

ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Лекция 4.

Описание кристаллических структур (продолжение)

Пространственная группа симметрии – совокупность преобразований симметрии кристаллической решётки, совмещающих эту решётку саму с собой. Всего имеется **230 ПГС**.

Кристаллографический класс – кристаллографическая точечная группа симметрии, отражающая точечную симметрию кристалла.

Кристаллографический класс можно получить, если в ПГС заменить все открытые операции симметрии на сходственные закрытые и добавить их к имеющимся изначально в ПГС закрытым операциям симметрии.

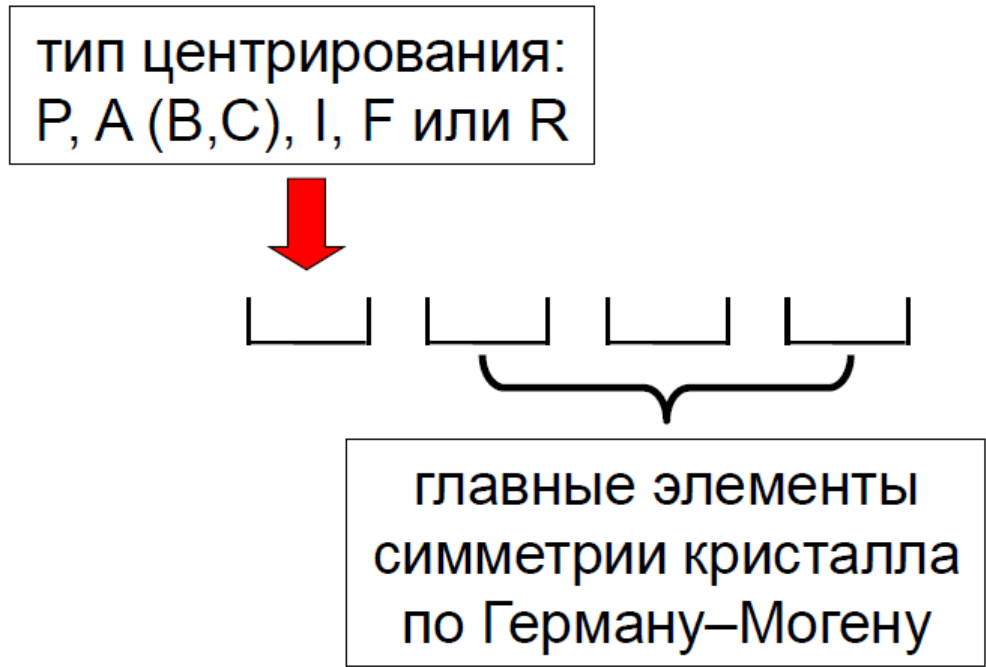
Всего имеется **32 КК**.

Решётки Бравэ – типы пространственных решёток, которые характеризуются параллелепедом повторяемости наивысшей симметрии и наименьшего объёма. **14 кристаллических решёток Бравэ**.

Кристаллическая система (сингония) – кристаллографический тип структуры, который характеризуется определенным набором закрытых элементов симметрии (поворотных и инверсионных осей) и формой ячейки Бравэ. **7 КС** (кубическая, гексагональная, тригональная, тетрагональная, ромбическая, моноклинная и триклинная).

Категория – наиболее крупное объединение точечных групп симметрии по старшим элементам симметрии. **3 категории** (**высшая** (четыре оси третьего порядка), **средняя** (одна ось третьего, четвертого или шестого порядка) и **низшая** (элементы симметрии не выше второго порядка)).

Международный символ пространственной группы: трансляции + другие элементы симметрии



- Если в символе группы только закрытые элементы
– **симморфные** пространственные группы.
- Если в символе группы есть открытые элементы
– **несимморфные** пространственные группы

Симморфные пространственные группы = решётка Бравэ + кристаллографический класс. **73 симморфных ПГС.**

Несимморфные пространственные группы получаются заменой некоторых или всех закрытых элементов симметрии на открытые (поворотные оси на винтовые оси, плоскости зеркального отражения на плоскости скользящего отражения). **157 несимморфных ПГС.**

230 ПГС = 73 симморфных ПГС + 157 несимморфных ПГС

Правила записи международного символа пространственной группы симметрии.

Кристаллическая система	1 ^я позиция	2 ^я позиция	3 ^я позиция	4 ^я позиция
триклинная	Тип решётки Бравэ	1 (-1)	-	-
моноклинная		1	ось 2 или 2_1 и плоскость перпендикулярная оси Y	1
ромбическая		плоскость перпендикулярная или ось (2 или 2_1) параллельная		
		оси X	оси Y	оси Z
тетрагональная,		ось четвертого порядка параллельная оси Z	плоскость перпендикулярная или ось 2 (2_1) параллельная оси X(Y)	плоскость перпендикулярная или ось 2 (2_1) параллельная диагонали грани XY
тригональная	ось третьего порядка параллельная оси Z	плоскость перпендикулярная или ось 2 (2_1) параллельная оси X(Y)	плоскость перпендикулярная или ось 2 (2_1) параллельная большой диагонали грани XY	

Правила записи международного символа пространственной группы симметрии.

Кристаллическая система	1 ^я позиция	2 ^я позиция	3 ^я позиция	4 ^я позиция
гексагональная	Тип решётки Бравэ	ось шестого порядка параллельная оси Z	плоскость перпендикулярная или ось 2 (2_1) параллельная оси X(Y)	плоскость перпендикулярная или ось 2 (2_1) параллельная большой диагонали грани XY
кубическая		плоскости перпендикулярные или оси параллельные осям X, Y, Z	оси 3 (или -3), расположенные вдоль телесной диагонали куба	диагональные плоскости или оси

Триклинная

$\boxed{1}$	$P1$
$\bar{1}$	$P\bar{1}$

Моноклинная

$\boxed{2}$	$P2, P2_1, C2$
m	Pm, Pc, Cm, Cc
$2/m$	$P2/m, P2_1/m, C2/m, P2/c, P2_1/c, C2/c$

Ромбическая

222

P222, P222₁, P2₁2₁2, P2₁2₁2₁, C222₁, C222, F222, I222, I2₁2₁2₁

mm2

Pmm2, Pmc2₁, Pcc2, Pma2₁, Pca2₁, Pnc2₁, Pmn2₁, Pba2, Pna2₁, Pnn2, Cmm2, Cmc2₁, Ccc2, Amm2, Abm2, Ama2, Aba2, Fmm2, Fdd2, Imm2, Iba2, Ima2

mmm

Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna, Pmna, Pcca, Pbam, Pccn, Pbcm, Pnnm, Pmmn, Pbcn, Pbca, Pnma, Cmcm, Cmca, Cmmm, Cccm, Cmma, Ccca, Fmmm, Fddd, Immm, Ibam, Ibca, Imma

Тетрагональная

$\boxed{4}$	$P4, P4_1, P4_2, P4_3, I4, I4_1$
$\bar{4}$	$P\bar{4}, I\bar{4}$
$4/m$	$P4/m, P4_2/m, P4/n, P4_2/n, I4/m, I4_1/a$
$\boxed{422}$	$P422, P42_12, P4_122, P4_12_12, P4_222, P4_22_12, P4_322, P4_32_12, I422, I4_122$
$4mm$	$P4mm, P4bm, P4_2cm, P4_2nm, P4cc, P4nc, P4_2mc, P4_2bc, I4mm, I4cm, I4_1md, I4_1cd$
$\bar{4}m$	$P\bar{4}2m, P\bar{4}2c, P\bar{4}2_1m, P\bar{4}2_1c, P\bar{4}m2, P\bar{4}c2, P\bar{4}b2, P\bar{4}n2, I\bar{4}m2, I\bar{4}c2, I\bar{4}2m, I\bar{4}2d$
	$P4/mmm, P4/mcc, P4/nbm, P4/nnc, P4/mbm, P4/mnc, P4/nmm, P4/ncc, P4_2/mmc, P4_2/mcm, P4_2/nbc, P4_2/nnm, P4_2/mbc, P4_2mnm, P4_2/nmc, P4_2/ncm, I4/mmm, I4/mcm, I4_1/amd, I4_1/acd$

Тригональная, гексагональная

$\boxed{3}$	$P3, P3_1, P3_2, R3$
$\bar{3}$	$P\bar{3}, R\bar{3}$
$\boxed{32}$	$P312, P321, P3_112, P3_121, P3_212, P3_221, R32$
$3m$	$P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c$
$\bar{3}m$	$P\bar{3}1m, P\bar{3}1c, P\bar{3}m1, P\bar{3}c1, R\bar{3}m, R\bar{3}c$
$\boxed{6}$	$P6, P6_1, P6_5, P6_3, P6_2, P6_4$
$\bar{6}$	$P\bar{6}$
$6/m$	$P6/m, P6_3/m$
$\boxed{622}$	$P622, P6_122, P6_522, P6_222, P6_422, P6_322$
$6mm$	$P6mm, P6cc, P6_3cm, P6_3mc$
$\bar{6}m$	$P\bar{6}m2, P\bar{6}c2, P\bar{6}2m, P\bar{6}2c$
$6/mmm$	$P6/mmm, P6/mcc, P6_3/mcm, P6_3/mmc$

Кубическая

23

$m\bar{3}$

$P23, F23, I23, P2_13, I2_13$

$Pm\bar{3}, Pn\bar{3}, Fm\bar{3}, Fd\bar{3}, Im\bar{3}, Pa\bar{3}, Ia\bar{3}$

432

$\bar{4}3m$

$P432, P4_232, F432, F4_132, I432, P4_332, P4_132, I4_132$

$P\bar{4}3m, F43m, I\bar{4}3m, P43n, F\bar{4}3c, I\bar{4}3d$

$m\bar{3}m$

$Pm\bar{3}m, Pn\bar{3}n, Pm\bar{3}n, Pn\bar{3}m, Fm\bar{3}m, Fm\bar{3}c, Fd\bar{3}m, Fd\bar{3}c, Im\bar{3}m, Ia\bar{3}d$

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

Если мы действуем всеми операциями симметрии на какую-либо произвольную точку, то мы получаем правильную систему точек (ПСТ) выбранной позиции.

Количество полученных таким образом точек называется кратностью выбранной позиции

Точка общего положения – не лежит ни на каком элементе симметрии.

Точка частного положения – лежит на **закрытом** элементе симметрии. Симметрия точки частного положения определяется теми элементами симметрии, которые проходят через эту точку.

Каждая позиция характеризуется:

- 1) **Кратностью** – числом точек, которые получаются действием всех операций симметрии группы на данную точку.
- 2) **Симметрией позиции** – определяется точечной симметрией позиции.
- 3) **Числом степеней свободы** – числом независимо варьируемых координат точки.

Точка общего положения имеет симметрию 1 (тождественное преобразование), её кратность равна числу операций симметрии в данной группе, число степеней свободы равно 3 (координаты x , y , z могут принимать любые значения).

Точки частного положения, которые находятся на плоскостях зеркального отражения имеют кратность в 2 раза меньшую, чем точки общего положения, симметрию m и 2 степени свободы (одна координата фиксированная).

Точки частного положения, которые находятся на поворотных осях порядка n имеют кратность в n раз меньшую, чем точки общего положения, симметрию оси n и одну степень свободы (две координаты фиксированы).

Точки частного положения, которые находятся в центрах инверсии имеют кратность в 2 раза меньшую, чем точки общего положения, симметрию -1 и 0 степеней свободы (все координаты фиксированы).

Точки частного положения, которые находятся на пересечении нескольких закрытых элементов симметрии имеют кратность точки общего положения, разделенную на произведение порядков каждого закрытого элемента симметрии.

Симметрически независимая часть ячейки (asymmetric unit) – минимальная часть объёма элементарной ячейки, размножение которой всеми операциями симметрии пространственной группы можно получить всё содержимое ячейки (структуры).

