

Описание симметрии кристаллических структур

Часть 2

Краткое содержание предыдущей лекции

- Ввели понятия симметрии, операции симметрии, элемента симметрии, группы симметрии, подгруппы и надгруппы;
- Матричные, символьные и графические представления операций;
- Правильная система точек;
- Закрытые операции симметрии, точечные группы симметрии

Кристалл – субстанция, которую можно построить регулярным повторением в трех измерениях одинаковых пространственных элементов, каждый из которых, в свою очередь, содержит один или более атомов.

(Ф. Блатт)

Под идеальным кристаллом мы будем понимать однородную анизотропную симметричную конденсированную среду, обладающую трансляционно упорядоченным атомным строением и способную самоограняться в процессе роста

(Е.В. Чупрунов)

Главный признак кристалла – наличие трансляционной симметрии

Трансляционная симметрия, ПГС, кристаллографический класс и система

- Группа трансляций (ГТ)
- Правильная система точек ГТ = Решетка Бравэ
- Группа Бравэ
- Открытые операции симметрии:
трансляция, скользящее отражение, винтовой поворот
- Пространственные группы симметрии (ПГС)
- Кристаллографический класс (КК)
- Кристаллическая система (КС)
- Элементарная ячейка, выбор координатных осей
- Номенклатура ПГС, ТГС и КК

Трансляционная симметрия, ПГС, кристаллографический класс и система

- Группа трансляций (ГТ)
- Правильная система точек ГТ = Решетка Бравэ
- Группа Бравэ
- Открытые операции симметрии:
трансляция, скользящее отражение, винтовой поворот
- Пространственные группы симметрии (ПГС)
- Кристаллографический класс (КК)
- Кристаллическая система (КС)
- Элементарная ячейка, выбор координатных осей
- Номенклатура ПГС, ТГС и КК

Трансляционная симметрия

Одномерная

Бесконечные цепи (бордюры)

$$\vec{T} = n\vec{a} \quad n \in Z$$

Двумерная

Бесконечные слои

$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} \quad u, v \in Z$$

Трёхмерная

Кристаллические структуры

$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad u, v, w \in Z$$

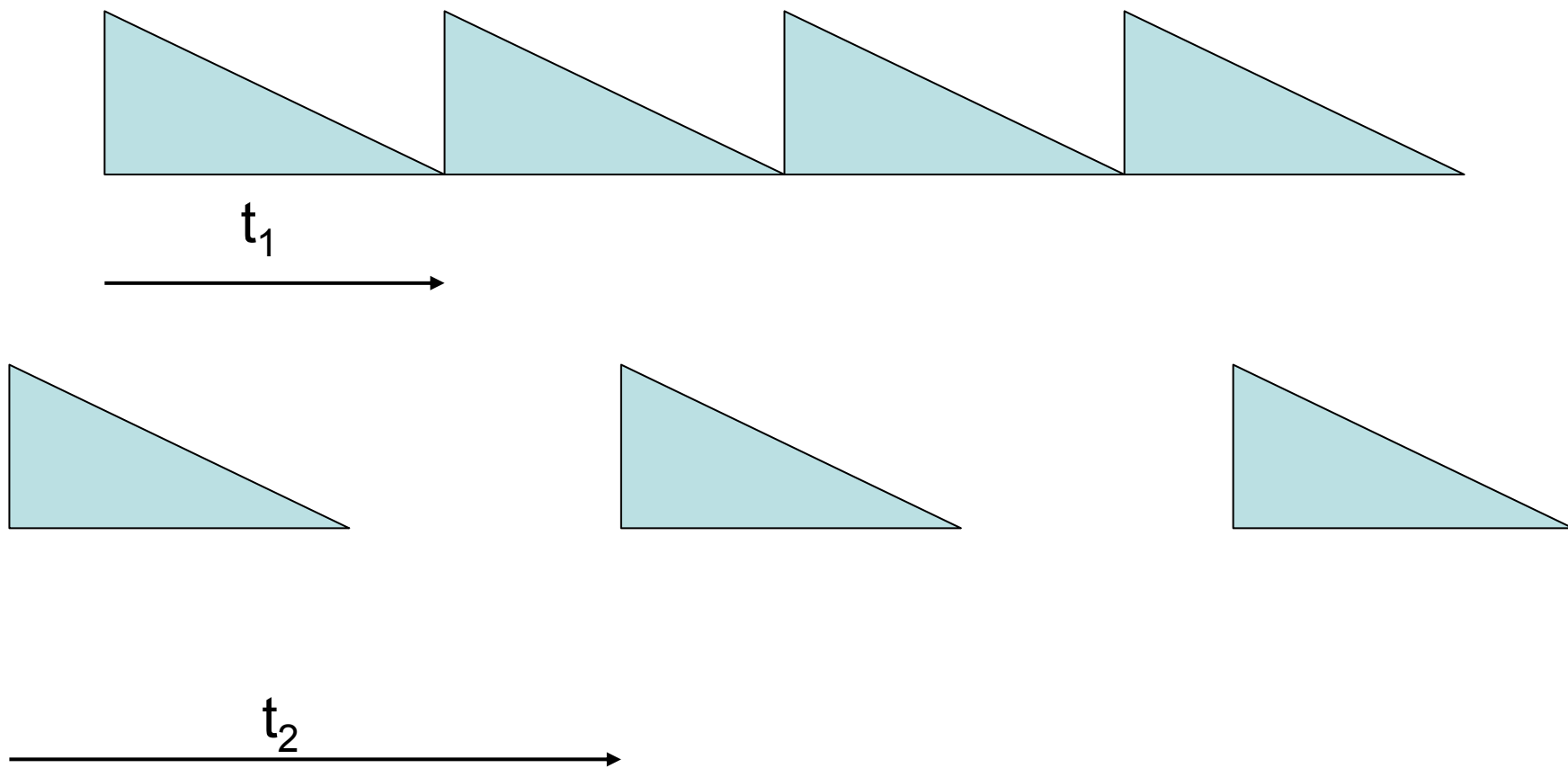
Множество векторов \vec{T} образуют группу, если в качестве умножения принять геометрическое сложение векторов.

$$e = \vec{0}$$

Обратный элемент: $\vec{t}^{-1} = -\vec{t}$

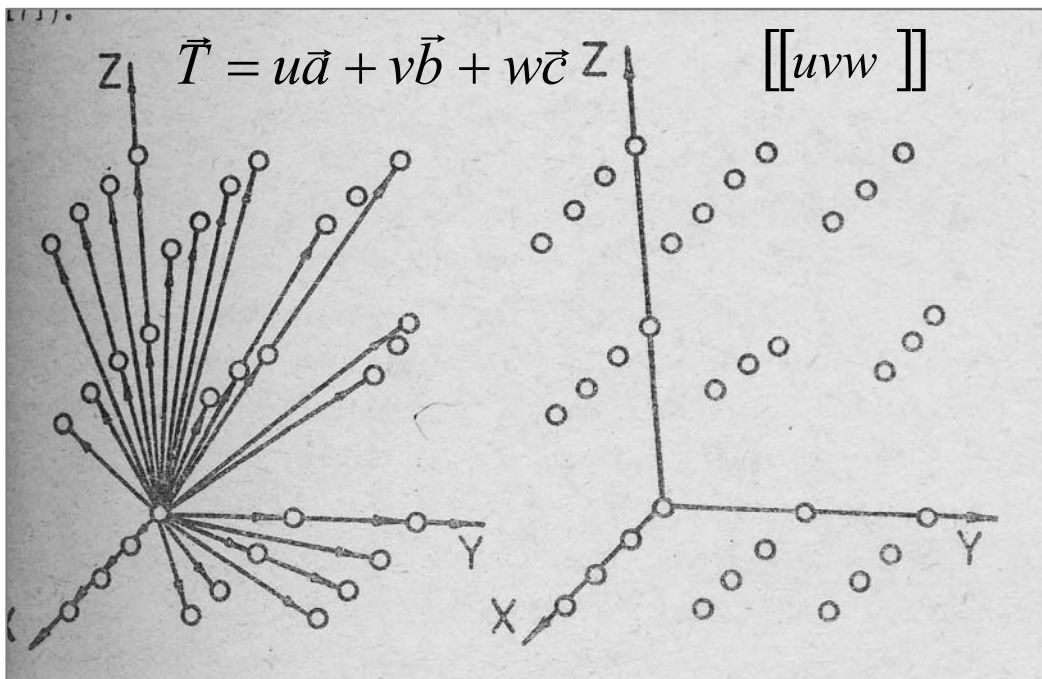
Множество векторов трансляций, совмещающих структуру саму с собой, образуют группу трансляций (ГТ) данной структуры.

Число элементов группы трансляции бесконечно. Генераторами ГТ являются вектора элементарных трансляций.



Длины векторов трансляции могут быть разными, но это не порождает никакой новой симметрии, группа трансляций остается одна и та же!

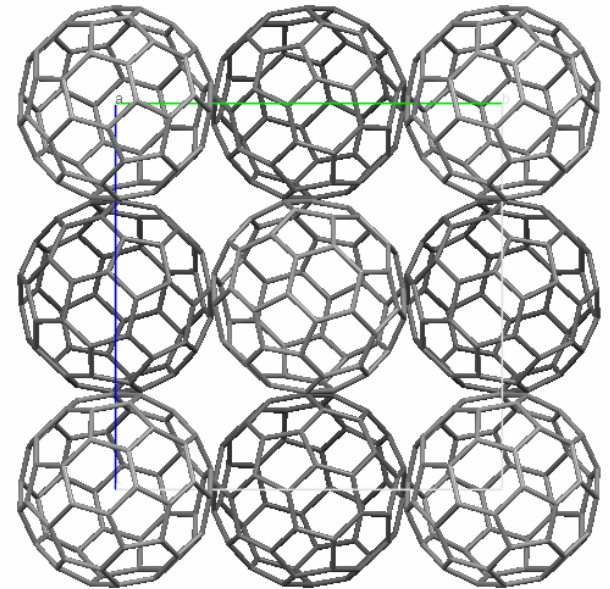
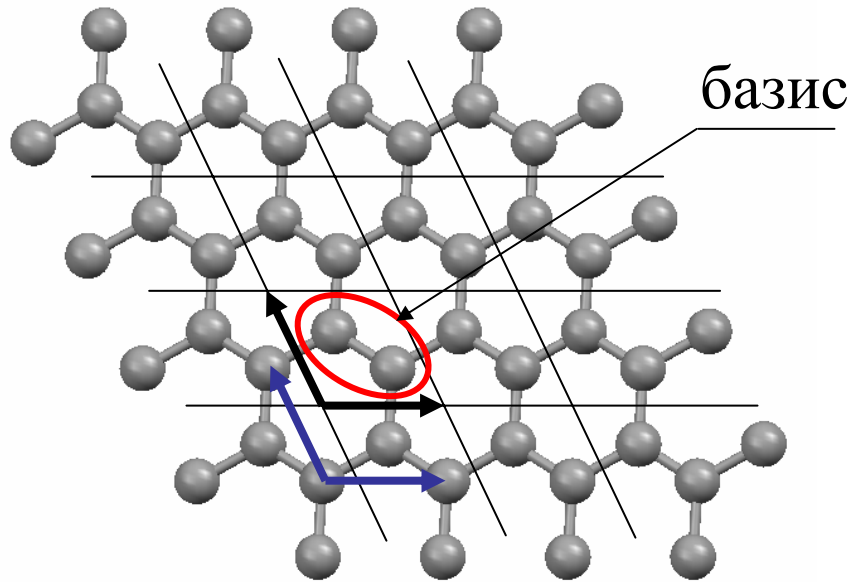
Правильную систему точек группы трансляций называют решеткой Бравэ кристаллической структуры.



Точки решетки Бравэ имеют абсолютно одинаковый пространственный порядок и ориентацию, независимо от того, какую точку мы принимаем за исходную.

Узел решетки Бравэ – математическая абстракция. В узлы решетки можно поместить материальные точки или одинаковые шарики.

Фрагмент структуры, из которого можно получить всю структуру, подвергнув фрагмент трансляциям решетки Бравэ, называется базисом.

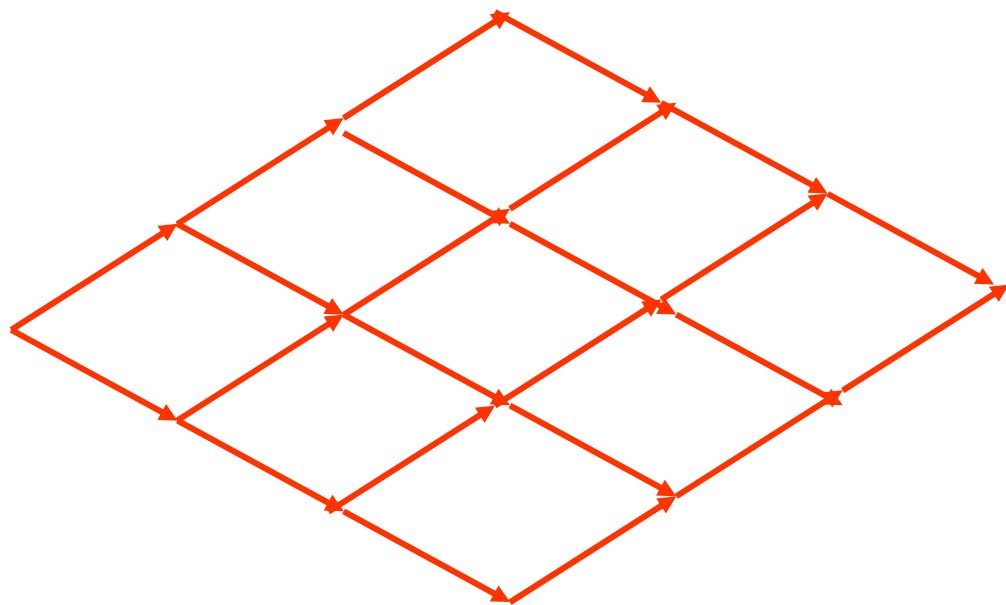
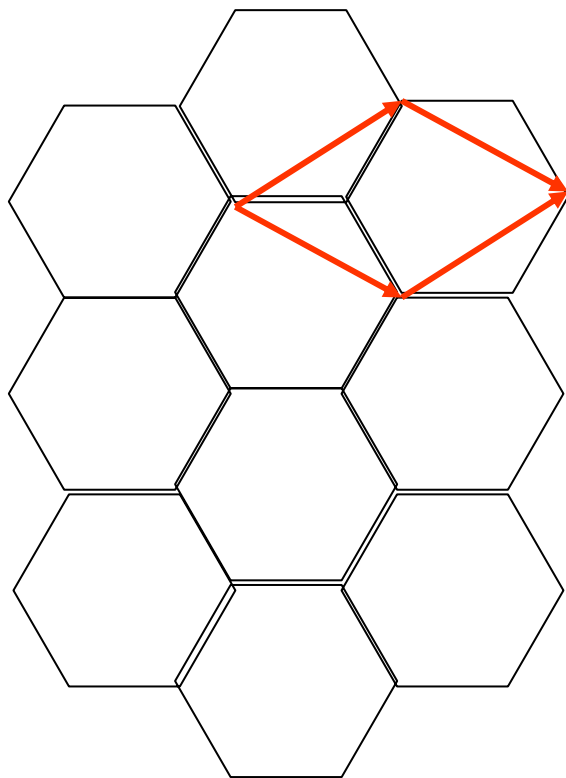


Для того, чтобы однозначно описать кристаллическую структуру необходимо и достаточно указать решетку Бравэ и координаты всех точек базиса в системе координат, связанной с решеткой Бравэ.

