

# Раздел 1. Геометрическая кристаллография

- **Основные понятия кристаллографии**
  - **Элементы симметрии континуума и теоремы их сложения**
- **Классы симметрии (точечные группы)**
  - **Элементы симметрии дисконтинуума. Системы трансляций Бравэ. Базис.**
- **Пространственные группы, правильные системы точек**

# Лекция 1.1. Основные понятия кристаллографии

---

□ *Понятие о кристалле*

□ *Пространственная решетка*

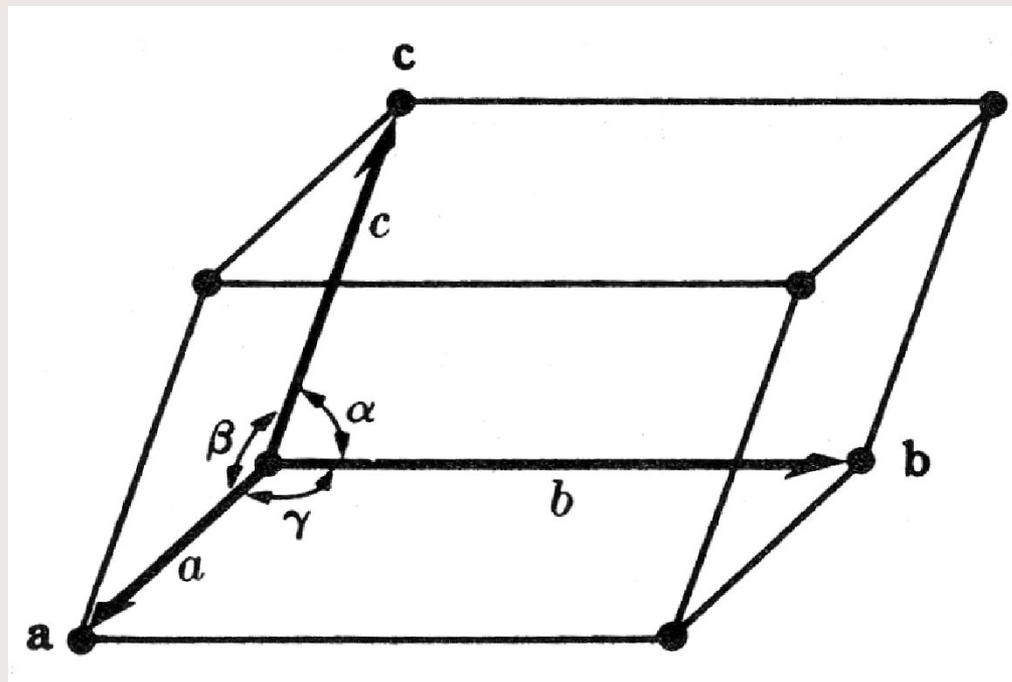
□ *Элементарная ячейка*

□ *Категории и сингонии*

□ *Индексы плоскостей и направлений кристалла*

□ *Проекции кристаллов*

# Элементарная ячейка



Любая элементарная ячейка описывается  
некомпланарными осями трансляциями –  $a$ ,  $b$ ,  $c$   
и осями углами:  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$

# Правила выбора элементарной ячейки

---

- *элементарная ячейка должна лучшим образом отражать симметрию решетки;*
- *предпочтение отдается перпендикулярным и равным друг другу трансляциям, т.е. число прямых углов и одинаковых трансляций должно быть максимальным;*
- *объем ячейки должен быть минимальным.*

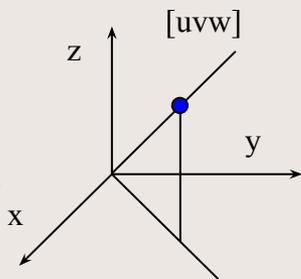
# Разделение кристаллов на сингонии и категории

Сингония	Оси координат	Категория
триклинная	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	низшая
моноклинная	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	
ромбическая	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
тригональная	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	средняя
тетрагональная	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
гексагональная	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
кубическая	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	высшая

# Индексы плоскостей и направлений кристалла

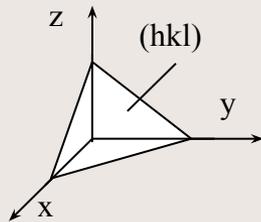
**[[m, p, q]]** *координаты узла*

**[uvw]**



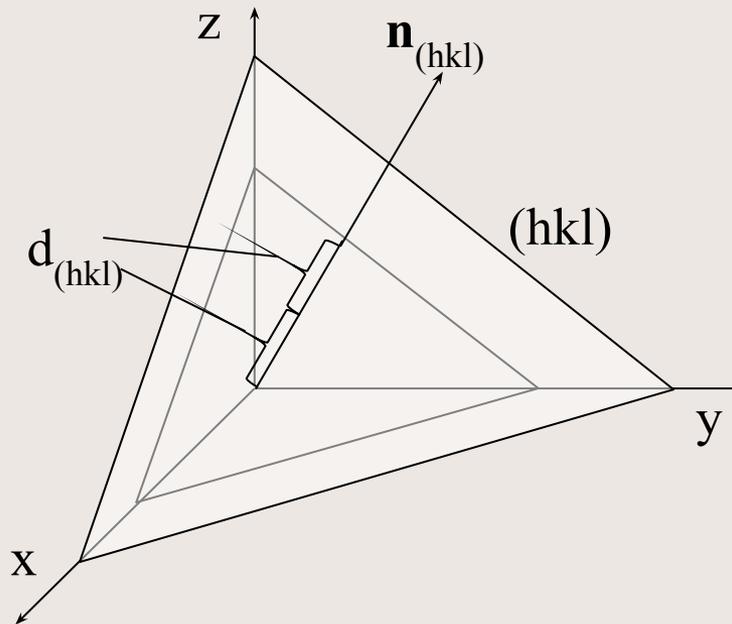
*индексы направления* – три целых, взаимно простых числа, пропорциональных координатам любой точки, лежащей на этом направлении, если оно проходит через начало координат

**(hkl)**



*индексы плоскости* – три целых, взаимно простых числа, обратно пропорциональных отрезкам, отсекаемым этой плоскостью на осях координат

# Межплоскостное расстояние



$(hkl)$  – семейство параллельных плоскостей

$d_{(hkl)}$  – межплоскостное расстояние

# Совокупность плоскостей

$$\frac{1}{d_{\text{гекс}}^2} = \frac{4(h^2 + hk + k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$\frac{1}{d_{\text{ромбич}}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

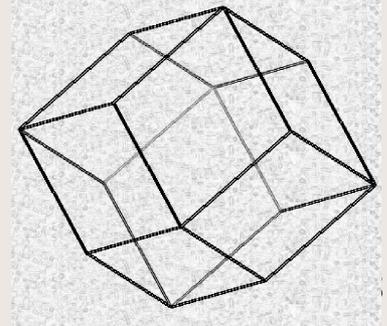
$$\frac{1}{d_{\text{куб}}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

$$\frac{1}{d_{\text{тетр}}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Плоскости кристалла, имеющие численно одинаковые индексы и одно и тоже межплоскостное расстояние, принадлежат к **одной совокупности  $\{hkl\}$**

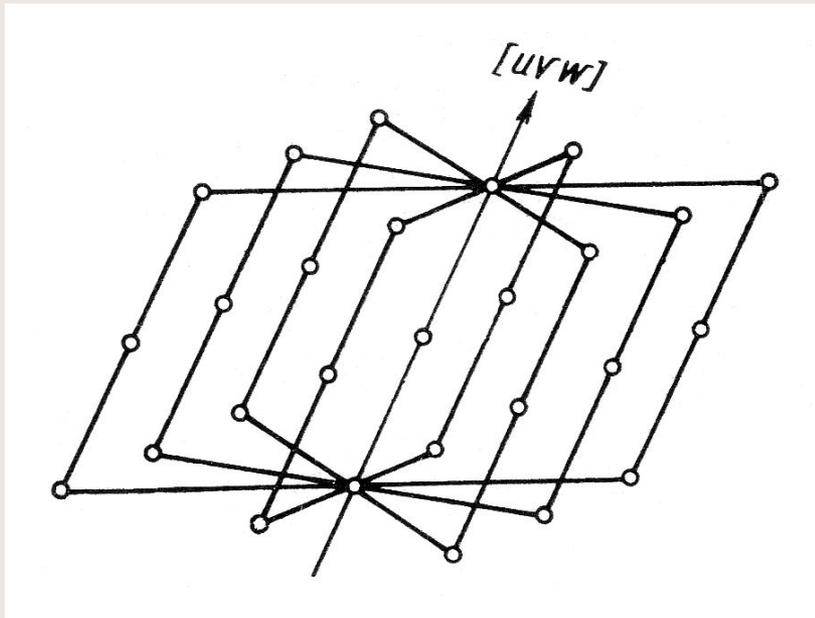
Кубическая сингония, совокупность  **$\{110\}$** :

$(110), (\bar{1}10), (1\bar{1}0), (\bar{1}\bar{1}0), (101), (\bar{1}01), (10\bar{1}),$   
 $(\bar{1}0\bar{1}), (011), (0\bar{1}1), (01\bar{1}), (0\bar{1}\bar{1})$



# Зона плоскостей

Плоскости кристалла, параллельные одному общему направлению, образуют **зону плоскостей**, а это общее направление называется **осью зоны**.