Независимая область, взятая сама по себе, асимметрична (по определению), т.е. внутри нее нет симметрично эквивалентных точек.

Структура = заселенная независимая область + пространственная группа симметрии

Строение кристалла

- Повторяющийся фрагмент + закон повторения
 - Базис + элементарная ячейка на векторах трансляций
 - Симметрически независимая часть + ПГС

International Tables for X-ray Crystallography Volume A

**Обозначение и действие элементов симметрии.
Графики 230 пространственных групп и их
системы эквивалентных позиций (ПСТ).
Погасания рефлексов, вызванные симметрией.
И многое другое.**

Международные таблицы по кристаллографии

INTERNATIONAL TABLES FOR CRYSTALLOGRAPHY

Brief Teaching Edition of
Volume A
SPACE-GROUP SYMMETRY

<http://it.iucr.org/>

<http://www.cryst.ehu.es/>

<http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/large/sgp.htm>

Edited by
THEO HAHN

Home

International Tables for Crystallography

ISBN: 978-1-4020-4969-9 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
[2016 Edition](#) | [Early view chapters](#) |
[2006 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
 - Volume A1** Symmetry relations between space groups
[2011 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
[2006 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
 - Volume B** Reciprocal space
[2010 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
[2006 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
 - Volume C** Mathematical, physical and chemical tables
[2006 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
 - Volume D** Physical properties of crystals
[2013 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
[2006 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
 - Volume E** Subperiodic groups
[2010 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
[2006 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
 - Volume F** Crystallography of biological macromolecules
[2012 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
[2006 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
 - Volume G** Definition and exchange of crystallographic data
[2006 Edition](#) | [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Symmetry database**

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 determination, and the physical and chemical properties of crystals. Each volume also contains discussions of theory, practical explanations and examples, all of

International Tables is available in print and online. A brief teaching edition of Volume A is also available in print.

The series is planned, edited and maintained by the IUCr's Commission on International Tables.

An overview of the series by the Editor-in-chief, Carolyn P. Brock, is given in the *IUCr Newsletter* (2014), Vol. 22, No. 2.

① $Cmm2$

② No. 35

номер ПГС

C_{2v}^{11}

$Cmm2$

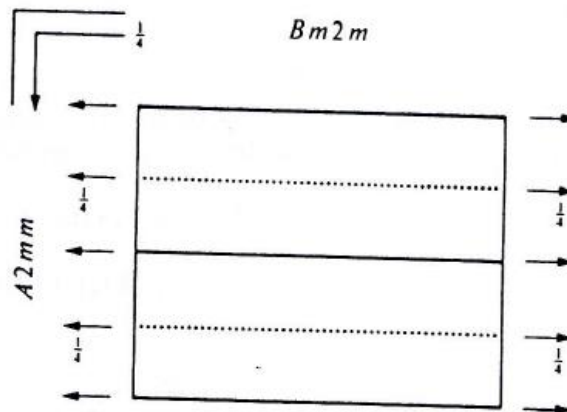
Символ ПГС

$mm2$

Orthorhombic

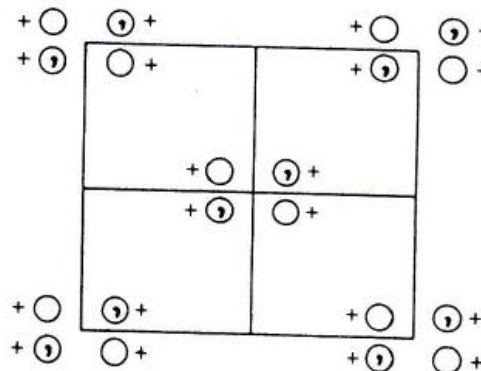
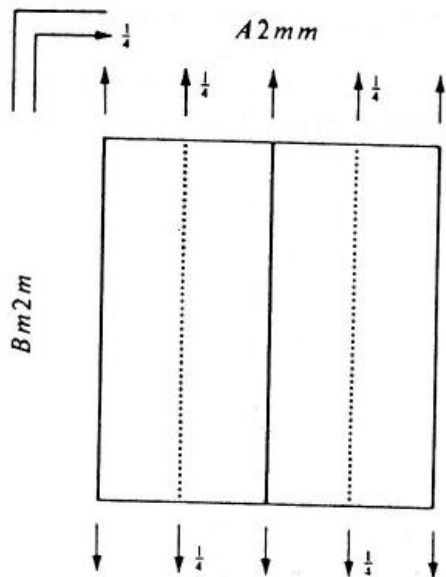
КК

Patterson symmetry $Cmmm$ КС

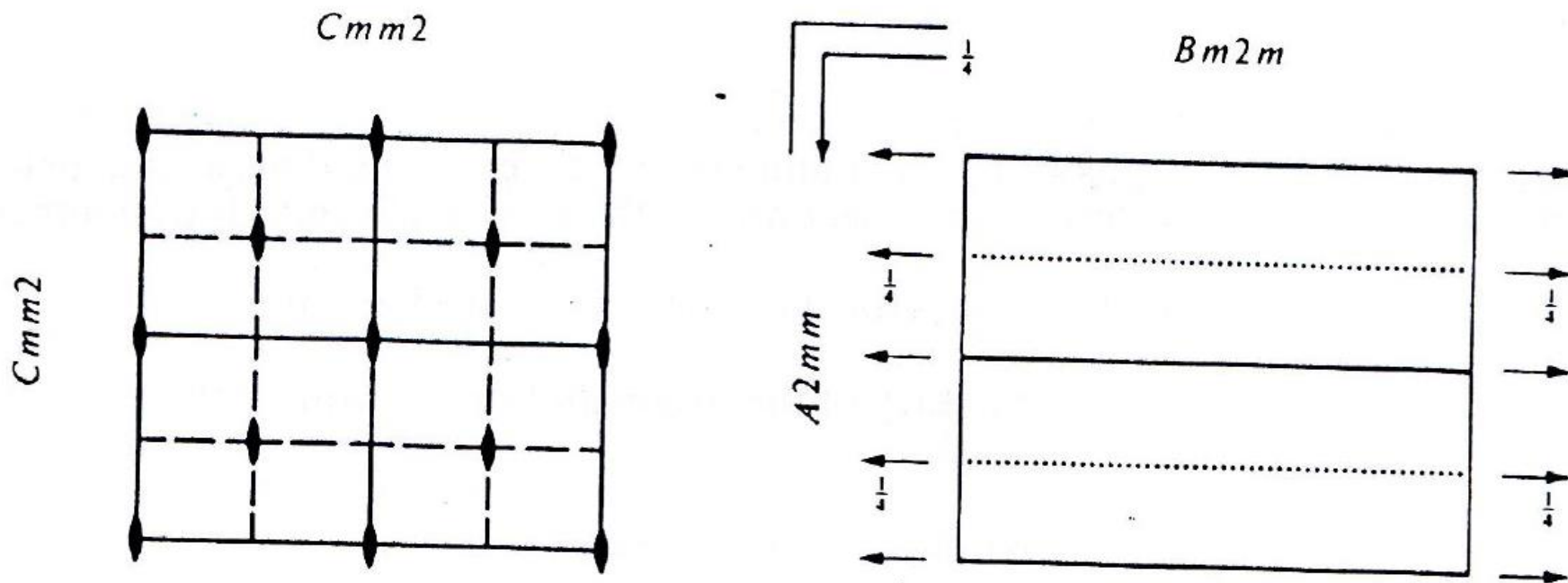


проекция ЭС на координатные плоскости

③



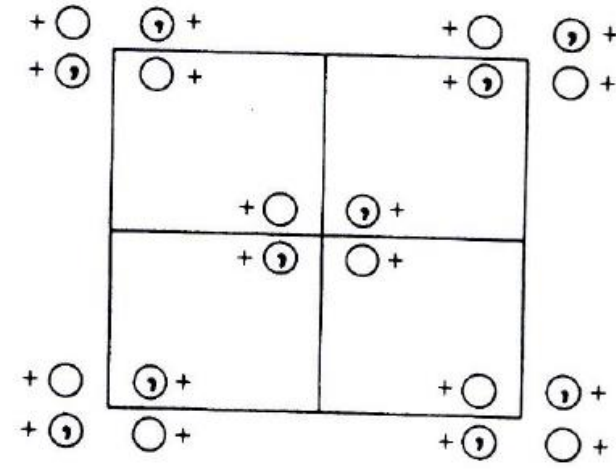
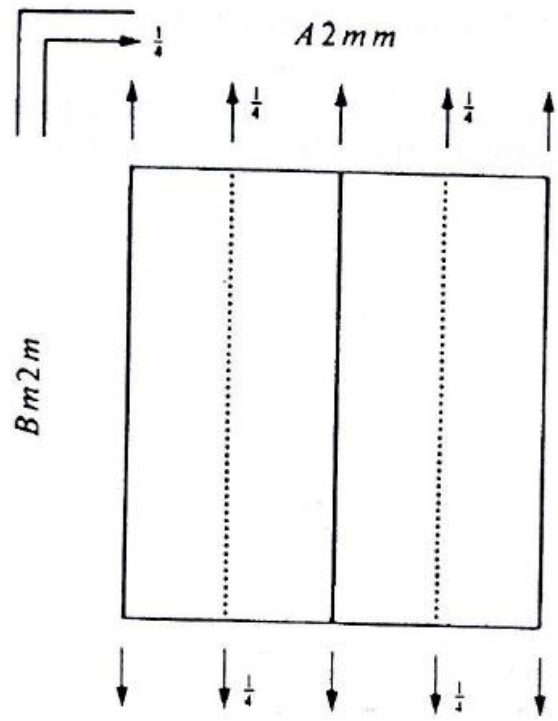
ПСТ



проекции ЭС на координатные плоскости

C_{2v} , $A2mm$, $Bm2m$ – так меняется символ ПГС №35 при изменении обозначения осей координат.

③



④ Origin on $mm2$ Начало координат

⑤ Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

⑥ Symmetry operations

For $(0,0,0)+$ set
 (1) 1 (2) 2 $0,0,z$ (3) m $x,0,z$ (4) m $0,y,z$
 For $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)+$ set
 (1) $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$ (2) 2 $\frac{1}{2},\frac{1}{2},z$ (3) a $x,\frac{1}{2},z$ (4) b $\frac{1}{2},y,z$

Симметрически
независимая часть

Операции
симметрии

генераторы

② Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$; (2); (3)

③ Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

(0,0,0)+ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$ +

⑧ f 1 (1) x,y,z (2) \bar{x},\bar{y},z (3) x,\bar{y},z (4) \bar{x},y,z

Кратность позиции

Индекс Вайкоффа

4 e $m..$ $0,y,z$ $0,\bar{y},z$

d $.m.$ $x,0,z$ $\bar{x},0,z$

4 c $..2$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},z$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},z$

