



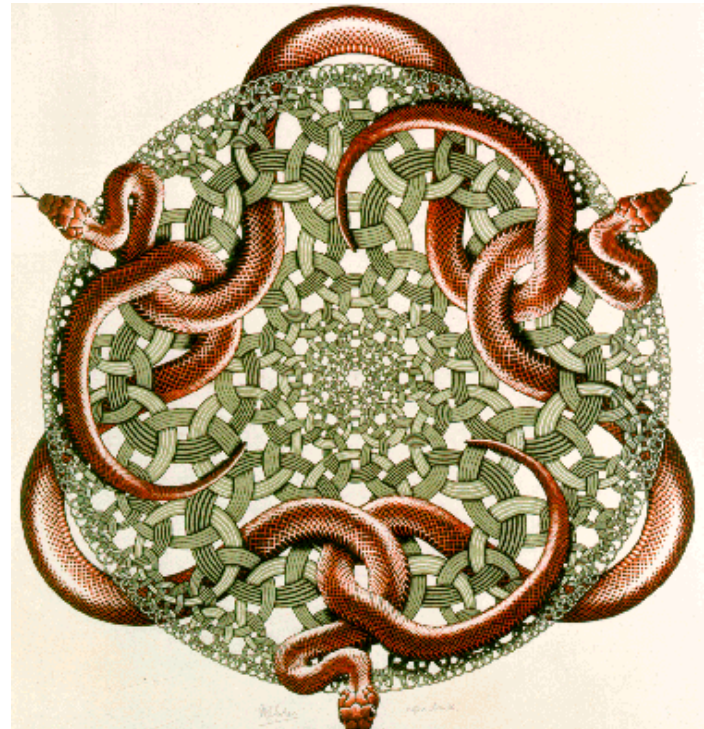
**Гуржий В.В., Кривовичев С.В.**

**Введение в  
КРИСТАЛЛОХИМИЮ и  
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ  
АНАЛИЗ**

**Лекция 2**

# Симметрия кристаллов

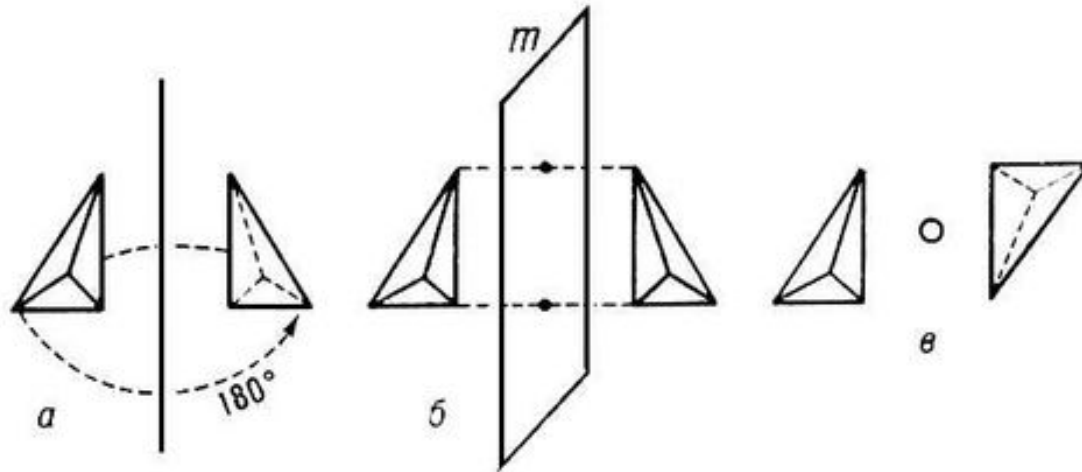
**Симметрия** — свойство геометрической фигуры при определенном преобразовании пространства приобретать новое положение, неотличимое от исходного (*самосовмещаться*).



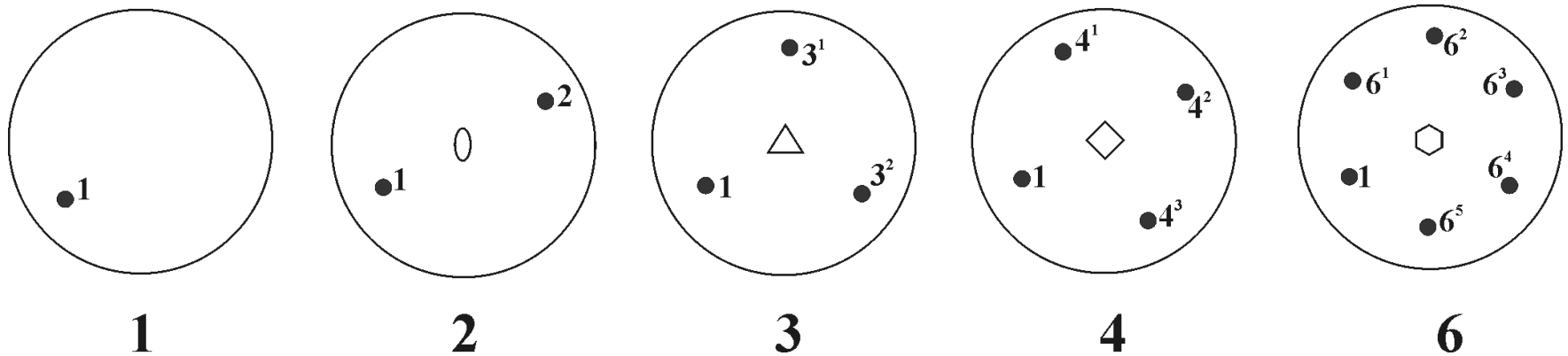
# Симметрия кристаллов

**Операция симметрии** – отражение геометрической фигуры самой в себя при некотором изометрическом преобразовании пространства

**Элемент симметрии** – геометрическое место точек, переходящее в себя при симметрическом преобразовании пространства



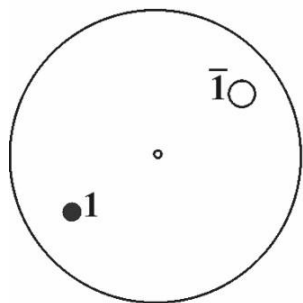
# Элементы симметрии кристаллов



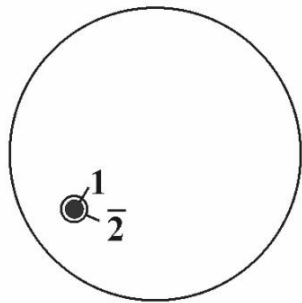
Простые оси симметрии – поворот на угол  **$360^\circ/n$**