Координаты базиса для примера слева:

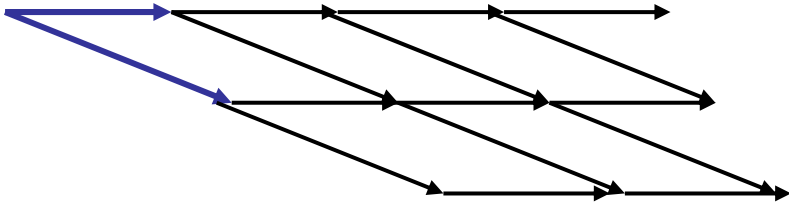
а) **1: (0, 0); 2: (2/3, 1/3)**; б) **1: (1/3, 2/3); 2: (2/3, 1/3)** – разный выбор начала координат

Структура

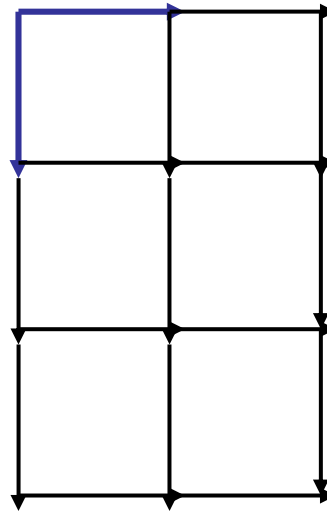


Решетка Бравэ

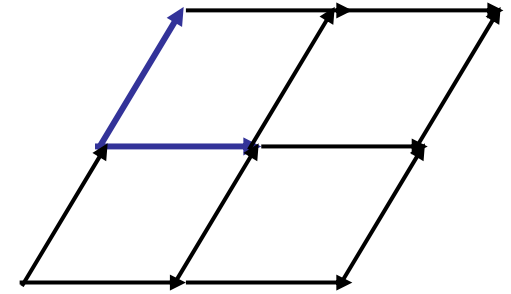
1 $t_1 \neq t_2$, угол между t_1 и t_2
любой, но не 90 или 60 град



2 $t_1 = t_2$, угол 90 град

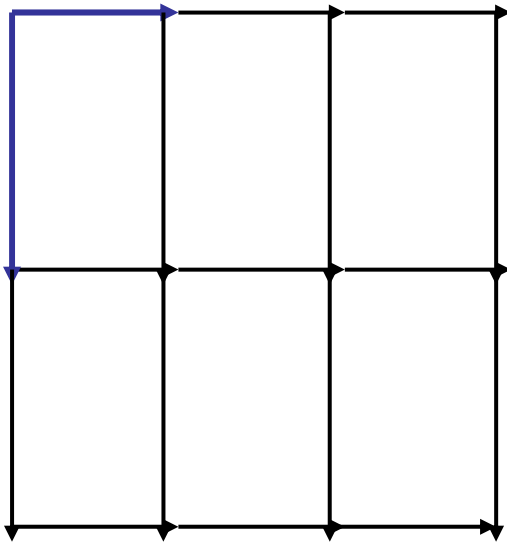


3



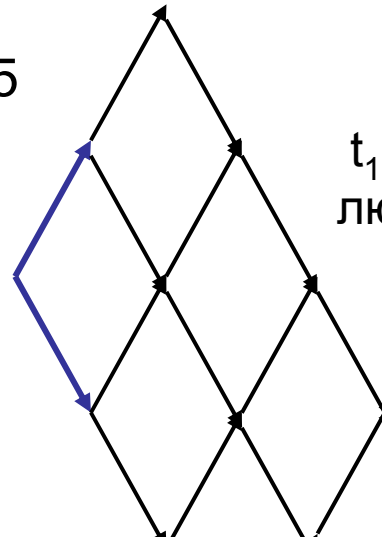
$t_1 = t_2$, угол 60 град

4



$t_1 \neq t_2$, угол между t_1 и t_2
90 град

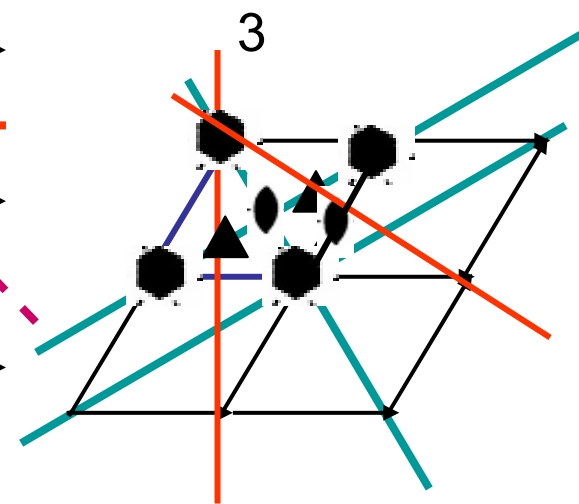
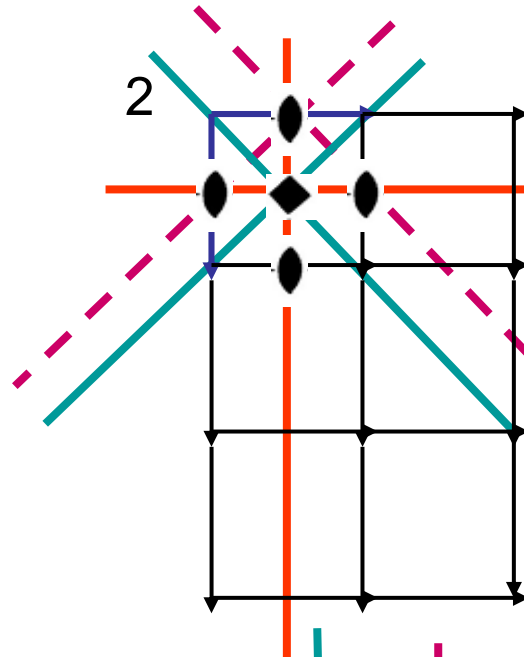
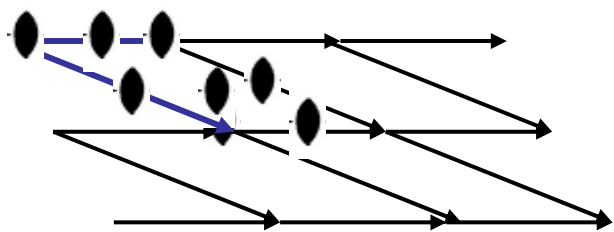
5



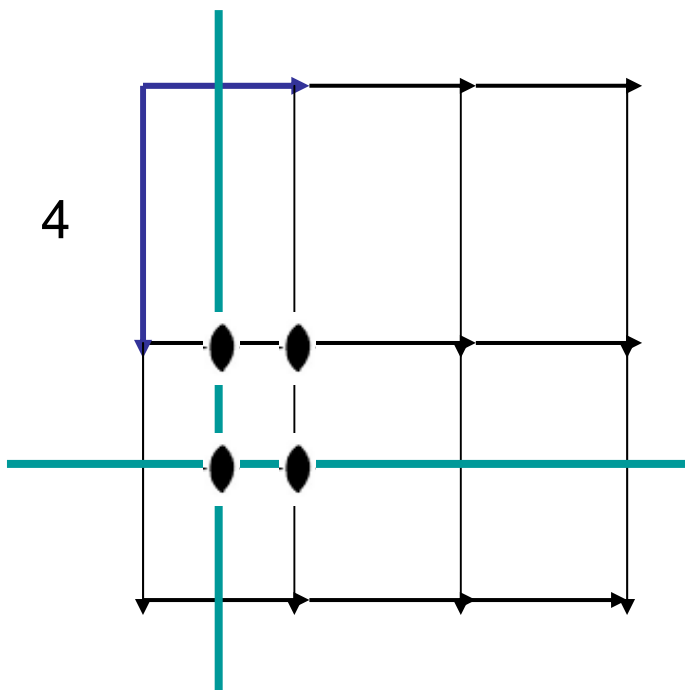
$t_1 = t_2$, угол между t_1 и t_2
любой, но не 90 или 60 град

Определенные соотношения между длинами и направлениями векторов элементарных трансляций порождают новую симметрию!

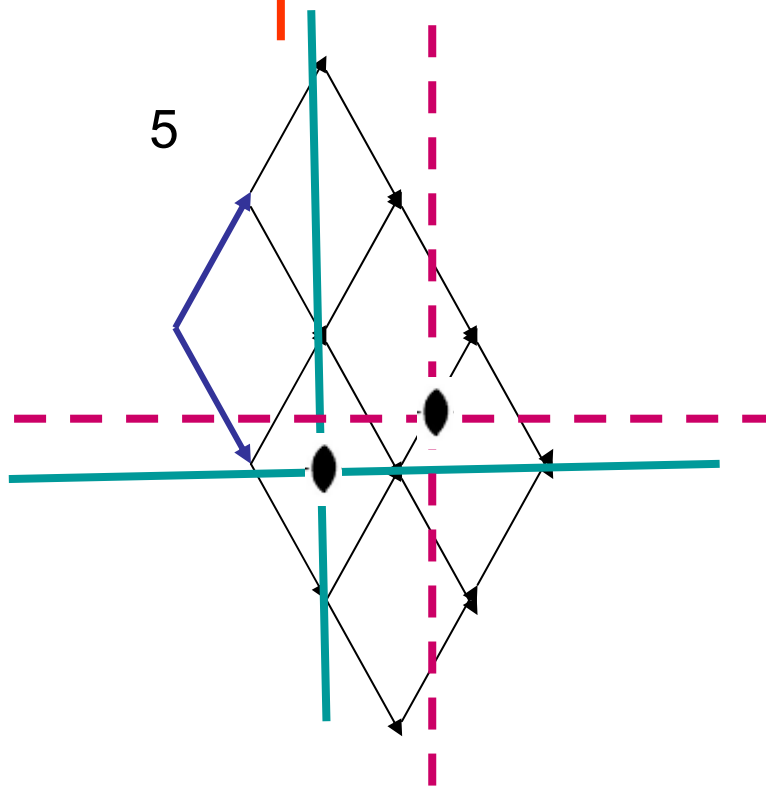
1



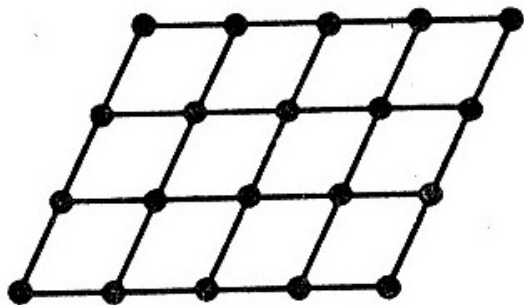
4



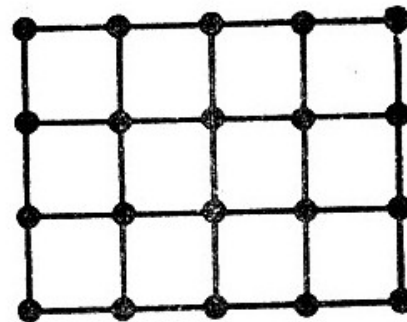
5



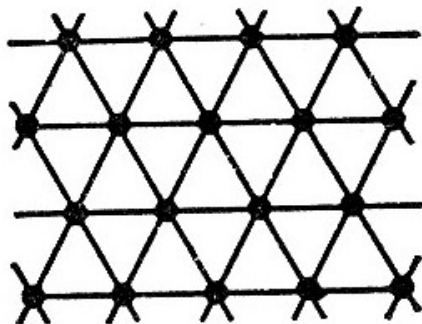
Двумерные решетки Бравэ



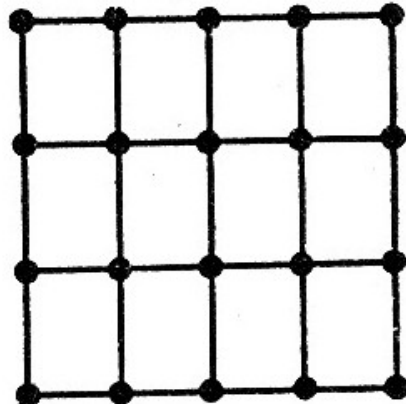
Косоугольная



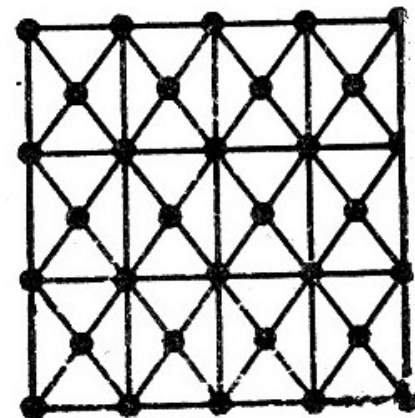
Квадратная



Гексагональная

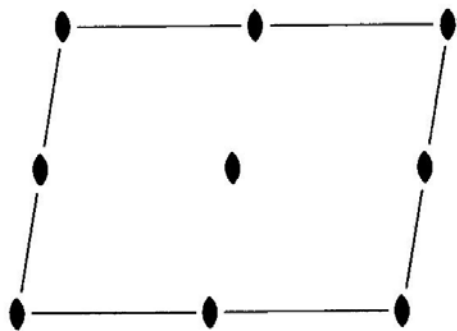


Прямоугольная

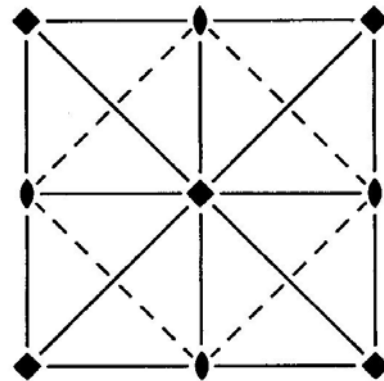


Прямоугольная
центрированная

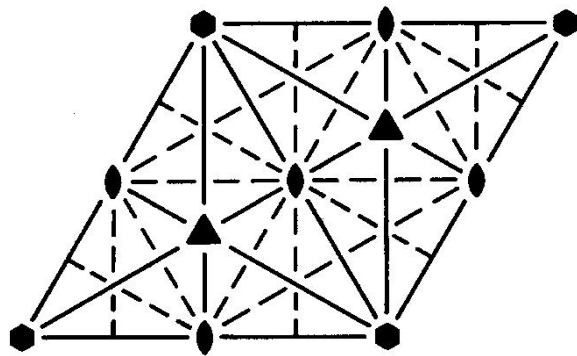
1.



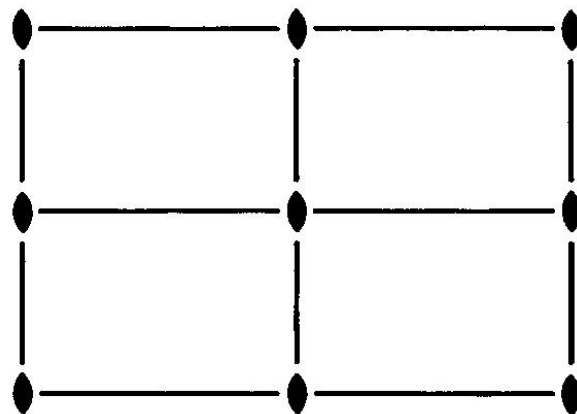
2.



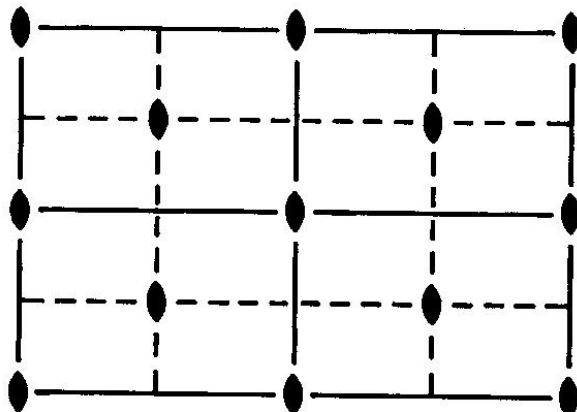
3.



