Учебные материалы
по курсу "Кристаллохимия"

Симметрия и структурные классы атомно-молекулярных систем

Многообразие групп симметрии

Апериодические системы

- Семейства точечных групп
- Предельные точечные группы
- Принципы символики Шёнфлиса для точечных групп
- Орбиты точечных групп
- Структурные классы молекул

Системы с одномерной и двумерной периодичностью

- Симметрия цепей
- Примеры структурных классов цепей
- Симметрия слоев
- Примеры структурных классов слоев

Системы с трехмерной периодичностью

- Кристаллографические координатные системы (сингонии) и типы решеток

Общая кристаллохимия

- Химические связи в кристаллах и систематика кристаллических структур

Систематическая кристаллохимия

- Компактные бинарные структуры

Контрольные работы

- Содержание контрольных работ
  - Контрольная 1
  - Контрольная 2
  - Контрольная 3

- Материалы для подготовки к контрольной 2
  - Примеры задач с ответами и решениями по теме "Группы симметрии и структурные классы кристаллических структур"
- Материалы для подготовки к контрольной 3
  - Описание некоторых простых кристаллических структур ("джентльменский набор")
  - "Стандартный план" описания кристаллической структуры
  - Примеры описания структур по стандартному плану (NaCl, a-графит, вюрцит)

Симметрия и структурные классы атомно-молекулярных систем

Многообразие групп симметрии

Совокупность симметрических операций, которые допустимы для данной фигуры, называется ее группой симметрии. В общем виде группу симметрии можно записать следующим образом:

$\boldsymbol{G_n^m}$, где *m* - размерность пространства, *n* - число измерений, по которым наблюдается периодичность

Ограничиваясь группами, относящимися к трехмерному пространству, мы будем рассматривать:

$\boldsymbol{G_0^3}$ - точечные группы симметрии (описывают симметрию конечных и бесконечных непериодических фигур, т.е. фигур, имеющих хотя бы одну неповторимую точку),

$\boldsymbol{G_1^3}$ - группы симметрии объемных периодических цепей, стержней,

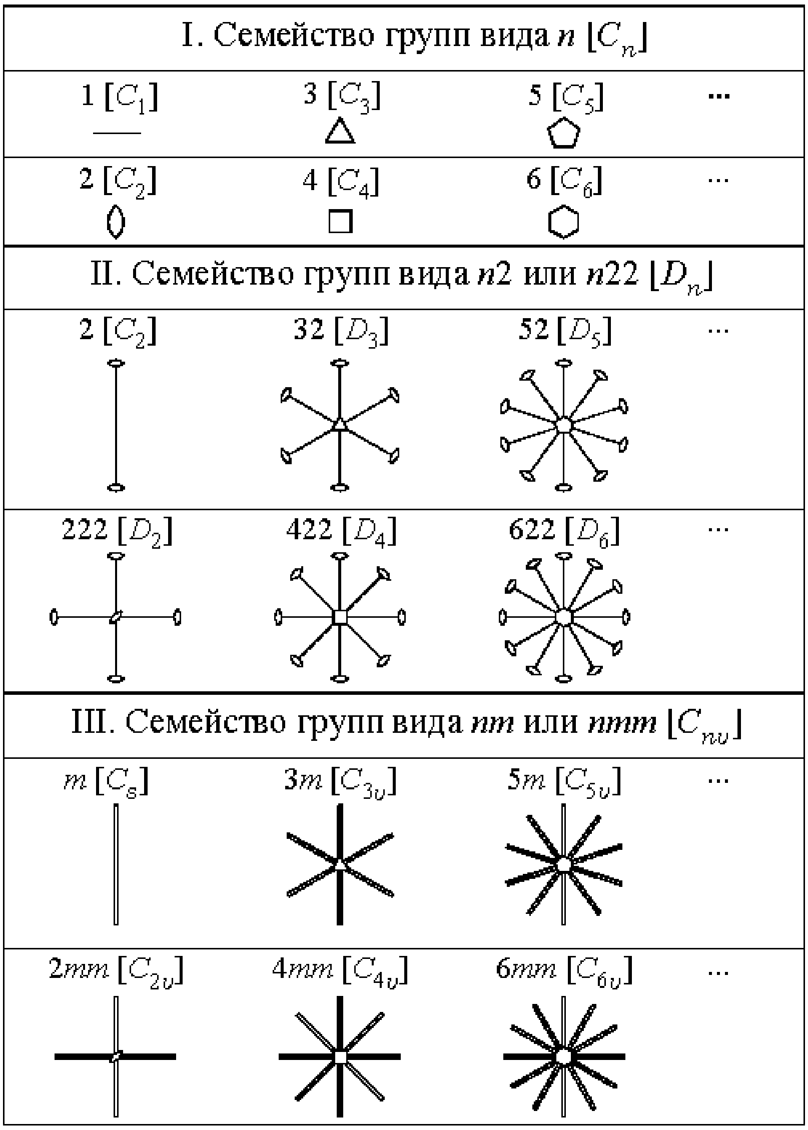
$\boldsymbol{G_2^3}$ - группы симметрии объемных, периодичных в двух измерениях слоев,

$\boldsymbol{G_3^3}$ - пространственные или федоровские группы (описывают симметрию трехмерных фигур, периодичных в трех измерениях).

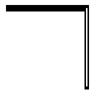
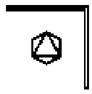
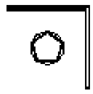
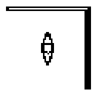
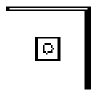
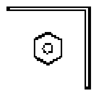
Апериодические системы

Семейства точечных групп

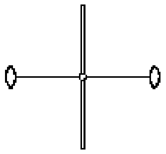
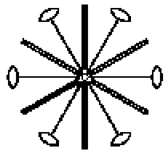
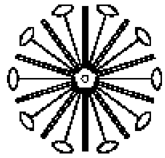
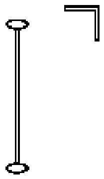
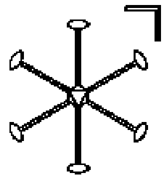
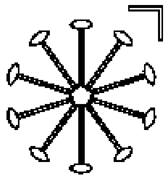
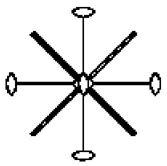
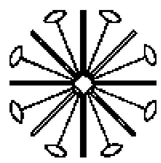
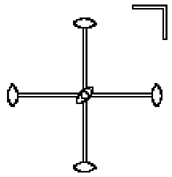
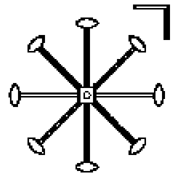
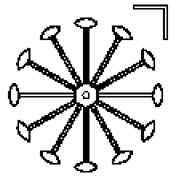
Точечные группы низшей и средней категории
(часть 1)