**n** – порядок оси симметрии

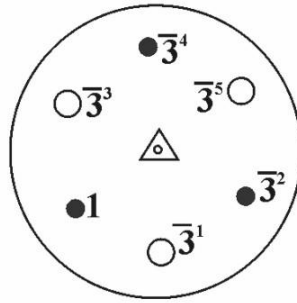
# Элементы симметрии кристаллов



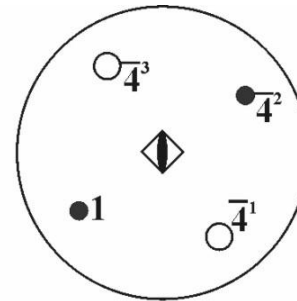
$$\bar{1} \equiv C$$



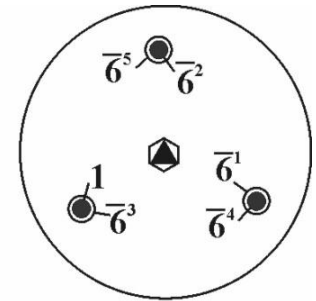
$$\bar{2} \equiv m_{\perp}$$



$$\bar{3} \equiv 3 + C$$



$$\bar{4}$$



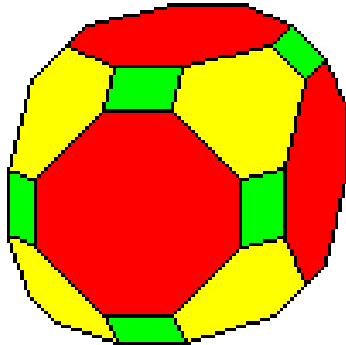
$$\bar{6} \equiv 3 + m_{\perp}$$

Инверсионные оси симметрии – поворот на угол  **$360^\circ/n$**  плюс отражение в **точке инверсии**

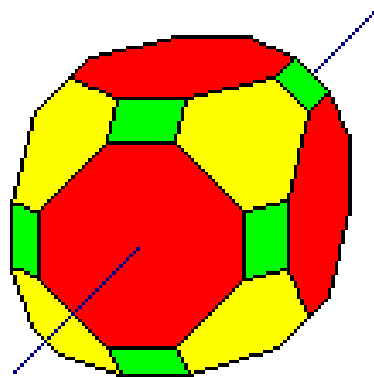
**$n$**  – порядок оси симметрии

# Элементы симметрии кристаллов

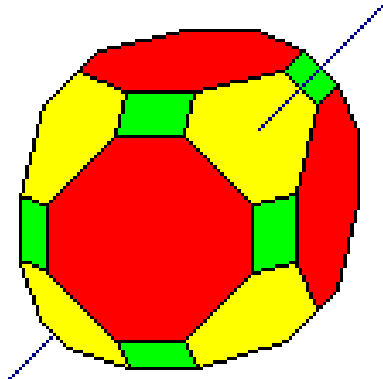
**Плоскость  
симметрии**



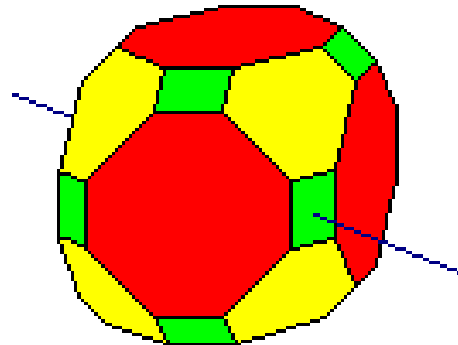
**Ось 4-го  
порядка**



**Ось 3-го  
порядка**



**Ось 2-го  
порядка**



# Элементы симметрии кристаллов

Категория	Сингония	Признак
Низшая	Триклинная	Ось 1-го порядка
	Моноклинная	Одна ось 2-го порядка
	Ромбическая	Три $\perp$ оси 2-го порядка
Средняя	Тригональная	Одна ось 3-го порядка
	Тетрагональная	Одна ось 4-го порядка
	Гексагональная	Одна ось 6-го порядка
Высшая	Кубическая	Четыре оси 3-го порядка

# Точечные группы

## 32 вида симметрии

**Группы симметрии,  
операции которых  
оставляют хотя бы  
одну точку  
пространства на месте**

Триклинная	1	$-1$					
Моноклинная	2	$m$	$2/m$				
Ромбическая	222	$mm2$	$mmm$				
Тетрагональная	4	$-4$	$4/m$	422	$4mm$	$-42m$	$4/mmm$
Тригональная	3	$-3$	32	$3m$	$-3m$		
Гексагональная	6	$-6$	$6/m$	622	$6mm$	$-62m$	$6/mmm$
Кубическая	23	$m-3$	432	$-43m$	$m-3m$		

## Центросимметричные группы



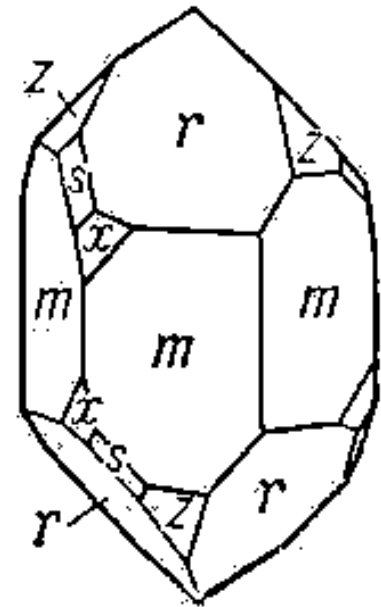
# Простые формы

**Простая форма** — совокупность граней, размноженных элементами симметрии

Всего известно 47 геометрически различных простых форм

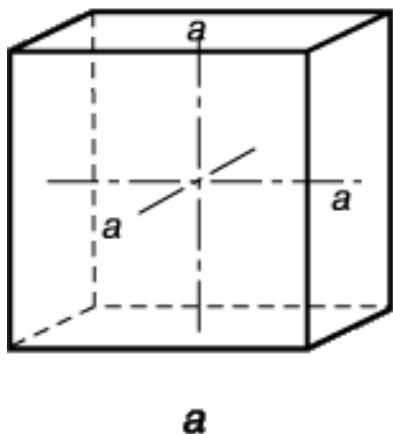
**Частные** - грани которых параллельны, перпендикулярны или симметрично пересекают элементы симметрии