2 b $mm2$ $0,\frac{1}{2},z$

2 a $mm2$ $0,0,z$

Симметрия позиции

$Pbcn$

No. 60

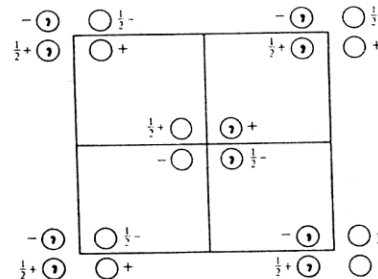
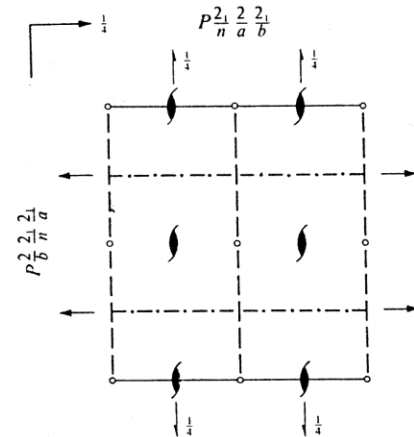
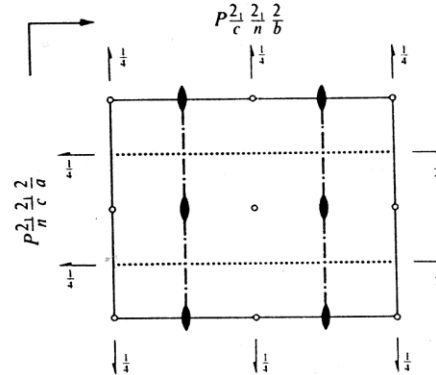
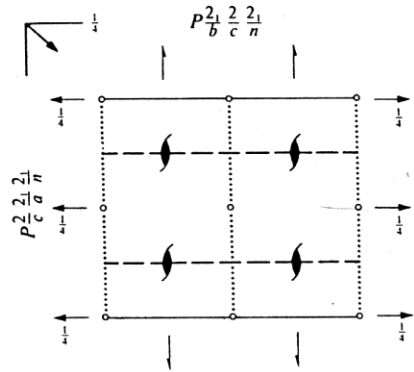
D_{2h}^{14}

$P2_1/b 2/c 2_1/n$

mmm

Orthorhombic

Patterson symmetry $Pmmm$



Origin at $\bar{1}$ on $1c1$

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

Symmetry operations

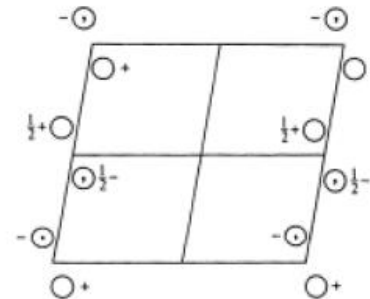
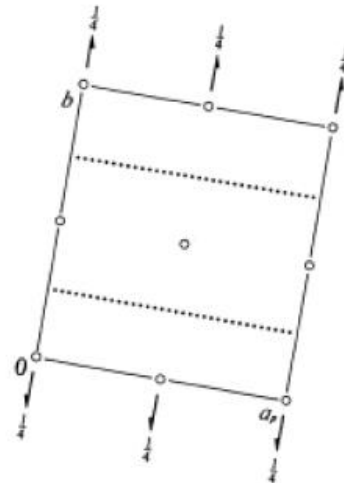
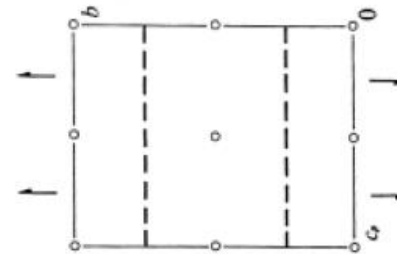
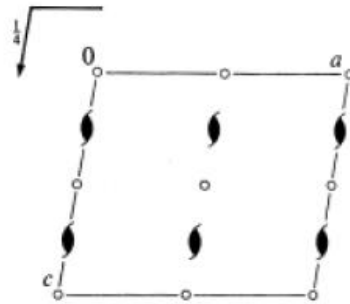
- | | | | | | | |
|---------------|--------------------------|-------------------------------|---------|---------------------|----------------------------|---------------------|
| (1) 1 | (2) $2(0,0,\frac{1}{2})$ | $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$ | (3) 2 | $0, y, \frac{1}{2}$ | (4) $2(\frac{1}{2}, 0, 0)$ | $x, \frac{1}{2}, 0$ |
| (5) $\bar{1}$ | $0, 0, 0$ | | (7) c | $x, 0, z$ | (8) b | $\frac{1}{2}, y, z$ |

- 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

$P2_1/c$ C_{2h}^5 $2/m$

Monoclinic

No. 14

 $P12_1/c1$ Patterson symmetry $P12/m1$ UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 1Origin at $\bar{1}$ Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

Symmetry operations

- (1) 1 (2) $2(0, \frac{1}{2}, 0) \ 0, y, \frac{1}{2}$ (3) $\bar{1} \ 0, 0, 0$ (4) $c \ x, \frac{1}{2}, z$

$P2_1/c$

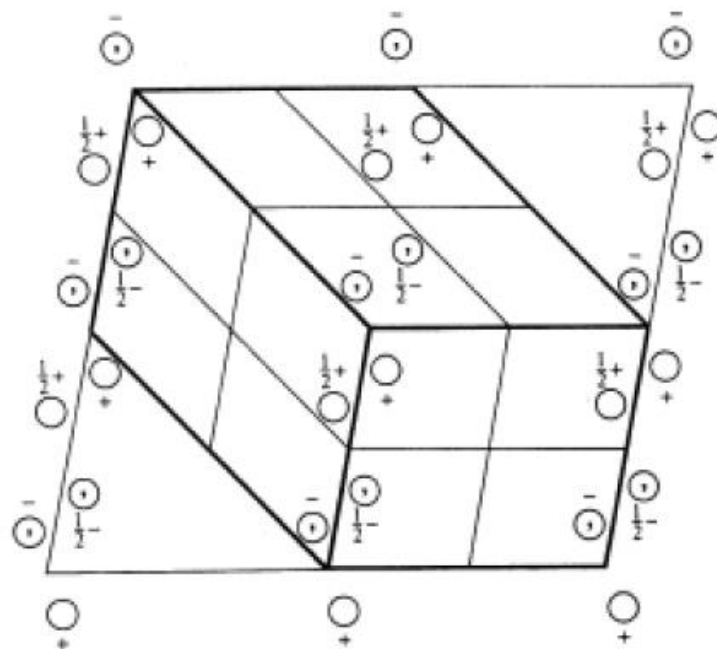
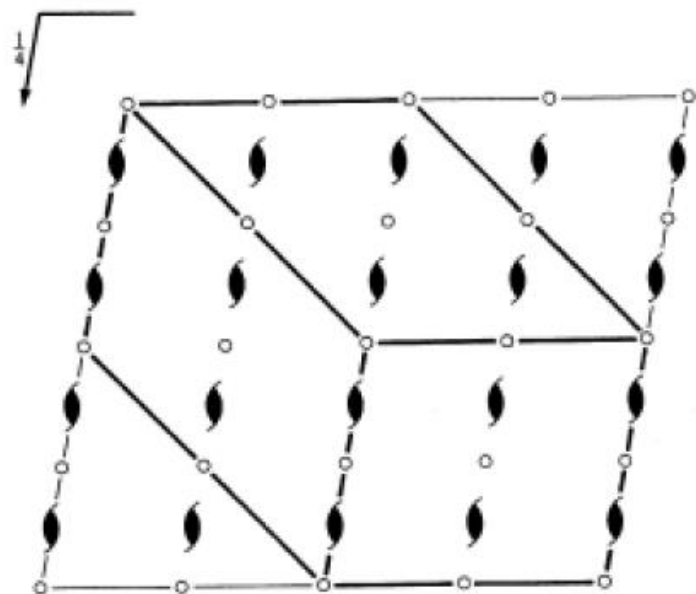
C_{2h}^5

$2/m$

Monoclinic

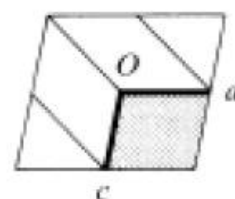
No. 14

UNIQUE AXIS b , DIFFERENT CELL CHOICES



$P12_1/c1$

UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 1



Origin at $\bar{1}$

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

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

4	e	1	(1) x, y, z	(2) $\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(4) $x, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$
---	-----	---	---------------	---	---------------------------------	---

General:

$h0l : l = 2n$

$0k0 : k = 2n$

$00l : l = 2n$

Special: as above, plus

2	d	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
---	-----	-----------	-------------------------------	-------------------------------

$hkl : k + l = 2n$

2	c	$\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, 0$
---	-----	-----------	---------------------	---------------------

$hkl : k + l = 2n$

2	b	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----------	---------------------	---

$hkl : k + l = 2n$

2	a	$\bar{1}$	$0, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----------	-----------	-------------------------------

$hkl : k + l = 2n$

$P12_1/n1$ UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 2Origin at $\bar{1}$ Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1$; $0 \leq y \leq \frac{1}{2}$; $0 \leq z \leq 1$ Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

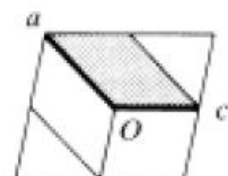
4	e	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$
---	-----	---	-------------	---	---------------------------------	---

2	d	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----------	---------------------	-------------------------------

2	c	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, 0$
---	-----	-----------	-------------------------------	---------------------

2	b	$\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
---	-----	-----------	---------------------	-------------------------------

2	a	$\bar{1}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----------	-----------	---



Reflection conditions

General:

$h0l : h + l = 2n$

$0k0 : k = 2n$

$h00 : h = 2n$

$00l : l = 2n$

Special: as above, plus

$hkl : h + k + l = 2n$

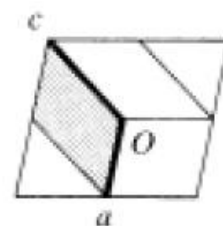
$hkl : h + k + l = 2n$

$hkl : h + k + l = 2n$

$hkl : h + k + l = 2n$

$P12_1/a1$

UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 3



Origin at $\bar{1}$

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

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

General:

4	e	$\bar{1}$	(1) x, y, z	(2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$	(3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z$
---	-----	-----------	---------------	---	---------------------------------	---

$h0l : h = 2n$

$0k0 : k = 2n$

$h00 : h = 2n$

Special: as above, plus

2	d	$\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----------	---------------------	---

$hkl : h + k = 2n$

2	c	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, 0$
---	-----	-----------	---------------------	---------------------

$hkl : h + k = 2n$

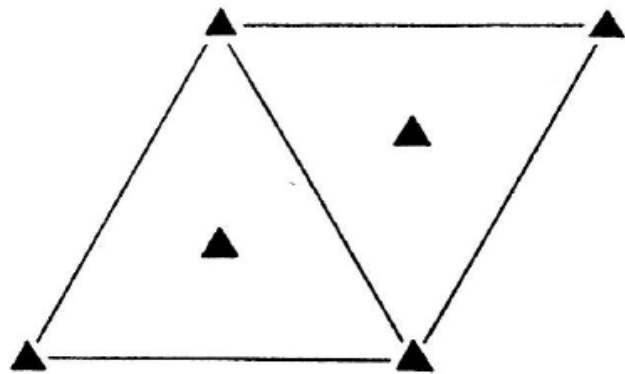
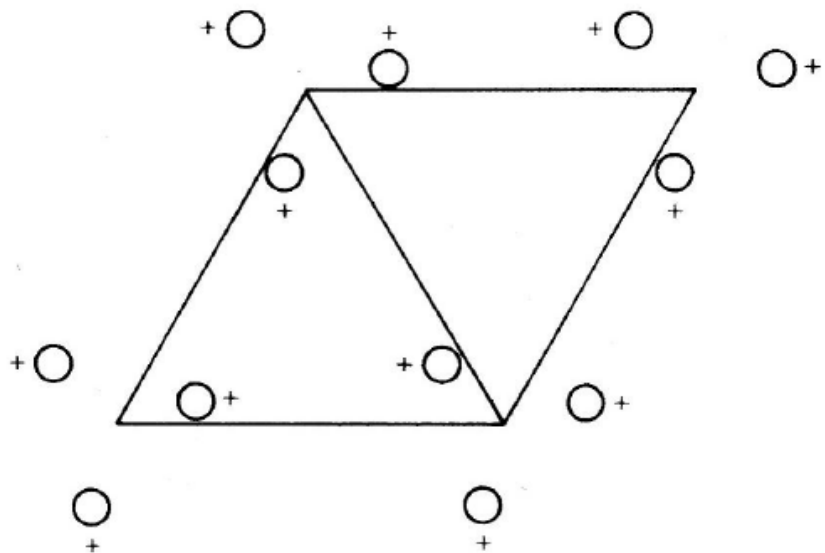
2	b	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----------	-------------------------------	-------------------------------