Точечные группы низшей и средней категории
(часть 2)

IV. Семейство групп вида $\bar{n}$ или n/m [S_n или C_{nh}]			
$\bar{1}$ [S_2]	$\bar{3}$ [S_6] 	$\bar{5}$ [S_{10}] 	…
($\bar{2}$) [C_s] 	$\bar{6}$ [C_{3h}] 	$\overline{10}$ [C_{5h}] 	…
$\bar{4}$ [S_4] 	$\bar{8}$ [S_8] 	$\overline{12}$ [S_{12}] 	…
$2/m$ [C_{2h}] 	$4/m$ [C_{4h}] 	$6/m$ [C_{6h}] 	…

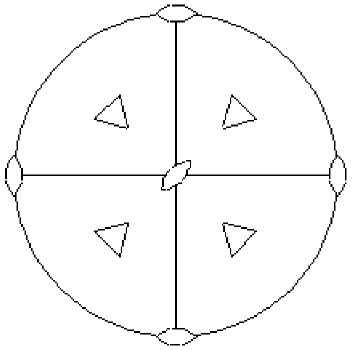
Точечные группы низшей и средней категории
(часть 3)

V. Семейство групп вида $\bar{n}m$, $\bar{n}m2$, $\bar{n}2m$, или n/mmm $[D_{nd}$ или $D_{nh}]$			
$(\bar{1}m)$ $[C_{2h}]$ 	$\bar{3}m$ $[D_{3d}]$ 	$\bar{5}m$ $[D_{5d}]$ 	…
$(\bar{2}m2)$ $[C_{2v}]$ 	$\bar{6}m2$ $[D_{3h}]$ 	$\overline{10}m2$ $[D_{5h}]$ 	…
$\bar{4}2m$ $[D_{2d}]$ 	$\bar{8}2m$ $[D_{4d}]$ 	…	
mmm $[D_{2h}]$ 	$4/mmm$ $[D_{4h}]$ 	$6/mmm$ $[D_{6h}]$ 	…

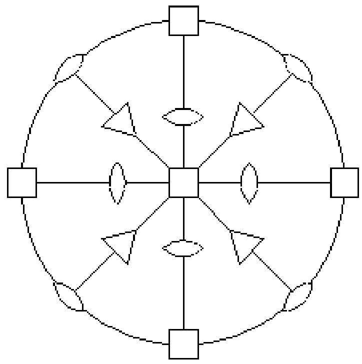
Точечные группы высшей категории
(часть 1)

Семейство VI (хиральные группы)

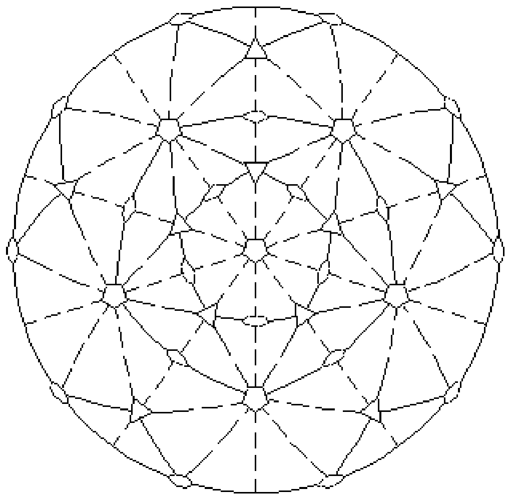
23 [*T*]



432 [*O*]



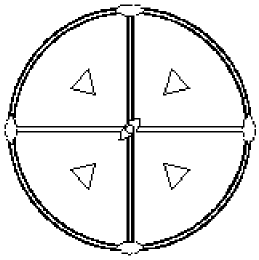
25 [*I*]



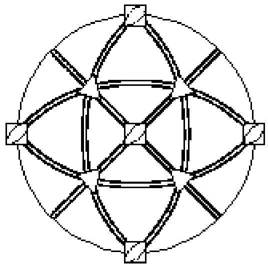
Точечные группы высшей категории
(часть 2)

Семейство VII (ахиральные группы)

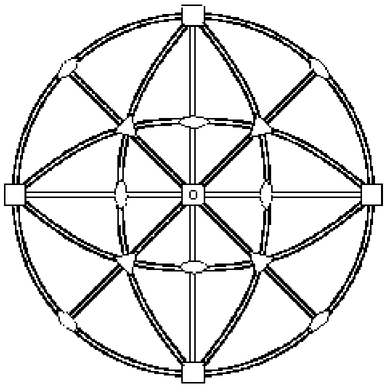
$m3$ [T_h]



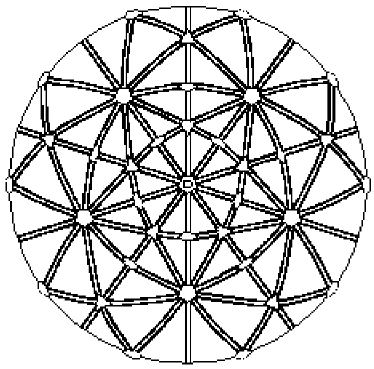
$\bar{4}3m$ [T_d]



$m3m$ [O_h]



$m5$ [I_h]



Примечание. В семействах I – V некоторые группы, стоящие в началах рядов, повторяются (в виде разных проекций). Не употребляемые варианты обозначений групп заключены в круглые скобки. Вместо символа $\bar{2}$ используется обозначение m, вместо $\bar{1}\,m$ – $2/m$, вместо $\bar{2}\,m2$ – $mm2$ (или $2mm$). В квадратных скобках приведены символы Шенфлиса.

Предельные точечные группы

Семейство	Предельные точечные группы		
	Символы Германа-Могена	Символы Шенфлиса	Геометрический образ
I	∞	C_∞	
II	$\infty 2$	D_∞	
III	∞m	$C_{\infty v}$	конус
IV	$\infty/m\ (\bar{\infty})$	$S_\infty\ (C_{\infty h})$	
V	$\frac{\infty}{m}m\ (\bar{\infty}m)$	$D_{\infty h}$	цилиндр
VI	$\infty\infty$	K	
VII	$\frac{\infty}{m}\infty$	K_h	шар

Примечание. В математике группу K называют *группой вращений*, а группу K_h – *полной ортогональной группой*.