4.



5.



- Можно выделить 5 различных двумерных групп трансляций и 14 различных трехмерных групп трансляций (различных – по порождаемой элементарными трансляциями дополнительной симметрии);
- Сочетание трансляций порождает новые закрытые операции симметрии (инверсия, повороты вокруг осей 2, 4, 3, 6, зеркальное отражение), а также новые открытые операции симметрии (скользящее отражение, винтовой поворот);
- Совокупность закрытых и открытых операций симметрии образует группу симметрии, называемую пространственной группой симметрии (ПГС);
- ПГС решетки Бравэ – группа Бравэ

Трансляционная симметрия, ПГС, кристаллографический класс и система

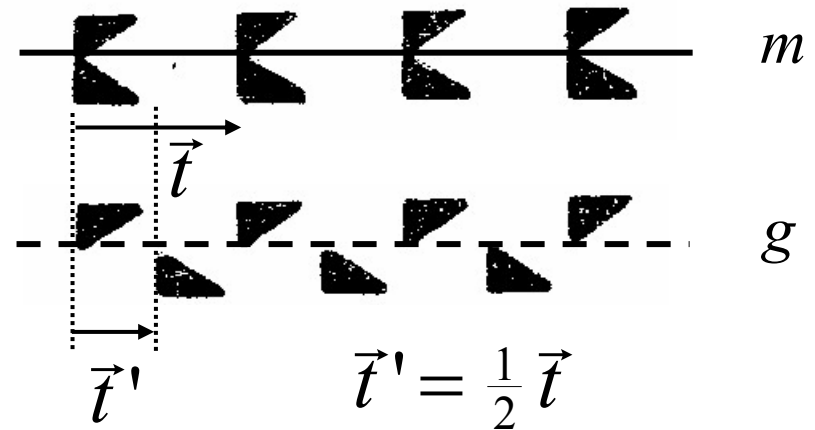
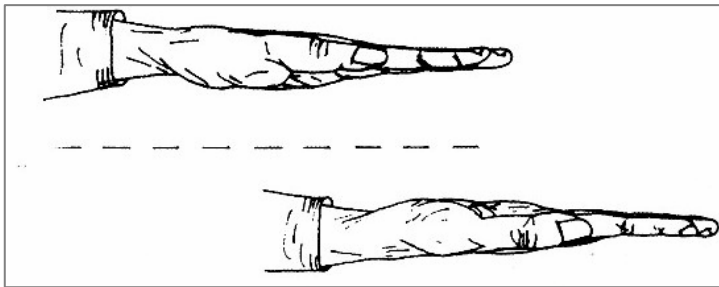
- Группа трансляций (ГТ)
- Правильная система точек ГТ = Решетка Бравэ
- Группа Бравэ
- Открытые операции симметрии:
трансляция, скользящее отражение, винтовой поворот
- Пространственные группы симметрии (ПГС)
- Кристаллографический класс (КК)
- Кристаллическая система (КС)
- Элементарная ячейка, выбор координатных осей
- Номенклатура ПГС, ТГС и КК

Сочетание трансляции с плоскостями и осями симметрии дает новые элементы симметрии – плоскости скользящего отражения и винтовые оси симметрии

Операции симметрии, которые не оставляют неподвижными ни одной точки пространства, называют открытыми операциями симметрии.

Плоскости скользящего отражения

Скользящее отражение – это операция симметрии, включающая зеркальное отражение в плоскости с одновременной трансляцией в направлении, параллельном данной плоскости.



\vec{t}' - вектор частичной трансляции.

Тип плоскости

Вектор частичной трансляции

a

$$\frac{1}{2}\vec{a}$$

b

$$\frac{1}{2}\vec{b}$$

c

$$\frac{1}{2}\vec{c}$$

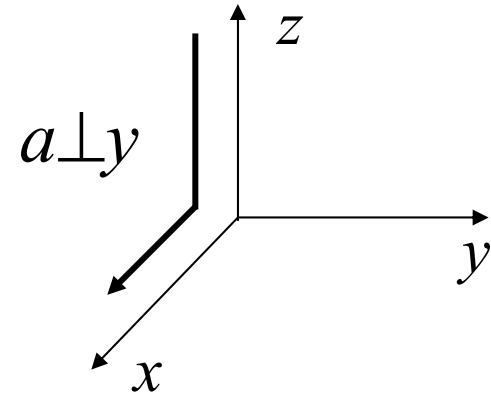
n

$$\frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c}) \text{ или } \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b}) \text{ или } \frac{1}{2}(\vec{c} + \vec{a})$$

d

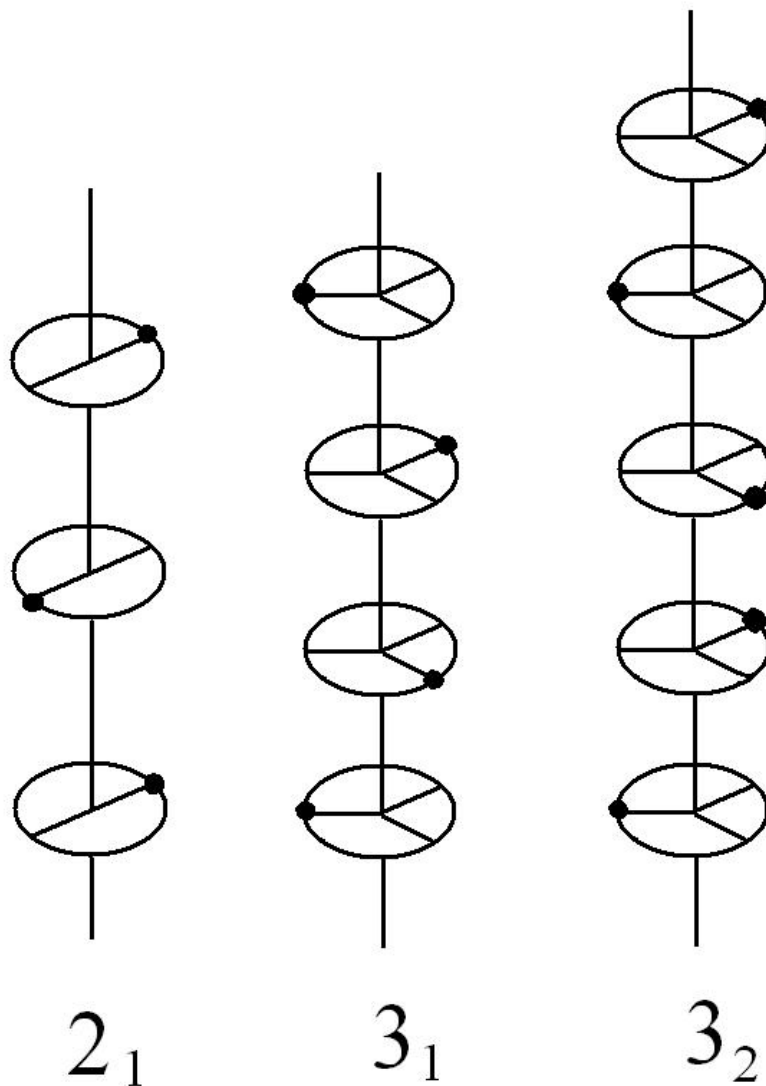
(алмазные)

$$\frac{1}{4}(\vec{b} + \vec{c}) \text{ или } \frac{1}{4}(\vec{a} + \vec{b}) \text{ или } \frac{1}{4}(\vec{c} + \vec{a})$$

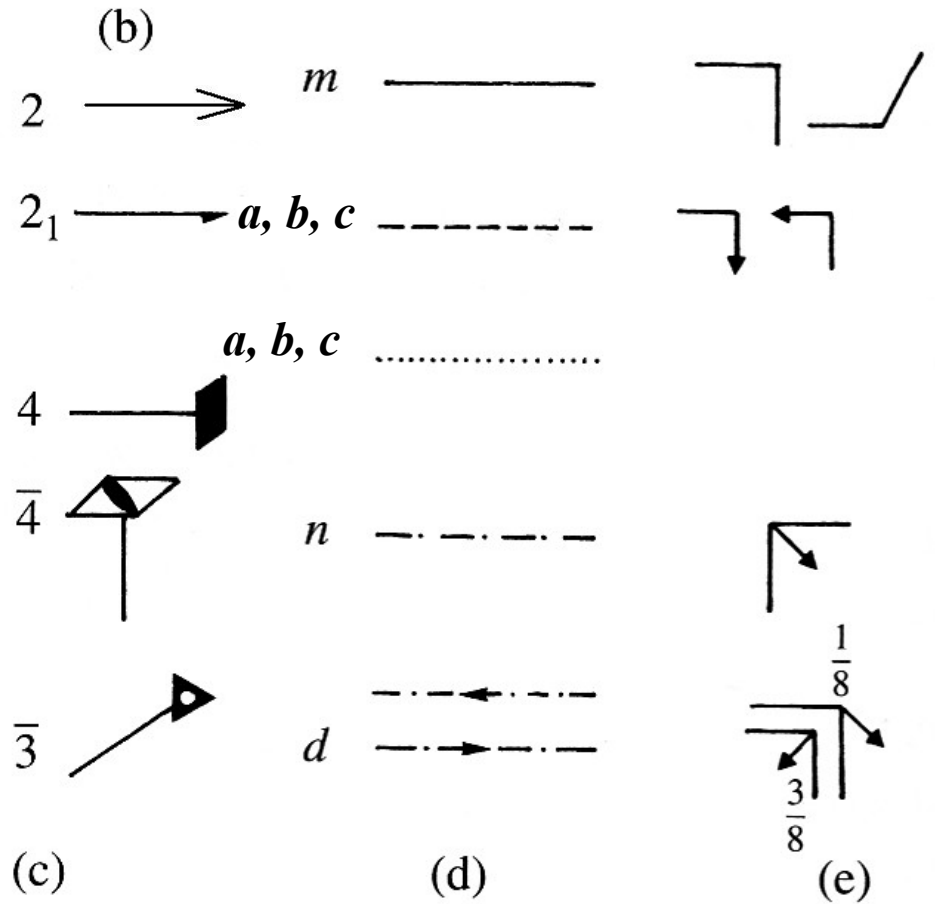
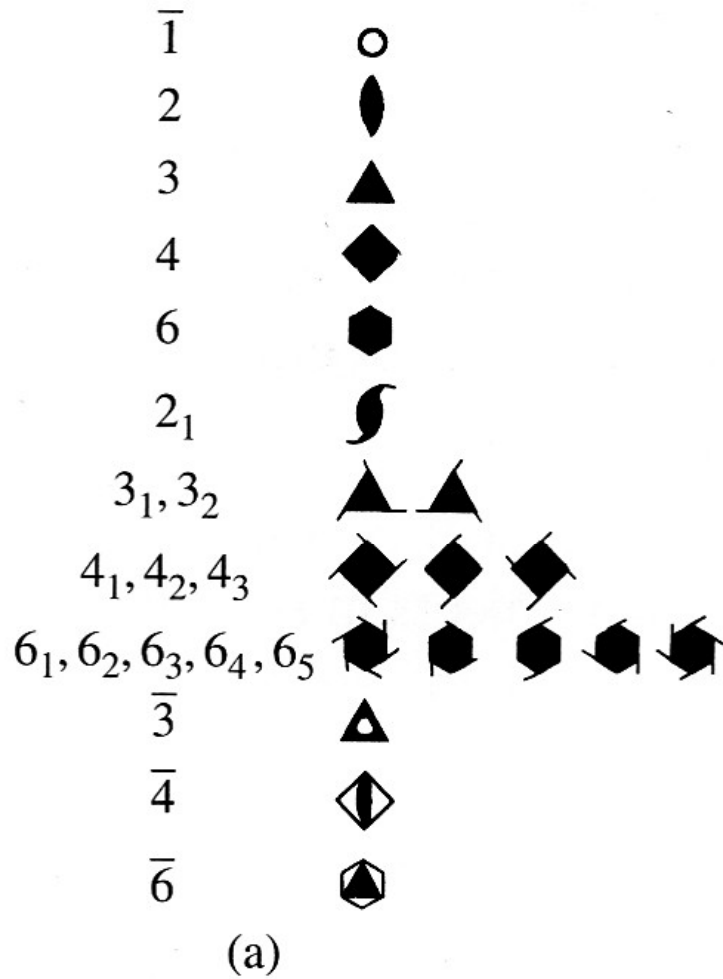


Винтовые оси симметрии

Винтовой поворот – это операция симметрии, включающая поворот вокруг оси с одновременным сдвигом вдоль той же оси.



Обозначения операций симметрии



Матричное представление

$$x, y, z, \rightarrow x', y', z'$$

$$x' = r_{11}x + r_{12}y + r_{13}z + t_1;$$

$$y' = r_{21}x + r_{22}y + r_{23}z + t_2;$$

$$z' = r_{31}x + r_{32}y + r_{33}z + t_3$$

$$\vec{r}' = R\vec{r} + \vec{t}$$

$$\det R = \pm 1$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix}$$

Для ТГС:

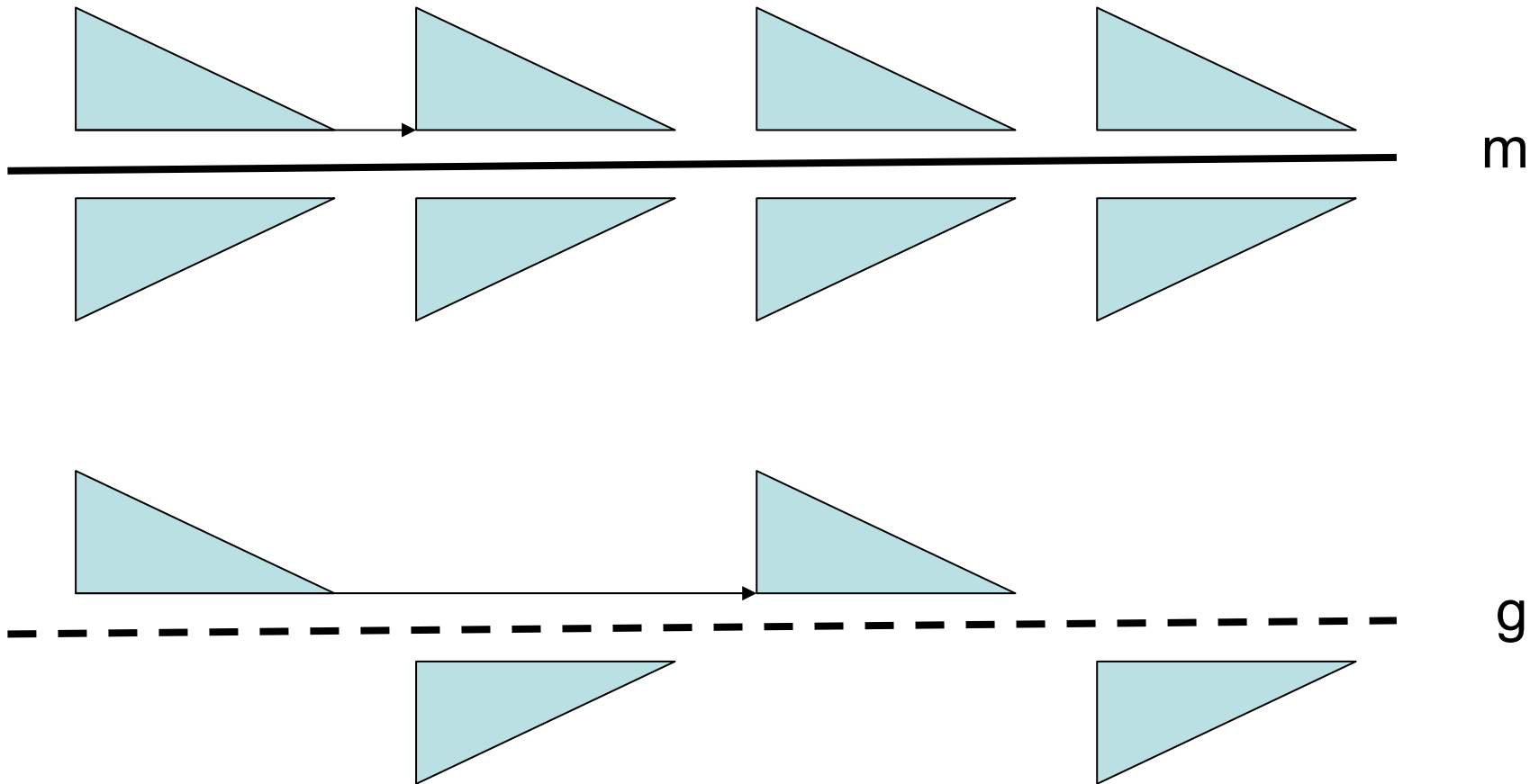
$$\vec{r}' = R\vec{r}$$

Операции симметрии 1-го рода: $\det R = 1$

Операции симметрии 2-го рода: $\det R = -1$

Геометрическое построение \leftrightarrow матричный вид операций
изоморфны

Закрытую и открытую операцию симметрии, в соответствии которым поставлена одна и та же матрица, называют сходственными.