$hkl : h + k = 2n$

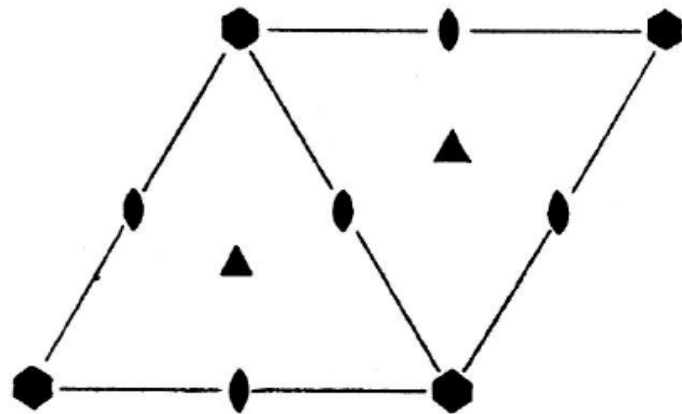
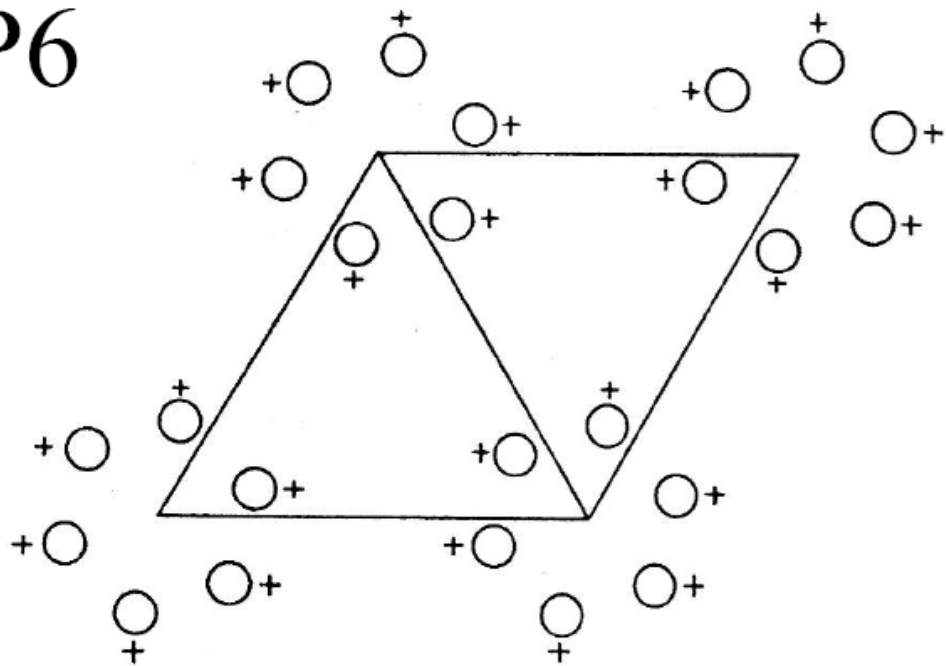
2	a	$\bar{1}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
---	-----	-----------	-----------	-------------------------------

$hkl : h + k = 2n$

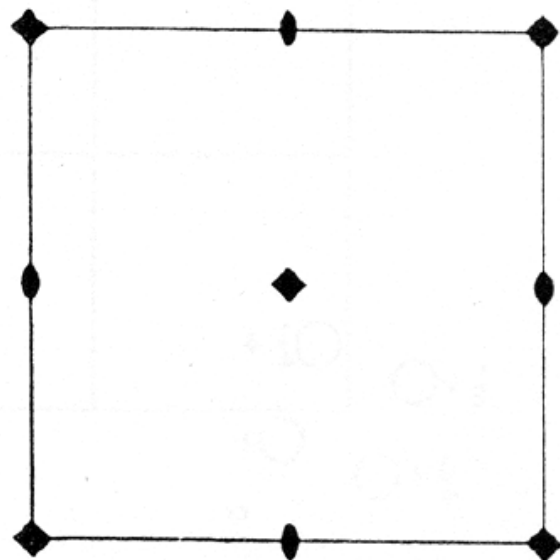
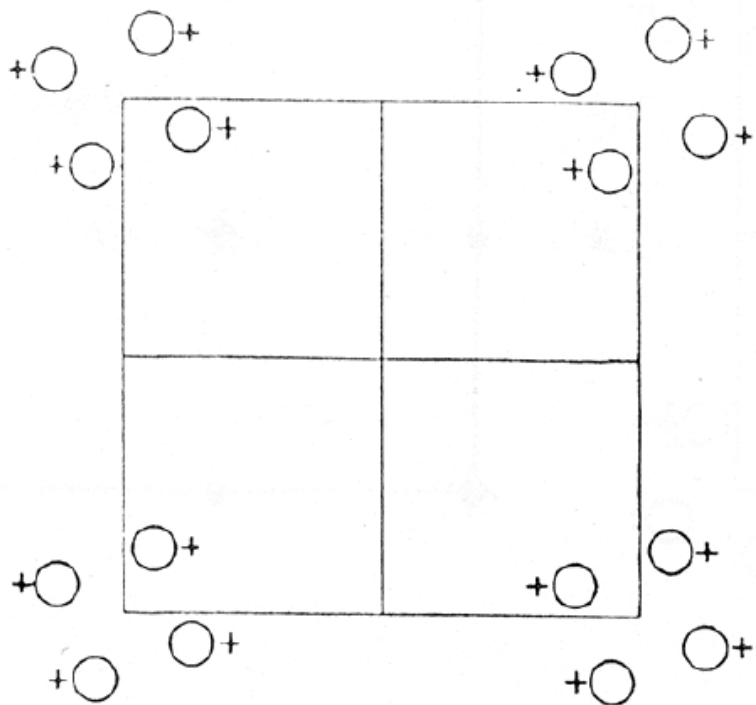
P3



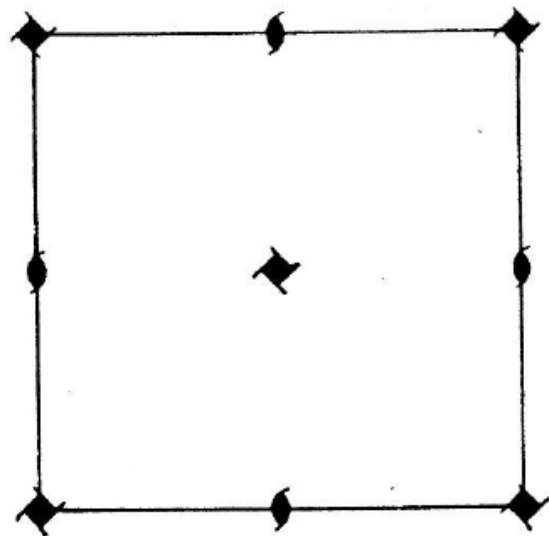
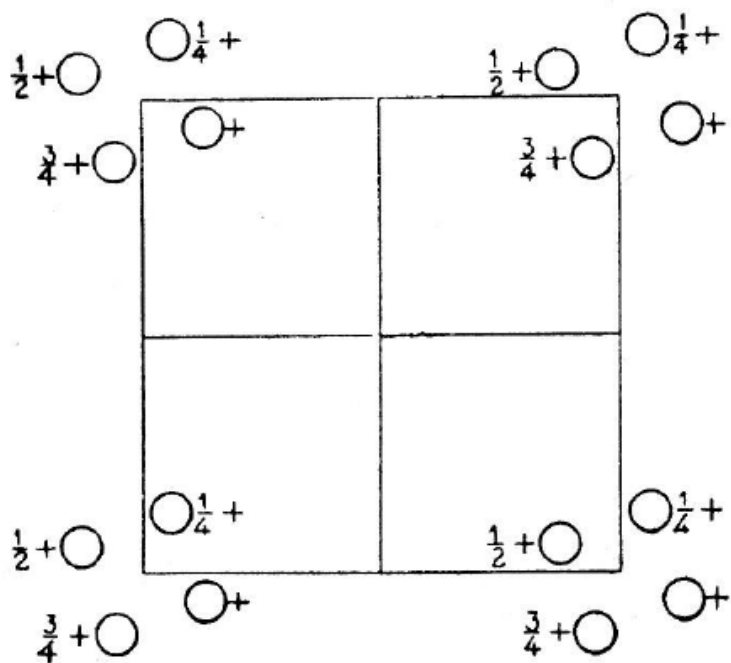
P6



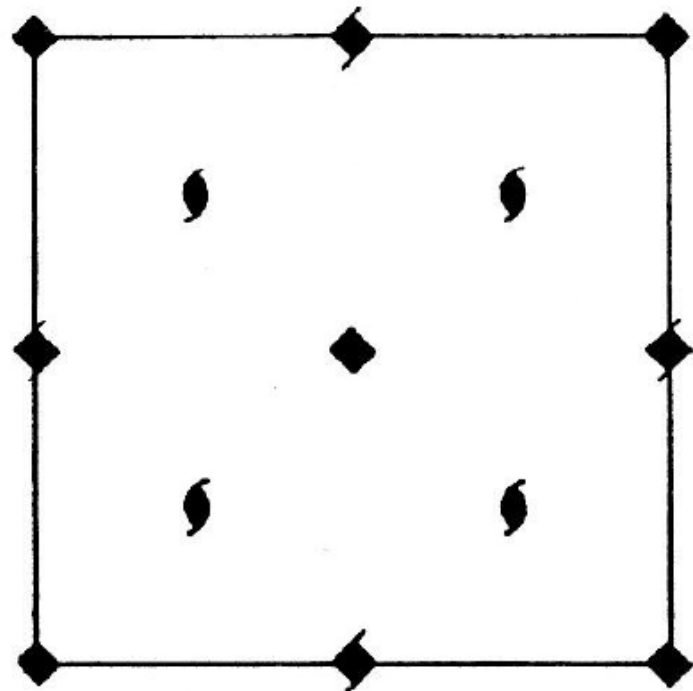
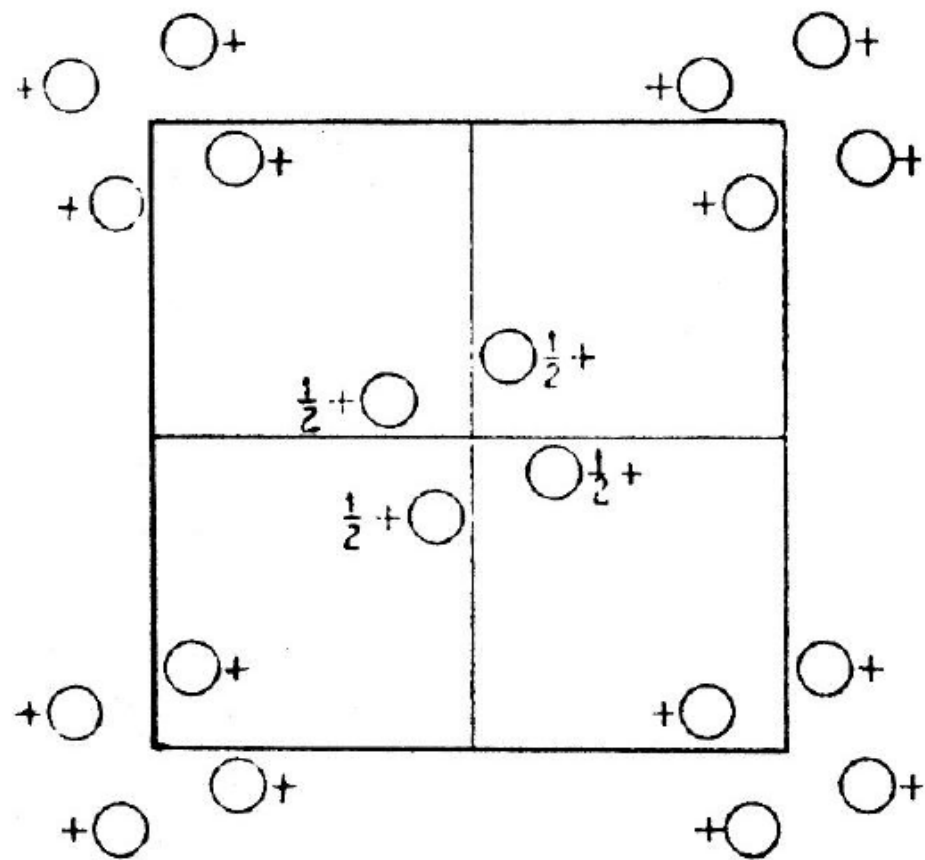
P4



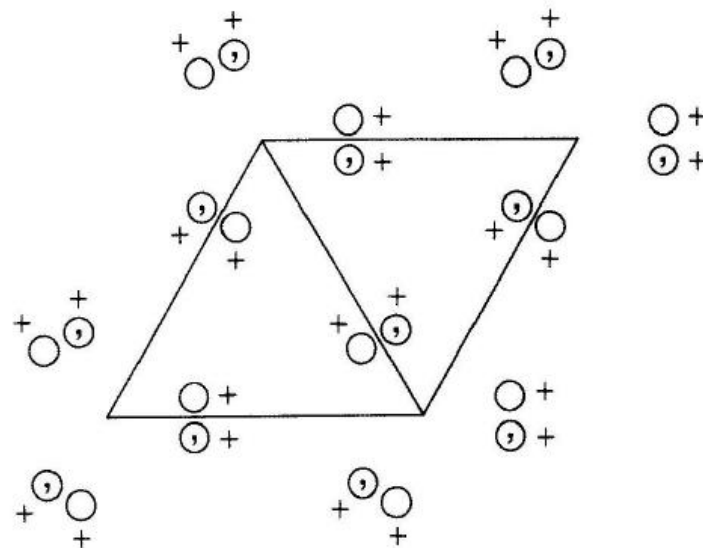
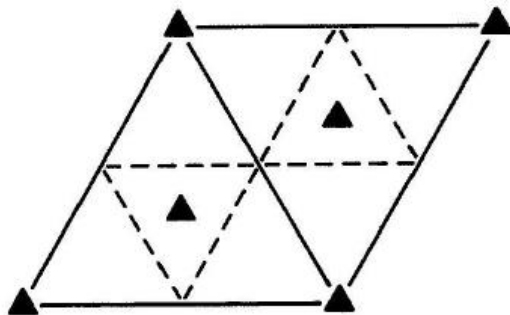
P4₁



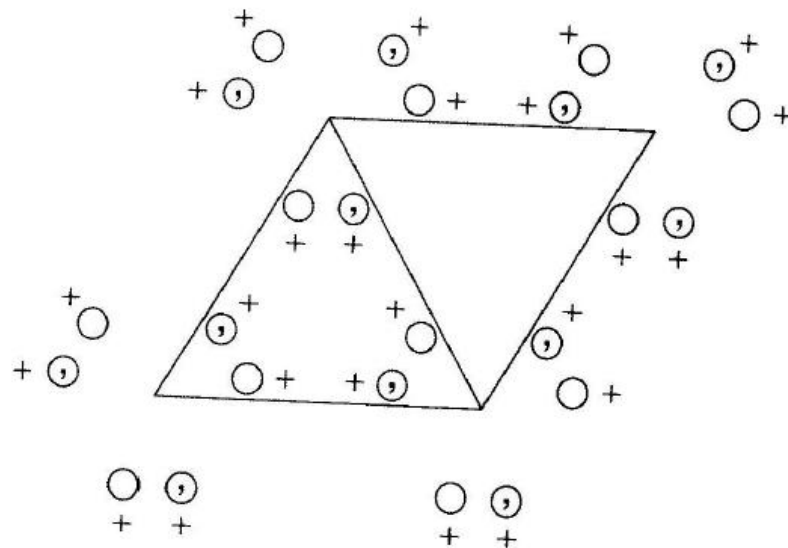
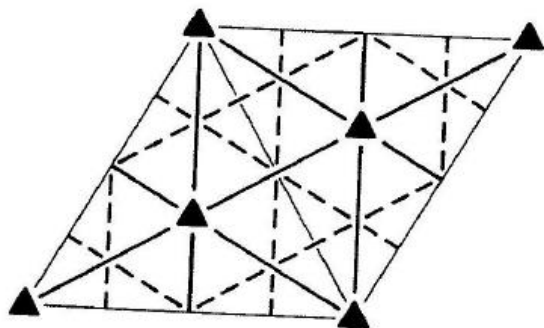
I4



- P 3 1 m

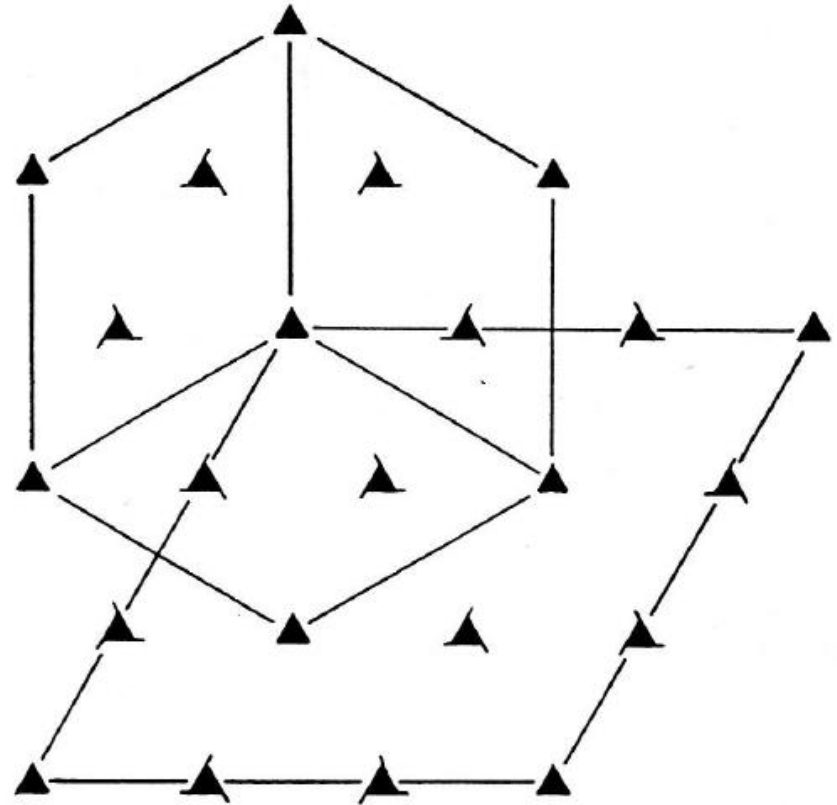
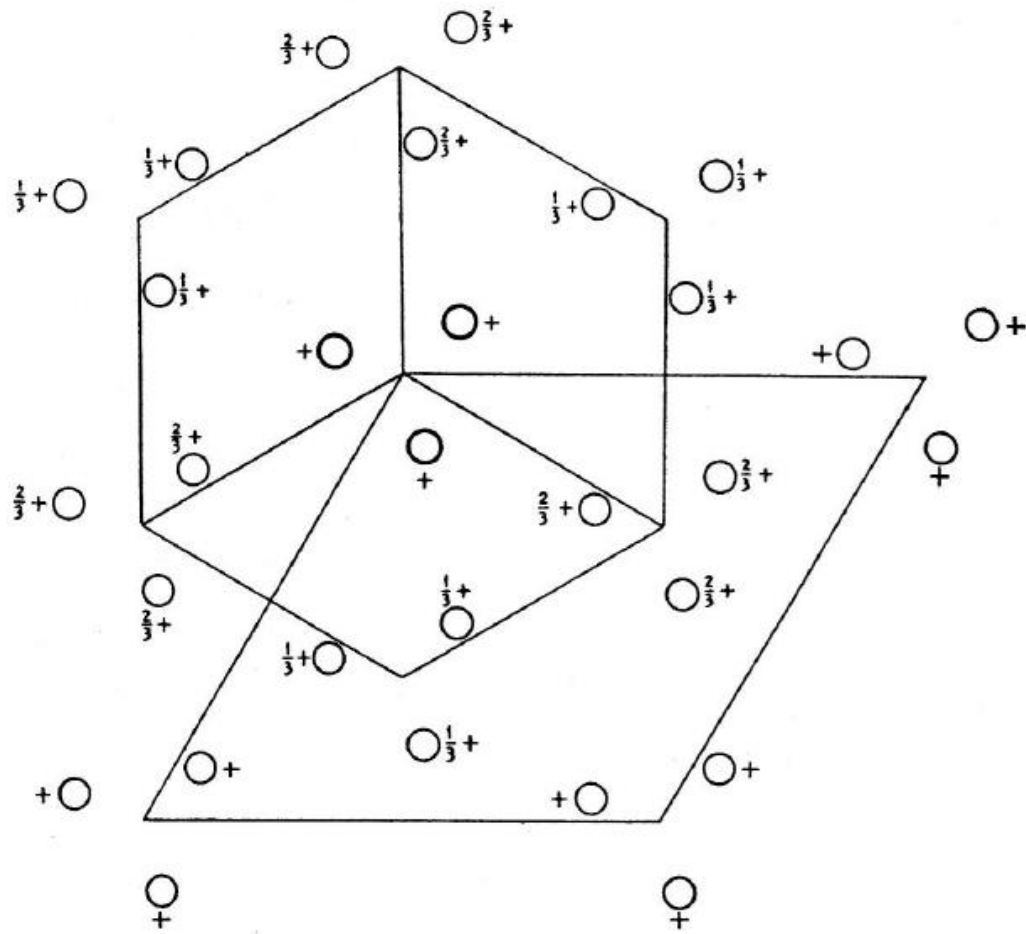


- P 3 m 1



Большое значение имеет последовательность символов в названии ПГС.

R3



$Pm\bar{3}m$

No. 221

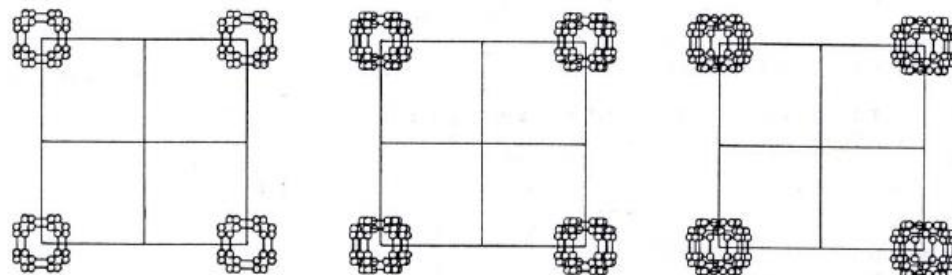
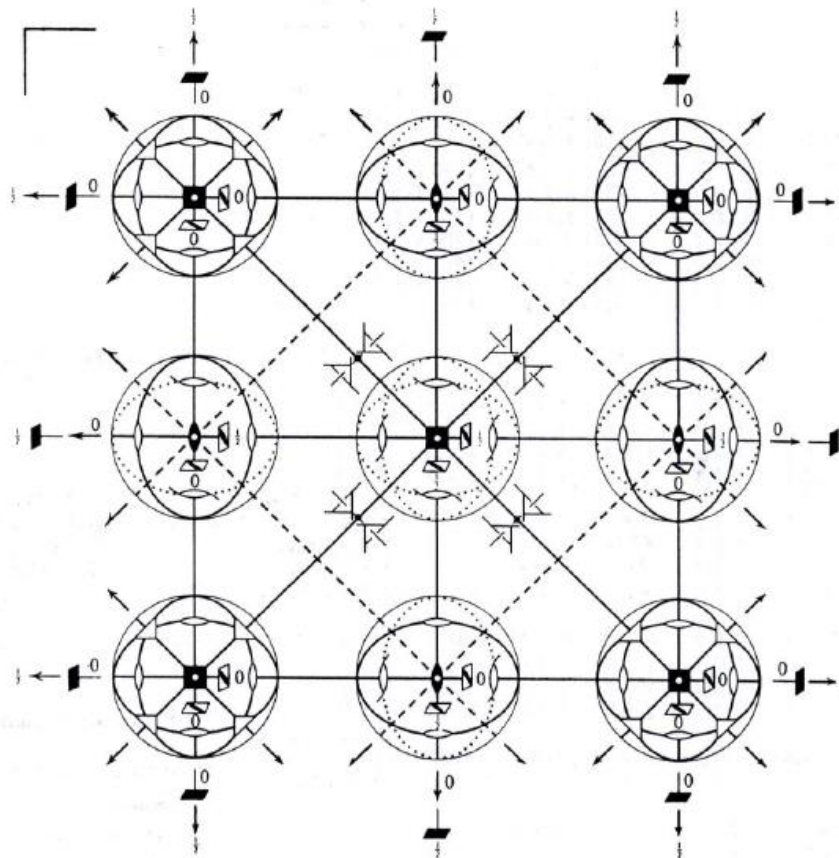
O_h^1

$P4/m\bar{3}2/m$

$m\bar{3}m$

Cubic

Patterson symmetry $Pm\bar{3}m$

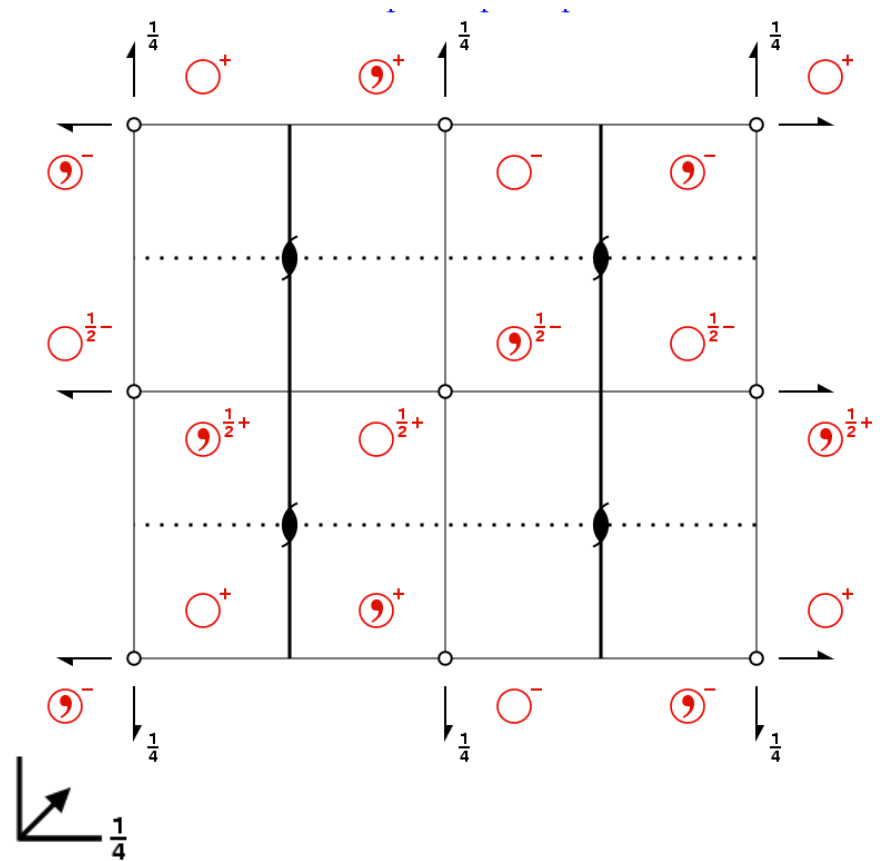
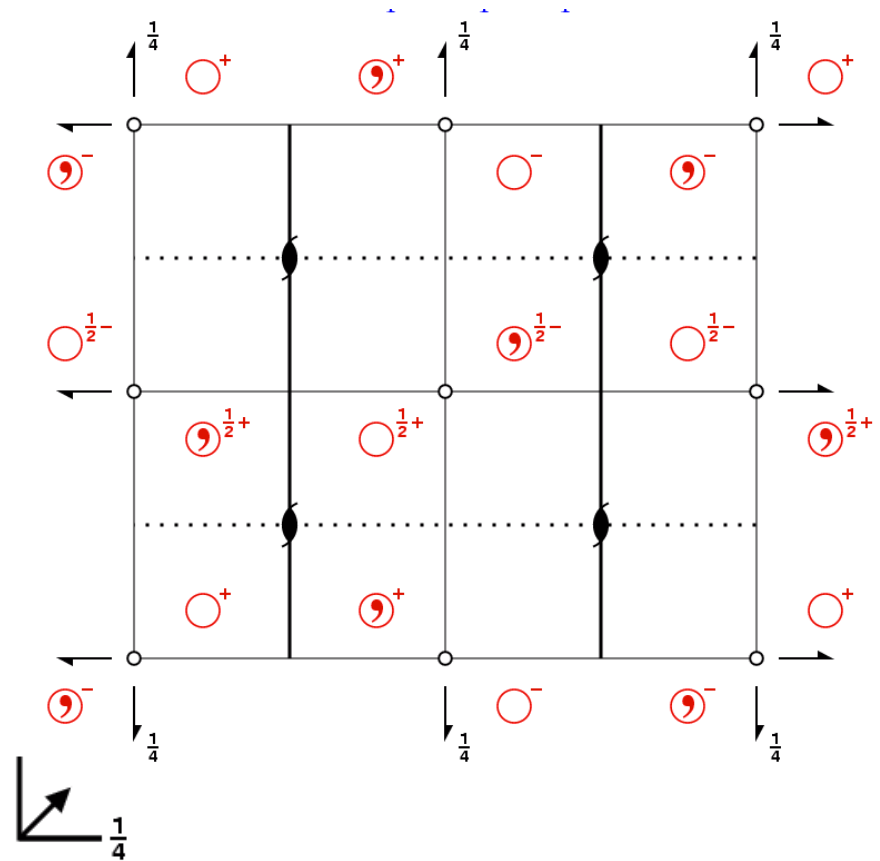
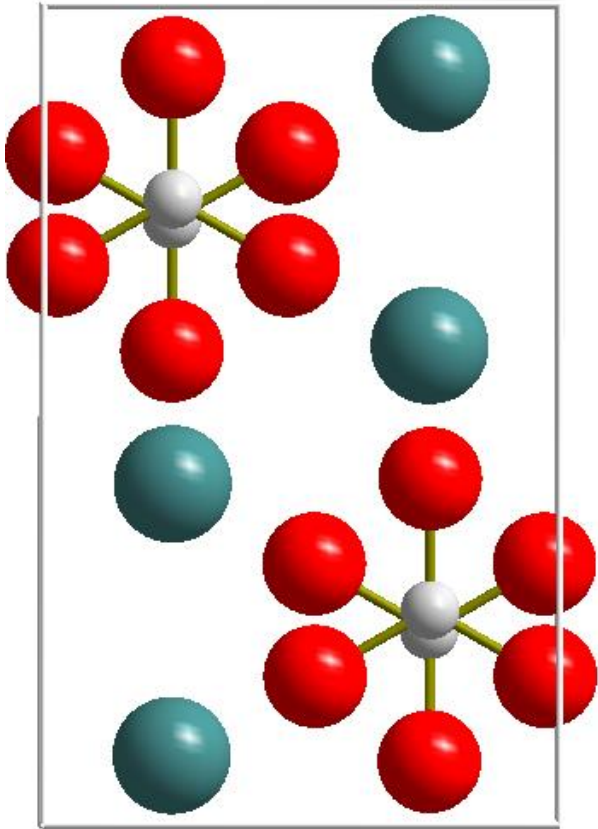


Строение кристалла

- Повторяющийся фрагмент + закон повторения
 - Базис + элементарная ячейка на векторах трансляций
 - Симметрически независимая часть + ПГС

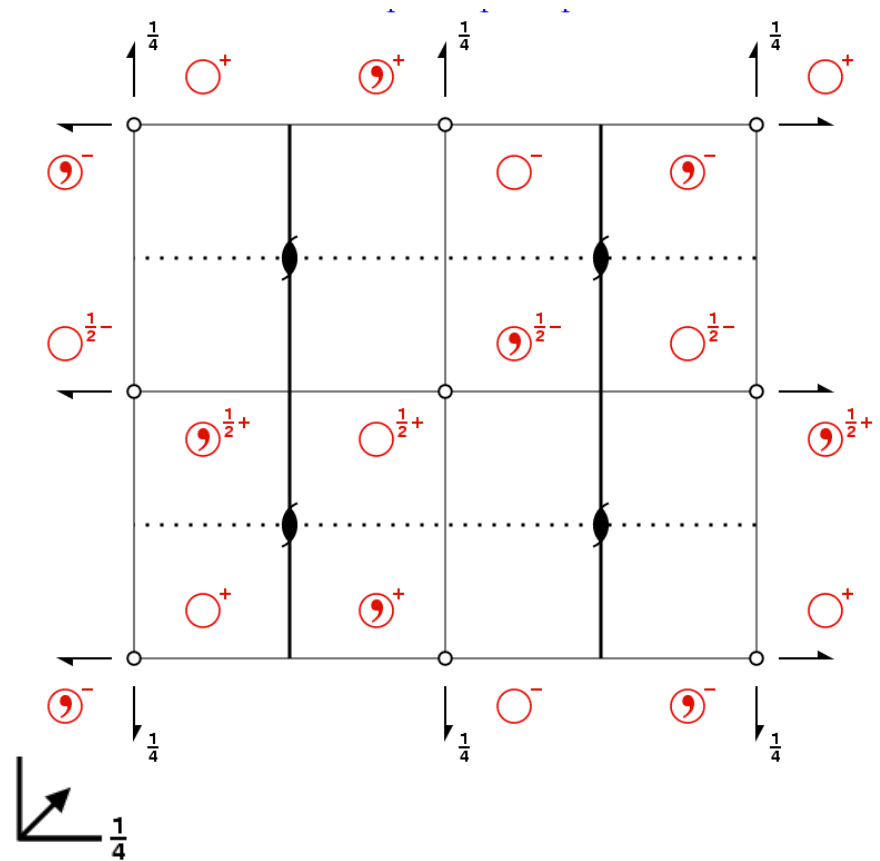
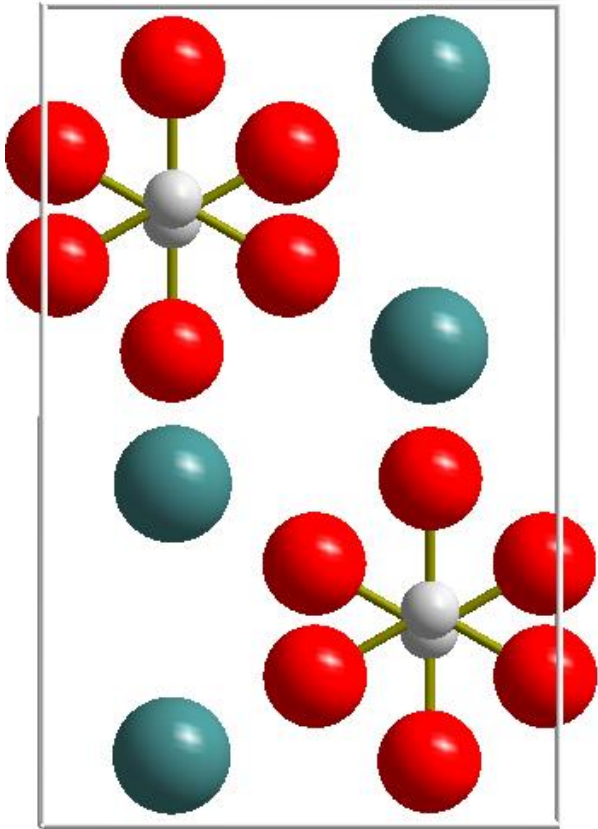
Арагонит (CaCO₃)

Pnma

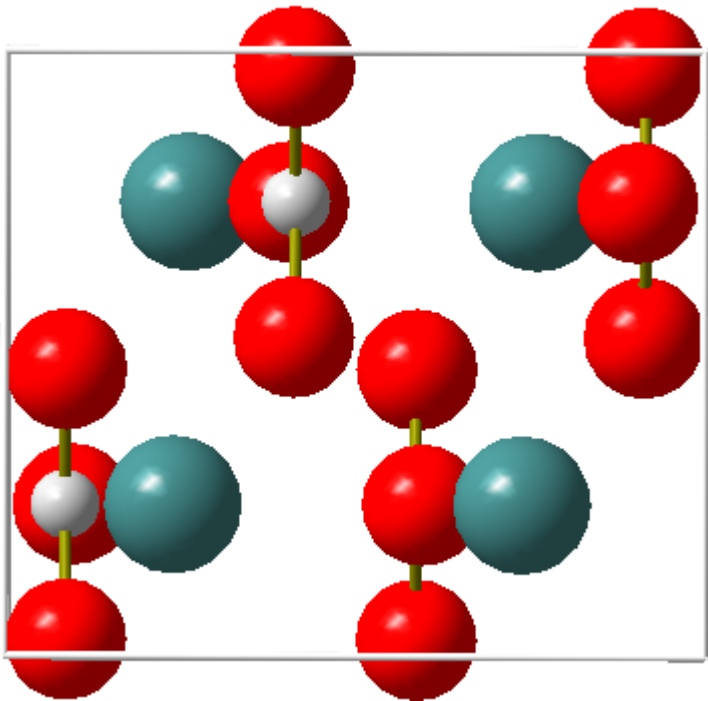


Арагонит (CaCO₃)

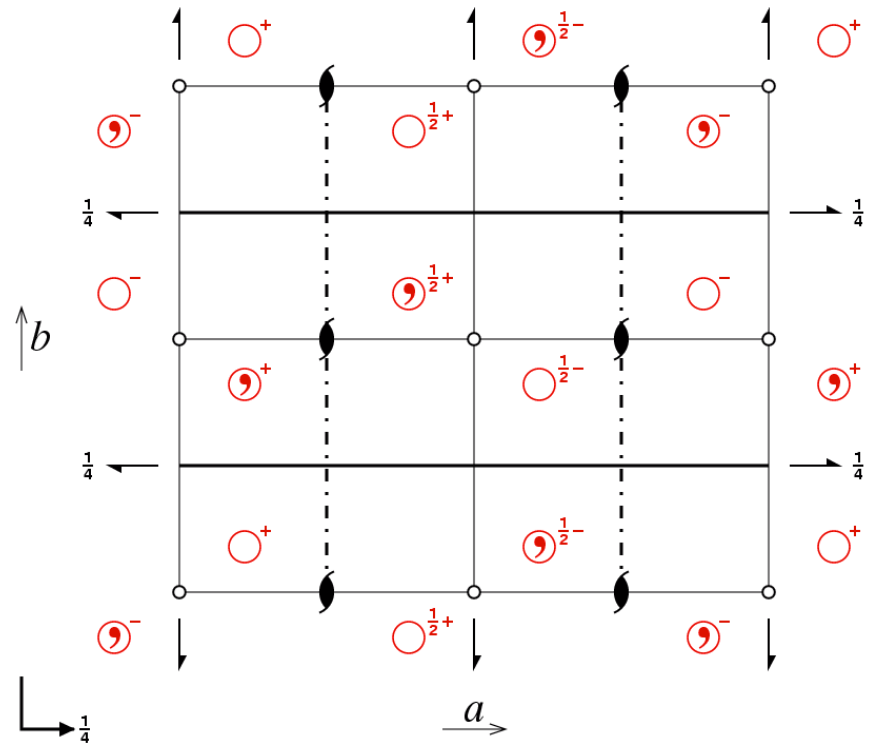
Pnma



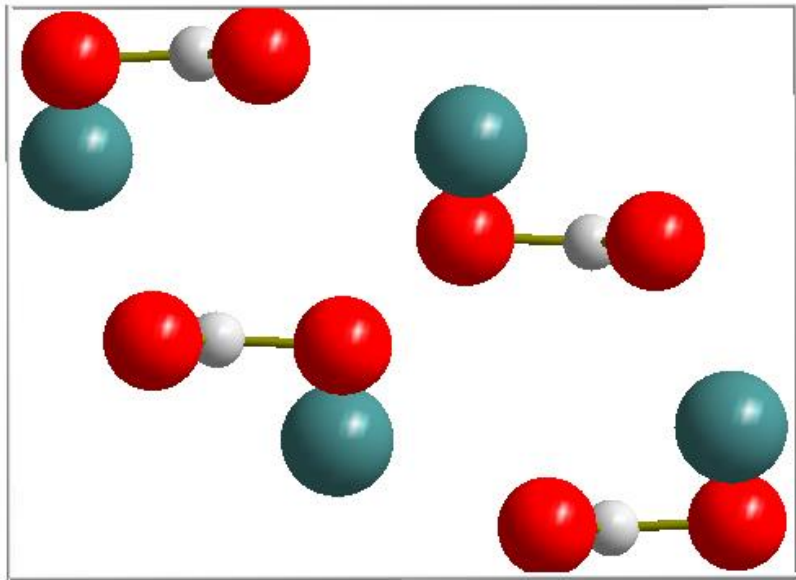
Арагонит



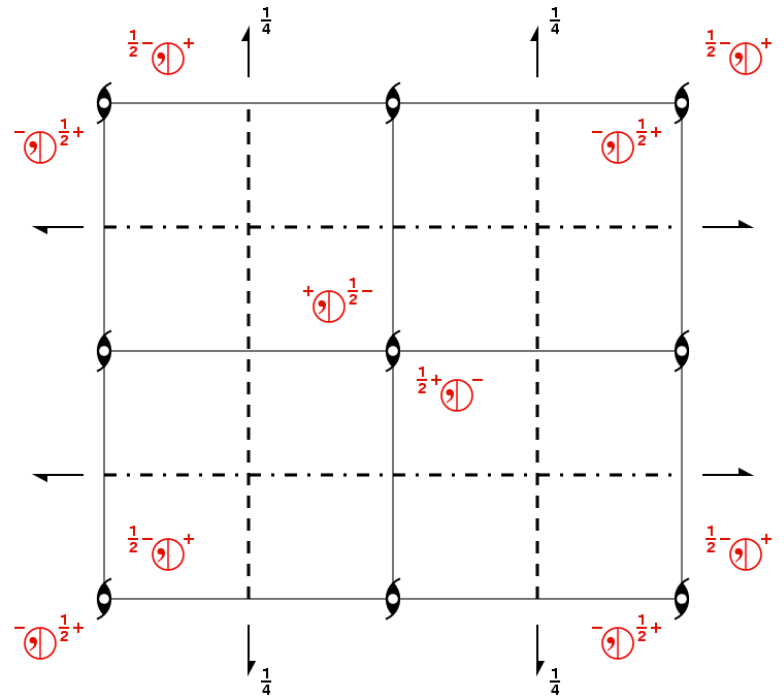
Pnma



Арагонит



Pnma



Стандартная форма хранения информации о кристаллической структуре (CIF – Crystallographic Information File)

_symmetry_cell_setting ?
 _symmetry_space_group_name_H-M ?

P2₁/n

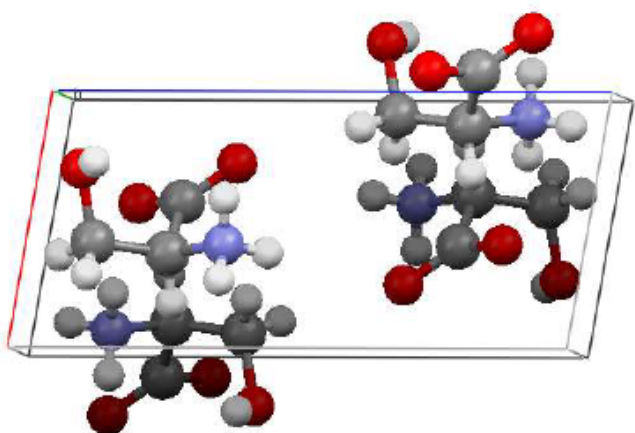
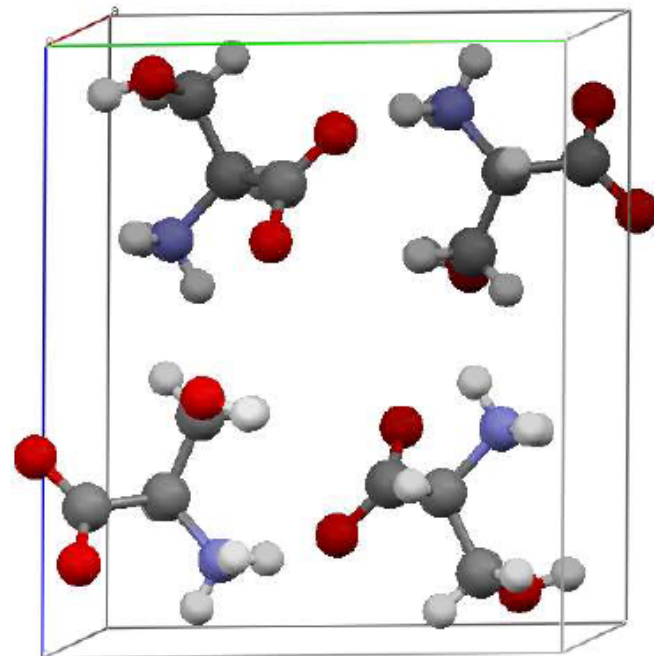
loop_		N1 N 1.0920(3) 0.67011(15) 0.84738(13)
_symmetry_equiv_pos_as_xyz		H2 H 1.121(5) 0.717(3) 0.924(2)
'x, y, z'		H5 H 0.914(5) 0.622(3) 0.835(2)
'-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'	2 ₁	H6 H 1.232(5) 0.600(3) 0.853(2)
'-x, -y, -z'		O1 O 0.7675(3) 0.90229(13) 0.83629(12)
'x-1/2, -y-1/2, z-1/2'	n	O2 O 0.7975(3) 0.66902(15) 0.56824(12)
		H8 H 0.774(5) 0.579(3) 0.594(2)
_cell_length_a	4.832(2)	O3 O 0.9207(3) 1.00598(14) 0.66795(13)
_cell_length_b	9.153(4)	C5 C 1.1220(3) 0.77908(17) 0.74465(14)
_cell_length_c	10.460(4)	H1 H 1.314(4) 0.8161(19) 0.7655(15)
_cell_angle_alpha	90.00	C6 C 0.9179(3) 0.90576(16) 0.75036(15)
_cell_angle_beta	99.85(4)	C7 C 1.0821(3) 0.7095(2) 0.61140(16)
_cell_angle_gamma	90.00	H4 H 1.132(4) 0.780(3) 0.553(2)
_cell_volume	455.8(3)	H7 H 1.209(4) 0.625(2) 0.613(2)
_cell_formula_units_Z	4	

_symmetry_cell_setting ?
_symmetry_space_group_name_H-M ?

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x+1/2, y+1/2, -z+1/2' 2_1
'-x, -y, -z'
'x-1/2, -y-1/2, z-1/2' n

_cell_length_a 4.832(2)
_cell_length_b 9.153(4)
_cell_length_c 10.460(4)
_cell_angle_alpha 90.00
_cell_angle_beta 99.85(4)
_cell_angle_gamma 90.00
_cell_volume 455.8(3)
_cell_formula_units_Z 4

$P2_1/n$



аланин

Основные базы данных

- CCDC (Кембриджский банк данных)
- ICSD (Банк данных неорганических структур)
- CRYSTMET (структуры металлов и интерметаллидов)
- PDB (Protein Data Bank) (структуры белков)

The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC).

The CCDC websites use cookies. By continuing to browse the site you are agreeing to our use of cookies. For more details about cookies and how to manage them, see our [cookie policy](#).

Continue



Sign In

Community

Research & Consultancy

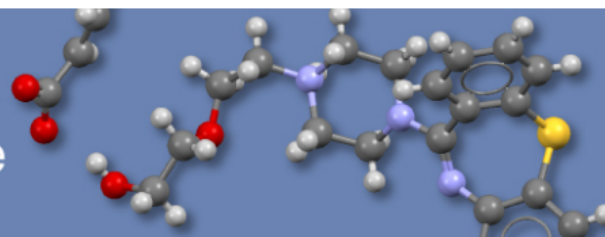
Solutions

News & Events

Support & Resources

The CCDC

Celebrating 50 Years of the Cambridge Structural Database



CSD
50
1965 - 2015

Available Now!

CSD 2016 – The world's essential database of crystal structures, over 850,000 entries

Introducing CSD-Enterprise – ALL the data with ALL the software

CSD-System, CSD-Discovery, CSD-Materials – New CSD-driven software suites

[What's new for 2016?](#)

[Download CSD 2016](#)

[What's in the latest update?](#)

[Update CSD 2016](#)

The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) celebrates fifty years of sharing crystal structure data.

[Find out more here.](#)



Deposit Structures

Upload your data to the CCDC for inclusion in the Cambridge Structural Database



Access Structures

View and retrieve structures in the Cambridge Structural Database

Structures deposited with CCDC are made publically available for download at the point of publication or at consent from the depositor. They are also scientifically enriched and included in the Cambridge Structural Database (CSD) which underpins a range of software solutions offered by CCDC. Targeted subsets of the CSD are also freely available to support teaching and other activities.

Tweets by @ccdc_cambridge



CCDC Cambridge @ccdc_cambridge

Busy week for CCDC with Ian Bruno and Suzanna Ward giving three talks at #SciDataCon and Amy Sarjeant talking at #MOF2016



7h



CCDC Cambridge @ccdc_cambridge

Read about Ian Bruno and Suzanna Ward's talks at #SciDataCon yesterday here: scidatacon.org/2016/sessions/... and scidatacon.org/2016/sessions/...



7h



CCDC Cambridge @ccdc_cambridge

Find details of Ian Bruno's talk today at #SciDataCon

Embed

[View on Twitter](#)

<http://www.ccdc.cam.ac.uk>

CCDC

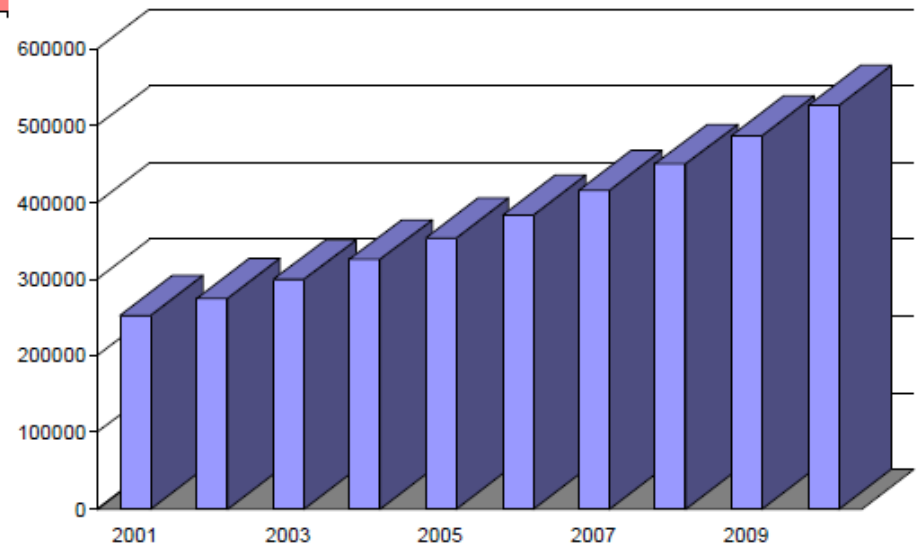
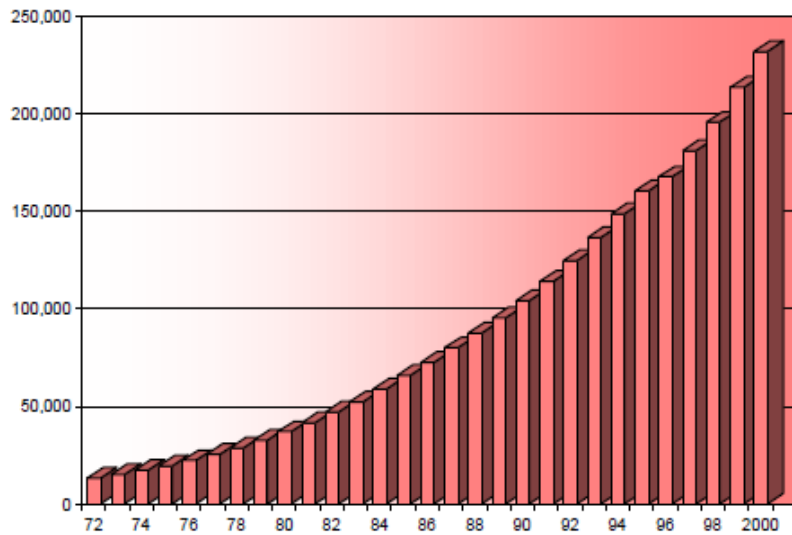
Научные задачи

- Создание и пополнение базы данных:
 - 3D данные о кристаллических структурах,
 - 2D химические диаграммы,
 - Литературные ссылки
- Разработка программного обеспечения для работы с данными и получения структурной информации
- Проведение исследований с использованием Кембриджского Банка Данных

Содержание CSD

- Органические и металлоорганические соединения
- Результаты экспериментальной расшифровки кристаллических структур
- Данные рентгеновских и нейтронографических экспериментов
- Свыше **850000** записей
- Около 60 000 новых записей добавляется каждый год
- Используется свыше 1200 журналов в качестве первичных источников информации

Число структур



Inorganic Crystal Structure Database

- <http://icsd.fiz-karlsruhe.de/icsd/>

FIZ Karlsruhe поддерживает самый крупный Банк данных неорганических структур, в настоящее время содержит 185000 записей (включая координаты атомов), из публикаций с 1913 года.

В настоящее время ICSD содержит 185000 структур :

2032 структур кристаллов элементов

34587 структур кристаллов бинарных соединений

68064 записей структур соединений с тремя элементами

66817 записей структур соединений с 4 и 5 элементами

Около 167000 записей (81%) описаны через структурные тип

Анализируются координационные числа, координационные полиэдры и полиэдры Вороного-Дирихле

<http://cds.dl.ac.uk/cds/help/icsd.html>



Home » Services » Crystallography » ICSD

ICSD – the Inorganic Crystal Structure Database

ICSD is the world's largest database for fully identified inorganic crystal structures. It is produced by FIZ Karlsruhe and currently contains about 185,000 crystal structures. Updates are made twice a year (in spring and in fall) with data taken from scientific journals and other sources.

Thanks to these many heterogeneous data sources the database has a wide coverage. ICSD is also updated retroactively. As all steps of the value generation chain – looking for sources, database production, data management – are performed here at FIZ Karlsruhe, we can always meet and maintain our high standards as to the reliability of the data.

About 6,000 structures are added to ICSD each year. The oldest records date back to the year 1913 and contain information from publications by William Henry Bragg and his son.



[Direct link to ICSD](#)



[More Information](#)

[Crystal structure depot](#)

[Contact](#)

Contact



Wendelin Detemple
Head FIZ Products & Services

Phone: +49 7247 808 534

COL ICSD Collection Code 32100

DATE Recorded Mar 16, 1987; updated Nov 10, 1997

NAME Calcium carbonate

MINR Aragonite - from Horenz, Czechoslovakia

FORM Ca (C O3)

= C Ca O3

TITL Neutron diffraction refinement of the crystal structure of
Aragonite

REF TMPM. Tschermaks Mineralogische und Petrographische Mitteilungen
(1979-)

TTMMD 35 (1986) 127-131

AUT Jarosch D, HegerяG

CELL a=4.961(0) b=7.967(1) c=5.741(0) a=90.0 b=90.0 c=90.0
V=226.9 Z=4

SGR P m c n (62) - orthorhombic

CLAS mmm (Hermann-Mauguin) - D2h (Schoenflies)

PRS oP20

ANX ABX3

PARM Atom__	No	OxStat	Wyck	-----X-----	-----Y-----	-----Z-----	-SOF-
Ca	1	2.000	4c	1/4	0.41508(5)	0.24046(8)	1
C	1	4.000	4c	1/4	0.76211(4)	0.08518(6)	1
O	1	-2.000	4c	1/4	0.92224(4)	0.09557(8)	1
O	2	-2.000	8d	0.47347(5)	0.68065(3)	0.08726(5)	1

CRYSTMET® содержит данные о кристаллических структурах металлов, сплавов, интерметаллидов (почти 160000 записей). Основан в 1960 сотрудниками Лос-Аламоса Cromer и Larson, в настоящее время поддерживается Национальным Исследовательским Советом Канады. В 1996 CRYSTMET® передан Toth Information Systems.

Acta Crystallographica Section B
**Structural
Science**

ISSN 0108-7681

**Peter S. White,^{a*} John R.
Rodgers^b and Yvon Le Page^c**

^aDepartment of Chemistry, CB 3290 Venable Hall, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC 27599-3290, USA, ^bToth Information Systems Inc., 2045 Quincy Avenue, Ottawa, Ontario, Canada K1J 6B2, and ^cICPET, National Research Council of Canada, Ottawa, Ontario, Canada K1A 0R6

Correspondence e-mail:
pwhite@pyrite.chem.unc.edu

CRYSTMET: a database of the structures and powder patterns of metals and intermetallics

CRYSTMET is a database of critically evaluated crystallographic data for metals (including alloys, intermetallics and minerals) and associated bibliographic, chemical and physical information. Also included are simulated powder diffraction patterns for all of the entries. The database currently contains almost 70000 entries and covers the literature exhaustively from 1922 to the present. The database is available on CD-ROM with search/analysis software for use on personal computers. This software can be used with any database in the appropriate format; currently CRYSTMET and the ICSD databases are available. This paper describes the database content, the procedures used in its construction, the software made available to the user and a number of potential uses for the data.

Received 18 December 2001
Accepted 11 February 2002

background. