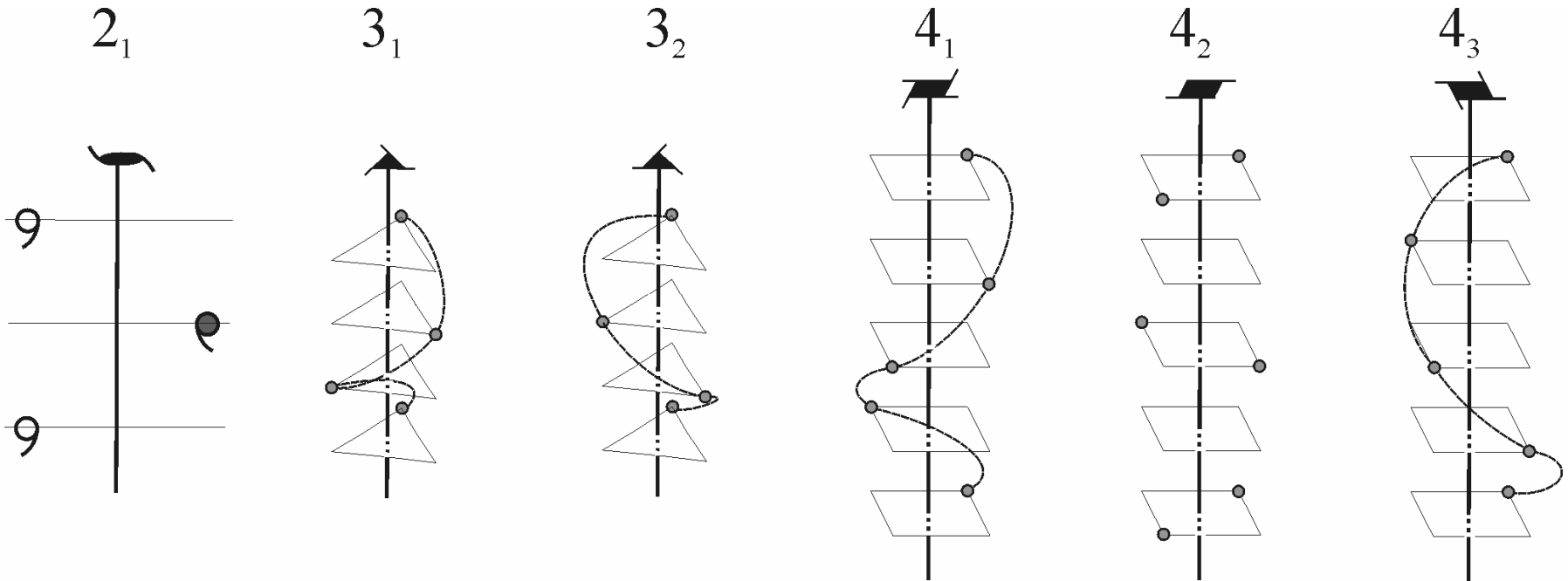
+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

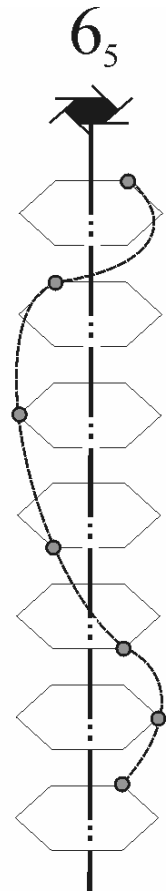
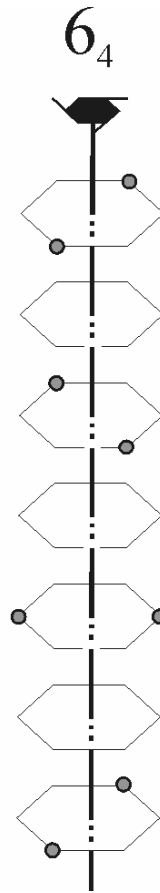
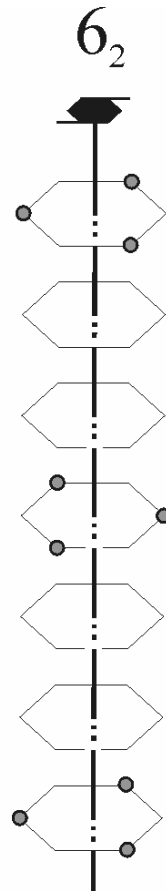
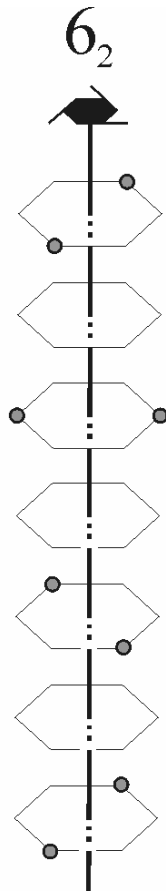
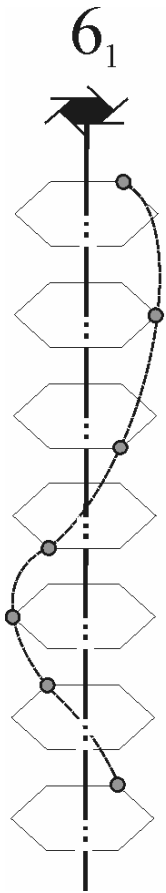
# Элементы симметрии кристаллических структур