Принципы символики Шёнфлиса для точечных групп

Группы низшей и средней категории

C - нет побочных осей 2,
D - есть побочные оси 2,
S - группа представляет собой зеркально-поворотную ось четного порядка
Цифровой индекс - порядок поворотной оси
(в группах S - порядок зеркально-поворотной оси)
Буквенные индексы:
v - есть вертикальные плоскости симметрии,
d - вертикальные плоскости симметрии чередуются с осями 2,
h - горизонтальная плоскость симметрии

1.	C_1	C_3	C_5	...	2.	D_1	D_3	D_5	...	3.	C_s	C_{3v}	C_{5v}	...
	C_2	C_4	C_6	...		D_2	D_4	D_6	...		C_{2v}	C_{4v}	C_{6v}	...

4.	S_2	S_6	S_{10}	...	5.	C_{2h}	D_{3d}	D_{5d}	...
	C_s	C_{3h}	C_{5h}	...		C_{2v}	D_{3h}	D_{5h}	...
	S_4	S_8	S_{12}	...		D_{2d}	D_{4d}	D_{6d}	...
	C_{2h}	C_{4h}	C_{6h}	...		D_{2h}	D_{4h}	D_{6h}	...

Группы высшей категории

T - группы с осями 3, но без осей 4,
O - группы с осями 4,
I - группы с осями 5
Буквенные индексы:
h - координатные плоскости симметрии,
d - диагональные плоскости симметрии

$T \quad O \quad I \qquad T_h \quad T_d \quad O_h \quad I_h$

Предельные группы

$C_\infty \quad D_\infty \quad C_{\infty v} \quad S_\infty\,(C_{\infty h}) \quad D_{\infty h} \quad K \quad K_h$

Орбиты точечных групп низшей и средней категории

Семейства точечных групп		Типы орбит (1) - симметрия позиции (2) - кратность орбиты						
I	n	(1)	n	1				
		(2)	1	n				
II	$n2$	(1)	$n2$	n	2	1		
		(2)	1	2	n	$2n$		
	$n22$	(1)	$n22$	n	2	1		
		(2)	1	2	n	$2n$		
III	nm	(1)	nm	m	1			
		(2)	1	n	$2n$			
	nmm	(1)	nmm	m	1			
		(2)	1	n	$2n$			
IV	$\bar{n}$ $(n = 2k+1)$	(1)	$\bar{n}$	n	1			
		(2)	1	2	$2n$			
	$\bar{n}$ $(n = 4k)$	(1)	$\bar{n}$	$n/2$	1			
		(2)	1	2	n			
	$\bar{n}$ $(n = 4k+2)$	(1)	$\bar{n}$	$n/2$	m	1		
		(2)	1	2	$n/2$	n		
	n/m $(n = 2k)$	(1)	n/m	n	m	1		
		(2)	1	2	n	$2n$		
V	$\bar{n}m$ $(n = 2k+1)$	(1)	$\bar{n}m$	nm	2	m	1	
		(2)	1	2	$2n$	$2n$	$4n$	
	$\bar{n}2m$ $(n = 4k)$	(1)	$\bar{n}2m$	$(n/2)mm$	2	m	1	
		(2)	1	2	n	n	$2n$	
	$\bar{n}m2$ $(n = 4k+2)$	(1)	$\bar{n}m2$	$(n/2)m$	$2mm$	$m_{\perp}$	$m_{\parallel}$	1
		(2)	1	2	$n/2$	n	n	$2n$
	n/mmm $(n = 2k)$	(1)	n/mmm	nmm	$2mm$	$m_{\perp}$	$m_{\parallel}$	1
		(2)	1	2	n	$2n$	$2n$	$4n$

Примечание. Символы $m_{\perp}$ и $m_{||}$ обозначают горизонтальную и вертикальную плоскости симметрии в случае их одновременного присутствия в группе.

Орбиты точечных групп высшей категории

Семейства точечных групп	Точечная группа	Типы орбит (1) - симметрия позиции (2) - кратность орбиты							
VI	**23**	(1)	23	3	2	1			
		(2)	1	4	6	12			
	432	(1)	432	4	3	2	1		
		(2)	1	6	8	12	24		
	25	(1)	25	5	3	2	1		
		(2)	1	6	10	15	30		
VII	$m3$	(1)	$m3$	$2mm$	3	m	1		
		(2)	1	6	8	12	24		
	$\bar{4}3m$	(1)	$\bar{4}3m$	$3m$	$2mm$	m	1		
		(2)	1	4	6	12	24		
	$m3m$	(1)	$m3m$	$4mm$	$3m$	$2mm$	m_c	m_d	1
		(2)	1	6	8	12	24	24	48
	$m5$	(1)	$m5$	$5m$	$3m$	$2mm$	m	1	
		(2)	1	12	20	30	60	120	

Примечание. Символы m_c и m_d обозначают координатные и диагональные плоскости симметрии.

Структурные классы молекул

Всякий атомно-молекулярный объект, представленный в виде r-модели, т.е. в виде совокупности точечных атомов, координаты которых считаются известными, можно отнести к определенному структурному классу (СК), который определяется *группой симметрии* и перечнем занятых атомами *орбит*.

Орбита - это совокупность точек, преобразующихся друг в друга операциями симметрии группы G и, следовательно, эквивалентных. Каждая орбита характеризуется, во-первых, кратностью, т.е. числом входящих в нее точек, во-вторых, симметрией позиции, выражаемой точечной группой S (site-symmetry). Группа S характеризует симметрию окружения точки, относящейся к данной орбите; эта группа определяется совокупностью элементов симметрии, проходящих через рассматриваемую точку. В символе структурного класса орбита указывается в виде соответствующей группы S.

Для молекул, изображаемых r-моделью, в СК входит точечная группа G_0^3, действующая в 3-мерном апериодичном пространстве (мы исключаем из рассмотрения полимерные молекулы). Символ СК в общем случае имеет вид:

$$G_0^3\,(S_{11}, S_{21}, \ldots; S_{12}, S_{22}, \ldots; \ldots; S_{1k}, S_{2k}, \ldots)$$

В нем последовательно перечисляются орбиты, занятые атомами; каждая орбита представлена группой S, характеризующей симметрию соответствующей позиции. Запятые разделяют орбиты, занятые атомами одного сорта (т.е. атомами одного химического элемента); точка с запятой ставится при переходе от одного химического элемента к другому. Атомы разных элементов рассматриваются в последовательности, определяемой валовой химической формулой вещества.