*Условие зональности:*

$$hu + kv + lw = 0,$$

*т.е. плоскость  $(hkl)$  принадлежит зоне с осью  $[uvw]$*

# Лекция 1.2. Элементы симметрии континуума и теоремы их сложения

---

□ *Элементы симметрии континуума*

□ *Эпюры элементов симметрии*

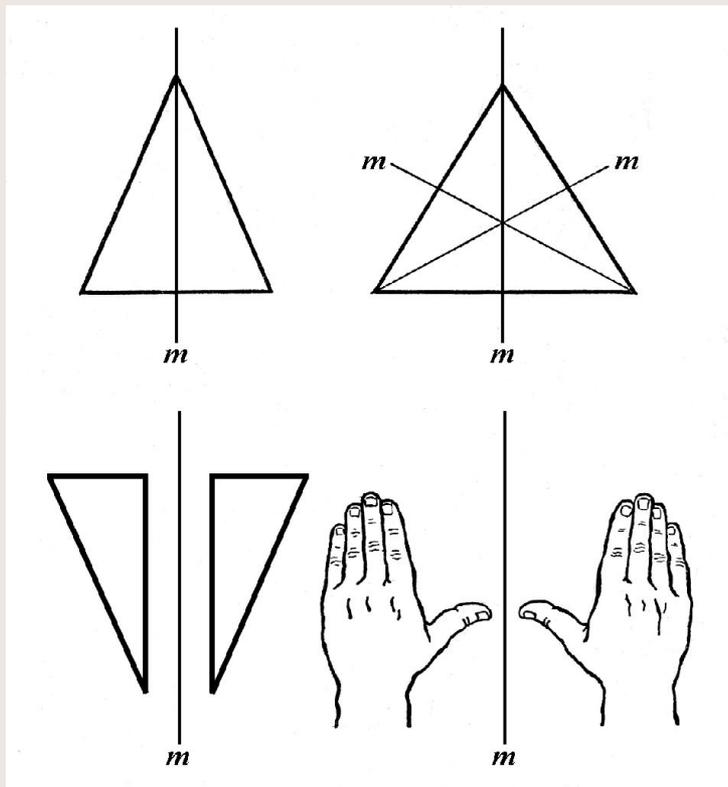
□ *Теоремы сложения элементов симметрии*

□ *Определяющие элементы симметрии*

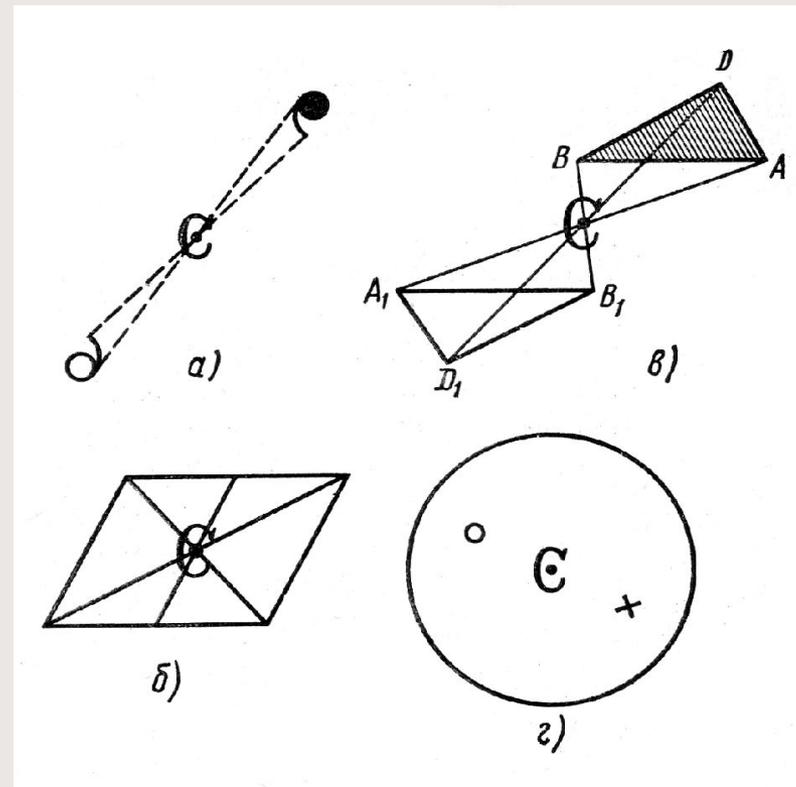
□ *Установка кристалла*

# Элементы симметрии

## Плоскость симметрии $m$



## Центр инверсии $C$



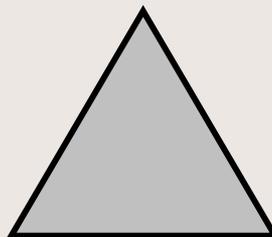
# Элементы симметрии

## Плоские фигуры с осями симметрии разного порядка

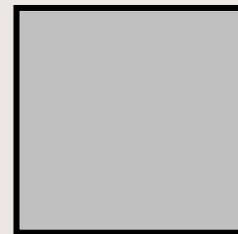
2-го порядка



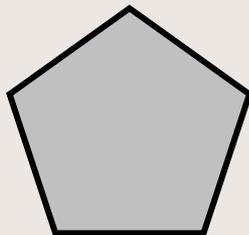
3-го порядка



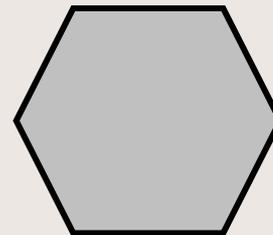
4-го порядка



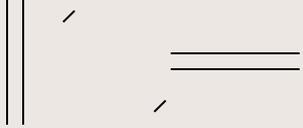
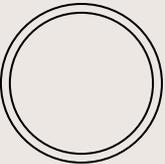
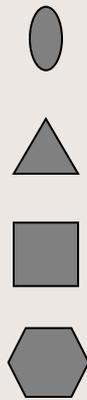
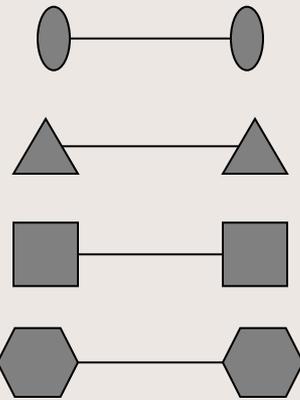
5-го порядка



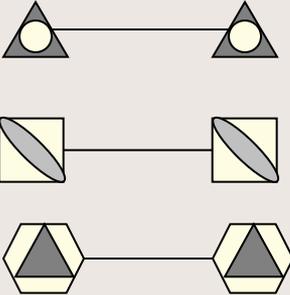
6-го порядка



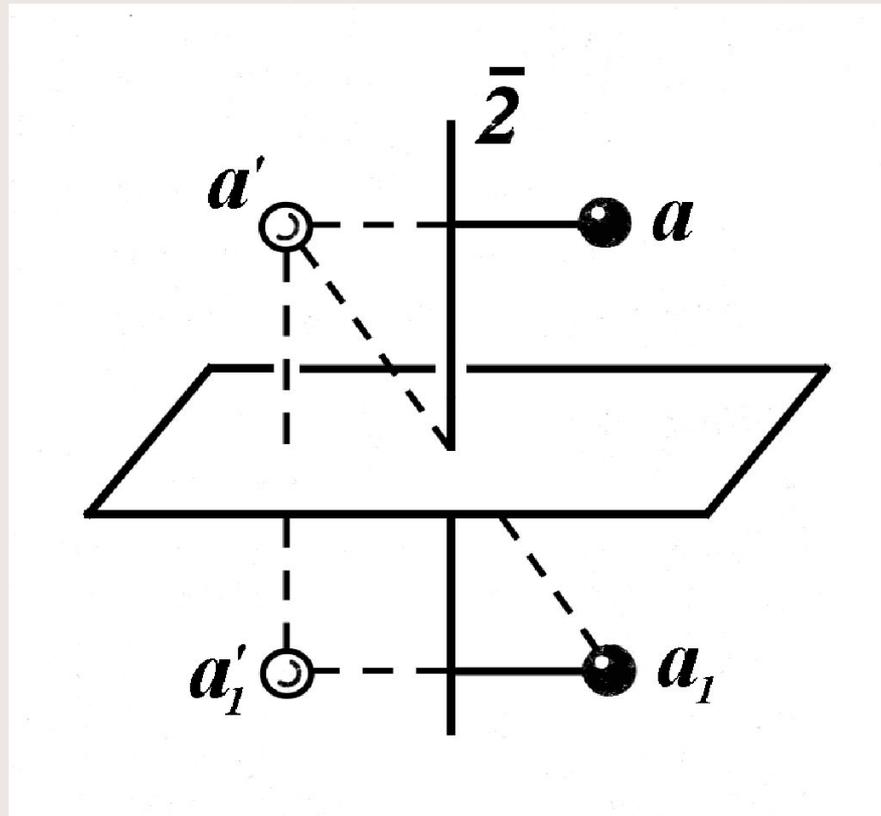
# Элементы симметрии внешней формы и их обозначения

	⊥ плоскости чертежа	 плоскости чертежа
плоскость симметрии $m (= P)$		
поворотные оси { 2 <sup>го</sup> порядка 3 <sup>го</sup> порядка 4 <sup>го</sup> порядка 6 <sup>го</sup> порядка		

# Элементы симметрии внешней формы и их обозначения

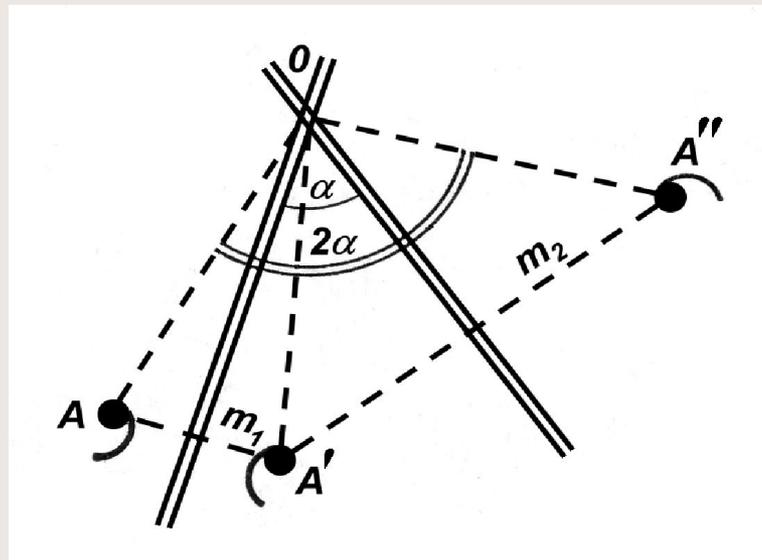
	⊥ плоскости чертежа	 плоскости чертежа
центр симметрии $\bar{1} (= C)$		
инверсионные оси	<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="font-size: 3em; margin-right: 10px;">}</div> <div> <p>3<sup>го</sup> порядка</p> <p>4<sup>го</sup> порядка</p> <p>6<sup>го</sup> порядка</p> </div> </div> 	

# Иллюстрация равенства $m = \bar{2}$



# Теоремы сложения элементов симметрии

**Теорема 1.** *Линия пересечения двух плоскостей симметрии есть ось симметрии с элементарным углом поворота в два раза большим угла между плоскостями.*