## Винтовые оси симметрии



# Элементы симметрии кристаллических структур

## Винтовые оси симметрии



# Элементы симметрии кристаллических структур

Оси симметрии, перпендикулярные плоскости чертежа

Система обозначений осей симметрии

	Поворотные оси	Инверсионные оси	Винтовые оси
1	нет обозн.	$\bar{1}$	$2_1$
2		$\bar{2}$ $m_{\perp}$	$3_1$
3		$\bar{3}$	$4_1$
4		$\bar{4}$	$4_2$
6		$\bar{6}$	$4_3$
			$6_1$
			$6_2$
			$6_3$
			$6_4$
			$6_5$

Оси симметрии, параллельные плоскости чертежа

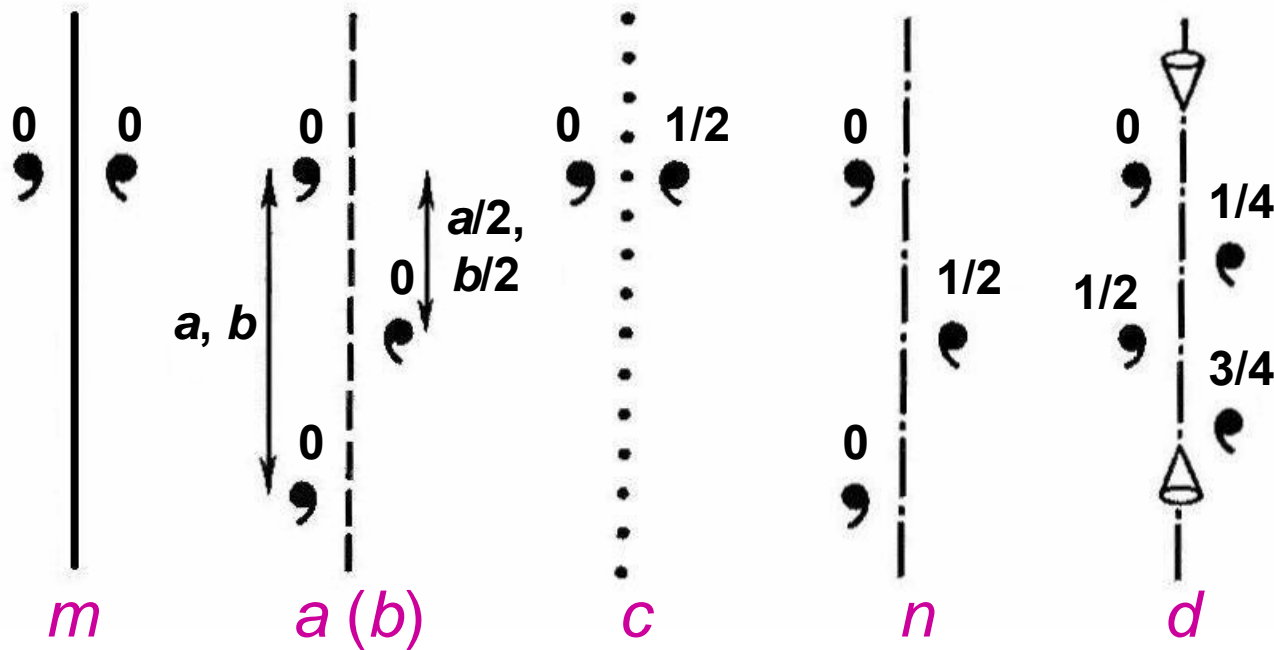
2		4		$4_2$		4	
$2_1$		$4_1$		$4_3$			

Оси симметрии, расположенные косо по отношению к плоскости чертежа

2		3		$3_2$	
$2_1$		$3_1$		$\bar{3}$	

# Элементы симметрии кристаллических структур

## Плоскости скользящего отражения (отражение + перенос вдоль плоскости)



номенклатура плоскостей определяется направлением переноса  
например, плоскость  $a$  – перенос вдоль вектора  $a$   
(т.е. вдоль оси X)



# Элементы симметрии кристаллических структур

## Система обозначений плоскостей симметрии


*Плоскости, перпендикулярные плоскости чертежа*


$m$	—————	<i>плоскость зеркального отражения, компоненты скольжения нет</i>
$a, b, c$	-----	<i>плоскость осевого скольжения, перенос на <math>1/2t</math> вдоль плоскости чертежа</i>
$a, b, c$	.....	<i>плоскость осевого скольжения, перенос на <math>1/2t</math> перпендикулярно плоскости чертежа</i>
$n$	-----	<i>плоскость осевого скольжения, перенос на <math>1/2t</math> параллельно плоскости чертежа и на <math>1/2t</math> перпендикулярно плоскости чертежа</i>
$d$	→→→→→ ←←←←←	<i>"алмазная" плоскость (пара плоскостей; встречается только в центрированных ячейках), перенос на <math>1/4</math> диагонали (<math>1/2t</math>) параллельно плоскости чертежа и на <math>1/4</math> диагонали (<math>1/2t</math>) перпендикулярно плоскости чертежа</i>

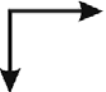
# Элементы симметрии кристаллических структур

## Система обозначений плоскостей симметрии

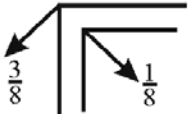
*Плоскости, параллельные плоскости чертежа*

$m$   *плоскость зеркального отражения, компоненты скольжения нет*

$a, b, c$   *перенос на  $1/2t$  в направлении стрелки*

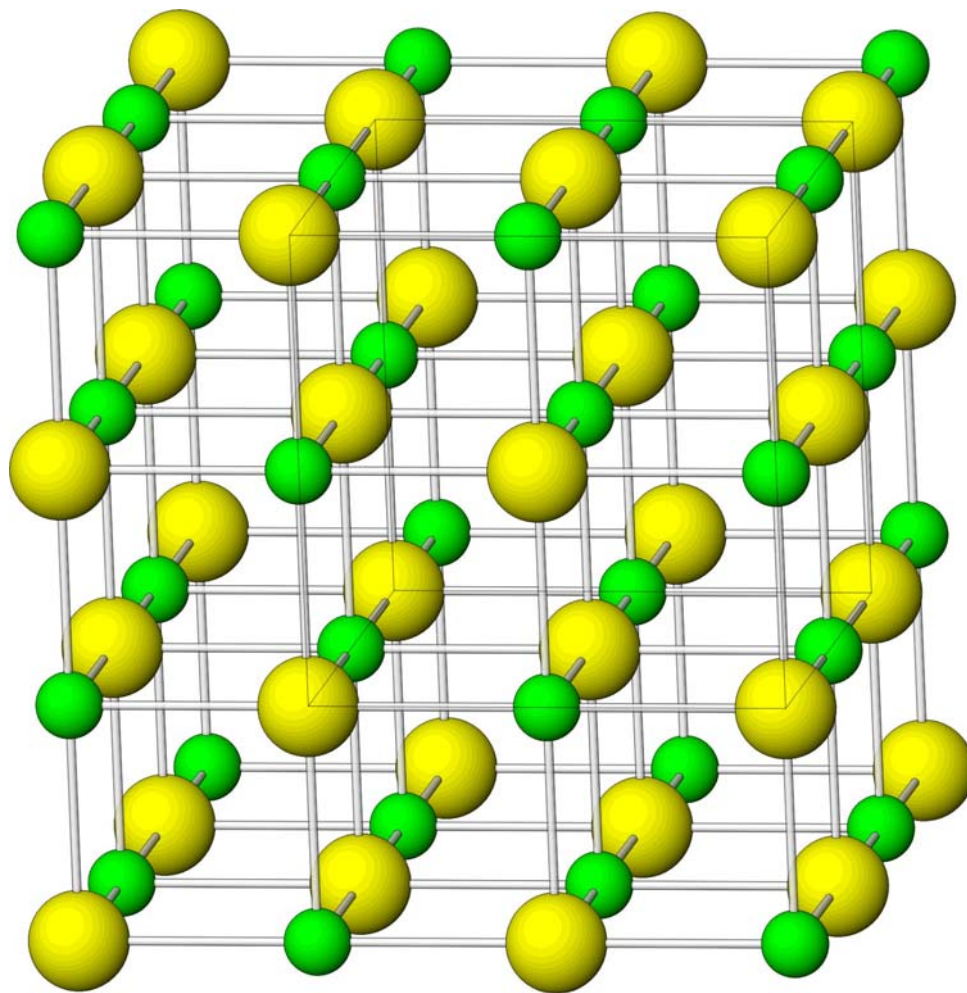
$a, b, c (e)$   *перенос на  $1/2t$  в направлении двух стрелок (встречается только в центрированных ячейках)*