Рассмотрим в качестве примера молекулу бифенила $C_{12}H_{10}$. В кристалле эти молекулы плоские; в газовой фазе наблюдается поворот одного из фенильных циклов на ~30° вокруг связи С-С. СК плоской молекулы характеризуется символом:

$$mmm\ (2mm, 2mm, m, m; 2mm, m, m).$$

Для сокращения символа одноименные орбиты, занятые атомами одного сорта, часто записывают в виде степени, где показатель указывает число орбит:

$$mmm\ ((2mm)^2, m^2; 2mm, m^2).$$

Для молекулы бифенила в газовой фазе символ СК имеет вид:

$$222\ (2^2, 1^2; 2, 1^2),$$

где единица изображает общую (асимметричную) позицию.

Важной наглядной характеристикой орбиты является ее кратность. Поэтому символ СК целесообразно дополнить указанием кратности орбит (под символами групп S). Например, для бифенила:

$$mmm\ ((2mm)^2, m^2; 2mm, m^2) \qquad 222(2^2, 1^2; 2, 1^2)$$
$$2 \quad 4 \quad 2 \quad 4 \qquad\qquad 2\ 4\ 2\ 4$$

Добавим к сказанному примеры записи СК для нескольких молекул (с указанием кратности занятых орбит).

Ферроцен $Fe(C_5H_5)_2$	$\bar{5}m\ (\underset{1}{\bar{5}m};\ \underset{10}{m};\ \underset{10}{m})$
Циклопропан C_3H_6	$\bar{6}m2\ (\underset{3}{2mm};\ \underset{6}{m})$
Диоксид углерода CO_2	$\frac{\infty}{m}m\ (\underset{1}{\frac{\infty}{m}m};\ \underset{2}{\infty m})$
Метан CH_4	$\bar{4}3m\ (\underset{1}{\bar{4}3m};\ \underset{4}{3m})$
Хлорбензол C_6H_5Cl	$2mm\ (\underset{1}{(2mm)^2},\ \underset{2}{m^2};\ \underset{1}{2mm},\ \underset{2}{m^2};\ \underset{1}{2mm})$

Еще один пример - СК транс- и гош-конформаций дихлорэтана - представлен на рисунке.

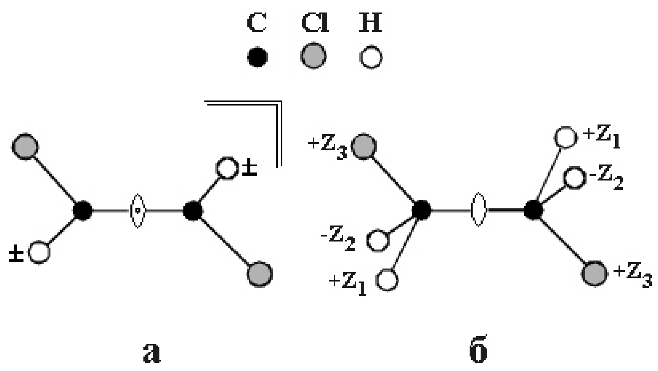


Рис. Проекция молекулы дихлорэтана $C_2H_4Cl_2$:

а) транс-конформация, СК: $2/m\ (\underset{2}{m};\ \underset{4}{1};\ \underset{2}{m})$

б) гош-конформация, СК: $2\ (\underset{2}{1};\ \underset{2}{1^2};\ \underset{2}{1})$

Системы с одномерной и двумерной периодичностью

Симметрия цепей

Группы симметрии типа G_1^3 описывают симметрию объемных цепей, точнее трехмерных фигур, периодичных в одном измерении. Каждая из этих групп содержит одномерную подгруппу трансляций, т.е. одномерную решетку. Объемные цепи могут обладать направленными вдоль оси цепи поворотными, инверсионными и винтовыми осями любого (в том числе сколь угодно высокого) порядка, а также зеркальными плоскостями симметрии и плоскостями скользящего отражения, проходящими через ось цепи. Перпендикулярно к оси цепи могут располагаться только поворотные оси 2 и (или) плоскости *m*. Наклонных элементов симметрии в цепях быть не может.

Общее число групп G_1^3 бесконечно, однако подобно точечным группам они подразделяются на конечное число семейств.

Группа G_1^3 либо содержит одну ось высшего порядка (направленную вдоль оси цепи), либо не содержит ни одной такой оси; следовательно всякая группа G_1^3 относится либо к средней, либо к низшей категории. При этом аналогично соответствующим точечным группам, эти группы можно подразделить на пять семейств.

В двух нижеследующих таблицах представлены: 1) группы G_1^3, производные от восьми точечных групп низшей категории и 2) группы средней категории с указанием семейства, к которому они относятся.

Развернутый символ группы G_1^3 состоит из четырех частей: ⎵ ‿ ‿ ‿

Первая часть (нулевая позиция) – большая буква *P* (одномерная решетка может быть только примитивной) с индексом *c* (от слова *chain*) . В последующих трех позициях (первой, второй и третьей) записываются элементы симметрии.

Для групп низшей категории указываются элементы симметрии, направленные вдоль (в случае осей 2 и 2_1) или перпендикулярно (в случае плоскостей *m* и *c*) осям *X*, *Y*, *Z* соответственно. Обычно ось цепи считается осью *Z*. Однако возможен и другой выбор осей координат. Тогда одна и та же группа G_1^3 низшей категории может быть записана разными символами (см. примечание к соответствующей таблице).

В символах групп средней категории первая позиция занята осью высшего порядка (которая совмещается с координатной осью *Z*) и перпендикулярной ей плоскостью (если она есть); вторая позиция занята элементом симметрии параллельным (если это ось) или перпендикулярным (если это плоскость) оси *X*, третья позиция отводится для обозначения оси симметрии (или плоскости), параллельной (или, соответственно, перпендикулярной) диагонали *XY*.

Для некоторых групп G_1^3, как и для соответствующих точечных групп, в символе группы достаточно использовать только первую или первую и вторую позиции.

Группы симметрии цепей (группы G_1^3). Низшая категория.

Точечная группа	Группы симметрии цепей (стержней)				
1	P_c1				
$\bar{1}$	$P_c\bar{1}$				
2	P_c112	P_c211	P_c112_1		
m	P_c11m	P_cm11	P_cc11		
$\frac{2}{m}$	$P_c11\frac{2}{m}$	$P_c\frac{2}{m}11$	$P_c\frac{2}{c}11$	$P_c11\frac{2_1}{m}$	
$mm2$	P_cmm2	P_c2mm	P_cc2m	P_cmc2_1	P_ccc2
222	P_c222	P_c222_1			
mmm	P_cmmm	P_cmcm	P_cccm		

Примечание. Группы записаны в предположении, что ось цепи совмещена с осью Z. Возможен, однако, и другой выбор осей координат. Например, группы $P_{c(Z)}11\frac{2}{m}$, $P_{c(Z)}mc2_1$, $P_{c(Z)}ccm$ при совмещении оси цепи с осью Y записываются символами $P_{c(Y)}1\frac{2}{m}1$, $P_{c(Y)}m2_1b$, $P_{c(Y)}bmb$ соответственно.

Группы симметрии цепей (группы G_1^3)
средней категории, распределенные
по семействам точечных групп (G_0^3)

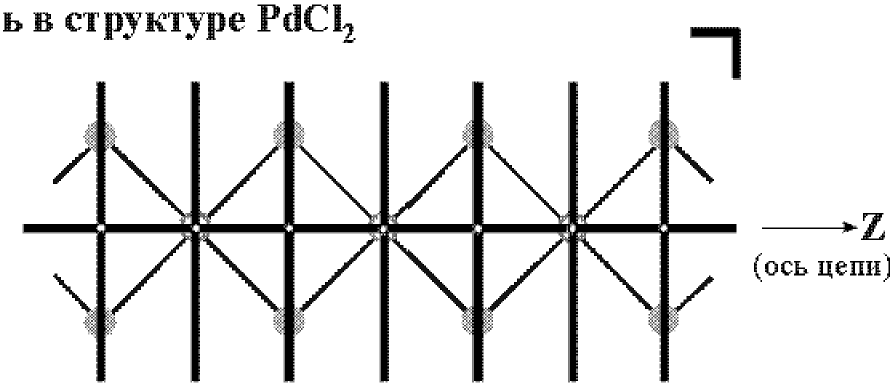
	G_0^3	G_1^3
I	3 4 …	P_c3 P_c3_1 P_c3_2 P_c4 P_c4_1 P_c4_2 P_c4_3 …………………………
II	32 422 …	P_c32 P_c3_12 P_c3_22 P_c422 P_c4_122 P_c4_222 P_c4_322 …………………………
III	$3m$ $4mm$ …	P_c3m P_c3c P_c4mm P_c4_2mc P_c4cc …………………………

	G_0^3	G_1^3	G_0^3	G_1^3
IV	$\bar{3}$ $\bar{5}$ …	$P_c\bar{3}$ $P_c\bar{5}$ ………………	$\bar{6}$ $\overline{10}$ …	$P_c\bar{6}$ $P_c\overline{10}$ ……………………………
	$\bar{4}$ $\bar{8}$ …	$P_c\bar{4}$ $P_c\bar{8}$ ………………	$4/m$ $6/m$ …	P_c4/m P_c4_2/m P_c6/m P_c6_3/m ……………………………
V	$\bar{3}m$ $\bar{5}m$ …	$P_c\bar{3}m$ $P_c\bar{3}c$ $P_c\bar{5}m$ $P_c\bar{5}c$ ………………	$\bar{6}m2$ $\overline{10}m2$ …	$P_c\bar{6}m2$ $P_c\bar{6}c2$ $P_c\overline{10}m2$ $P_c\overline{10}c2$ ……………………………
	$\bar{4}2m$ $\bar{8}2m$ …	$P_c\bar{4}2m$ $P_c\bar{4}2c$ $P_c\bar{8}2m$ $P_c\bar{8}2c$ ………………	$4/mmm$ $6/mmm$ …	$P_c\frac{4}{m}mm$ $P_c\frac{4_2}{m}mc$ $P_c\frac{4}{m}cc$ $P_c\frac{6}{m}mm$ $P_c\frac{6_3}{m}mc$ $P_c\frac{6}{m}cc$ ……………………………

Примеры структурных классов цепей

На рисунках изображены проекции цепей
совместно с важнейшими элементами симметрии

Цепь в структуре $PdCl_2$

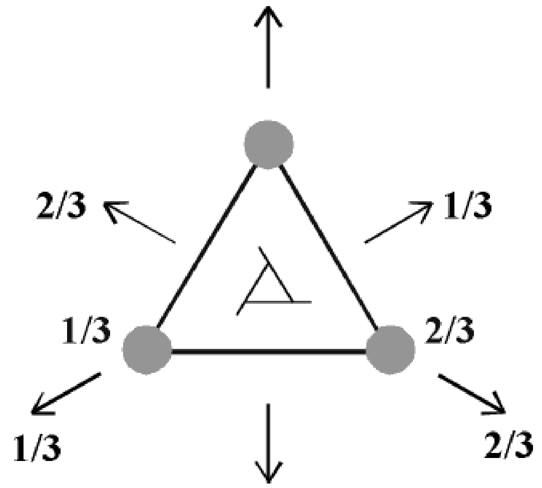


Cl

Pd

$P_c mmm$, Z=1 (mmm; $2mm$)

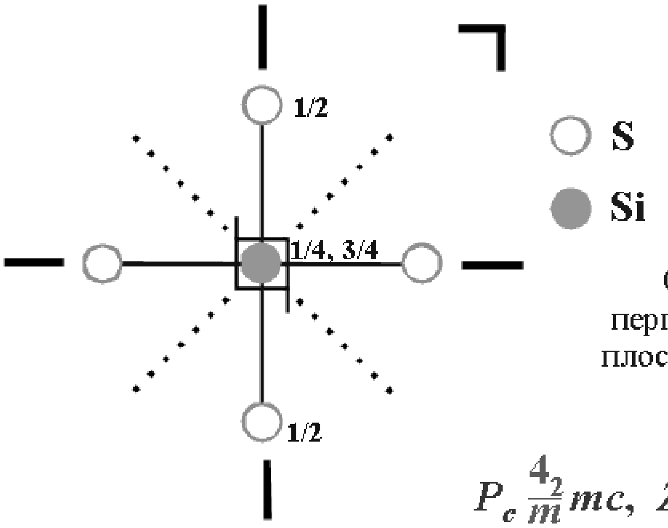
Цепь в структуре серого Se



Ось цепи
перпендикулярна
плоскости чертежа

$P_c\,3_1 2$, Z=3 (2)

Цепь в структуре SiS_2 ($BeCl_2$)



Ось цепи перпендикулярна плоскости чертежа

$$P_c\frac{4_2}{m}mc,\ Z=2\ (\bar{4}2m;\ 2mm)$$

Симметрия слоев

Группы G_2^3 описывают симметрию объемных слоев, т.е. трехмерных фигур, периодичных в двух измерениях. Как и в случае пространственных групп, устанавливается определенное соответствие между группами симметрии слоев и кристаллографическими точечными группами. Всего имеется 80 групп G_2^3, каждая из которых в качестве подгруппы содержит двумерную решетку.