# Теоремы сложения элементов симметрии

**Теорема 2.** *Через точку пересечения двух осей симметрии проходит третья, равнодействующая им.*

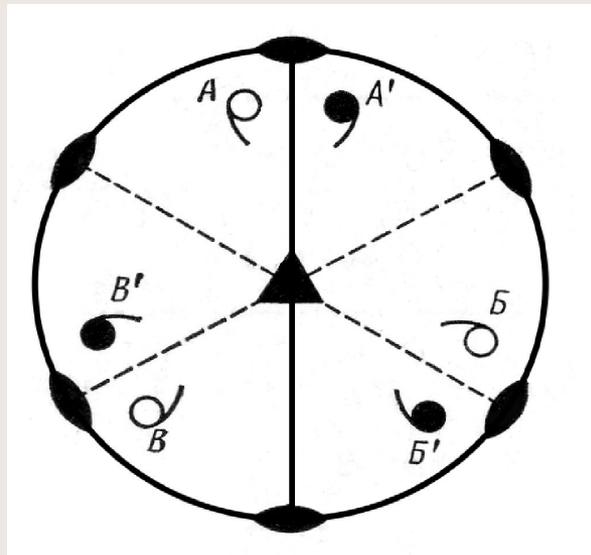
**Теорема 3.** *В точке пересечения оси четного порядка с перпендикулярной ей плоскостью симметрии расположен центр инверсии.*

## **Следствие:**

*В центросимметричном кристалле сумма осей симметрии четного порядка равна числу плоскостей симметрии.*

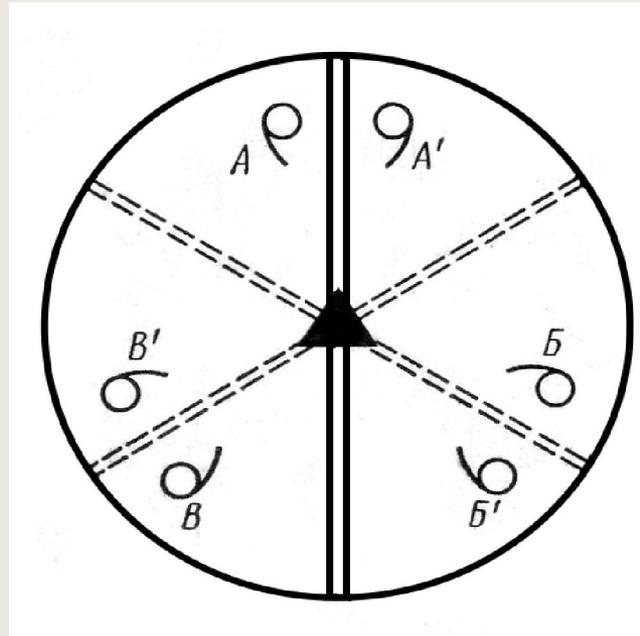
# Теоремы сложения элементов симметрии

**Теорема 4.** Если перпендикулярно оси порядка  $n$  расположена хотя бы одна ось второго порядка, то число таких осей второго порядка равно  $n$ .



# Теоремы сложения элементов симметрии

**Теорема 5.** Если через ось порядка  $n$  проходит хотя бы одна плоскость симметрии, то всего таких плоскостей симметрии должно быть  $n$ .



# Характерная симметрия и установка кристалла в зависимости от сингонии

	Сингония	Характерная симметрия	Расположение осей
<i>низшая категория</i>	триклинная	$1$ или $\bar{1}$	по ребрам кристалла
	моноклинная	$2$ или $\bar{2} (= m)$	ось $Y \parallel 2$ или $\perp m$
	ромбическая	<i>три оси</i> $2$ или <i>три оси</i> $\bar{2} (= m)$	<i>оси</i> $X, Y, Z \parallel 2$ или $\perp m$

# Характерная симметрия и установка кристалла в зависимости от сингонии

	Сингония	Характерная симметрия	Расположение осей
<i>средняя категория</i>	тригональная	<i>ось 3 или <math>\bar{3}</math></i>	<i>главная ось параллельна Z, остальные – в плоскости XY</i>
	тетрагональная	<i>ось 4 или <math>\bar{4}</math></i>	
	гексагональная	<i>ось 6 или <math>\bar{6}</math></i>	
<i>высшая</i>	кубическая	<i>четыре оси 3</i>	<i>оси X, Y, Z ⊥ трем осям 4, <math>\bar{4}</math> или 2</i>

# Лекция 1.3. Классы симметрии (точечные группы)

---

□ *Классы симметрии (точечные группы)*

□ *Главные направления*

□ *Общее и частное положения*

# Классы симметрии

*Класс симметрии* – множество элементов симметрии, действующих на плоскости и направления в кристалле.

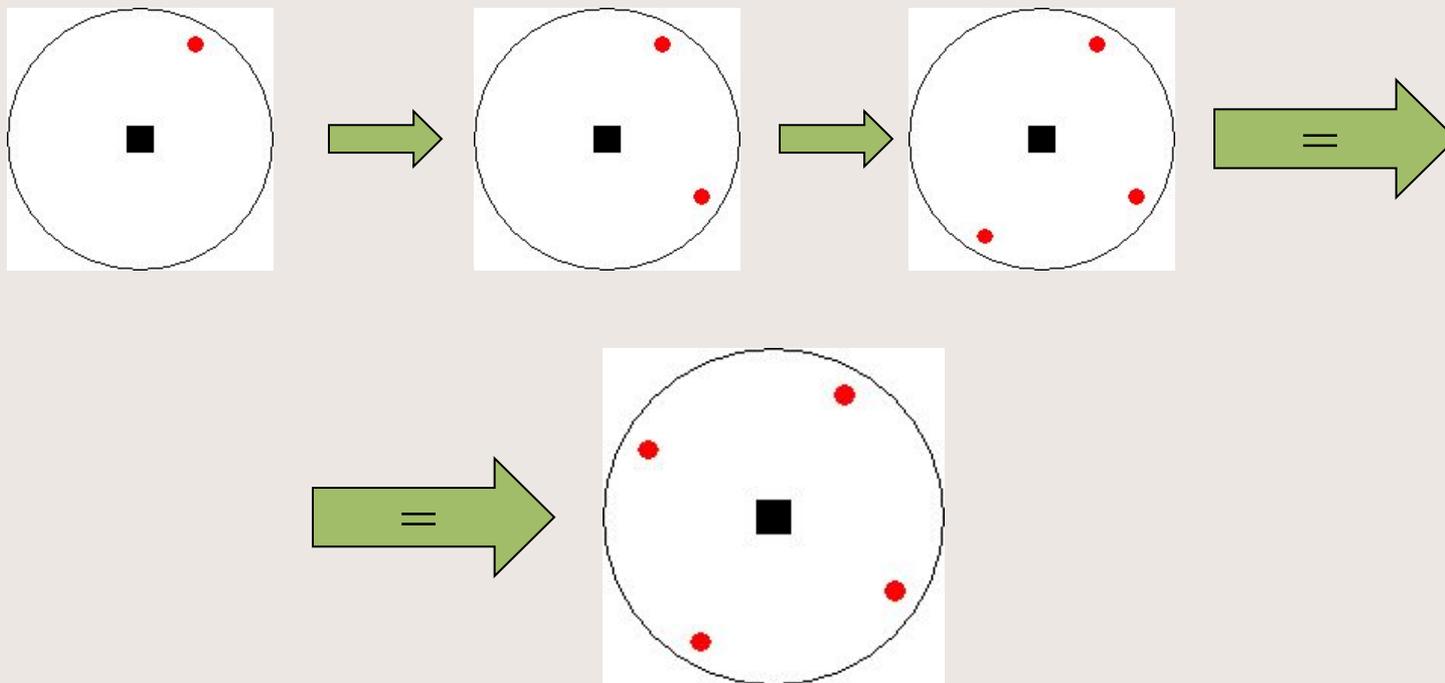
*Вывод классов симметрии* – перебор всех возможных сочетаний элементов симметрии, пересекающихся в одной точке.

*Возможные варианты:*

- 1) Классы с одной поворотной осью
- 2) Классы с одной инверсионной осью
- 3) Классы с 1<sup>ой</sup> поворотной осью и  $\perp$  осями 2<sup>го</sup> порядка
- 4) Классы с одной поворотной осью и  $\perp$  осями 2<sup>го</sup> и 3<sup>го</sup> порядка
- 5) Классы с несколькими осями высшего порядка