- Сходственные операции: зеркальное и скользящее отражение, простой и винтовой поворот
- Элементы симметрии (плоскости, оси), соответствующие сходственным операциям симметрии, совпадают в пространстве

Трансляционная симметрия, ПГС, кристаллографический класс и система

- Группа трансляций (ГТ)
- Правильная система точек ГТ = Решетка Бравэ
- Группа Бравэ
- Открытые операции симметрии:
трансляция, скользящее отражение, винтовой поворот
- Пространственные группы симметрии (ПГС)
- Кристаллографический класс (КК)
- Кристаллическая система (КС)
- Элементарная ячейка, выбор координатных осей
- Номенклатура ПГС, ТГС и КК

Пространственные группы симметрии

Совокупность всех (открытых и закрытых) операций симметрии, совмещающих саму с собой периодическую структуру, называют пространственной группой симметрии данной структуры (ПГС).

Группа трансляций – всегда подгруппа ПГС

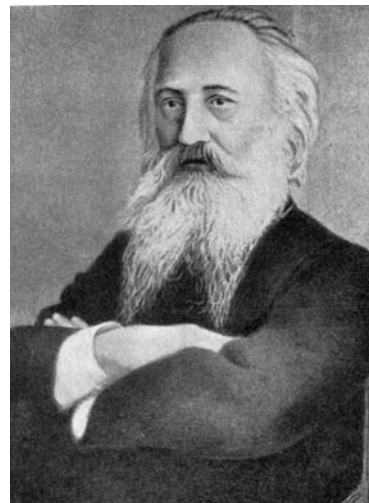
Группа Бравэ (ПГС решетки Бравэ структуры) не всегда совпадает с ПГС структуры

Число различных ПГС конечно (7 для одномерных трансляций, 17 для двумерных, 230 – для трехмерных)

Теоретический вывод всех возможных ПГС



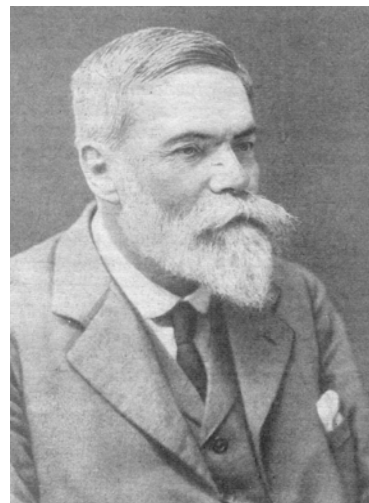
L. Sohncke (165 групп, 1897)



Е.С. Федоров (230, 1890)

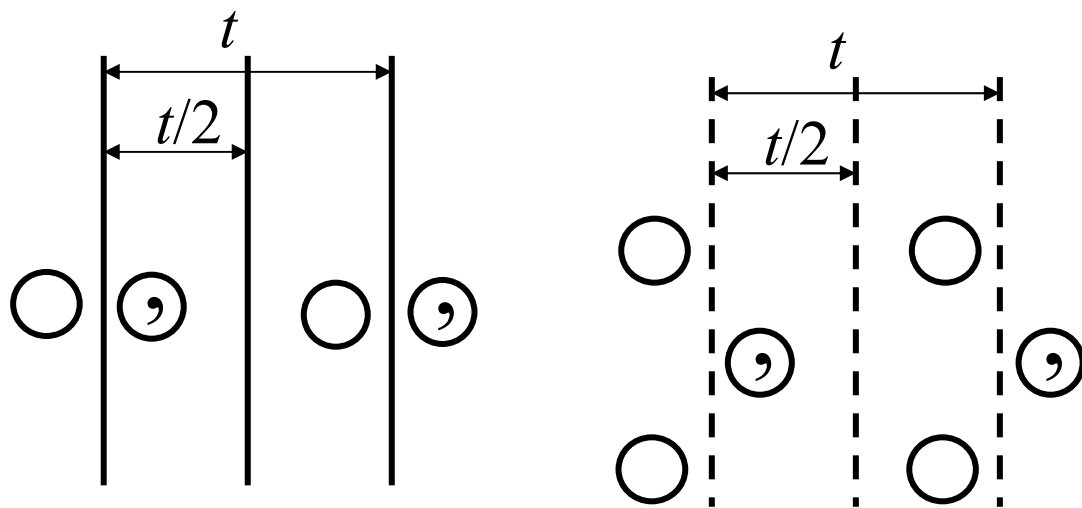


A. Schoenflies (230, 1891)



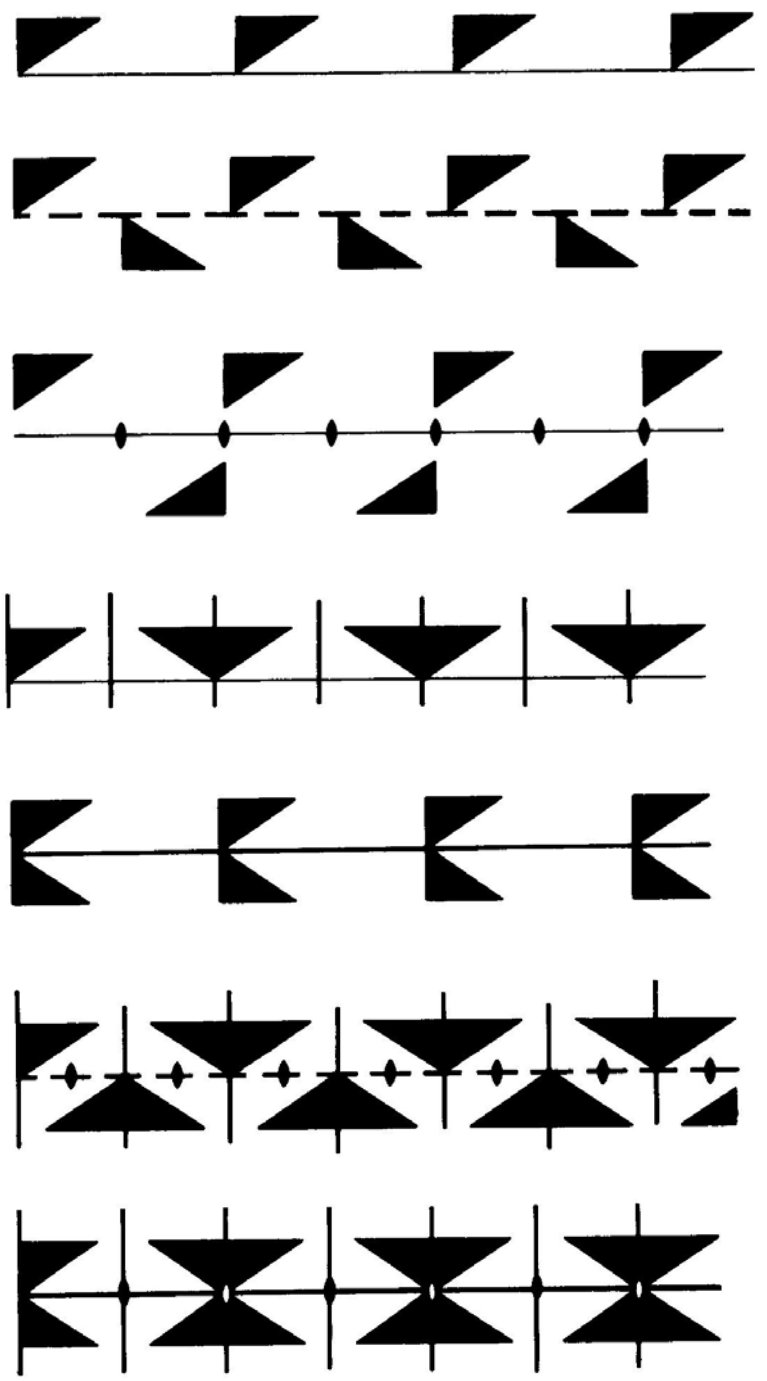
W. Barlow (230, 1894)

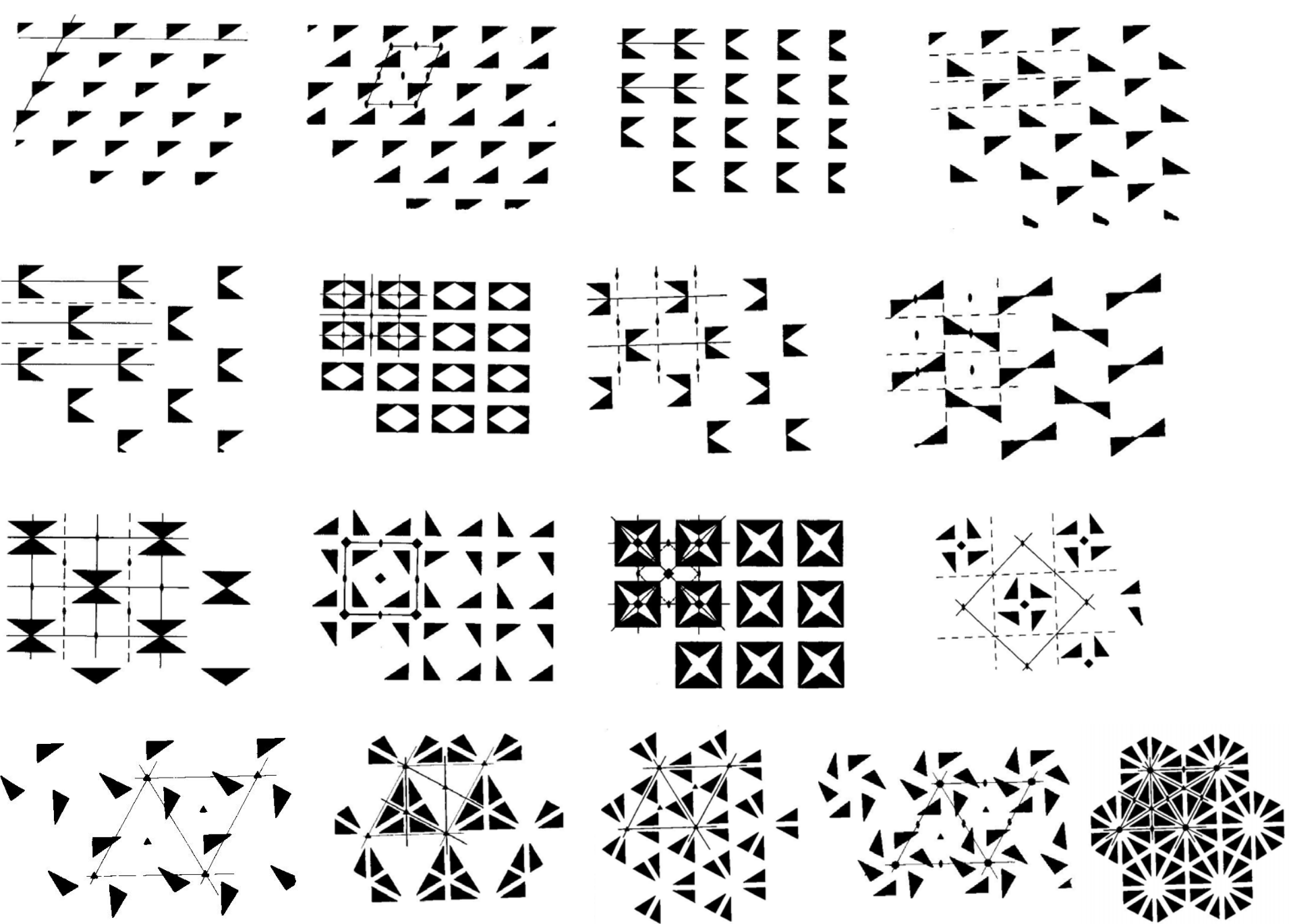
Плоскость симметрии и перпендикулярная ей трансляция с параметром t порождают новые вставленные плоскости симметрии, параллельные порождающей, аналогичные ей по типу и отстоящие от нее на расстоянии $t/2$.



Трансляция, перпендикулярная оси симметрии 2-го порядка, порождает такую же ось симметрии, параллельную порождающей и смещенную на $t/2$ в направлении трансляции.

- 7 ПГС бордюров





Международные таблицы по кристаллографии

INTERNATIONAL TABLES FOR CRYSTALLOGRAPHY

Brief Teaching Edition of
Volume A
SPACE-GROUP SYMMETRY

Edited by
THEO HAHN

Journals Online

- [Acta Cryst. A](#)
- [Acta Cryst. B](#)
- [Acta Cryst. C](#)
- [Acta Cryst. D](#)
- [Acta Cryst. E](#)
- [Acta Cryst. F](#)
- [J. Appl. Cryst.](#)

J. Synchrotron Rad.

*** International Tables**

- [Volume A](#)
- [\(Teaching Edition\)](#)
- [Volume A1](#)
- [Volume B](#)
- [Volume C](#)
- [Volume D](#)
- [Volume E](#)
- [Volume F](#)
- [Volume G](#)

- * IUCr Newsletter**
- * Teaching Pamphlets**
- * Other Publications**

Services

- * World Directory**
- ***

Crystallography

Home

International Tables for Crystallography

First online edition (2006) ISBN: 978-1-4020-4969-9 eISBN: 978-1-4020-5259-0 doi: 10.1107/97809553602060000001

This is the home page for **International Tables**, the definitive resource and reference work for crystallography. The series consists of the following volumes:



Guided tour

- Volume A** Space-group symmetry
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume A1** Symmetry relations between space groups
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume B** Reciprocal space
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume C** Mathematical, physical and chemical tables
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume D** Physical properties of crystals
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume E** Subperiodic groups
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume F** Crystallography of biological macromolecules
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume G** Definition and exchange of crystallographic data
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |

The series comprises articles and tables of data relevant to crystallographic research and to applications of crystallographic methods in all sciences concerned with the structure and properties of materials. Emphasis is given to symmetry, diffraction methods and techniques of crystal structure determination, and the physical and chemical properties of crystals. Each volume also contains discussions of theory, practical explanations and examples, all of which are useful for teaching.

International Tables is available in [print](#) and [online](#). A brief teaching edition of Volume A is also available in [print](#).