$n$   *перенос на  $1/2t$  в направлении стрелки*

$d$   *перенос в направлении стрелки на  $1/2$  центрирующей трансляции, т.е. на  $1/4$  диагонали соответствующей гранецентрированной ячейки*

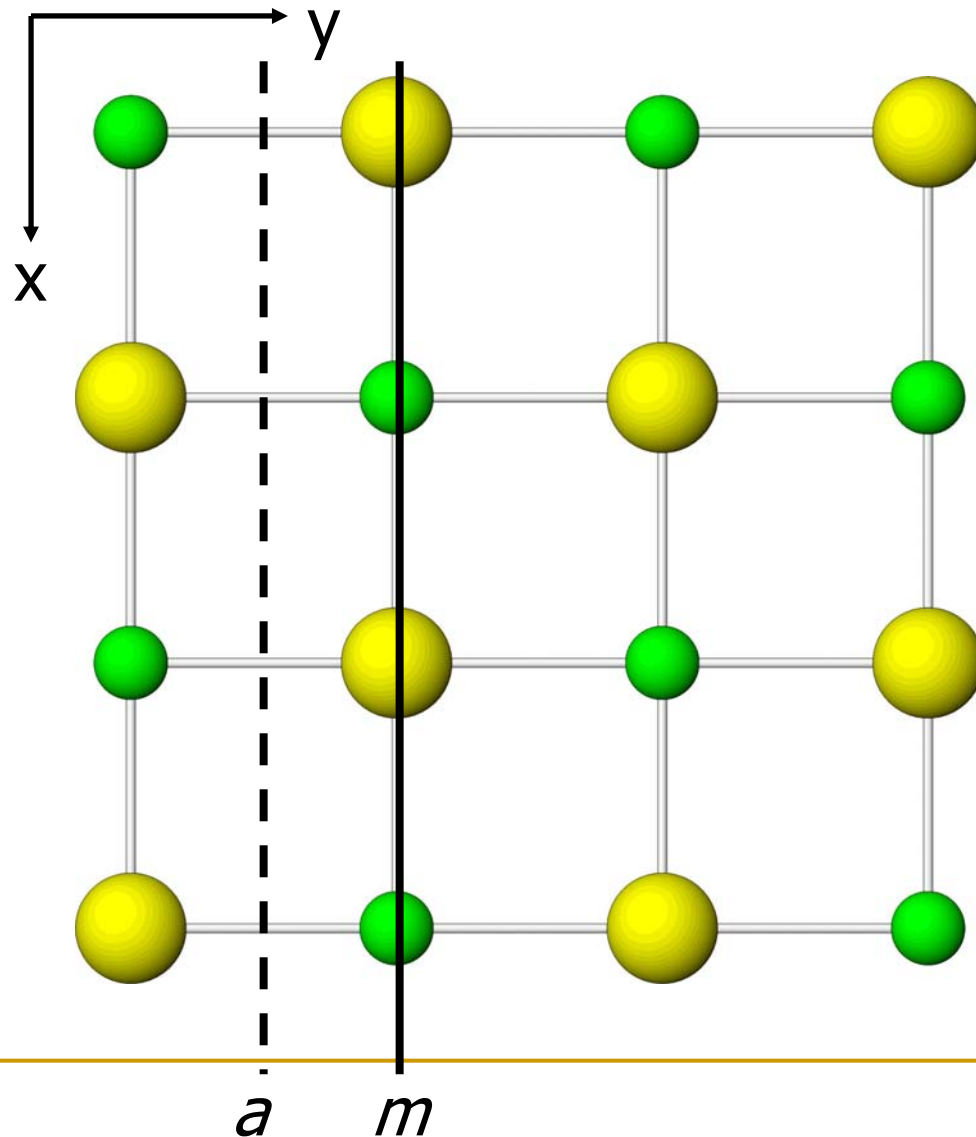
# Элементы симметрии кристаллических структур