# Пример вывода классов симметрии

ось 4

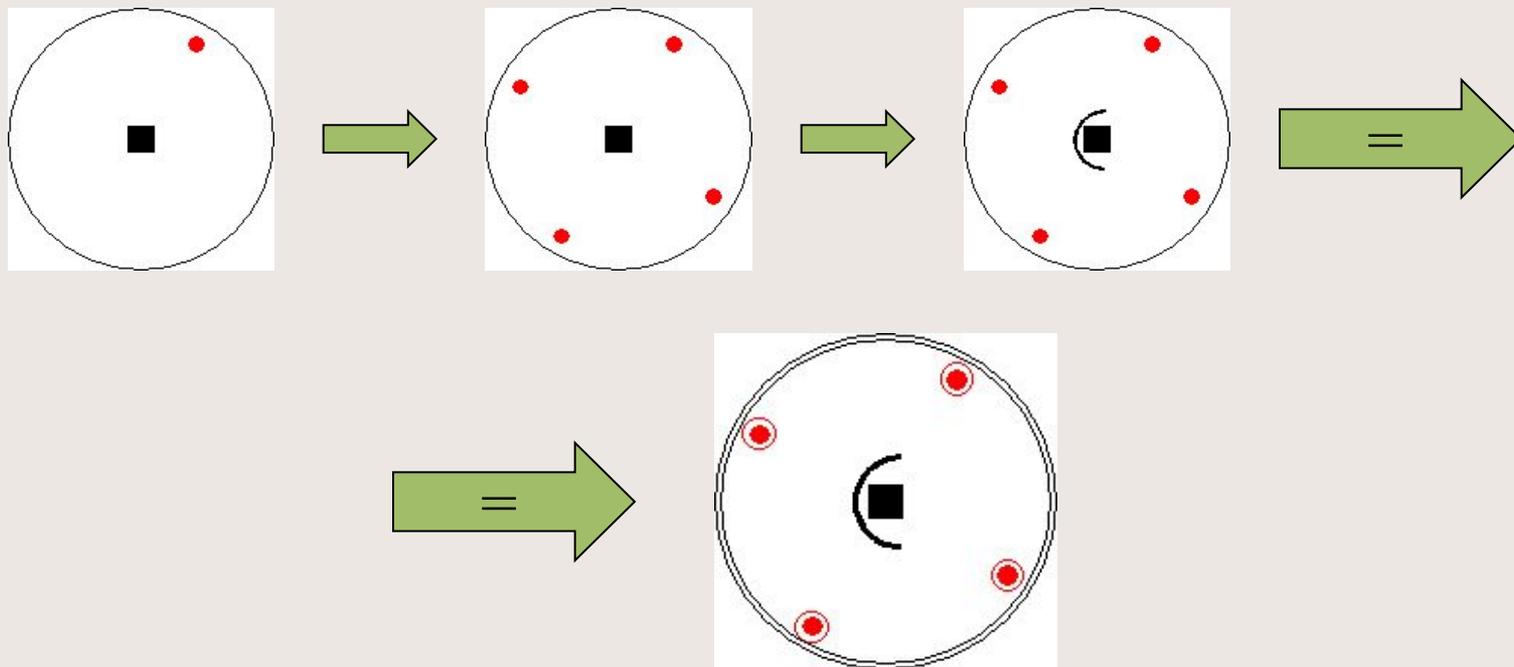


результат – класс **4**

кратность точки – 4

# Пример вывода классов симметрии

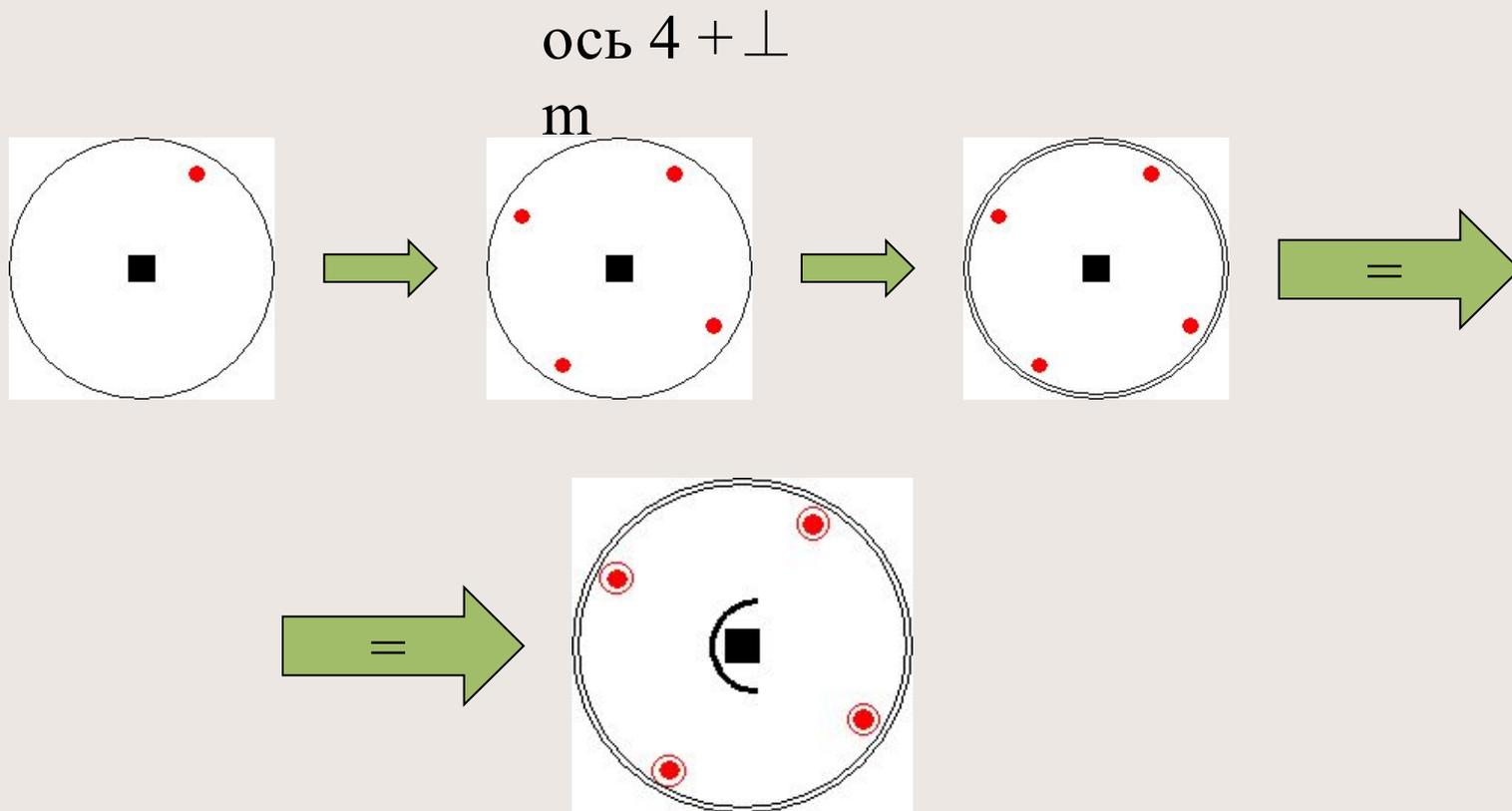
ось  $4 + \bar{1}$



результат – класс  $4/m$

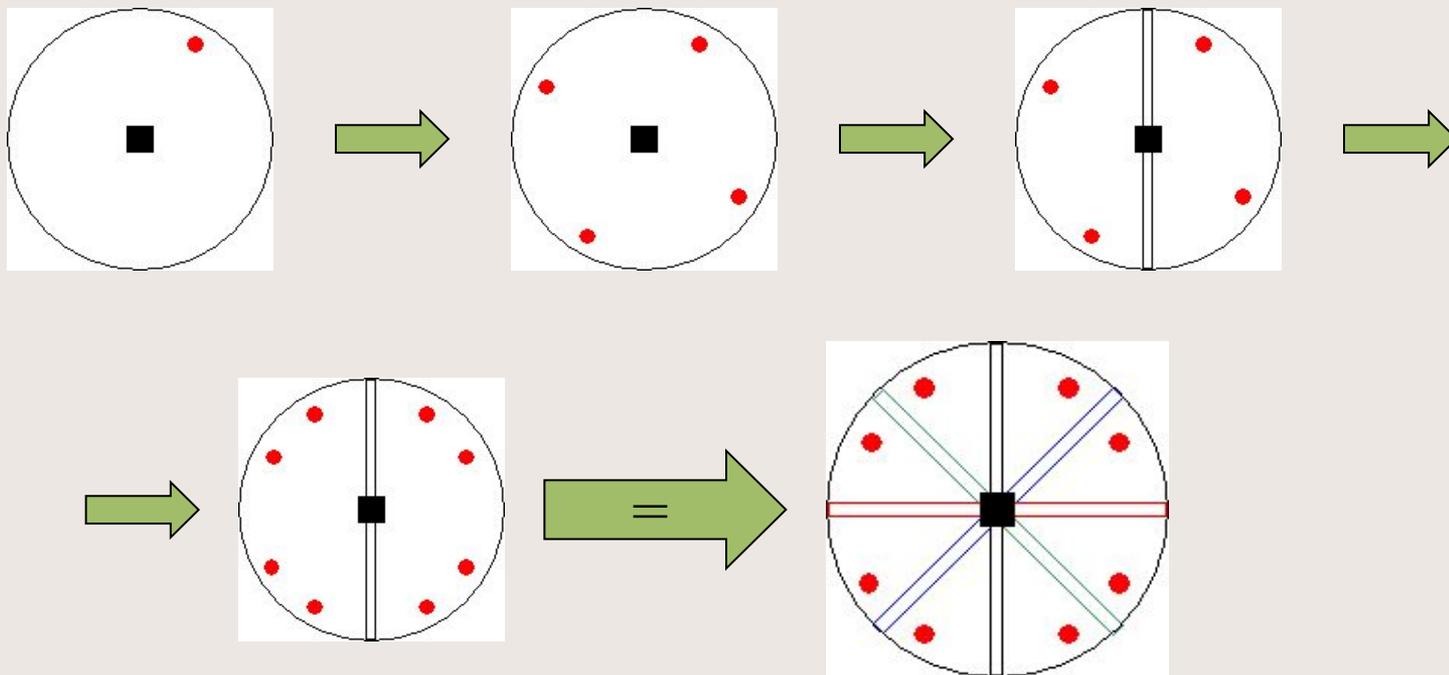
кратность точки – 8

# Пример вывода классов симметрии



# Пример вывода классов симметрии

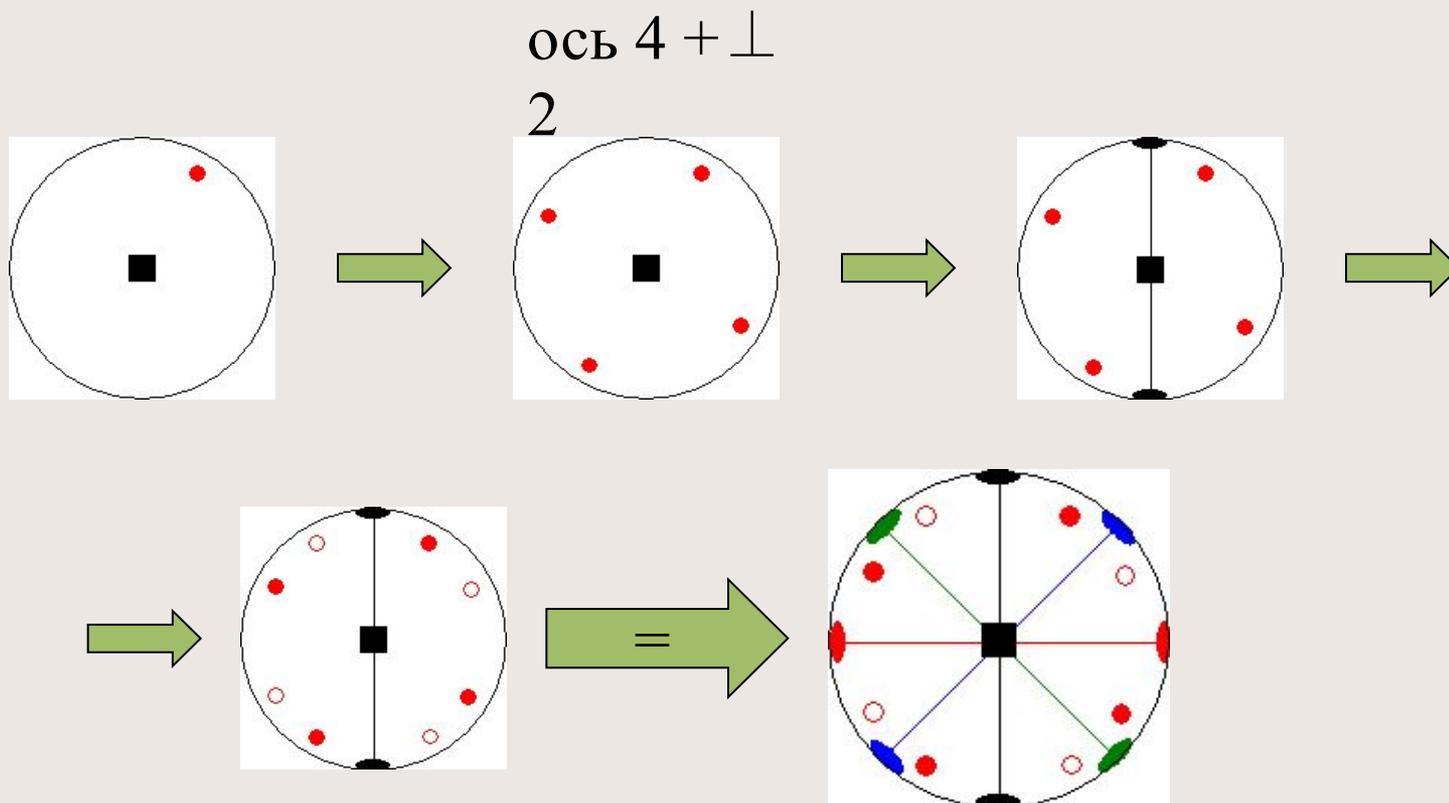
ось  $4 + \parallel m$



результат – класс  $4mm$

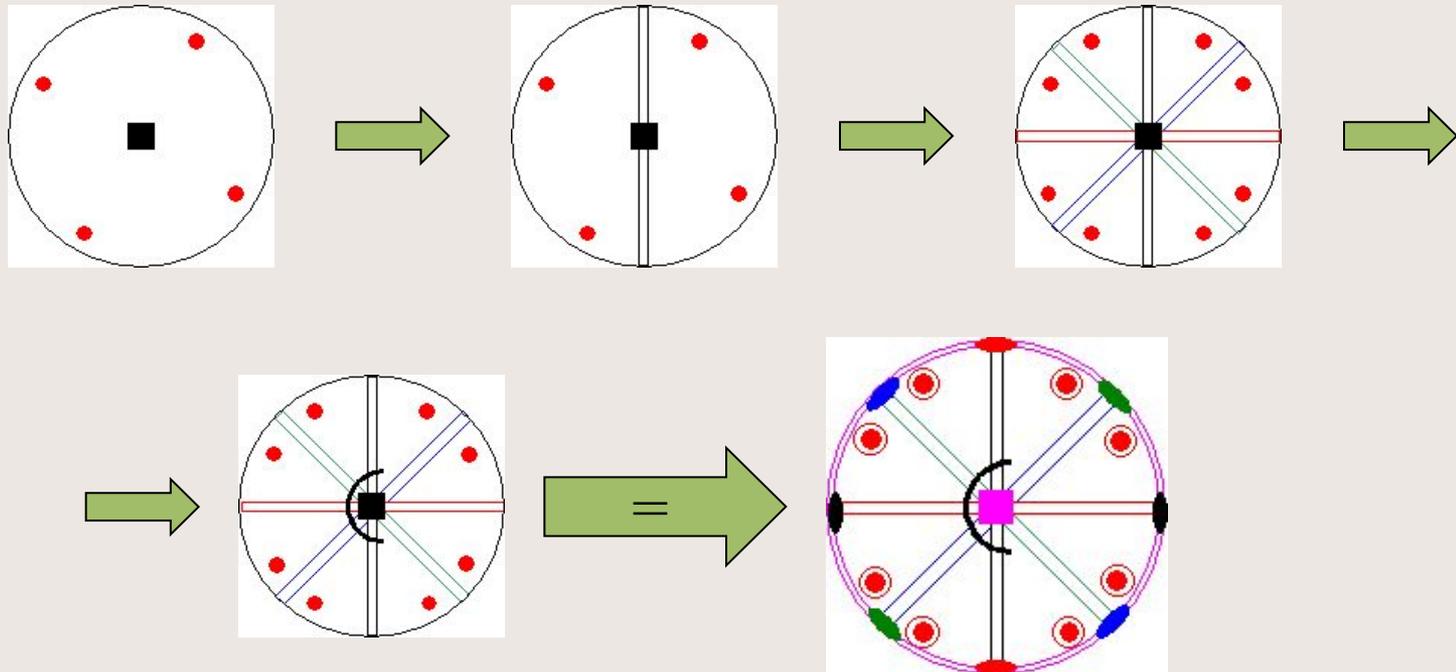
кратность точки – 8

# Пример вывода классов симметрии



# Пример вывода классов симметрии

ось  $4 + \parallel m + \bar{1}$  или ось  $4 + \perp 2 \bar{1}$   
+



результат – класс  $4/m \ 2/m \ 2/m$

кратность точки – 16

# Главные направления

сингония	вектора	индексы
моноклинная	$\mathbf{b}$	$[010]$
ромбическая	$\mathbf{c, b, a}$	$[001], [010], [100]$
тригональная	$\mathbf{c, b, a - b}$	$[001], [010], [1\bar{1}0]$
тетрагональная	$\mathbf{c, b, a - b}$	$[001], [010], [1\bar{1}0]$
гексагональная	$\mathbf{c, b, a - b}$	$[001], [010], [1\bar{1}0]$
кубическая	$\mathbf{c, a + b + c, a - b}$	$[001], [111], [1\bar{1}0]$