FCT/ZTF



bilbao crystallographic server

UPV/EHU



[The crystallographic site at the Condensed Matter Physics Dept. of the University of the Basque Country]

[[Space Groups](#)] [[Layer Groups](#)] [[Rod Groups](#)] [[Frieze Groups](#)] [[Wyckoff Sets](#)] [[mirror site at IUCR](#)]

Sections

[Retrieval Tools](#)
[Group-Subgroup](#)
[Representations](#)
[Solid State](#)
[Structure Utilities](#)
[Subperiodic](#)
[ICSDB](#)

[Contact us](#)
[About us](#)
[Links](#)
[Publications](#)
[How to cite the server?](#)

New programs and updates:

- **TRANPATH**
7-2007: Minor update and fixes.
- **SUPERGROUPS**
6-2007: Added link to Wyckoff Positions splitting.
- **SERIES**

Space Groups Retrieval Tools

GENPOS	Generators and General Positions of Space Groups
WYCKPOS	Wyckoff Positions of Space Groups
HKLCOND	Reflection conditions of Space Groups
MAXSUB	Maximal Subgroups of Space Groups
SERIES	Series of Maximal Isomorphic Subgroups of Space Groups
WYCKSETS	Equivalent Sets of Wyckoff Positions
NORMALIZER	Normalizers of Space Groups
KVEC	The k-vector types and Brillouin zones of Space Groups

Group - Subgroup Relations of Space Groups

SUBGROUPGRAPH	Lattice of Maximal Subgroups
HERMANN	Distribution of subgroups in conjugated classes
COSETS	Coset decomposition for a group-subgroup pair
WYCKSPLIT	The splitting of the Wyckoff Positions
MINSUP	Minimal Supergroups of Space Groups
SUPERGROUPS	Supergroups of Space Groups
CELLSUB	List of subgroups for a given k-index.
CELLSUPER	List of supergroups for a given k-index.
COMMONSUBS	Common Subgroups of Space Groups
COMMONSUPER	Common Supergroups of Two Space Groups

Пространственные группы симметрии

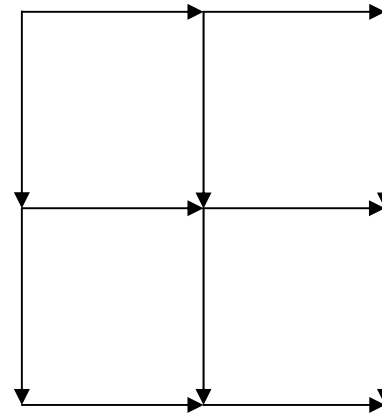
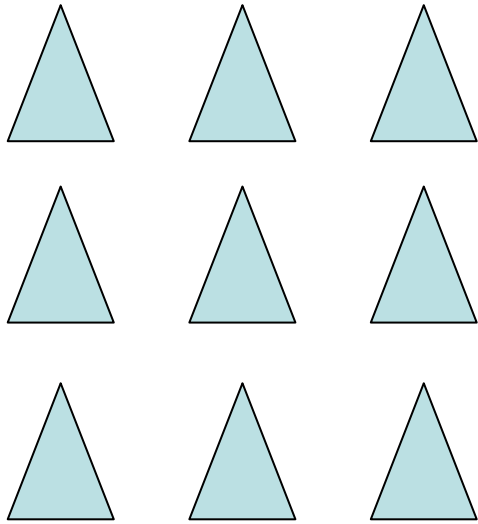
Совокупность всех (открытых и закрытых) операций симметрии, совмещающих саму с собой периодическую структуру, называют пространственной группой симметрии данной структуры (ПГС).

Группа трансляций – всегда подгруппа ПГС

Группа Бравэ (ПГС решетки Бравэ структуры) не всегда совпадает с ПГС структуры

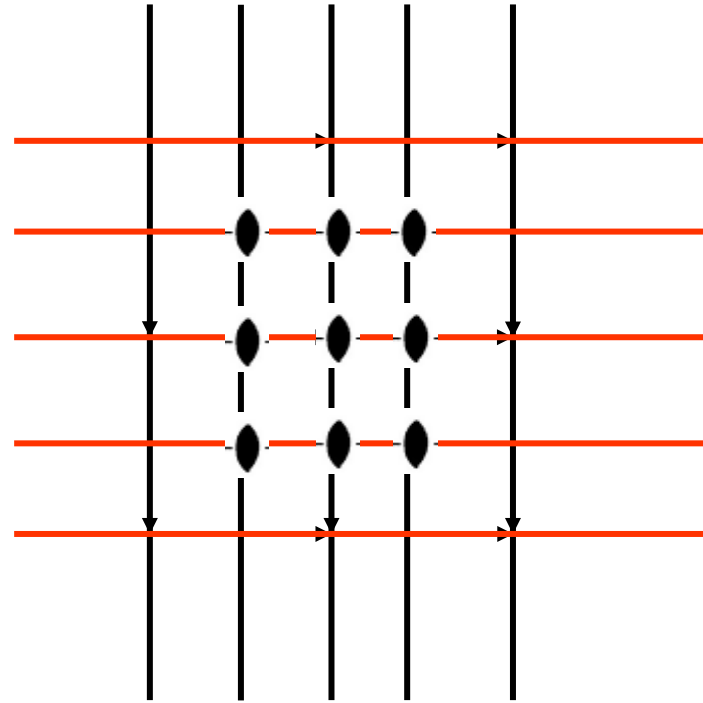
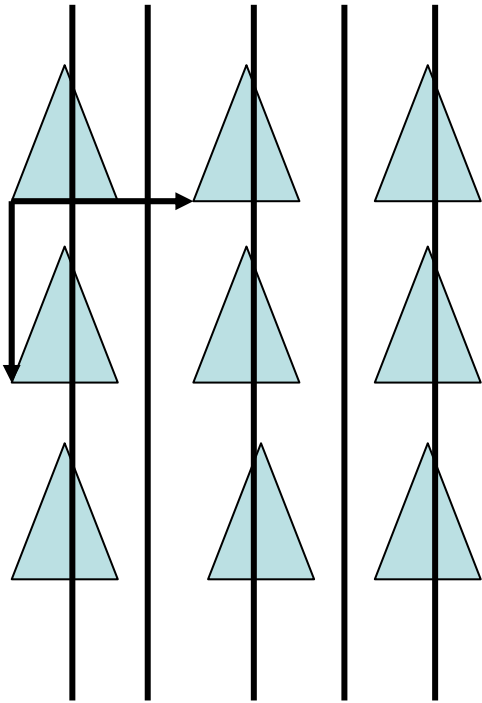
Число различных ПГС конечно (7 для одномерных трансляций, 17 для двумерных, 230 – для трехмерных)

Сравнение ПГС структуры и Группы Бравэ



Симметрия структуры ниже, чем симметрия соответствующей ей решетки Бравэ

Сравнение ПГС структуры и Группы Бравэ

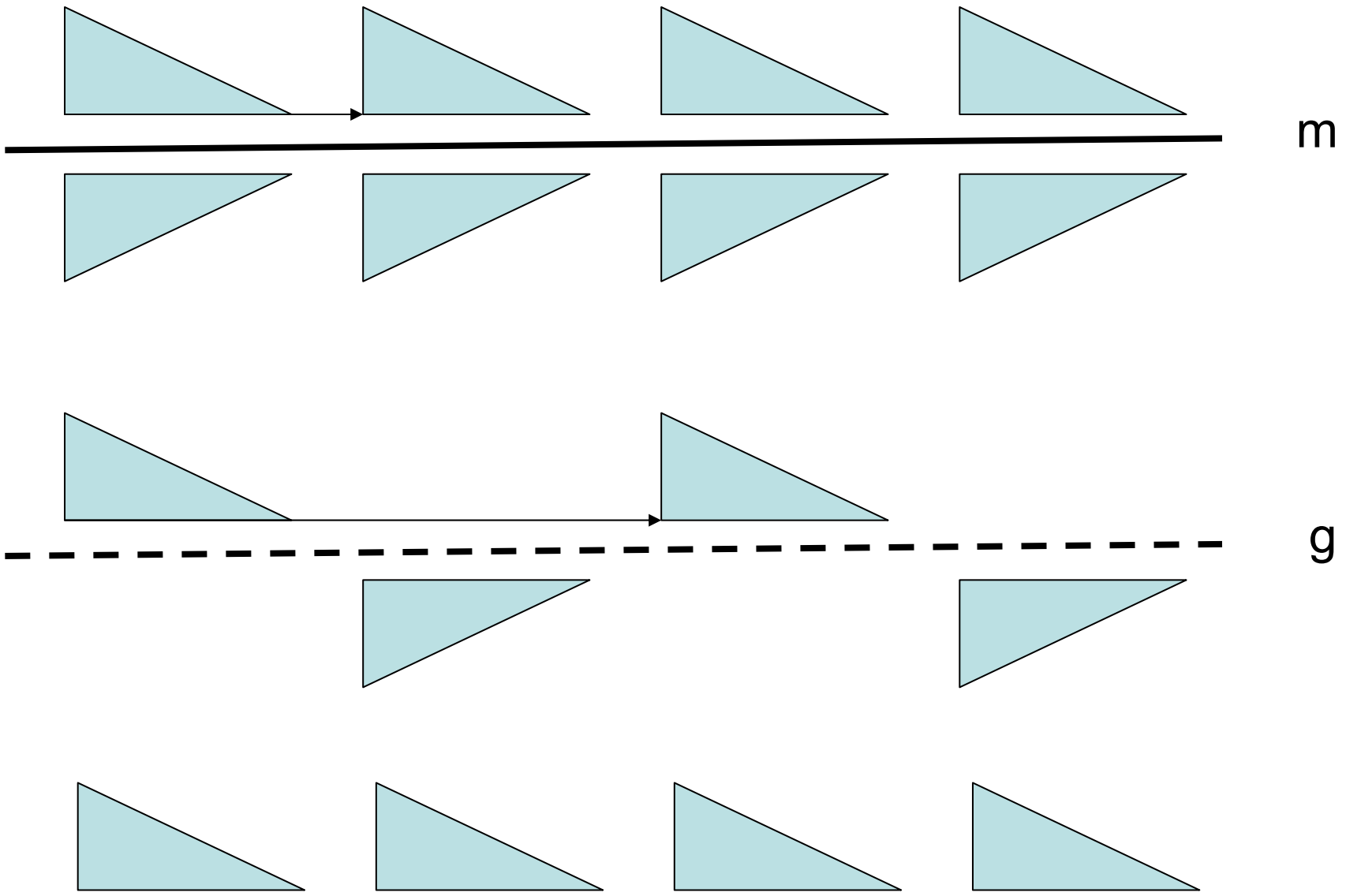


Симметрия структуры ниже, чем симметрия соответствующей ей решетки Бравэ

Если изменить симметрию транслируемых фрагментов или позволить им вращаться (динамический или статический беспорядок), то симметрия структуры может измениться при неизменном расположении транслируемых центров масс

Трансляционная симметрия, ПГС, кристаллографический класс и система

- Группа трансляций (ГТ)
- Правильная система точек ГТ = Решетка Бравэ
- Группа Бравэ
- Открытые операции симметрии:
трансляция, скользящее отражение, винтовой поворот
- Пространственные группы симметрии (ПГС)
- Кристаллографический класс (КК)
- Кристаллическая система (КС)
- Элементарная ячейка, выбор координатных осей
- Номенклатура ПГС, ТГС и КК

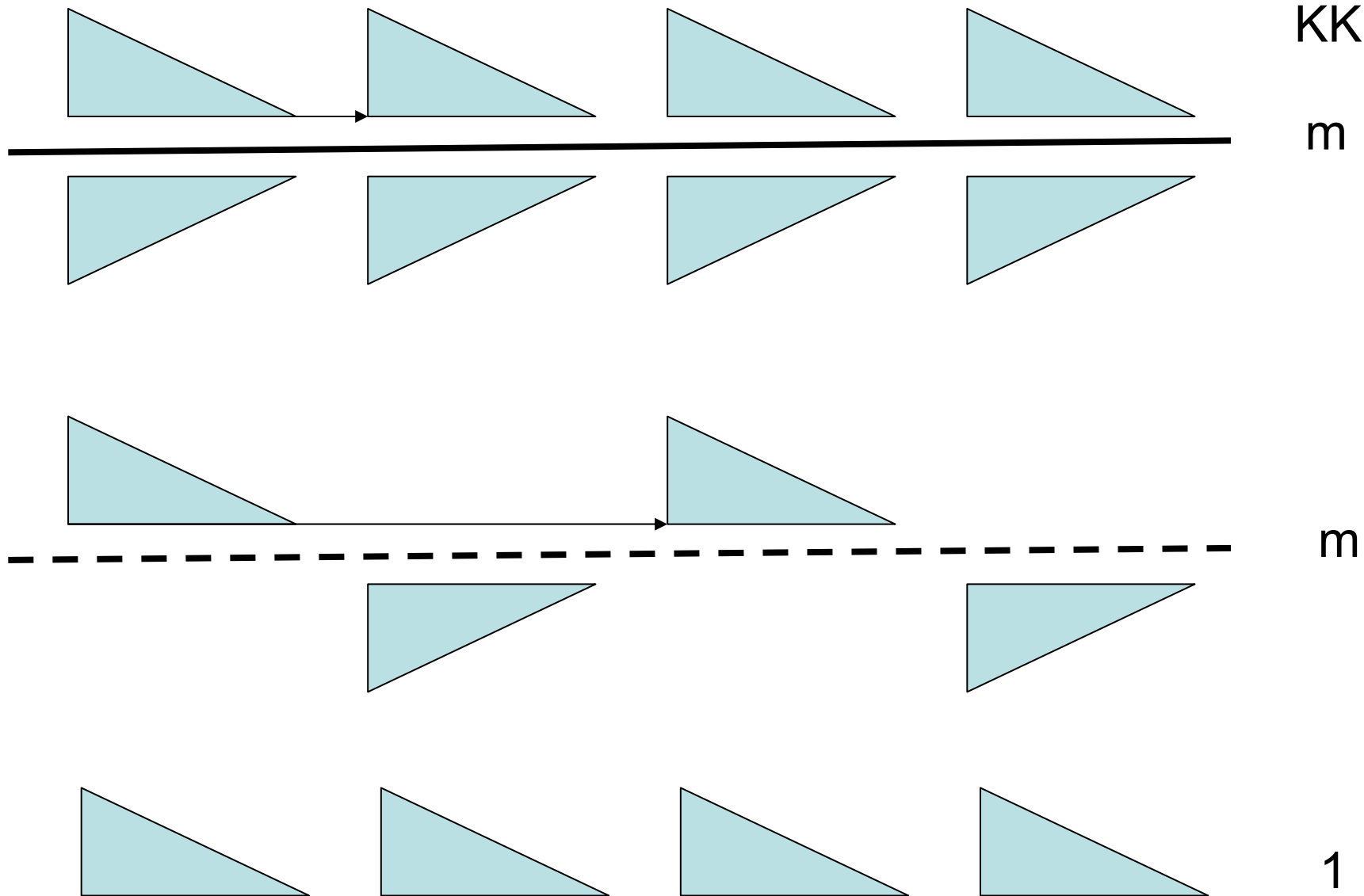


Кристаллографический класс

Если в пространственной группе симметрии заменить все открытые операции симметрии на сходственные закрытые и добавить их к закрытым операциям симметрии, входившим в ПГС изначально, то получим совокупность закрытых операций симметрии, которые образуют группу, называемую кристаллографическим классом данной структуры.

Кристаллографический класс:

Все закрытые операции + все сходственные операции ПГС



Кристаллографический класс не обязательно
 является подгруппой ПГС

Трансляционная симметрия, ПГС, кристаллографический класс и система

- Группа трансляций (ГТ)
- Правильная система точек ГТ = Решетка Бравэ
- Группа Бравэ
- Открытые операции симметрии:
трансляция, скользящее отражение, винтовой поворот
- Пространственные группы симметрии (ПГС)
- Кристаллографический класс (КК)
- Кристаллическая система (КС)
- Элементарная ячейка, выбор координатных осей
- Номенклатура ПГС, ТГС и КК

Кристаллическая система

Классификация всех ПГС по наличию элементов симметрии.