Существуют следующие типы решеток слоев:

1. Косоугольная примитивная (*P*)
2. Ортогональная примитивная (*P*)
3. Ортогональная центрированная (*C*)
4. Тетрагональная примитивная (*P*)
5. Гексагональная примитивная (*P*)

Тип решетки фиксируется имеющимися элементами симметрии.

Обычно координатные оси *X* и *Y* совмещают со средней плоскостью слоя, ось *Z* перпендикулярна этой плоскости, однако возможен и другой выбор осей координат. Развернутый символ группы G_2^3 по аналогии с символами пространственных групп состоит из четырех частей: ⎵ ⌣ ⌣ ⌣.

Первая часть (нулевая позиция) включает в себя указание типа решетки (*P* или *C* с индексом *l* от слова *layer*). Последующие три позиции (первая, вторая и третья) отводятся для обозначения элементов симметрии, входящих в группу.

Для групп средней категории в первой позиции записывается ось симметрии, направленная вдоль оси *Z*, и перпендикулярная к этой оси плоскость симметрии, если она имеется; во второй позиции - то же по отношению к оси *X*; в третьей - то же по отношению к диагонали *XY*. В ряде случаев для описания симметрии слоя достаточно использовать лишь первую или первую и вторую позиции.

В символах групп низшей категории первая, вторая и третья позиции соответствуют осям *X*, *Y*, *Z*.

Символ для групп средней категории	⎵ тип решетки	⌣ ось *Z*	⌣ ось *X*	⌣ диагональ *XY*
Символ для групп низшей категории	⎵ тип решетки	⌣ ось *X*	⌣ ось *Y*	⌣ ось *Z*

Ниже в двух таблицах приведен полный перечень групп G_2^3 средней и низшей категории.

Плоскость скользящего отражения, параллельная слою с центрированной решеткой, имеет примечательную особенность: она осуществляет сдвиг (скольжение) как вдоль оси *X*, так и вдоль оси *Y*. Поэтому в этом случае используется обозначение *g* (а не *a* или *b*).

Группы симметрии слоев (группы G_2^3).
Средняя категория

Примечание. Группам с осями четвертого порядка соответствует тетрагональная решетка, группам с осями третьего и шестого порядков – гексагональная решетка.

Точечная группа	Группы симметрии слоев			
4	$P_\ell 4$			
422	$P_\ell 422$	$P_\ell 42_1 2$		
$\bar{4}$	$P_\ell \bar{4}$			
$\bar{4}m2$	$P_\ell \bar{4}m2$	$P_\ell \bar{4}b2$	$P_\ell \bar{4}2m$	$P_\ell \bar{4}2_1 m$
$4mm$	$P_\ell 4mm$	$P_\ell 4bm$		
$4/m$	$P_\ell 4/m$	$P_\ell 4/n$		
$4/mmm$	$P_\ell 4/mmm$	$P_\ell 4/mbm$		
	$P_\ell 4/nmm$	$P_\ell 4/nbm$		
3	$P_\ell 3$			
32	$P_\ell 321$	$P_\ell 312$		
$3m$	$P_\ell 3m1$	$P_\ell 31m$		
$\bar{3}$	$P_\ell \bar{3}$			
$\bar{3}m$	$P_\ell \bar{3}\frac{2}{m}1$	$P_\ell \bar{3}1\frac{2}{m}$		
6	$P_\ell 6$			
622	$P_\ell 622$			
$\bar{6}$	$P_\ell \bar{6}$			
$\bar{6}m2$	$P_\ell \bar{6}m2$	$P_\ell \bar{6}2m$		
$6mm$	$P_\ell 6mm$			
$6/m$	$P_\ell 6/m$			
$6/mmm$	$P_\ell 6/mmm$			

Группы симметрии слоев (группы G_2^3).
Низшая категория

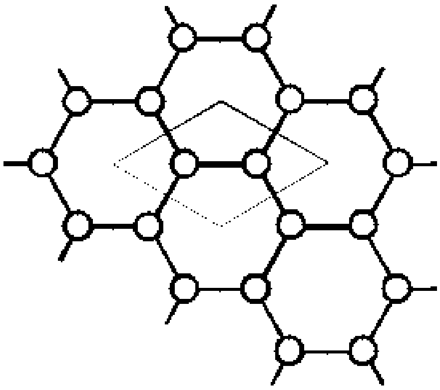
Примечание. Группам $P_\ell 1$, $P_\ell \bar{1}$, $P_\ell 112$, $P_\ell 11m$, $P_\ell 11b$, $P_\ell 11\frac{2}{m}$, $P_\ell 11\frac{2}{b}$ соответствует косоугольная решетка, прочим группам слоев – ортогональная решетка.

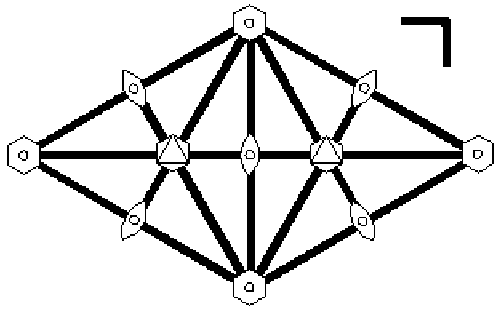
Точечная группа	Группы симметрии слоев
1	$P_\ell 1$
$\bar{1}$	$P_\ell \bar{1}$
2	$P_\ell 211$ $P_\ell 112$ $P_\ell 2_1 11$ $C_\ell 211$
m	$P_\ell 11m$ $P_\ell m11$ $P_\ell 11b$ $P_\ell b11$ $C_\ell m11$
$\frac{2}{m}$	$P_\ell 11\frac{2}{m}$ $P_\ell \frac{2}{m}11$ $P_\ell \frac{2_1}{m}11$ $P_\ell 11\frac{2}{b}$ $P_\ell \frac{2}{b}11$ $P_\ell \frac{2_1}{b}11$ $C_\ell \frac{2}{m}11$
222	$P_\ell 222$ $P_\ell 2_1 22$ $P_\ell 2_1 2_1 2$ $C_\ell 211$
$mm2$ $(2mm)$	$P_\ell mm2$ $P_\ell bm2$ $P_\ell ba2$ $C_\ell mm2$ $P_\ell 2mm$ $P_\ell 2mb$ $P_\ell 2_1 am$ $P_\ell 2_1 ma$ $P_\ell 2aa$ $P_\ell 2_1 ab$ $P_\ell 2_1 mn$ $P_\ell 2an$ $C_\ell 2mm$ $C_\ell 2mg$
mmm	$P_\ell mmm$ $P_\ell bmm$ $P_\ell bam$ $P_\ell mmb$ $P_\ell mab$ $P_\ell bmb$ $P_\ell bab$ $P_\ell mmn$ $P_\ell bmn$ $P_\ell ban$ $C_\ell mmm$ $C_\ell mmg$