Структура  
NaCl



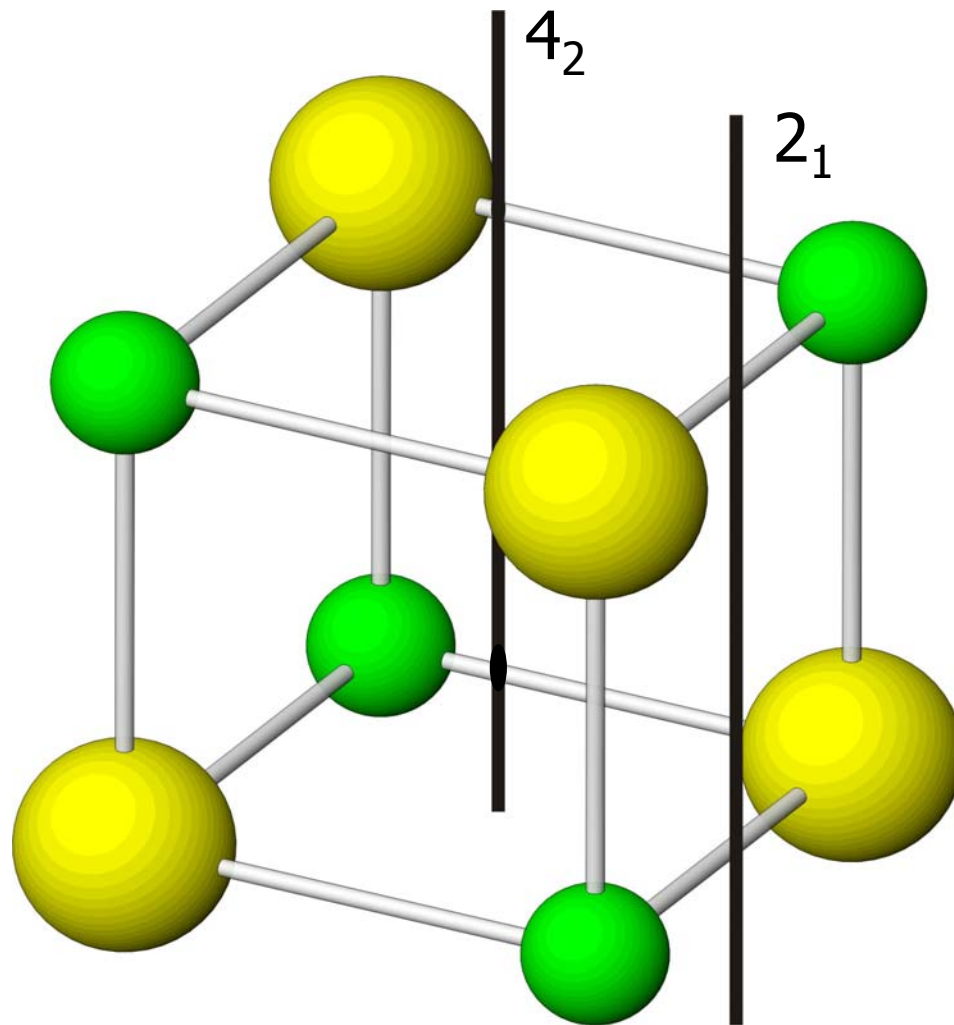
# Элементы симметрии кристаллических структур

Структура NaCl



# Элементы симметрии кристаллических структур

Структура  
NaCl



---

# Пространственные группы

**Пространственная группа** — совокупность преобразований симметрии кристаллической решетки, совмещающих эту решетку саму с собой

Всего существует 230 различных пространственных групп симметрии

32 точечные группы



230 пространственных групп

---

# Правила записи пространственных групп

## **Триклинная сингония:**

1. Тип решетки Браве (всегда Р-ячейка при стандартной установке)
2.  $P1$  или  $P-1$

## **Моноклинная сингония:**

1. Тип решетки Браве
2. Ось 2-го порядка или перпендикулярная ей плоскость

Примеры:  $P2_1/c$ ,  $P2$ ,  $Cc$

# Правила записи пространственных групп

## Ромбическая сингония:

1. Тип решетки Браве
2. Ось симметрии, совпадающая с первой кристаллографической осью (x) и перпендикулярная ей плоскость
3. Ось симметрии, совпадающая со второй кристаллографической осью (y) и перпендикулярная ей плоскость
4. Ось симметрии, совпадающая с третьей кристаллографической осью (z) и перпендикулярная ей плоскость

Примеры:  $Ibam$ ,  $P222_1$ ,  $Cma2$



# Правила записи пространственных групп

## Тригональная и гексагональная сингония:

1. Тип решетки Браве
2. Направление  $[0001]$  – ось симметрии, совпадающая с  $z$  и перпендикулярная ему плоскость
3. Большая диагональ: плоскость, проходящая вдоль большой диагонали и (или) перпендикулярная ей ось
4. Малая диагональ: плоскость, проходящая вдоль малой диагонали и (или) перпендикулярная ей ось

Примеры:  $R6_3/mc$ ,  $R6_3/mst$ ,  $R6_322_1$

# Правила записи пространственных групп

## Тетрагональная сингония:

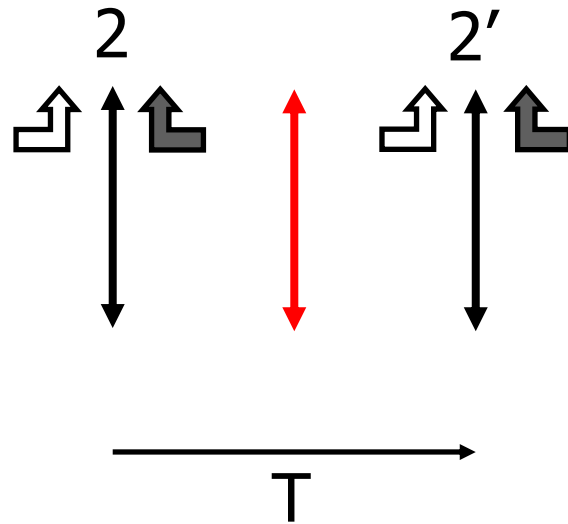
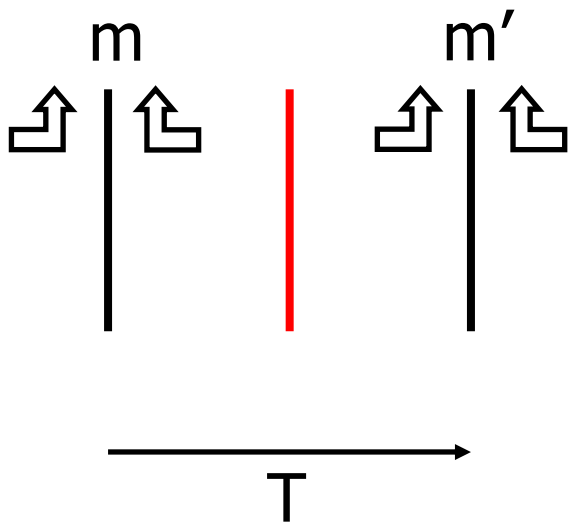
1. Тип решетки Браве
  2. Направление  $[001]$  – ось симметрии, совпадающая с  $z$  и перпендикулярная ему плоскость
  3. Направление  $[100] = [010]$  и перпендикулярная ему плоскость
  4. Диагональное направление  $[110]$  и перпендикулярная ему плоскость
- Примеры:  $I4_1/a$ ,  $P-42m$ ,  $I4_1/amd$

## Кубическая сингония:

1. Тип решетки Браве
  2. Координатное направление  $[100] = [010] = [001]$  и перпендикулярная ему плоскость
  3. Направление  $[111]$  – ось 3-го порядка
  4. Диагональное направление  $[110]$  и перпендикулярная ему плоскость
- Примеры:  $Fm-3m$ ,  $F-43m$ ,  $Pn-3m$ ,  $Pa-3$ ,  $P2_13$