Алгоритм:

- Выделить кристаллографический класс,
- Проанализировать наличие в КК (не в ПГС!) таких элементов, как отражение и поворот

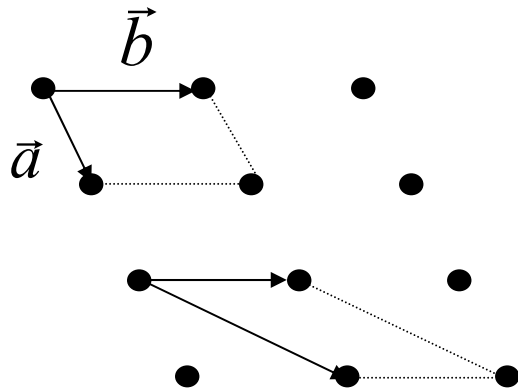
Крист. система	Поворотные оси	Отражения
триклинная	нет	нет
моноклинная	2 (только одна)	нет
- // -	нет	m (только одно)
- // -	2 (только одна)	m (ось \perp плоскости)
Ромбическая (orthorhombic)	2 2 2 (3 взаимоперпендикулярных оси)	нет
- // -	2 2 2 (3 взаимоперпендикулярных оси)	Минимум m m (2 взаимоперпендикулярных плоскости)
Тригональная	3 (только один), нет 4	Не имеет значения
Тетрагональная	4 (только один), нет 3	Не имеет значения
Гексагональная	6 (только один)	Не имеет значения
Кубическая	Несколько 3	Не имеет значения
Кубическая	Несколько 4	Не имеет значения
Кубическая	Одновременно 3 и 4	Не имеет значения

Трансляционная симметрия, ПГС, кристаллографический класс и система

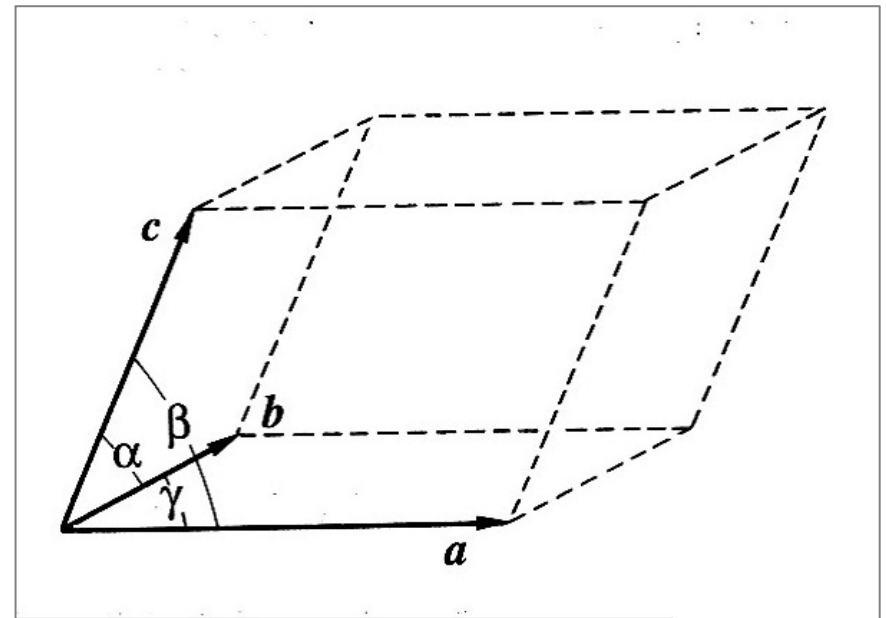
- Группа трансляций (ГТ)
- Правильная система точек ГТ = Решетка Бравэ
- Группа Бравэ
- Открытые операции симметрии:
трансляция, скользящее отражение, винтовой поворот
- Пространственные группы симметрии (ПГС)
- Кристаллографический класс (КК)
- Кристаллическая система (КС)
- Элементарная ячейка, выбор координатных осей
- Номенклатура ПГС, ТГС и КК

Элементарной ячейкой называют параллелепипед, построенный на векторах элементарных трансляций решетки Бравэ данной структуры.

Элементарная ячейка минимально возможного объема называется примитивной. Она содержит один узел решетки Бравэ.



$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b}$$

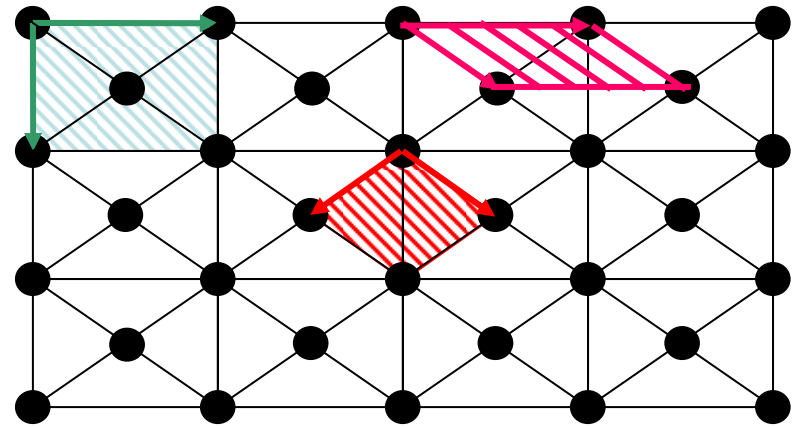
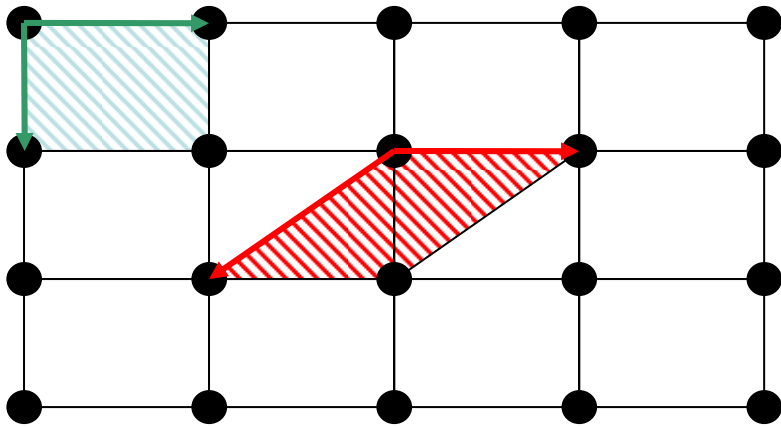


$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad u, v, w \in Z$$

Вариантов выбора примитивной элементарной ячейки бесконечно много. Все они имеют одинаковый объем.

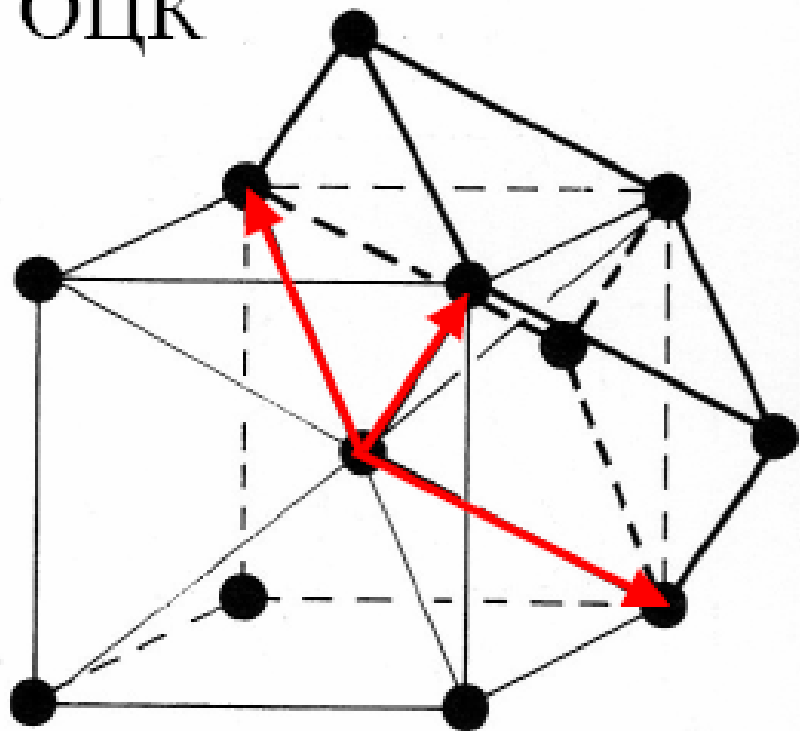
Критерии выбора элементарной ячейки

- Симметрия элементарной ячейки должна соответствовать симметрии решетки в целом.
- Элементарная ячейка должна иметь минимальный объем.
- Элементарная ячейка должна иметь максимальное количество прямых углов.

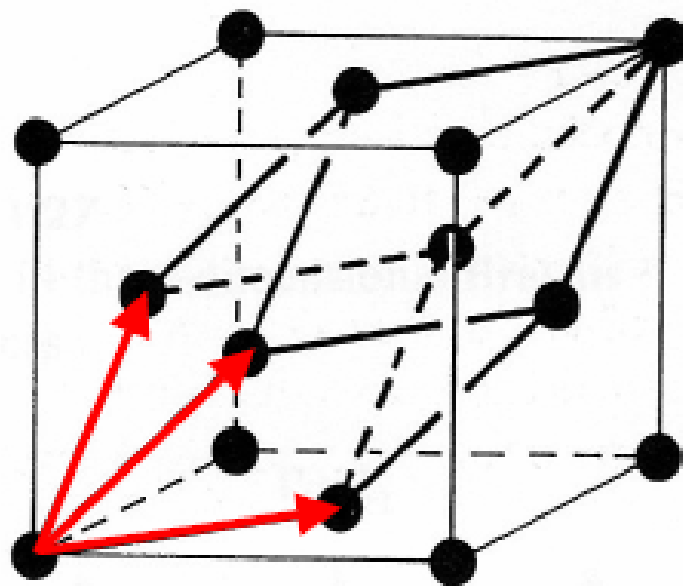


Условной элементарной ячейкой называется непримитивная элементарная ячейка, сохраняющая точечную симметрию решетки Бравэ.

ОЦК



ГЦК



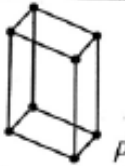
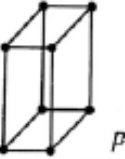
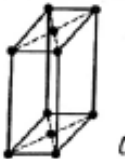
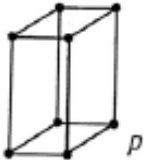
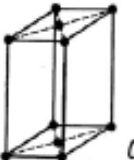
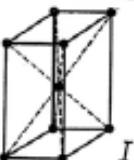
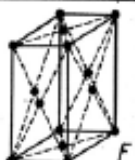
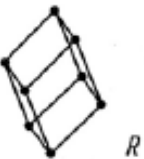
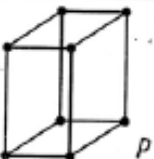
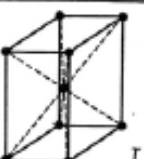
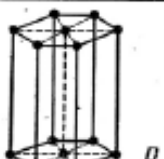

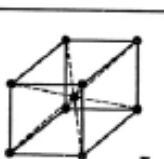
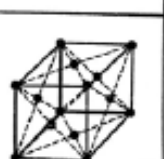
Символ	Основные трансляции	Базис	Число узлов в ячейке
P	a, b, c	000	1
A	$a, b, c, \frac{b+c}{2}$	000; $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	2
B	$a, b, c, \frac{a+c}{2}$	000; $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$	2
C	$a, b, c, \frac{a+b}{2}$	000; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$	2
I	$a, b, c, \frac{a+b+c}{2}$	000; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	2
F	$a, b, c, \frac{b+c}{2}, \frac{c+a}{2}, \frac{a+b}{2}$	000; $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}; \frac{1}{2}0\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$	4

**Стандартный выбор координатных осей
зависит от кристаллической системы:**

Крист. система	X	Y	Z
триклинная	любой	любой	любой
моноклинная		2 или \perp m	
ромбическая	2 или \perp m	2 или \perp m	2 или \perp m
тригональная	под 120 град к Y \perp 3 или по ребрам ромбоэдра	под 120 град к X \perp 3 или по ребрам ромбоэдра	3 или по ребрам ромбоэдра
тетрагональная	по вершинам квадрата \perp 4	по вершинам квадрата \perp 4	4
гексагональная	под 120 град к Y \perp 6	под 120 град к X \perp 6	6
кубическая	по ребрам куба, в к- ром 3 – телесная диагональ, 4 – \perp грани	по ребрам куба, в к- ром 3 – телесная диагональ, 4 - \perp грани	по ребрам куба, в к- ром 3 – телесная диагональ, 4 – \perp грани

Связь метрики элементарной ячейки и кристаллической системы

Крист. система	Ограничения на длины a, b, c	Ограничения на углы α, β, γ
триклинная	нет	нет
моноклинная	нет	минимум два из трех углов прямые
ромбическая	нет	все углы прямые
тетрагональная	минимум два параметра равны	все углы прямые
кубическая	все параметры равны	все углы прямые
тригональная и гексагональная	все параметры равны / два параметра равны	все углы равны / два угла прямые, третий – 120 градусов

Сингония	Тип решетки			
	Примитивная	Базоцентрированная	Объемно-центрированная	Граноцентрированная
Триклинная	 <i>P</i>			
Моноклинная	 <i>P</i>	 <i>C</i>		
Ромбическая	 <i>P</i>	 <i>C</i>	 <i>I</i>	 <i>F</i>
Тригональная (ромбоэдрическая)	 <i>R</i>			
Тетрагональная	 <i>P</i>		 <i>I</i>	
Гексагональная	 <i>P</i>			
Кубическая	 <i>P</i>		 <i>I</i>	 <i>F</i>

Трансляционная симметрия, ПГС, кристаллографический класс и система

- Группа трансляций (ГТ)
- Правильная система точек ГТ = Решетка Бравэ
- Группа Бравэ
- Открытые операции симметрии:
трансляция, скользящее отражение, винтовой поворот
- Пространственные группы симметрии (ПГС)
- Кристаллографический класс (КК)
- Кристаллическая система (КС)
- Элементарная ячейка, выбор координатных осей
- [Номенклатура ПГС, ТГС и КК](#)

Крист. система	1 позиция в символе ТГС или КК	2 позиция в символе ТГС или КК	3 позиция в символе ТГС или КК
триклинная	1 (-1)	-	-
моноклинная	(X) 1	(Y) 2 (или) m (или) 2/m	(Z) 1
ромбическая	(X) 2 (или) m (или) 2/m	(Y) 2 (или) m (или) 2/m	(Z) 2 (или) m (или) 2/m
Тригональная /гексагональная	(Z) 3 (или 3 ₁ , или -3) / 6 (или 6 ₁ , 6 ₃ , -6, 6/m)	(X,Y) Плоскость \perp X(Y), или ось 2 (2 ₁) (если есть)	(диагональ между X, Y) Диагональные плоскости или оси 2 (2 ₁) (если есть)
тетрагональная	(Z) 4 (или 4 ₁ , 4 ₂ , 4 ₃ , или -4)	- // -	(диагональ между X, Y) Диагональные плоскости или оси 2 (2 ₁) (если есть)
кубическая	(X,Y,Z) Плоскости \perp осям (если есть) или оси \parallel осям	(Телесная диагональ куба) 3 (или -3)	(Диагональ грани куба) Диагональные плоскости или оси 2 (если есть)