# Лекция 1.4. Элементы симметрии дисконтинуума

---

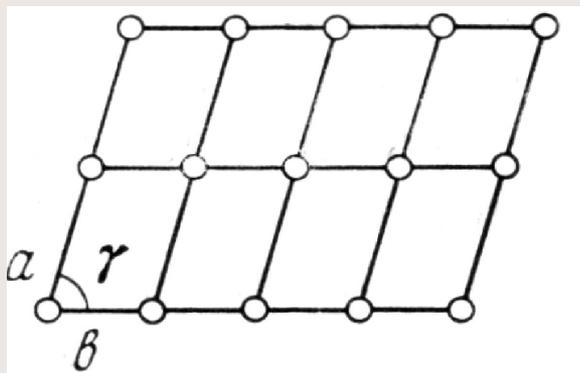
□ *Системы трансляций Бравэ*

□ *Элементы симметрии дисконтинуума*

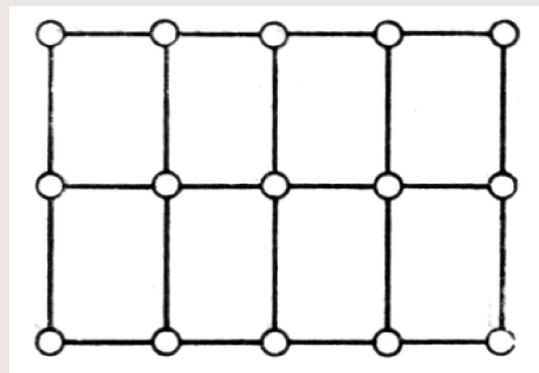
□ *Базис*

# Симметрия плоских сеток

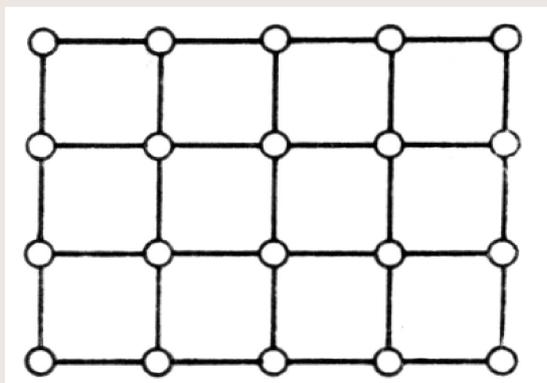
с осью 2



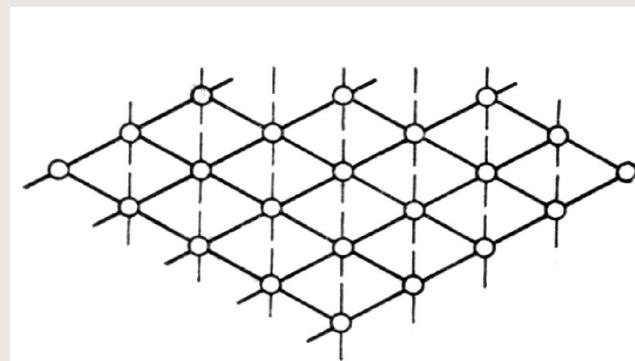
с осью 2 и  $m$



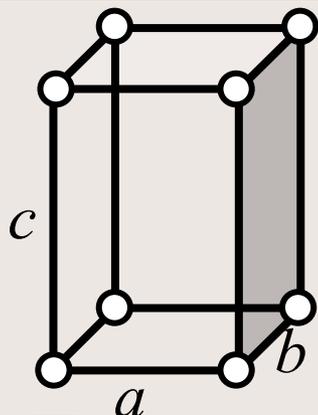
с осью 4 и  $m$



с осью 6 и  $m$



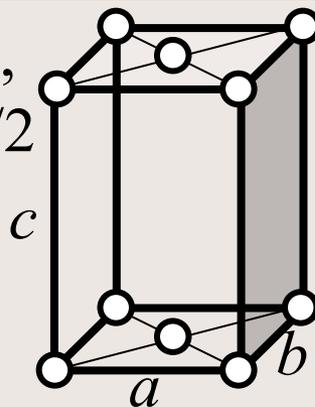
# Типы решеток Бравэ



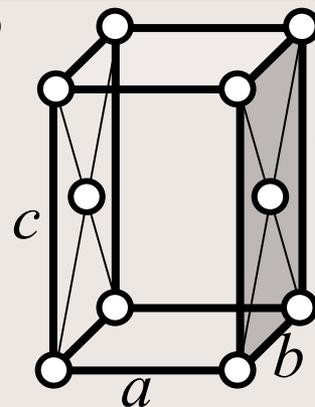
$a, b, c$

Примитивная –  $P$

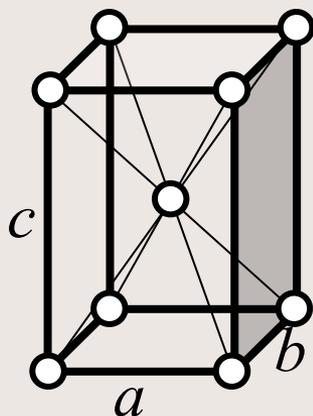
$a, b, c,$   
 $(a+b)/2$



Базоцентрированные –  $C, A$

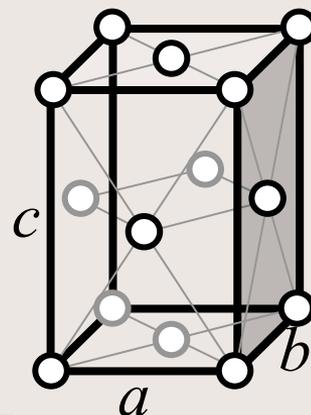


$a, b, c,$   
 $(b+c)/2$



$a, b, c,$   
 $(a+b+c)/2$

Объемноцентрированная –  $I$

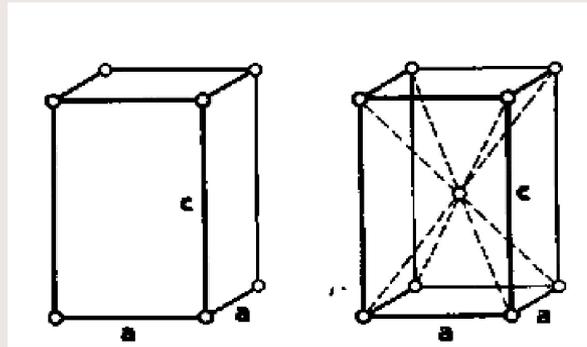


$a, b, c,$   
 $(a+b)/2,$   
 $(b+c)/2,$   
 $(a+c)/2$

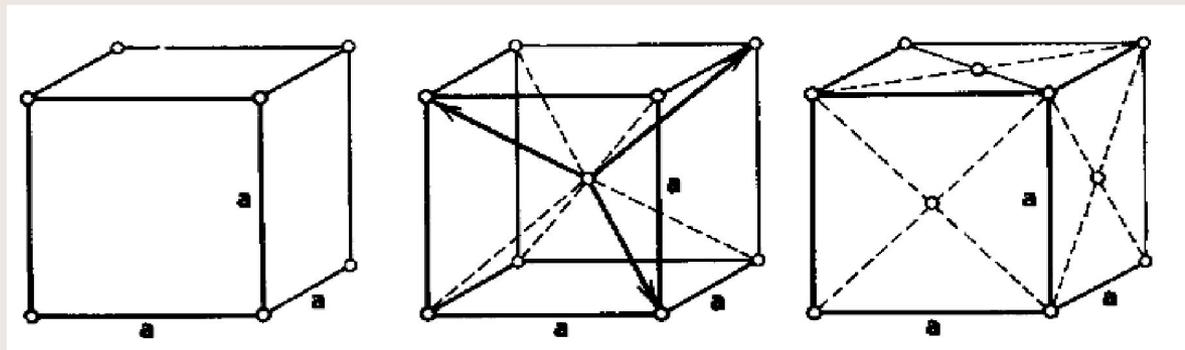
Гранецентрированная –  $F$

# Возможные решетки Бравэ в тетрагональной и кубической сингониях

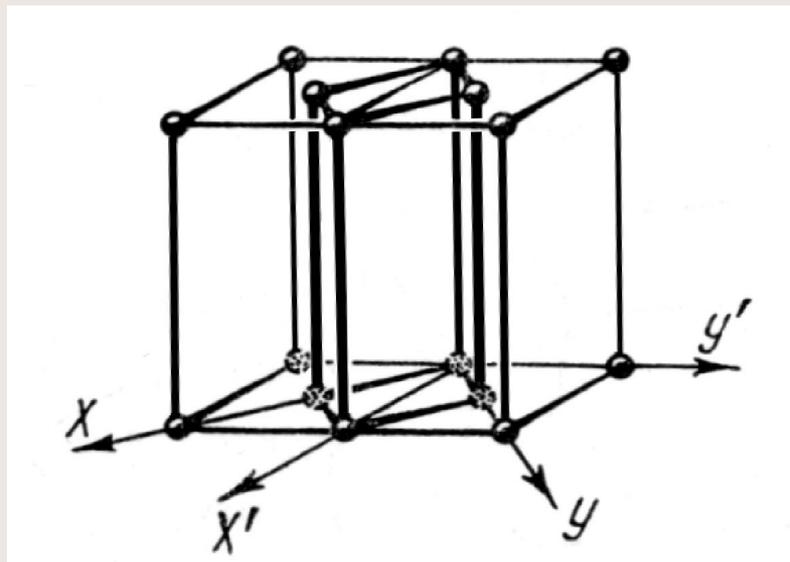
## *Тетрагональная сингония*



## *Кубическая сингония*

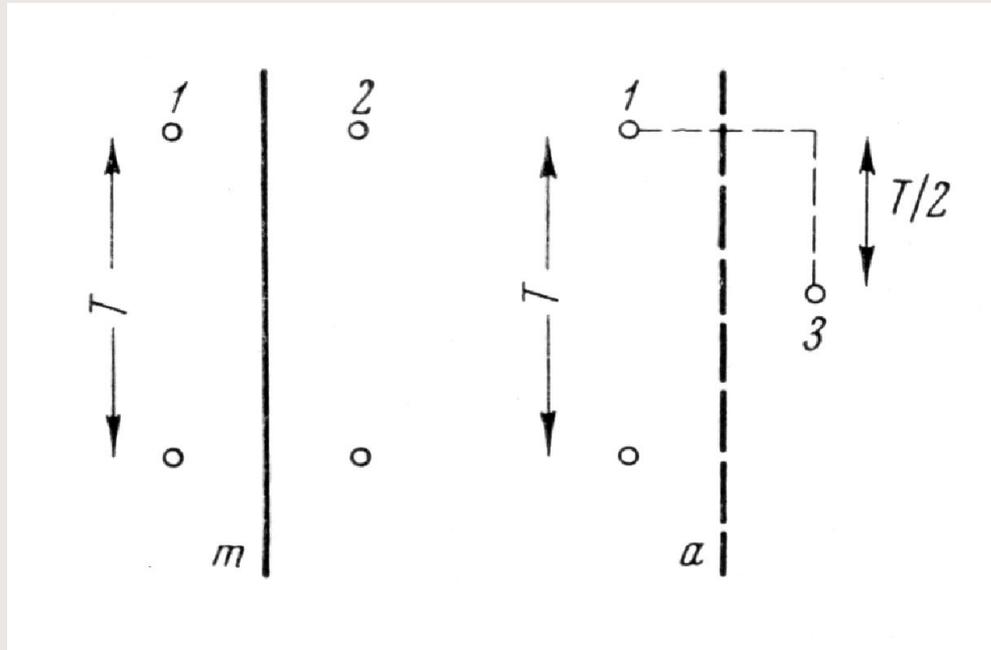


# Пояснения к числу решеток Бравэ



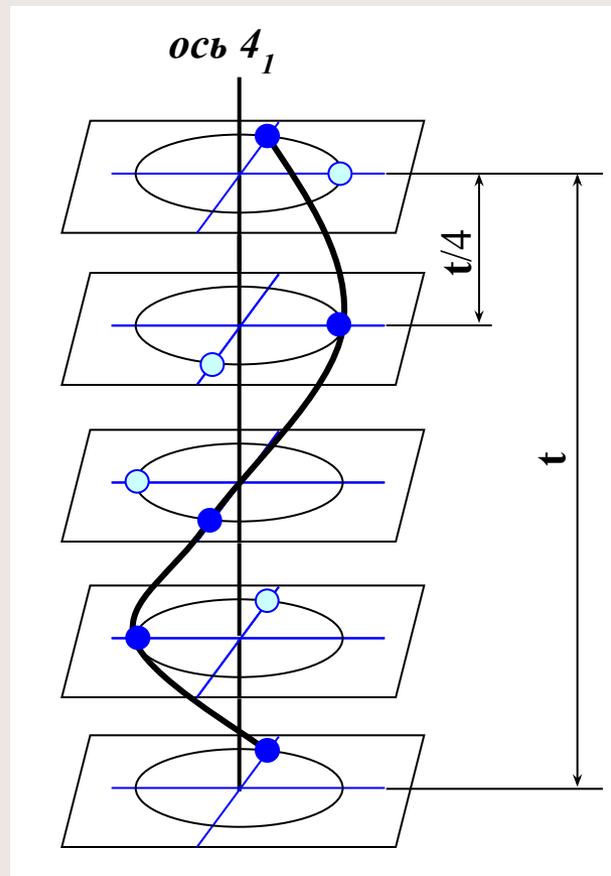
*Базоцентрированная тетрагональная ячейка  
сводится к вдвое меньшей примитивной*

# Элементы симметрии дисконтинуума



*Зеркальная плоскость симметрии **m** и  
плоскость скользящего отражения **a***

# Элементы симметрии дисконтинуума



*винтовая ось  $4_1$*

# Примеры международных обозначений элементов симметрии

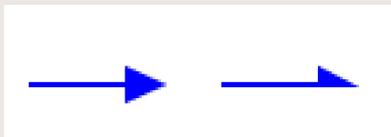
## *Оси*

*перпендикулярные плоскости чертежа*



## *Плоскости*

*параллельные плоскости чертежа*

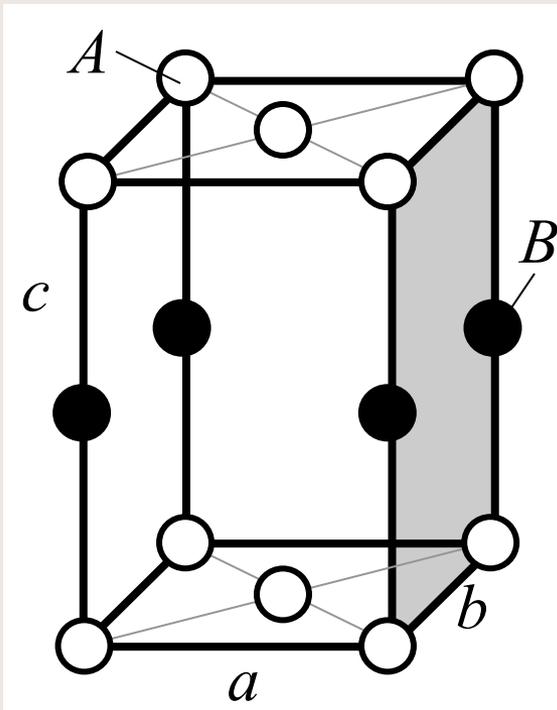


*наклонные к плоскости чертежа*



# Базис

*Базис* – совокупность координат всех атомов, принадлежащих элементарной ячейке



Базис ячейки:

$$A: [[000], [\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]]$$

$$B: [[00\frac{1}{2}]]$$

# Лекция 1.5. Пространственные группы

---

□ *Пространственные группы*

□ *Правильные системы точек*

# Пространственная группа

*Пространственная группа* – совокупность элементов симметрии, действующих на одну систему трансляций (ячейку Бравэ).