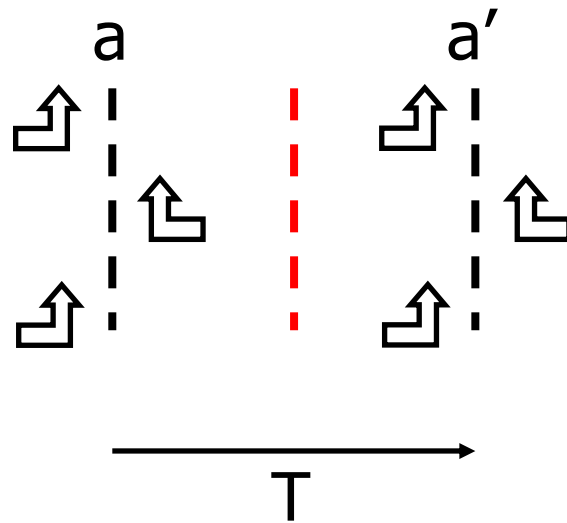
# Взаимодействие элементов симметрии с трансляциями

1. При взаимодействии элементов симметрии (плоскость, ось симметрии 2-го порядка, центр инверсии) с трансляциями перпендикулярными ( $T_{\perp}$ ) осям и плоскостям – появляется новый элемент симметрии, тождественный исходному и смещается на  $1/2$  трансляции ( $T/2$ )



# Взаимодействие элементов симметрии с трансляциями

1. При взаимодействии элементов симметрии (плоскость, ось симметрии 2-го порядка, центр инверсии) с трансляциями перпендикулярными ( $T_{\perp}$ ) осям и плоскостям – появляется новый элемент симметрии, тождественный исходному и смещается на  $1/2$  трансляции ( $T/2$ )

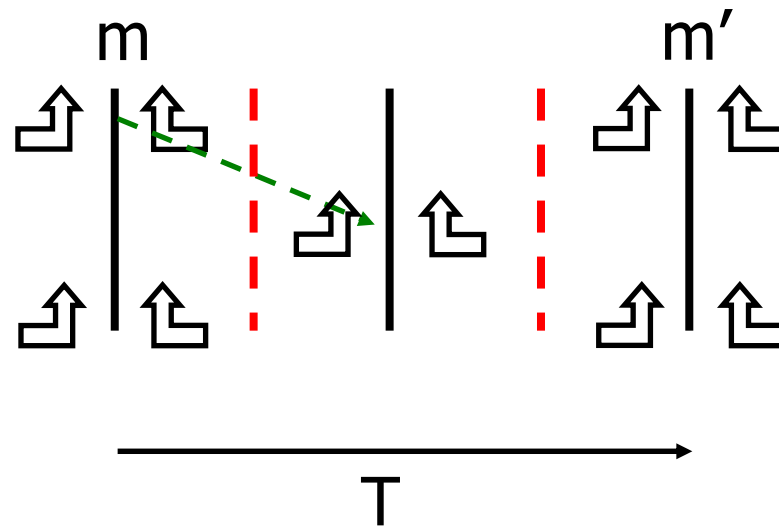


# Взаимодействие элементов симметрии с трансляциями

2. При взаимодействии элементов симметрии (плоскость, ось симметрии 2-го порядка, центр инверсии) с трансляциями параллельными ( $T_{\parallel}$ ) осям и плоскостям – трансляция вливается в исходный элемент симметрии и новый элемент симметрии совпадает со старым

# Взаимодействие элементов симметрии с трансляциями

3. При взаимодействии элементов симметрии (плоскость, ось симметрии 2-го порядка, центр инверсии) с трансляциями расположенными косо относительно элементов симметрии ( $T = t_{\parallel} + t_{\perp}$ ) осям и плоскостям –  $t_{\parallel}$  вливается в исходный элемент симметрии, а  $t_{\perp}$  переносит новый элемент симметрии на  $t_{\perp}/2$  ( $T/4$ )



# Взаимодействие элементов симметрии с трансляциями

4. Трансляция совокупности элементов симметрии (плоскость, ось симметрии 2-го порядка) смещает центр инверсии на  $\frac{1}{2}$  (T/2)

На пересечении оси и плоскости возникает центр инверсии