Примеры:

m m m, m m 2, 2 2 2, 3 2, m 3 m, 4 3 2,
4/m m m, 2/m, 1 2/m 1, 6/m m m,

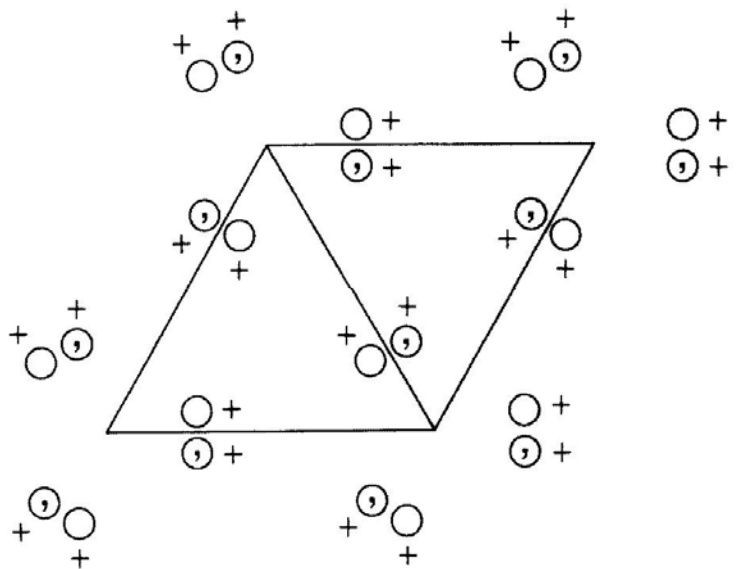
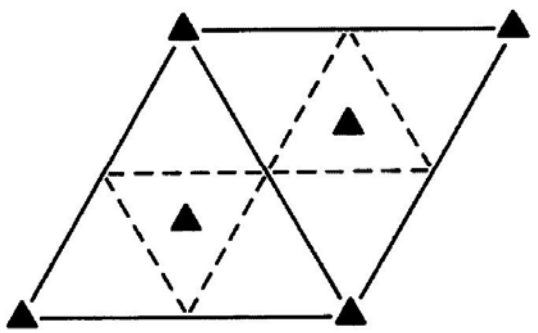
При записи символа ПГС все остается так же, но ПЕРЕД символом ТГС указывается тип центрировки элементарной ячейки (A, B, C, F, I)*:

I m m m, P m m 2, 2 2 2, 3 2, F m 3 m,
F 4 3 2, P 4/m m m, C 2/m, P 6/m m m,
P n m a, F d d d, P b c a, I 2₁/a, I 4₁/a c d

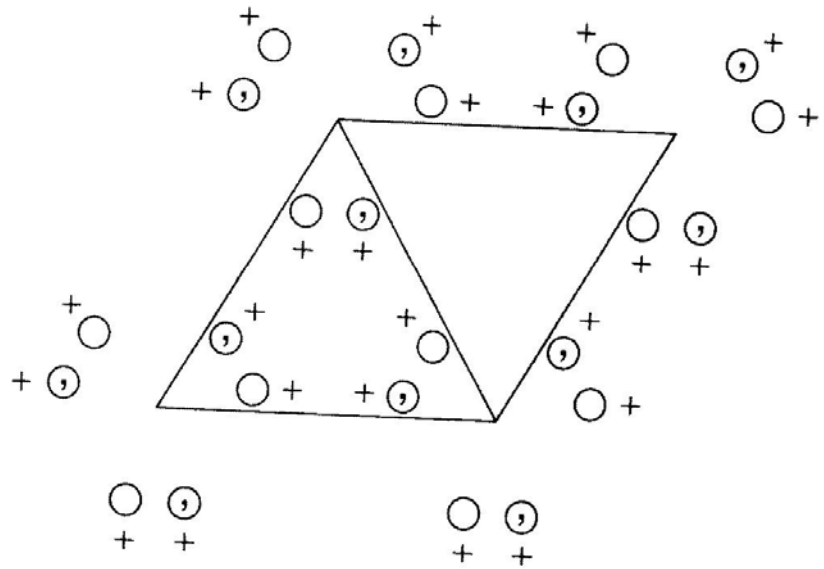
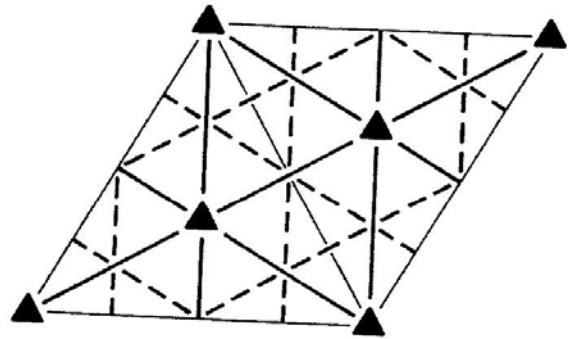
*кроме тригональных

- ПГС не зависит от выбора координатных осей и начала координат
- Запись символа ПГС зависит от выбора координатных осей и начала координат
- Большое значение имеет порядок отдельных символов в общем символе

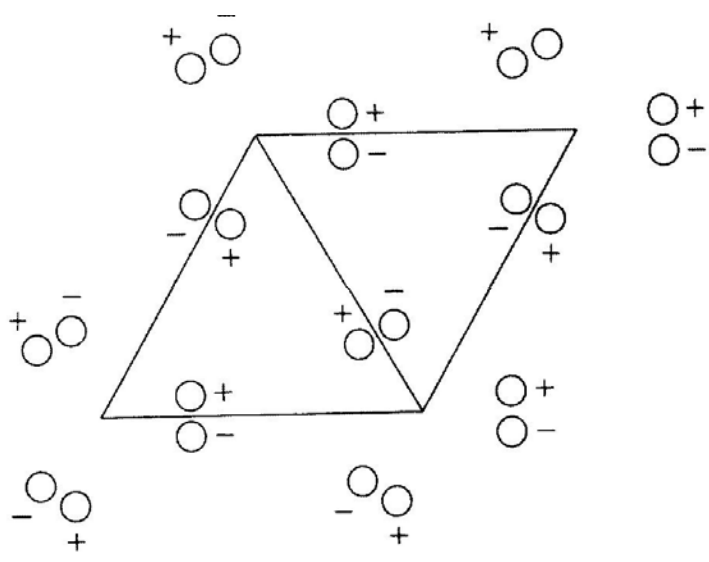
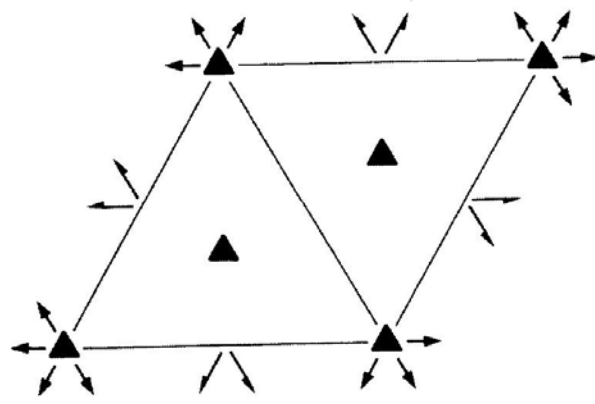
- P 3 1 m



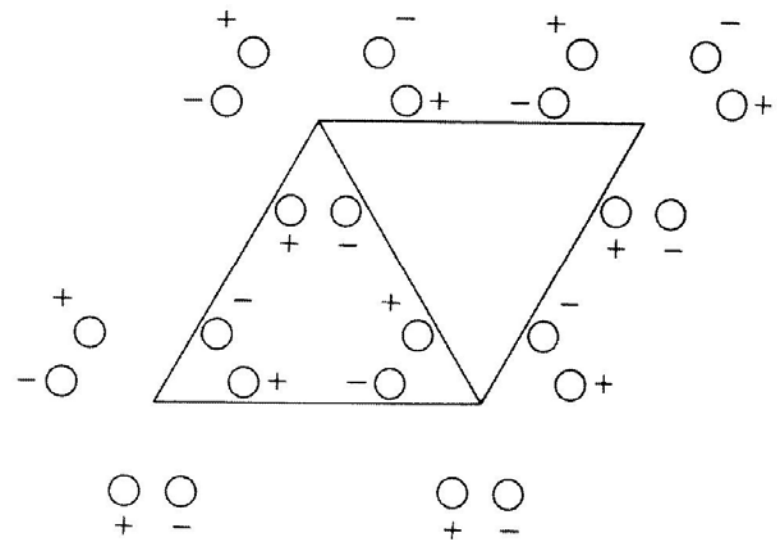
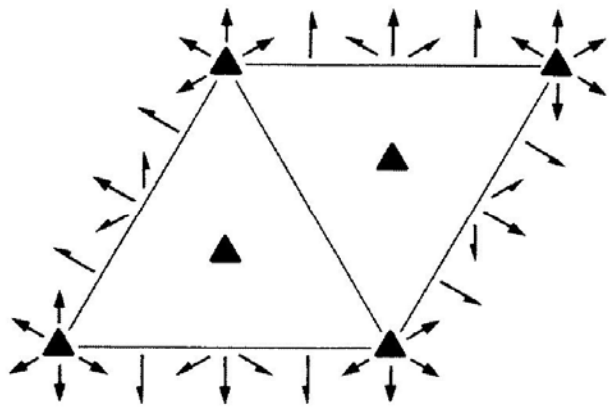
- P 3 m 1



• P 3 2 1



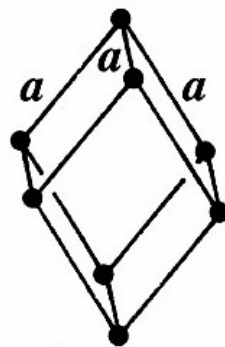
• P 3 1 2



Тригональные центрированные (в гексагональных координатах) ячейки обозначаются особо: символом R в первой позиции, т.к. можно представить их примитивными ромбоэдрическими ячейками (например, $R3m$, $R3c$).

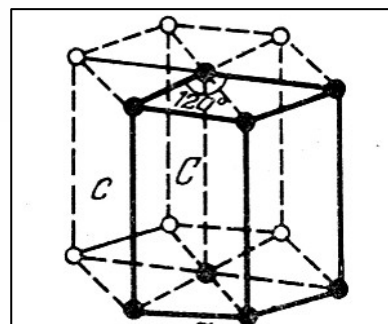
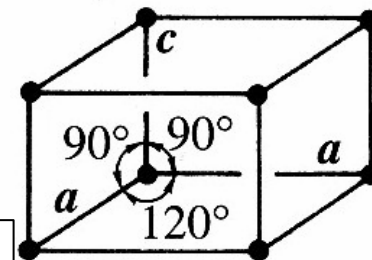
Trigonal Тригональная

Hexagonal Гексагональная

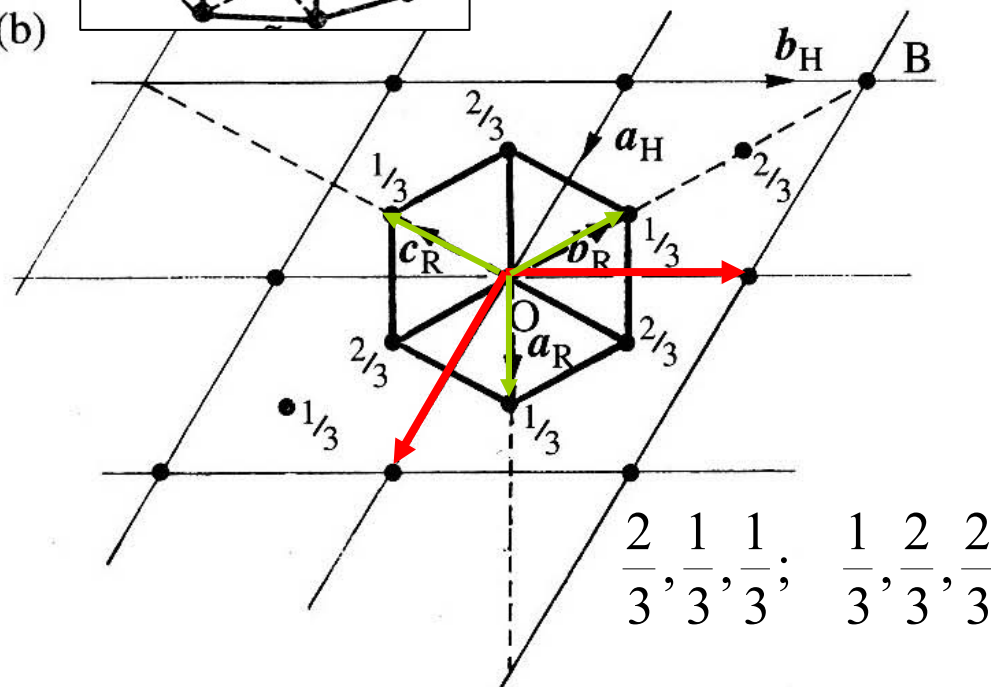


R

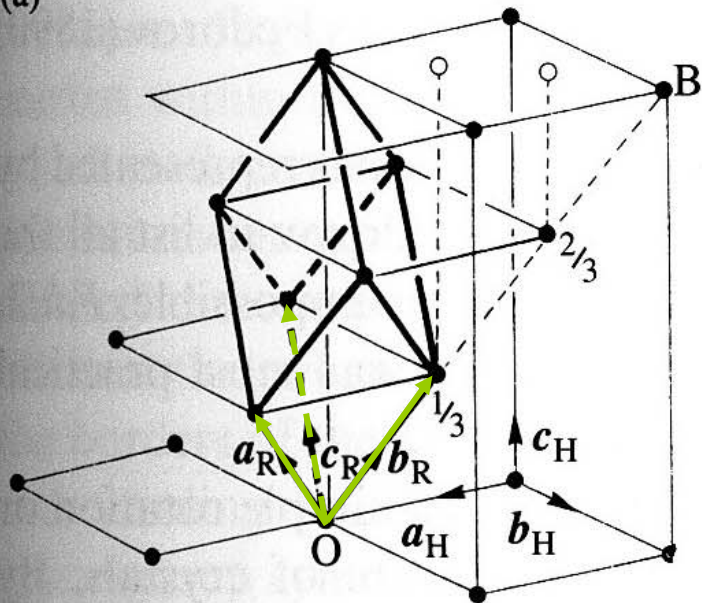
P



(b)



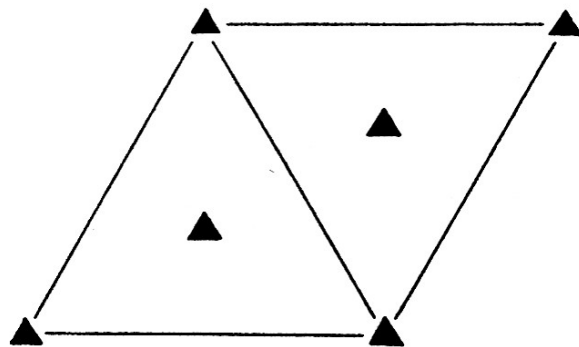
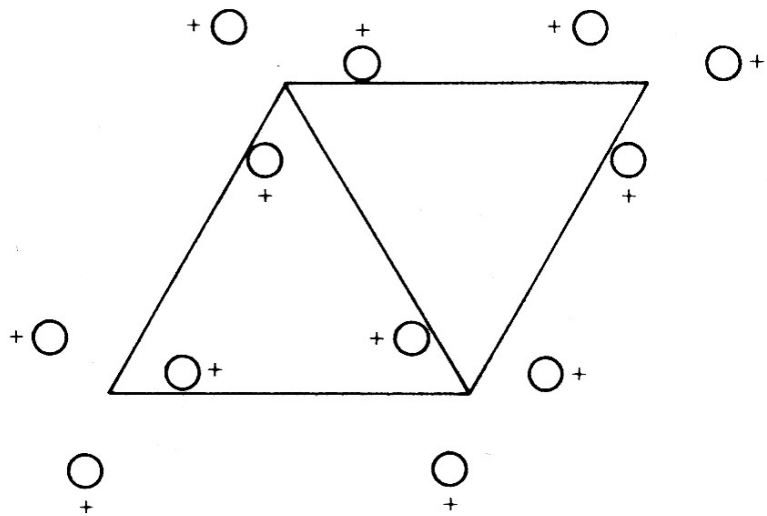
(a)