Примеры структурных классов слоев

На рисунках справа даны проекции соответствующих групп симметрии (представлены порождающие и некоторые порожденные элементы симметрии).

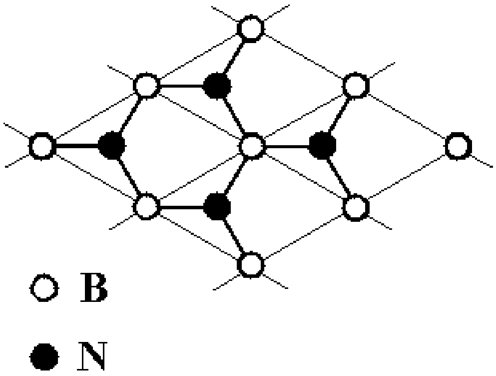
Графитовый слой

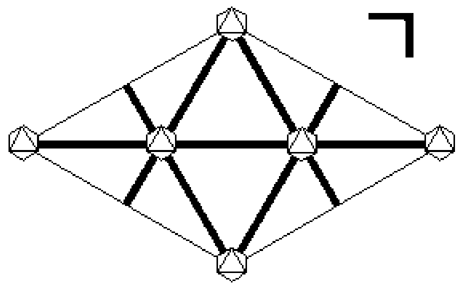




$P_l\,6/mmm$, $Z=2$ ($\bar{6}m2$)

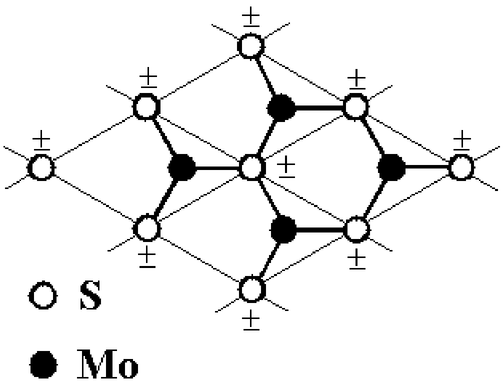
Слой в структуре BN

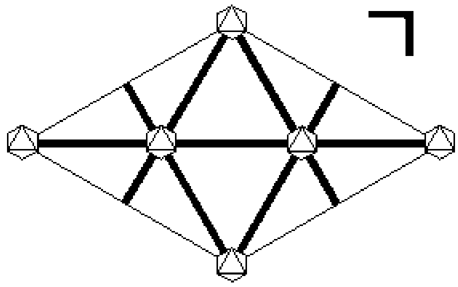




$P_l\,\bar{6}m2$, $Z=1$ ($\bar{6}m2$; $\bar{6}m2$)

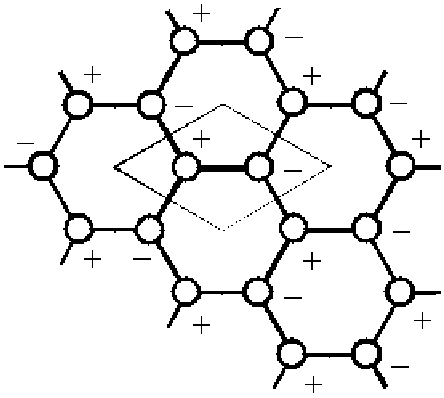
Слой-пакет в структуре MoS_2

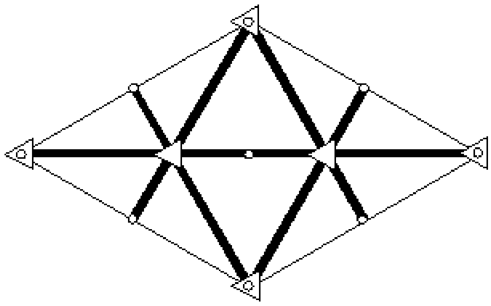




$P_l\,\bar{6}m2$, $Z=1$ ($\bar{6}m2$; $3m$)

Слой в структуре As





$P_1\bar{3}m1$, $Z=2$ $(3m)$

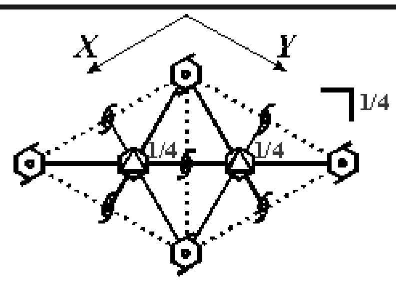
Системы с трехмерной периодичностью

Кристаллографические координатные системы (сингонии) и типы решеток

Голоэдрические группы	Координатные системы (сингонии)		Кристаллографические точечные группы	Типы решеток Браве
	Название	Параметры решетки		
$\bar{1}$	триклинная	-	1, $\bar{1}$	P
$2/m$	моноклинная	$\alpha=\beta=90°$	2, m, $2/m$	P, A (B)*)
mmm	ортогональная	$\alpha=\beta=\gamma=90°$	222, $mm2$, mmm	P, C (A, B), I, F
$4/mmm$	тетрагональная	$\alpha=\beta=\gamma=90°$ $a=b$	4, 422, $\bar{4}$, $\bar{4}2m$, $4mm$, $4/m$, $4/mmm$	P, I
$\bar{3}m$ $6/mmm$	гексагональная	$\alpha=\beta=90°$ $\gamma=120°$ $a=b$	3, 32, $3m$, $\bar{3}$, $\bar{3}m$, 6, 622, $\bar{6}$, $\bar{6}m2$, $6mm$, $6/m$, $6/mmm$	P, R
$m3m$	кубическая	$\alpha=\beta=\gamma=90°$ $a=b=c$	23, 432, $m3$, $\bar{4}3m$, $m3m$	P, I, F