$$\begin{array}{cccc} F & 4 & 3 & 2 \\ & \underline{\quad} & & \underline{\quad} \\ & m & & m \\ \hline & \underline{\quad} & \underline{\quad} & \underline{\quad} \\ I & II & III & IV \end{array}$$

$I$  – тип решетки Бравэ

$II, III, IV$  – элементы симметрии в  $1^{om}$ ,  
 $2^{om}$  и  $3^{em}$  главных направлениях

# Примеры пространственных групп

## кубическая сингония

$$F \frac{4_1}{d} 3 \frac{2}{m} \quad P23 \quad P\bar{4}3m$$

## гексагональная сингония

$$P \frac{6_3}{t} \frac{2}{t} \frac{2}{c} \quad P6mm \quad P\bar{6}$$

## тетрагональная сингония

$$I \frac{4_1}{a} \frac{2}{m} \frac{2}{d} \quad I \frac{4}{t} \frac{2}{t} \frac{2}{t}$$

## тригональная сингония

$$P32 \quad P3m$$

## ромбическая сингония

$$P222 \quad Pnma \quad Pmc2_1$$

## моноклинная сингония

$$C2 \quad P2_1/m$$

# Правильные системы точек

*Правильная система точек* (ПСТ) – совокупность симметрично эквивалентных позиций (точек), связанных преобразованиями пространственной группы

Обозначения для ПСТ:

$$\underbrace{2}_{I} \quad \underbrace{(c)}_{II} : \quad \underbrace{\frac{1}{2} \quad y \quad 0}_{III}$$

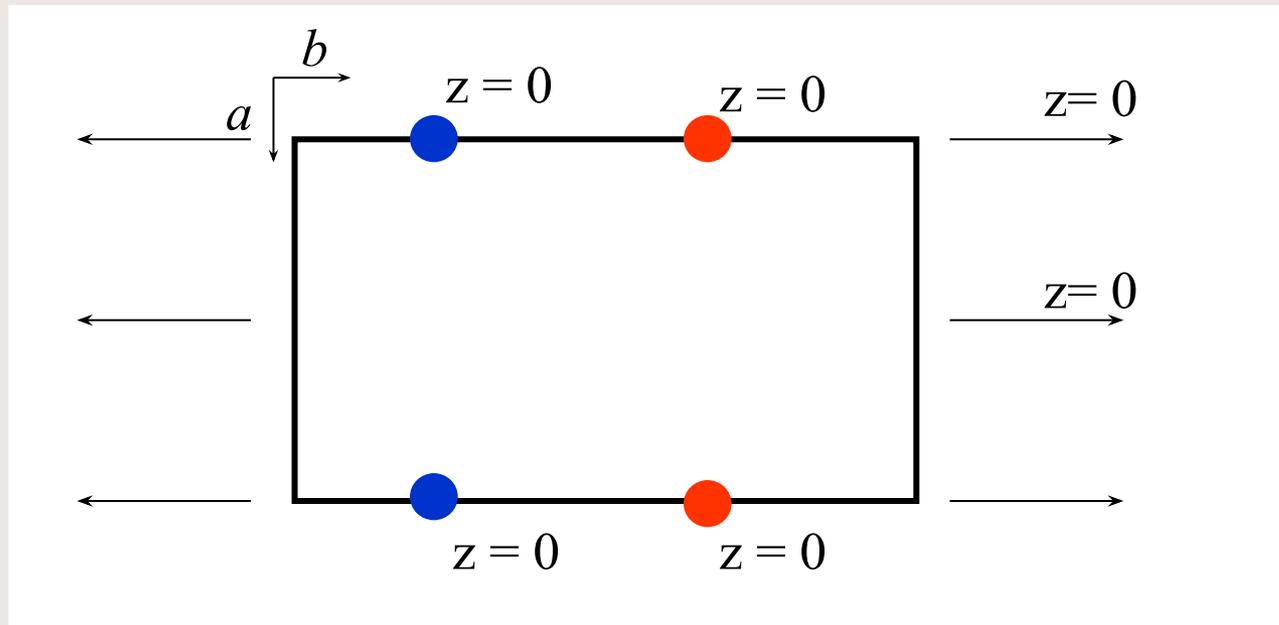
I – кратность позиции

II – тип позиции (по алфавиту из справочника)

III – координаты любого атома из ПСТ

# ПСТ в группе $P2/m$

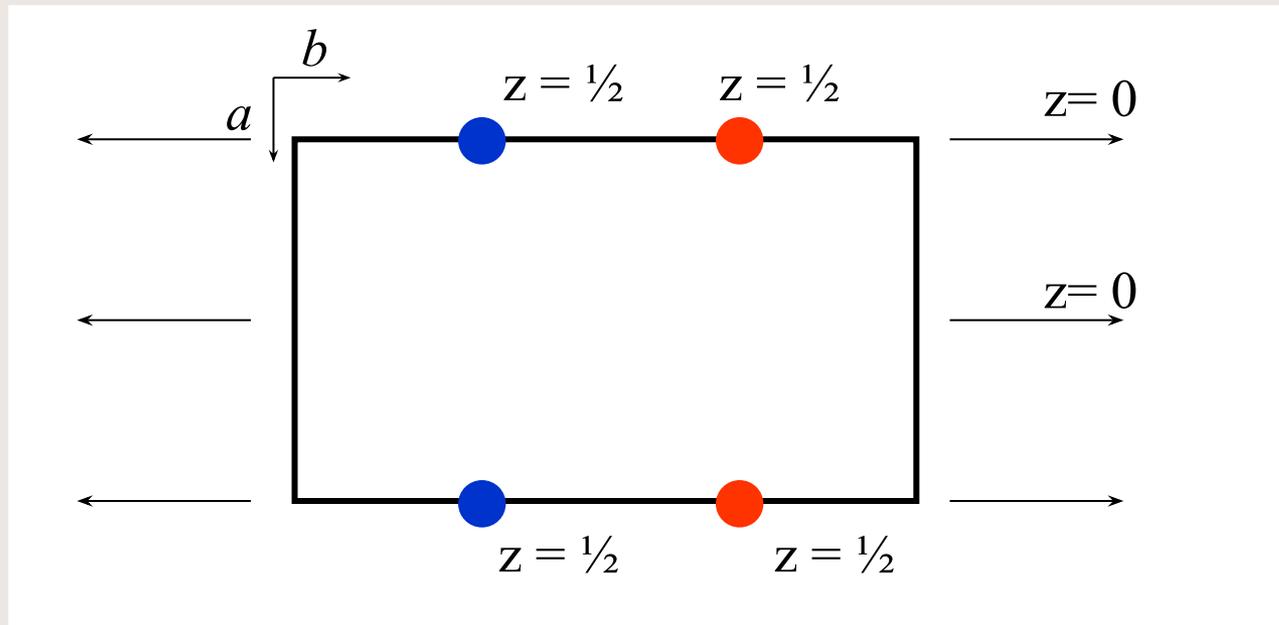
*частное положение*



Тип позиции:  $1(a): 0 y 0$   
 $1(a): 0 y 0$

# ПСТ в группе $P2/m$

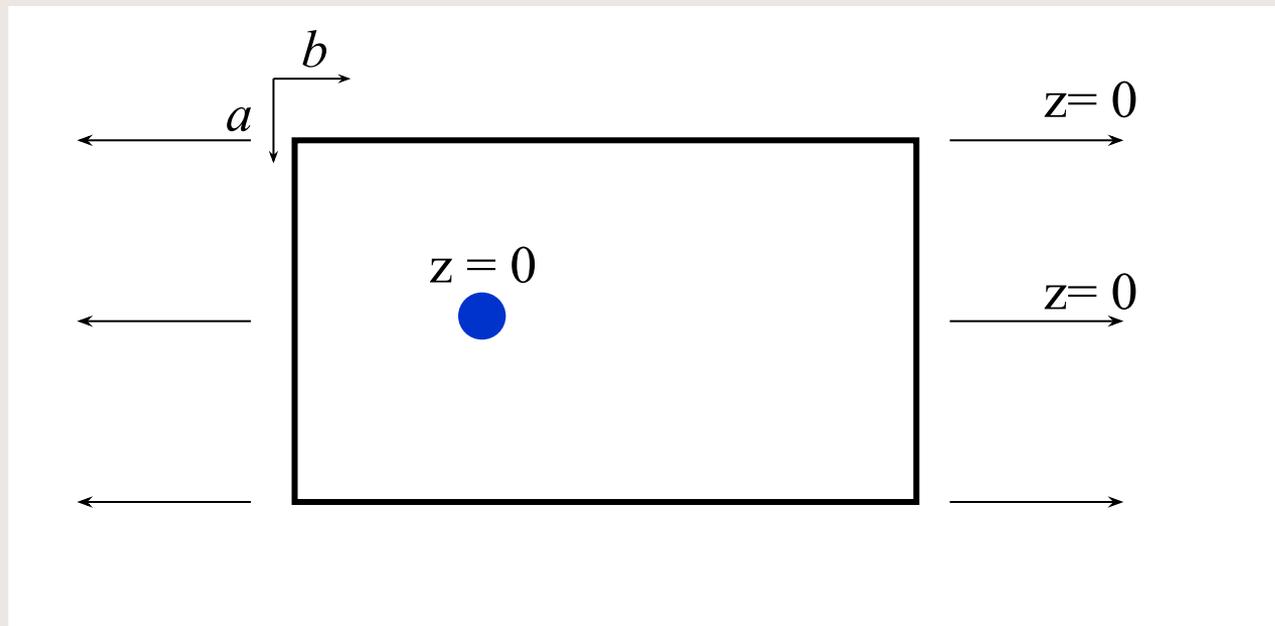
*частное положение*



Тип позиции:  $1(b): 0 \text{ y } \frac{1}{2}$   
 $1(b): 0 \text{ y } \frac{1}{2}$