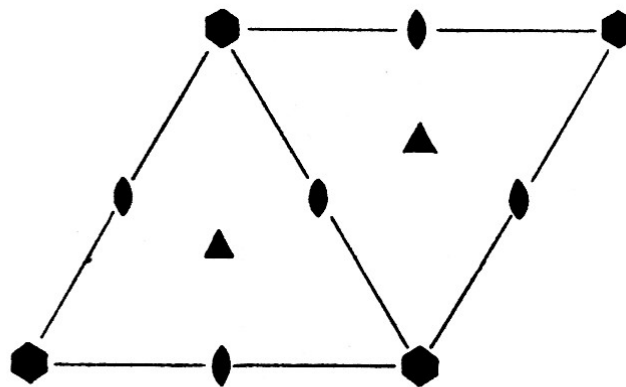
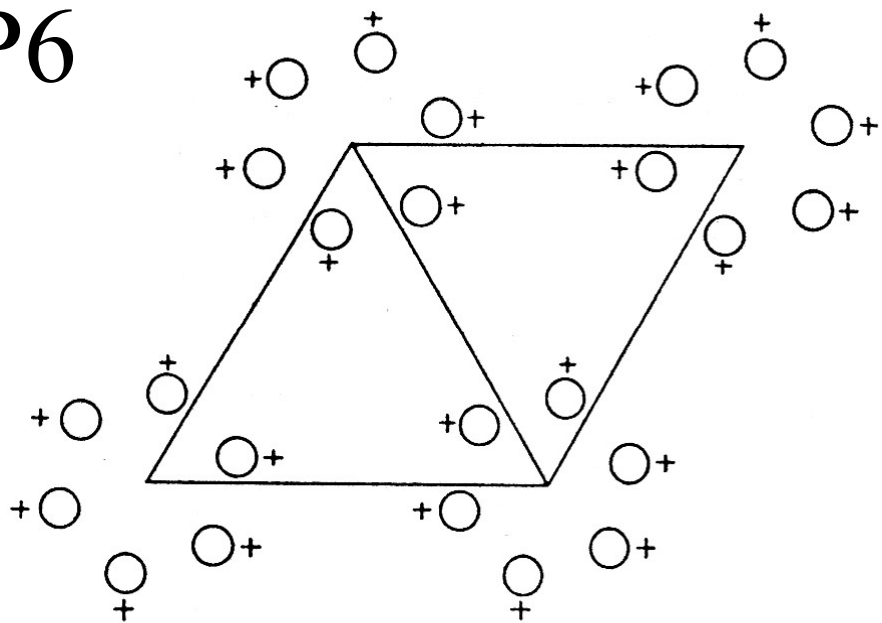
Символ ПГС содержит не все операции симметрии группы, остальные можно всегда получить из генераторов

Для облегчения работы, все ПГС имеют порядковые номера, которые однозначно задают их. Информация есть в Международных таблицах и используется стандартным образом в современных компьютерных программах и базах данных

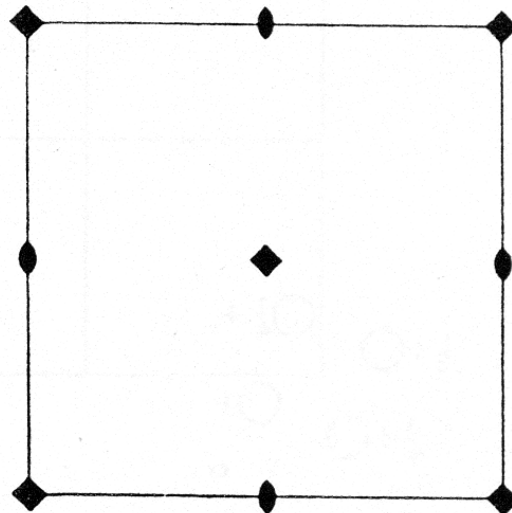
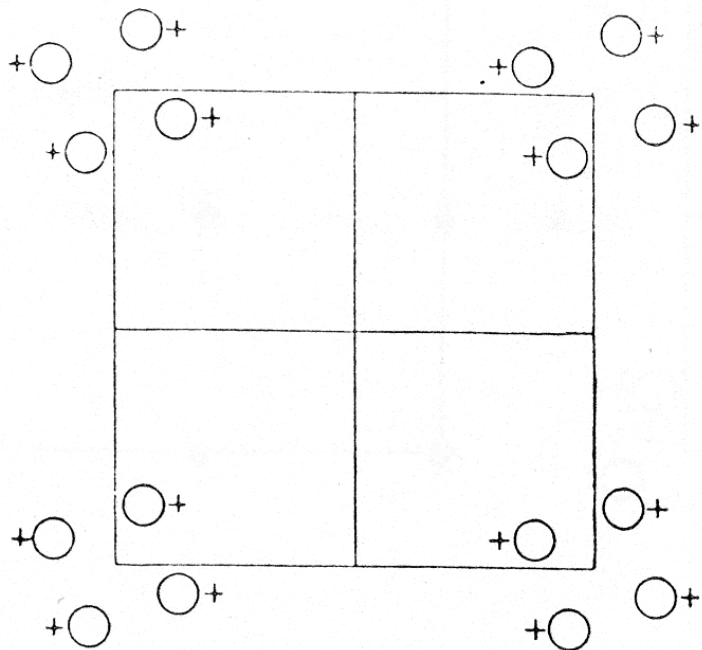
P3



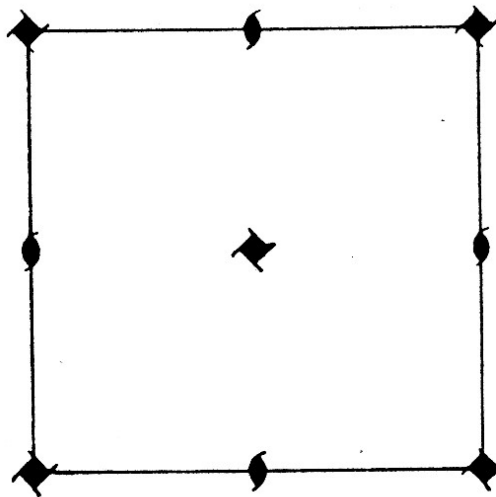
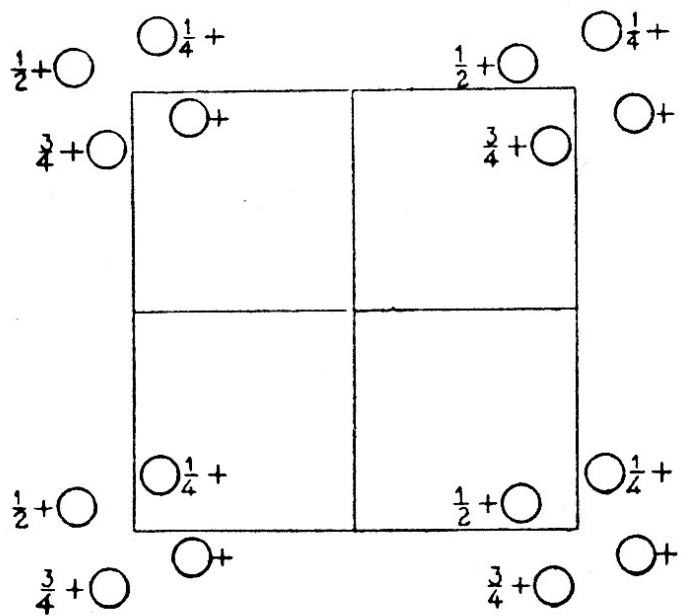
P6



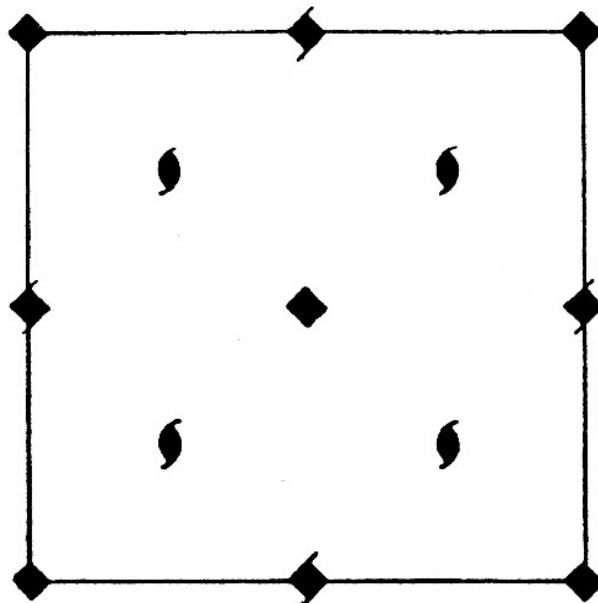
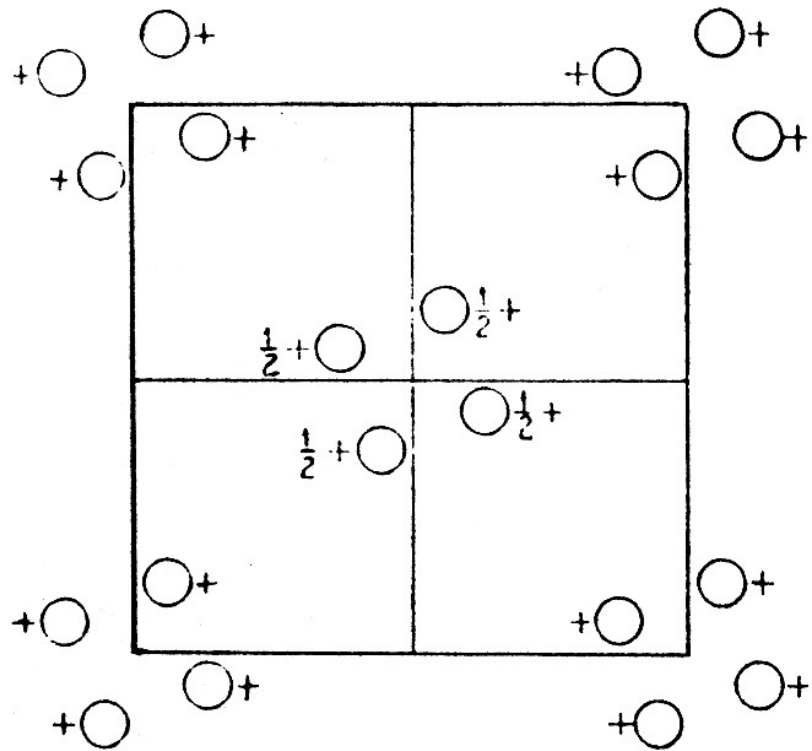
P4



P4₁



I4



Стандартные и нестандартные установки

- Cc (№ 9)

- An, Ia (№ 9)

No. 9

UNIQUE AXIS *b*, DIFFERENT CELL CHOICES

C1c1
UNIQUE AXIS *b*, CELL CHOICE 1

Origin on glide plane *c*

Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

Generators selected (1); $r(1,0,0)$; $r(0,1,0)$; $r(0,0,1)$; $r(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$; (2)

Positions		
Multiplicity,	Coordinates	
Wyckoff letter,	$(0,0,0)+$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)+$
Site symmetry		

4 a 1 (1) x,y,z (2) $x,\bar{y},z+\frac{1}{2}$

Reflection conditions

General:

$hkl : h+k=2n$
 $h0l : h,l=2n$
 $0kl : k=2n$
 $hk0 : h+k=2n$
 $0k0 : k=2n$
 $h00 : h=2n$
 $00l : l=2n$

CONTINUED

No. 9

A1n1
UNIQUE AXIS *b*, CELL CHOICE 2

Origin on glide plane *n*

Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

Generators selected (1); $r(1,0,0)$; $r(0,1,0)$; $r(0,0,1)$; $r(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$; (2)

Positions		
Multiplicity,	Coordinates	
Wyckoff letter,	$(0,0,0)+$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+$
Site symmetry		

4 a 1 (1) x,y,z (2) $x+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$

Reflection conditions

General:

$hkl : k+l=2n$
 $h0l : h,l=2n$
 $0kl : k+l=2n$
 $hk0 : k=2n$
 $0k0 : k=2n$
 $h00 : h=2n$
 $00l : l=2n$

I1a1
UNIQUE AXIS *b*, CELL CHOICE 3

Origin on glide plane *a*

Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

Generators selected (1); $r(1,0,0)$; $r(0,1,0)$; $r(0,0,1)$; $r(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$; (2)

Positions		
Multiplicity,	Coordinates	
Wyckoff letter,	$(0,0,0)+$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+$
Site symmetry		

4 a 1 (1) x,y,z (2) $x+\frac{1}{2},\bar{y},z$

Reflection conditions

General:

$hkl : h+k+l=2n$
 $h0l : h,l=2n$
 $0kl : k+l=2n$
 $hk0 : h+k=2n$
 $0k0 : k=2n$
 $h00 : h=2n$
 $00l : l=2n$

Crystal family	Symbol	Crystal system	Crystallographic point groups ¹	No. of space groups	Conventional coordinate system		Bravais lattices
					Restrictions on cell parameters	Parameters to be determined	

Three dimensions Triclinic (anorthic)	<i>a</i>	Triclinic	1, $\bar{1}$	2	None	<i>a, b, c</i> α, β, γ	<i>aP</i>
Monoclinic	<i>m</i>	Monoclinic	2, <i>m</i> , $\bar{2}/m$	13	<i>b</i> -unique setting $\alpha = \gamma = 90^\circ$	<i>a, b, c</i> β	<i>mP</i> <i>mC (mA, mI)</i>
					<i>c</i> -unique setting $\alpha = \beta = 90^\circ$	<i>a, b, c</i> γ	<i>mP</i> <i>mA (mB, mI)</i>
Orthorhombic	<i>o</i>	Orthorhombic	222, <i>mm2</i> , \bar{mmm}	59	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<i>a, b, c</i>	<i>oP</i> <i>oC (oA, oB)</i> <i>oI</i> <i>oF</i>
Tetragonal	<i>t</i>	Tetragonal	4, $\bar{4}$, $4/m$ 422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$	68	<i>a</i> = <i>b</i> $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<i>a, c</i>	<i>tP</i> <i>tI</i>
Hexagonal	<i>h</i>	Trigonal	3, $\bar{3}$ 32, $3m$, $\bar{3}m$	18	<i>a</i> = <i>b</i> $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ (hexagonal axes)	<i>a, c</i>	<i>hP</i>
				7	<i>a</i> = <i>b</i> = <i>c</i> $\alpha = \beta = \gamma$ (rhombohedral axes)	<i>a, \alpha</i>	<i>hR</i>
		Hexagonal	6, $\bar{6}$, $6/m$ 622, $6mm$, $\bar{6}2m$, $6/mmm$	27	<i>a</i> = <i>b</i> $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	<i>a, c</i>	<i>hP</i>
Cubic	<i>c</i>	Cubic	23, $\bar{m}\bar{3}$ 432, $43m$, $\bar{m}\bar{3}m$	36	<i>a</i> = <i>b</i> = <i>c</i> $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<i>a</i>	<i>cP</i> <i>cI</i> <i>cF</i>