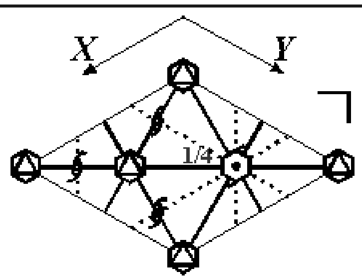
*) При установке $\alpha=\beta=90°$ в зависимости от выбора осей координат базоцентрированная решетка обозначается A или B. Кроме того, в моноклинной системе часто используется установка $\alpha=\gamma=90°$; тогда базоцентрированная решетка обозначается C (или A)

Никелин NiAs и кристаллический магний (пространственная группа $P6_3/mmc$)

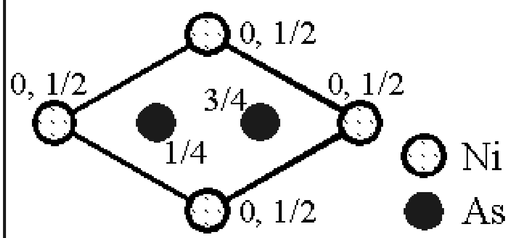


1-й способ выбора ячейки

Иногда оказывается удобным 2-й способ выбора ячейки – перенос начала координат в точку 1/3, 2/3, 1/4

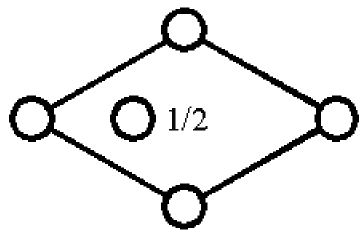


Никелин NiAs



Координаты атомов (первый способ выбора ячейки):
Ni 0, 0, 0; 0, 0, 1/2
As 2/3, 1/3, 1/4; 1/3, 2/3, 3/4
Стр. класс $P6_3/mmc$, $Z = 2(\bar{3}m;\ \bar{6}m2)$

Кристаллический Mg



Координаты атомов (второй способ выбора ячейки):
0, 0, 0; 2/3, 1/3, 1/2

Структурный класс
$P6_3/mmc$, $Z = 2(\bar{6}m2)$

Рутил TiO_2
(пространственная группа $P4_2/mnm$)

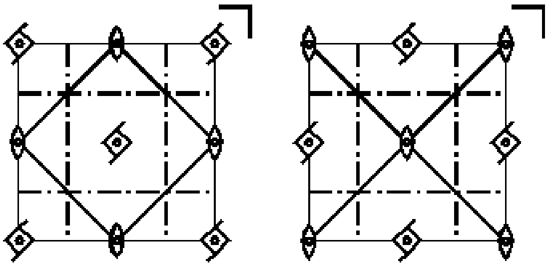
Группа $P\dfrac{4_2}{m}nm$ $(P4_2/mnm)$

(группа относится к кристаллографическому классу $4/mmm$)

Ось, направленная вдоль Z, и перпендикулярная к ней плоскость

Плоскость, перпендикулярная к оси X

Плоскость, перпендикулярная диагонали XY



Два способа выбора ячейки

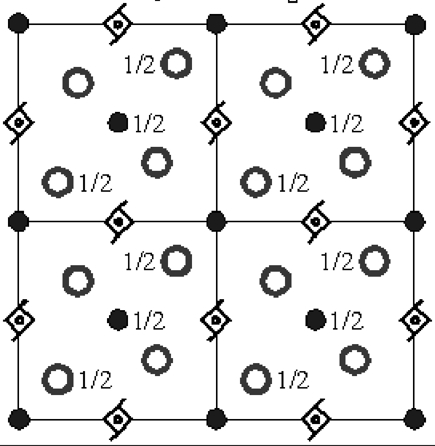
Изображены не все имеющиеся в группе элементы симметрии, а лишь “порождающие” (входящие в символ группы), а также оси 2 и центры инверсии ($4_2 \supset 2$, $2/m \supset \bar{1}$)

Координаты атомов (второй способ выбора ячейки):

●	Ti	**0, 0, 0** **0.5, 0.5, 0.5**
○	O	**0.3, 0.3, 0** **0.7, 0.7, 0** **0.8, 0.2, 0.5** **0.2, 0.8, 0.5**

Структурный класс
$P4_2/mnm$, $Z = 2(mmm;\ mm2)$

Рутил TiO_2



Вюрцит ZnS
(пространственная группа $P6_3/mc$)

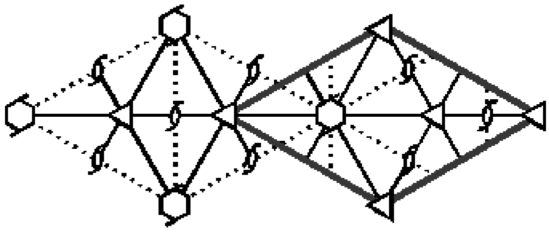
Группа $P\,6_3\,m\,c$

(группа относится к кристаллографическому классу $6mm$)

Ось, направленная вдоль Z

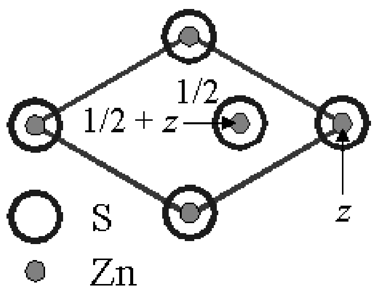
Плоскость, перпендикулярная к оси X; такая же плоскость проходит вдоль большой диагонали ячейки

Плоскость, проходящая вдоль малой диагонали ячейки



Показаны два способа выбора ячейки. Изображены не все имеющиеся в группе элементы симметрии, а лишь "порождающие" (входящие в символ группы), а также оси 3 и 2_1, появление которых обусловлено тем, что $6_3 \supset 3$ и $6_3 \supset 2_1$

Вюрцит ZnS



Координаты атомов (начало координат выбрано на оси 3):

Zn $0, 0, z$; $1/3, 2/3, 1/2+z$, где $z \approx 3/8$

S $0, 0, 0$; $1/3, 2/3, 1/2$

Структурный класс

$P6_3mc$, $Z = 2(3m;\ 3m)$