# ПСТ в группе $P2/m$

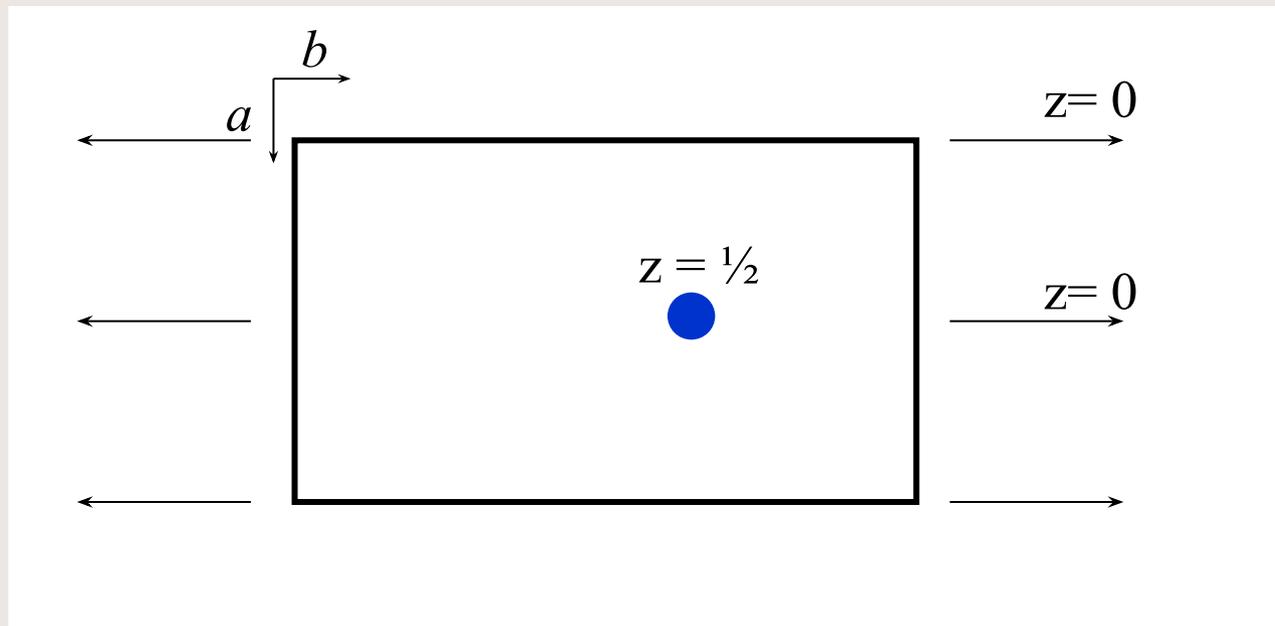
*частное положение*



Тип позиции:  $1(c): \frac{1}{2} y 0$

# ПСТ в группе P2/m

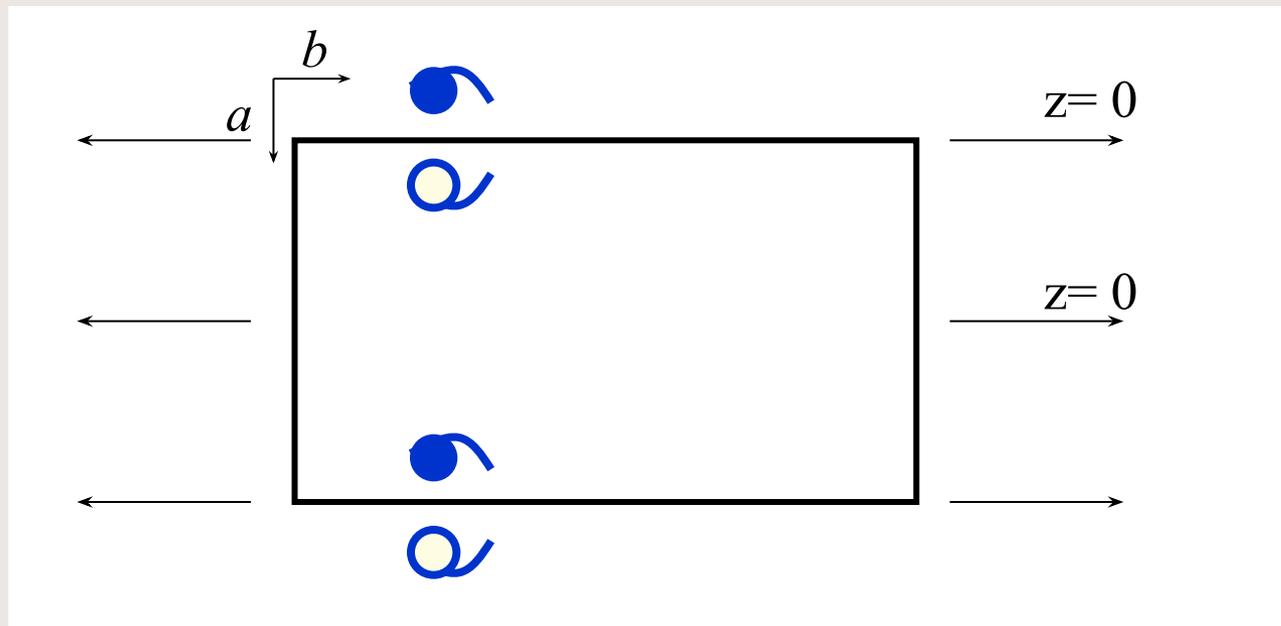
*частное положение*



Тип позиции:  $1(d): \frac{1}{2} y \frac{1}{2}$

# ПСТ в группе $P2/m$

*общее положение*



Тип позиции:  $2(e): x y z$

Координаты точек:  $муху z \quad \text{---}$

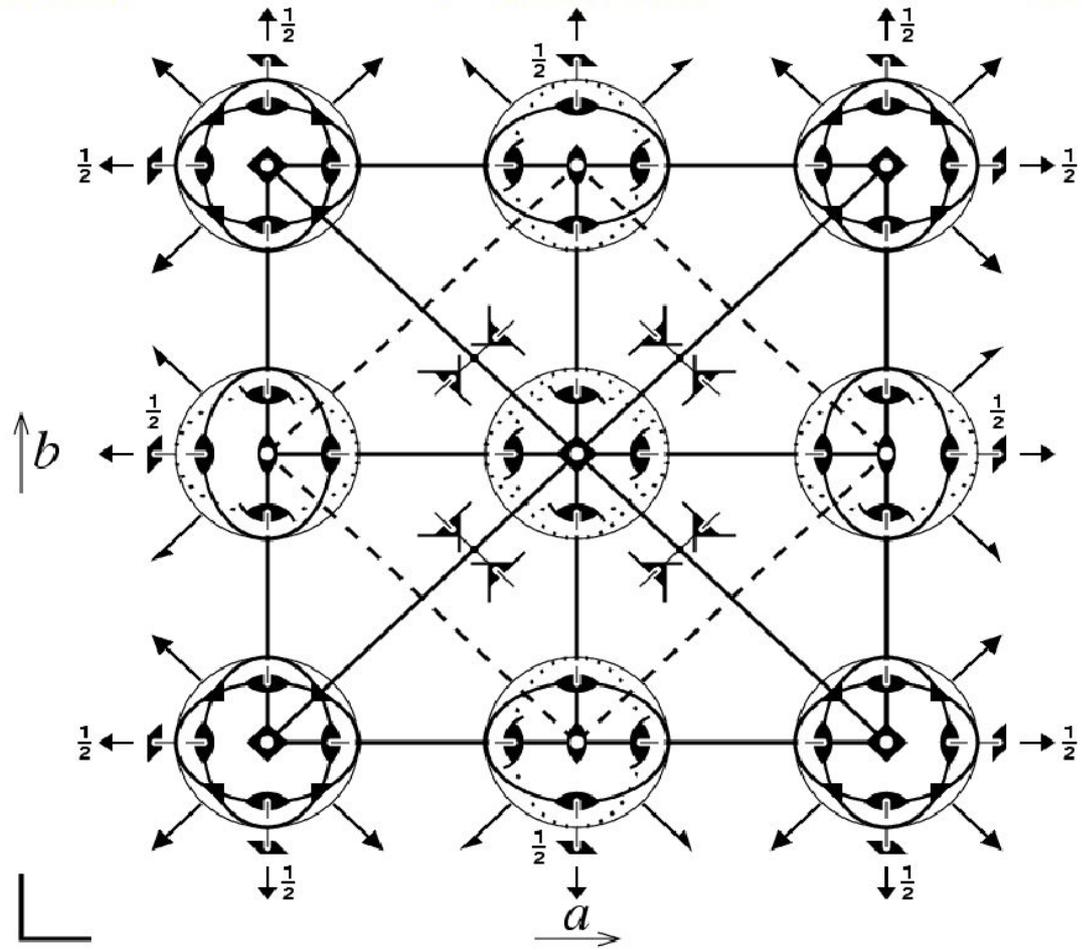
# Пример из Международных таблиц

$Pm\bar{3}m$

$P 4/m \bar{3} 2/m$

$m\bar{3}m$

No. 221



- |    |                             |    |                             |
|----|-----------------------------|----|-----------------------------|
| 1  | $x, y, z$                   | 25 | $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ |
| 2  | $x, \bar{y}, \bar{z}$       | 26 | $\bar{x}, y, z$             |
| 3  | $\bar{x}, y, \bar{z}$       | 27 | $x, \bar{y}, z$             |
| 4  | $\bar{x}, \bar{y}, z$       | 28 | $x, y, \bar{z}$             |
| 5  | $z, x, y$                   | 29 | $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$ |
| 6  | $\bar{z}, \bar{x}, y$       | 30 | $z, x, \bar{y}$             |
| 7  | $z, \bar{x}, \bar{y}$       | 31 | $\bar{z}, x, y$             |
| 8  | $\bar{z}, x, \bar{y}$       | 32 | $z, \bar{x}, \bar{y}$       |
| 9  | $y, z, x$                   | 33 | $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}$ |
| 10 | $\bar{y}, z, \bar{x}$       | 34 | $y, \bar{z}, x$             |
| 11 | $\bar{y}, \bar{z}, x$       | 35 | $y, z, \bar{x}$             |
| 12 | $y, \bar{z}, \bar{x}$       | 36 | $\bar{y}, z, x$             |
| 13 | $x, \bar{z}, y$             | 37 | $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y}$ |
| 14 | $x, z, \bar{y}$             | 38 | $\bar{x}, z, y$             |
| 15 | $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y}$ | 39 | $x, z, y$                   |
| 16 | $\bar{x}, z, y$             | 40 | $x, \bar{z}, \bar{y}$       |
| 17 | $z, y, \bar{x}$             | 41 | $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x}$ |
| 18 | $\bar{z}, y, x$             | 42 | $z, \bar{y}, \bar{x}$       |
| 19 | $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x}$ | 43 | $z, y, x$                   |
| 20 | $z, \bar{y}, x$             | 44 | $\bar{z}, y, \bar{x}$       |
| 21 | $\bar{y}, x, z$             | 45 | $y, \bar{x}, \bar{z}$       |
| 22 | $y, \bar{x}, z$             | 46 | $\bar{y}, x, \bar{z}$       |
| 23 | $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$ | 47 | $y, x, z$                   |
| 24 | $y, x, \bar{z}$             | 48 | $\bar{y}, \bar{x}, z$       |