**Общие** - грани которых произвольно пересекают все элементы симметрии

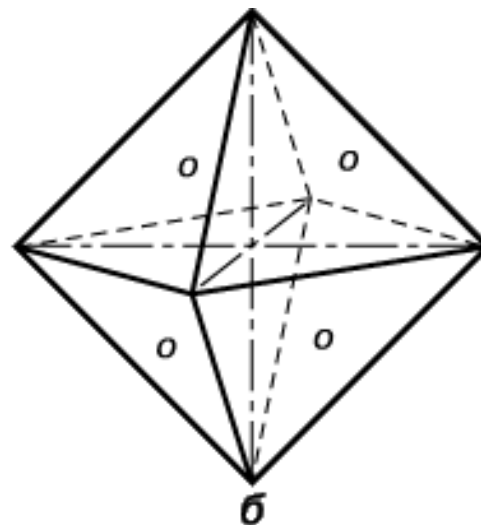


# Простые формы

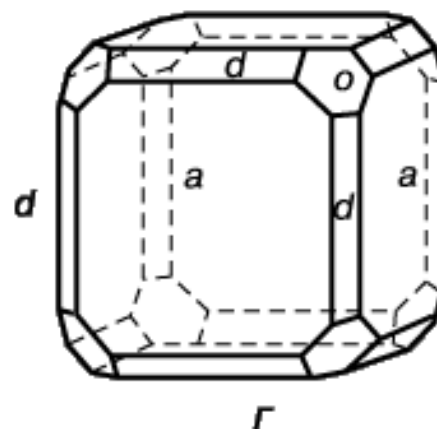
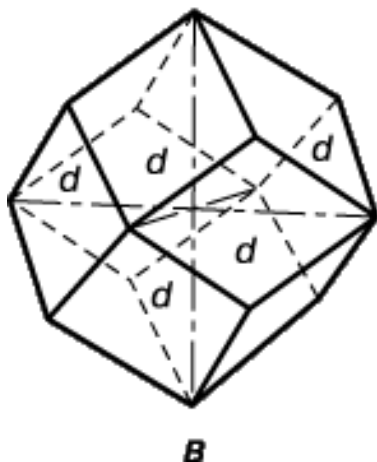
Куб



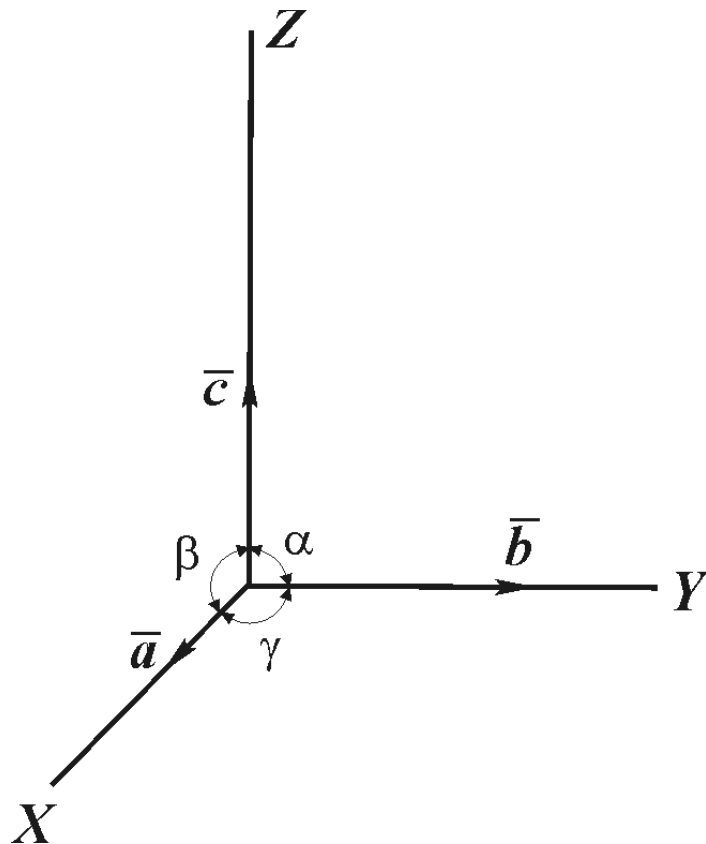
Октаэдр



Ромбо  
додекаэдр



# Кристаллографические системы координат



**Параметры, задающие ячейку**

**линейные параметры – длины векторов**

**$a, b, c$**

**угловые параметры – углы между векторами**

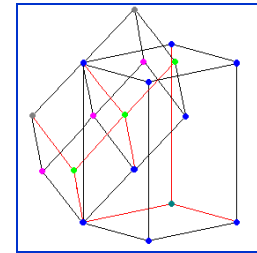
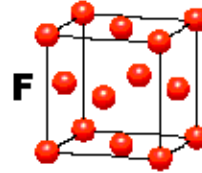
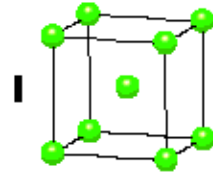
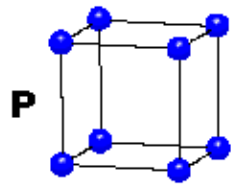
**$\alpha, \beta, \gamma$**

# Элементы симметрии кристаллических структур

## CUBIC

$$a = b = c$$

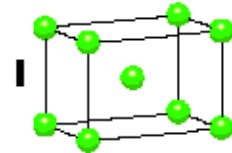
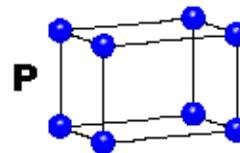
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



## TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

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

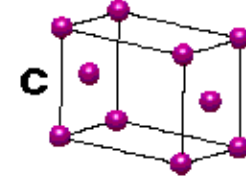
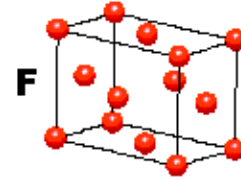
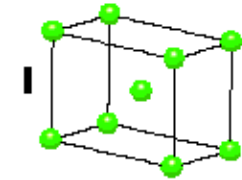
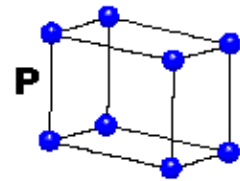


ромбоэдрическая ячейка в гексагональной установке

## ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

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

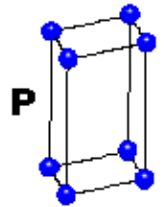


## HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

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

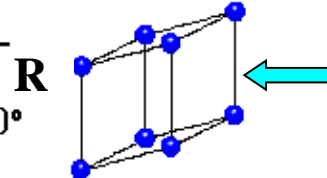
$$\gamma = 120^\circ$$



## TRIGONAL

$$a = b = c$$

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



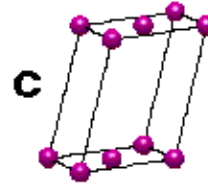
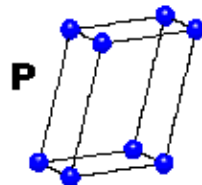
примитивная ромбоэдрическая ячейка

## MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

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

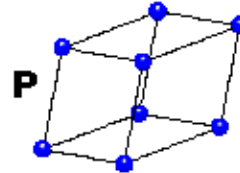
$$\beta \neq 120^\circ$$



## 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

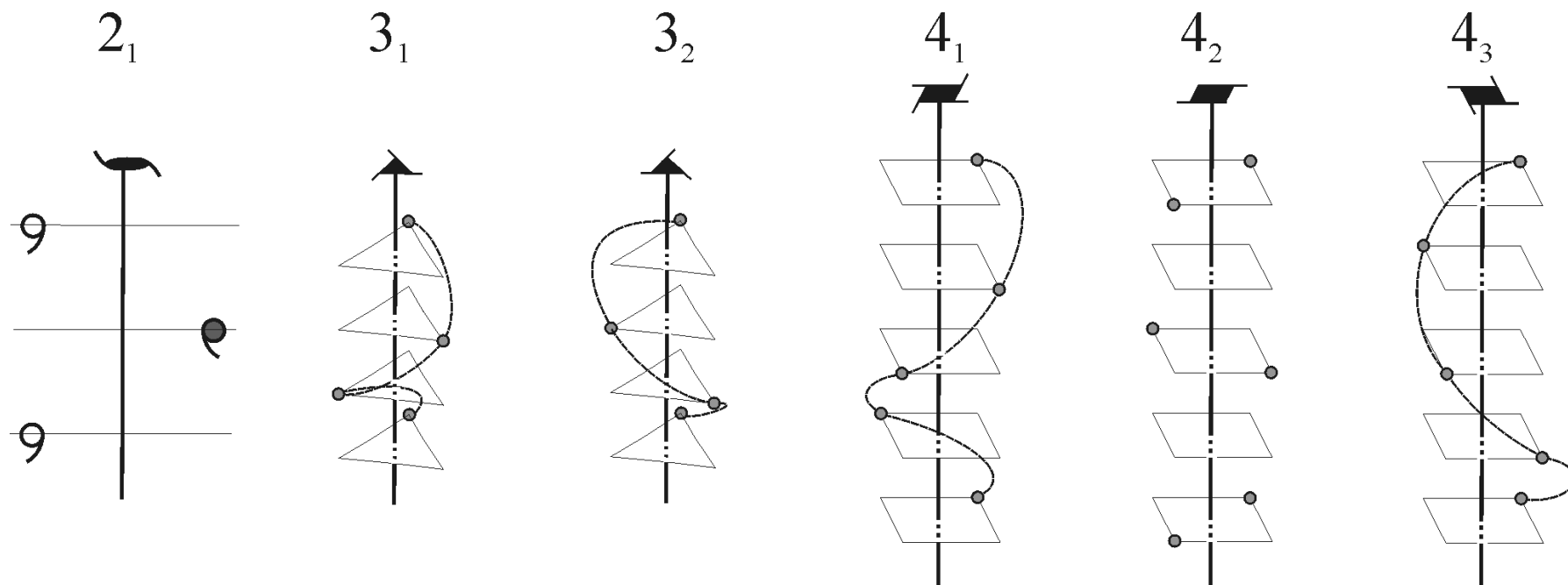
+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

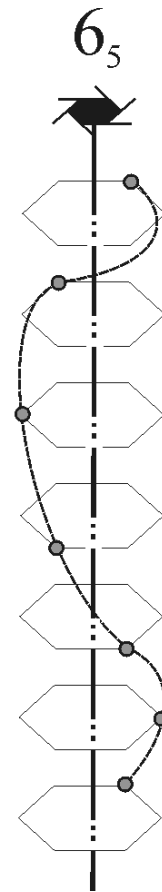
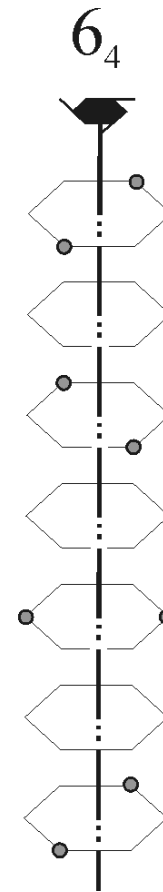
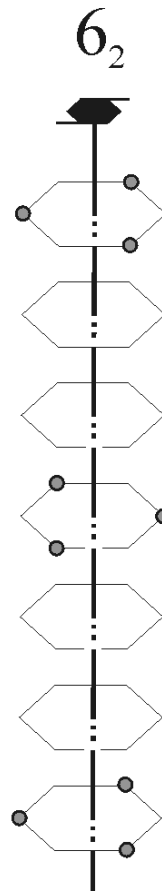
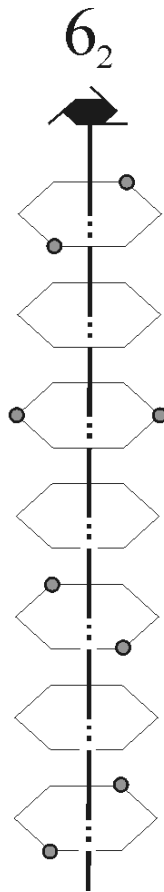
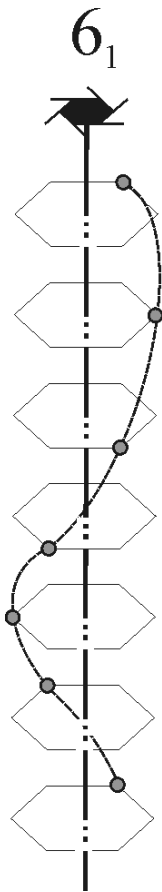
# Элементы симметрии кристаллических структур

## 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

1 нет обозн.

2 

3 

4 

6 

Инверсионные оси

$\bar{1}$  

$\bar{2}$   $m_{\perp}$

$\bar{3}$  

$\bar{4}$  


$\bar{6}$  

Винтовые оси

$2_1$  

$3_1$  

$4_1$  

$6_1$  

$3_2$  

$4_2$  

$6_2$  


$4_3$  

$6_3$  

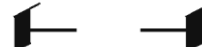
$6_4$  


$6_5$  

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 

$3_2$  

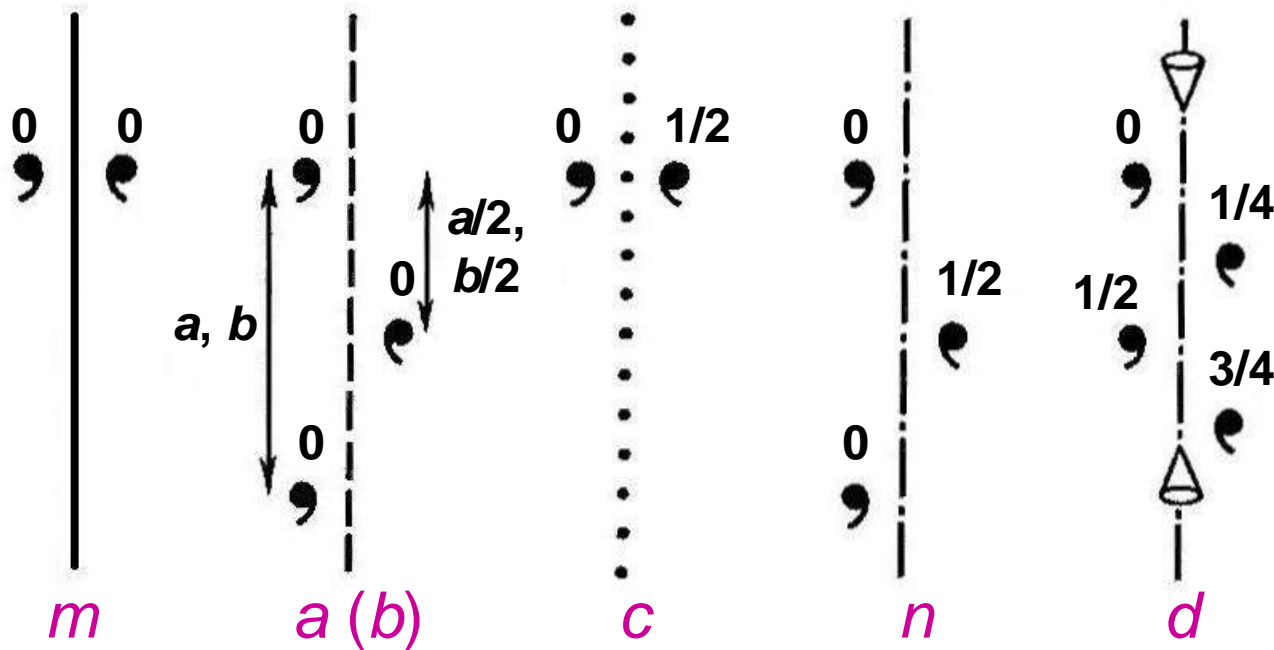
$2_1$  

$3_1$  

$\bar{3}$  

# Элементы симметрии кристаллических структур

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



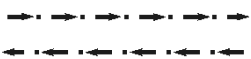
номенклатура плоскостей определяется направлением переноса  
например, плоскость  **$a$**  – перенос вдоль вектора  **$a$**   
(т.е. вдоль оси X)



# 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

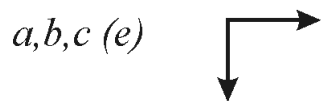
*Плоскости, параллельные плоскости чертежа*



*плоскость зеркального отражения, компоненты скольжения нет*



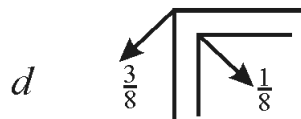
*перенос на  $1/2t$  в направлении стрелки*



*перенос на  $1/2t$  в направлении двух стрелок (встречается только в центрированных ячейках)*



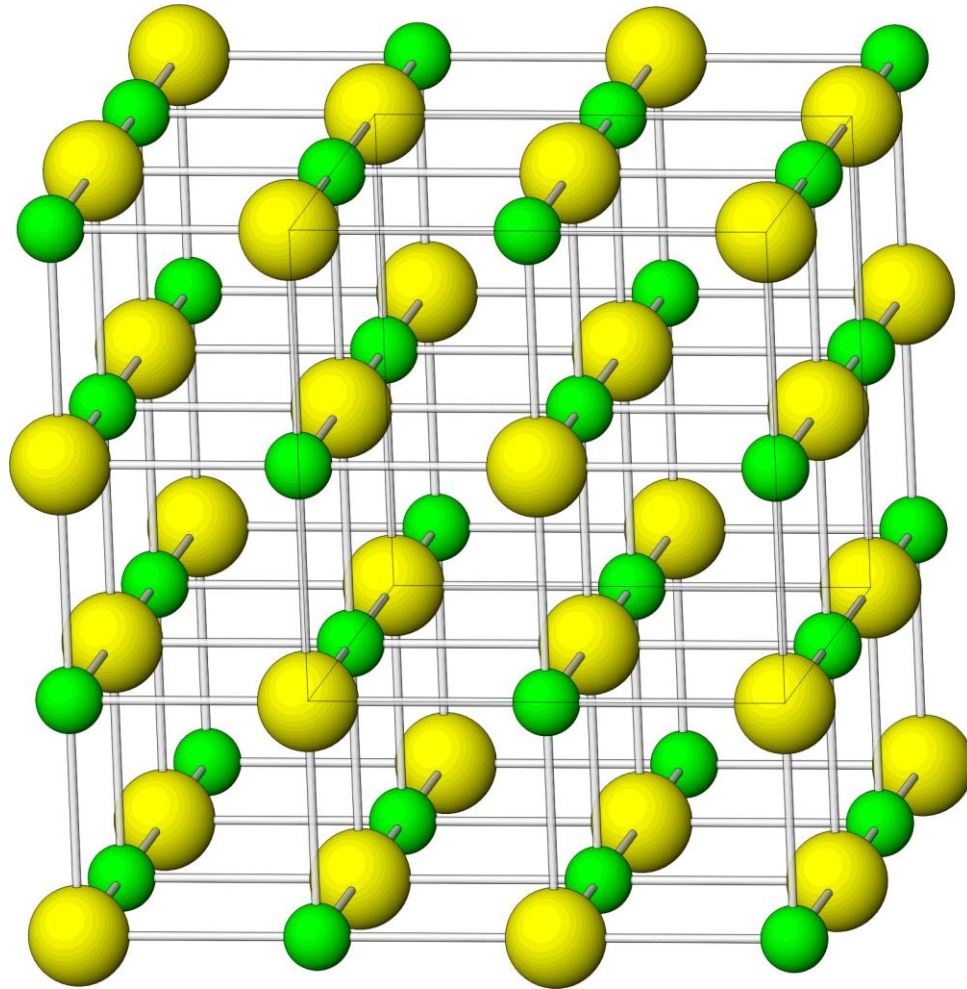
*перенос на  $1/2t$  в направлении стрелки*



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

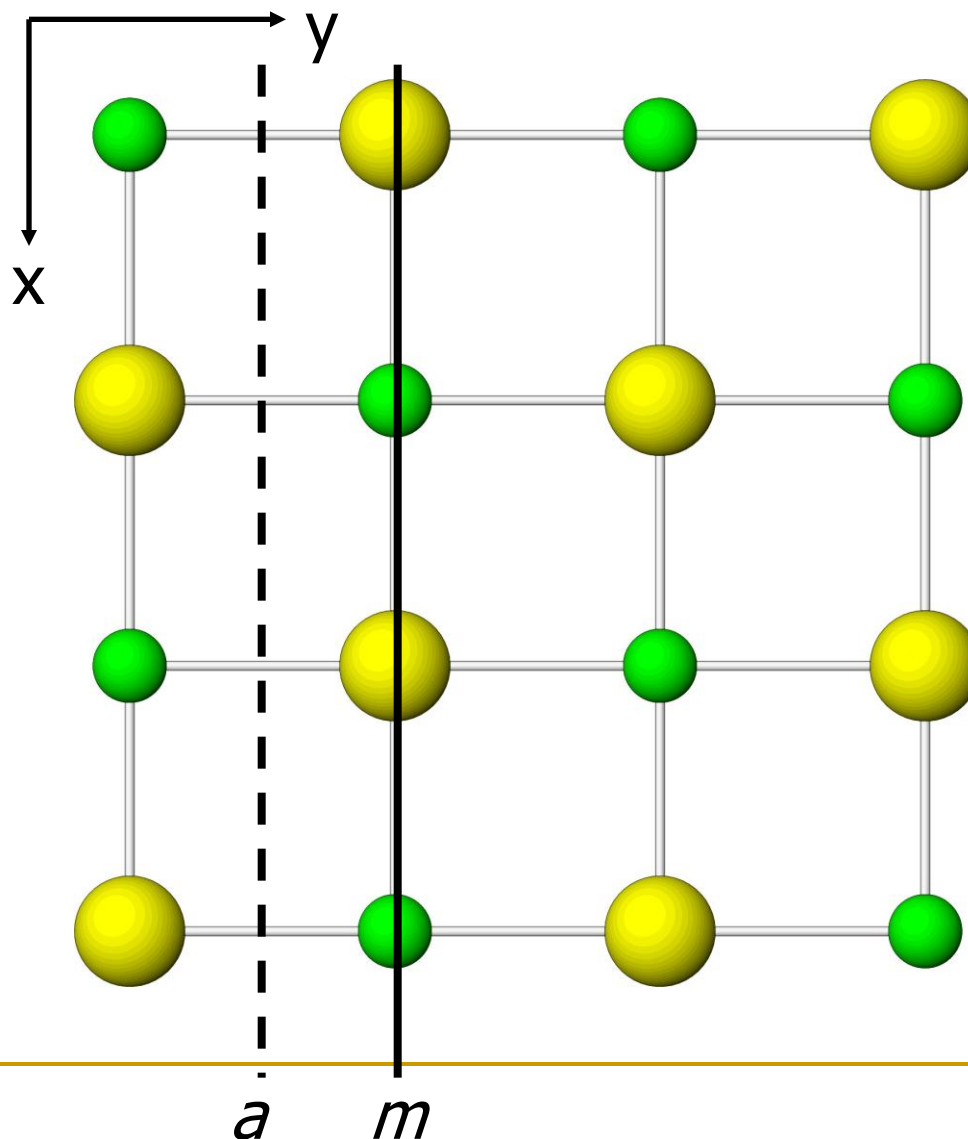
# Элементы симметрии кристаллических структур

Структура  
NaCl



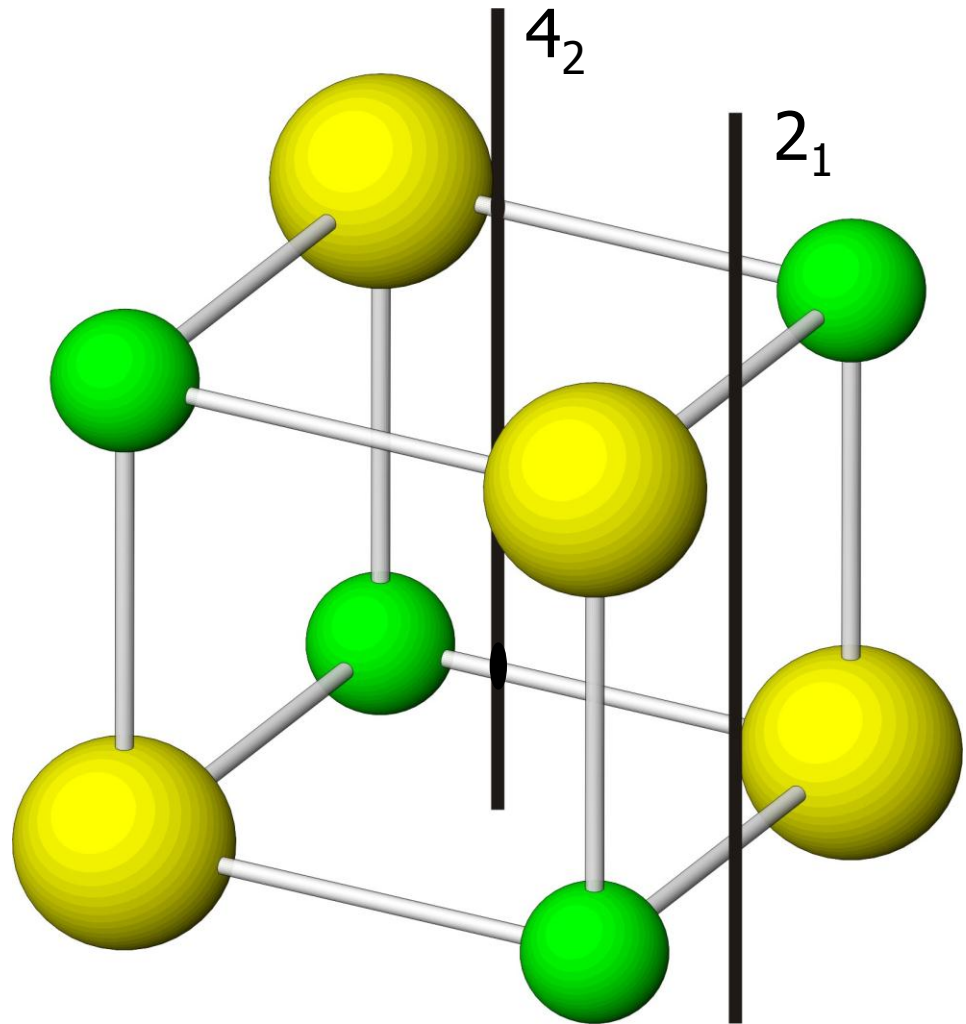
# Элементы симметрии кристаллических структур

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:  $R6_3/mc$ ,  $R6_3/mc2$ ,  $R6_322_1$

# 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:  $Fm-3m$ ,  $F-43m$ ,  $Pn-3m$ ,  $Pa-3$ ,  $P2_13$

# Правильные системы точек

**Правильная система точек** — совокупность точек, полученная размножением исходной точки всеми операциями симметрии данной пространственной группы

**Правильная система точек** занимает систему эквивалентных позиций

**ПСТ** можно получить из одной исходной точки, размножив ее элементами симметрии группы

Координаты каждой точки правильной системы выводятся из координат базисной точки с помощью матриц симметрических преобразований

---

# Правильные системы точек

Если каждую из координат  $x$ ,  $y$ ,  $z$  базисной точки можно выбрать произвольно, эта точка находится в **общем положении**. Позиция точки является **частной**, если ее координаты связаны между собой или фиксированы за счет расположения на элементе симметрии – поворотной оси, зеркальной плоскости, центре инверсии или особой точке сложной оси симметрии

ПСТ характеризуются **кратностью позиции** и **симметрией позиции**

---

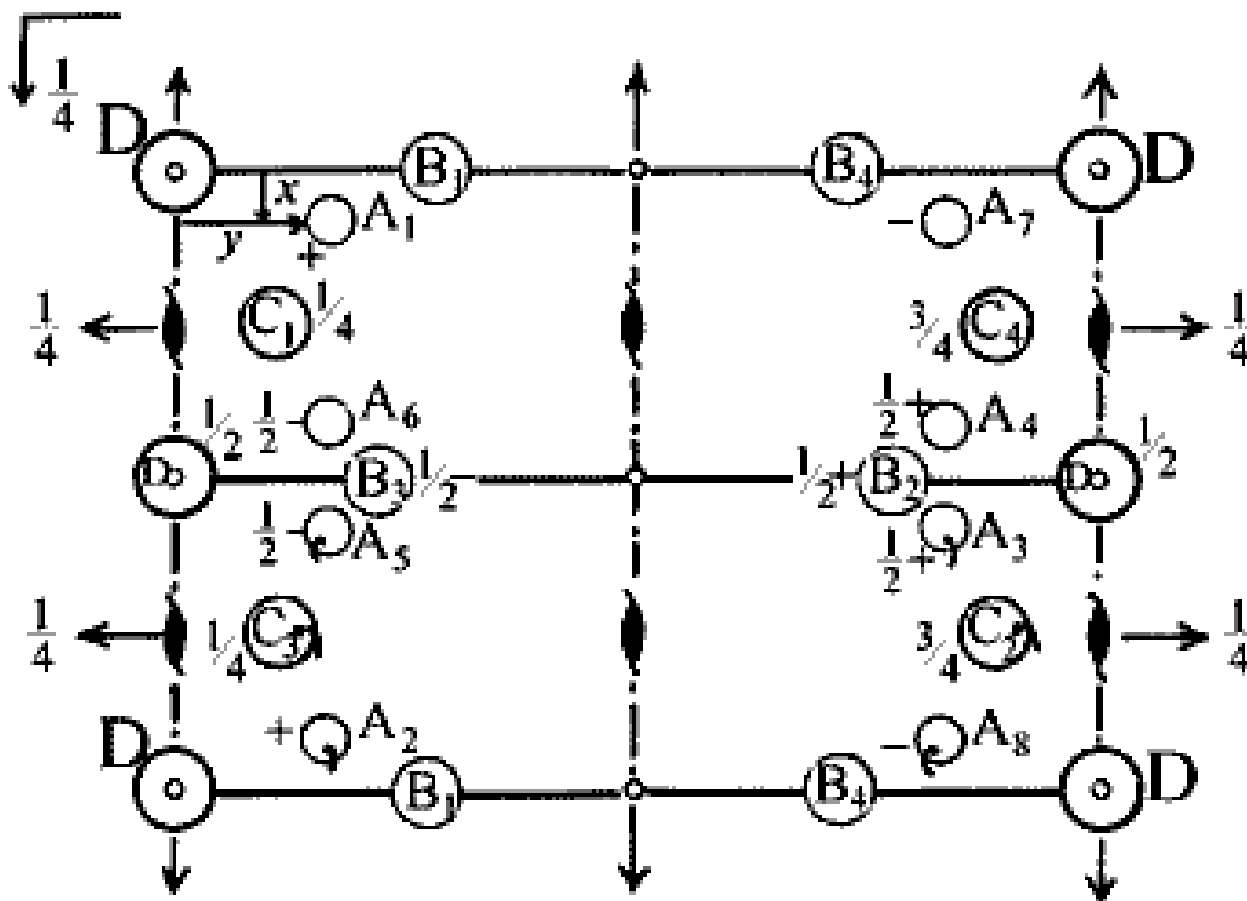
# Правильные системы точек

**Кратность позиции** – число точек, приходящихся на элементарную ячейку

Позиция	Симметрия позиции	Величина симметрии	Кратность позиции	Число степеней свободы
Общая	1	1	Равна $N$ – порядку пр. гр.	3
На плоскости $m$	$m$	2	$N / 2$	2
На оси $n$	$n$	$n$	$N / n$	1
В центре инверсии	ТГС позиции	Равна $p$ – порядку ТГС позиции	$N / p$	0

Порядок пр. гр. – кратность общей позиции

# Правильные системы точек



Общая (A) и  
частные  
(B,C,D)  
правильные  
системы

Проекция группы  $Ptma$

# Интернациональные таблицы по кристаллографии

[www.iucr.org](http://www.iucr.org)

$Pmna$

No. 53

$D_{2h}^7$

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

символ Шенфлиса

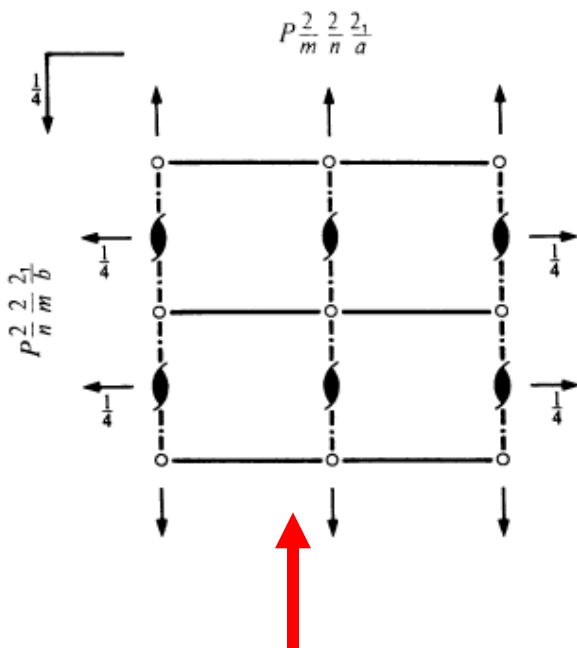
$mmm$

ТГС

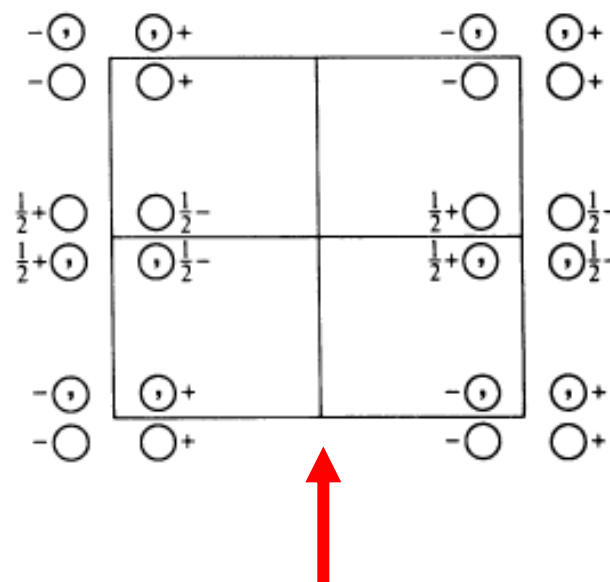
СИНГОНΙΑ

Orthorhombic

Patterson symmetry  $Pmmm$



проекция пр. гр.



размножение точек  
общей ПСТ

# Интернациональные таблицы по кристаллографии

[www.iucr.org](http://www.iucr.org)

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	<i>i</i>	1	(1) $x, y, z$ (5) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$ (6) $x + \frac{1}{2}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (7) $x + \frac{1}{2}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	(4) $x, \bar{y}, \bar{z}$ (8) $\bar{x}, y, z$
4	<i>h</i>	$m \dots$	$0, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$0, \bar{y}, \bar{z}$
4	<i>g</i>	$.2 \dots$	$\frac{1}{4}, y, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}, \bar{y}, \frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}, \bar{y}, \frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}, y, \frac{1}{4}$
4	<i>f</i>	$2 \dots$	$x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, 0$	$x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
4	<i>e</i>	$2 \dots$	$x, 0, 0$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, 0, 0$	$x + \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$
2	<i>d</i>	$2/m \dots$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		
2	<i>c</i>	$2/m \dots$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		
2	<i>b</i>	$2/m \dots$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$		
2	<i>a</i>	$2/m \dots$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$		

Reflection conditions

General:

$h0l : h + l = 2n$   
 $hk0 : h = 2n$   
 $h00 : h = 2n$   
 $00l : l = 2n$

Special: as above, plus

no extra conditions

$hkl : h = 2n$

$hkl : h + l = 2n$

$hkl : h + l = 2n$

$hkl : h + l = 2n$

$hkl : h + l = 2n$

$hkl : h + l = 2n$

$hkl : h + l = 2n$

ПСТ

условия погасаний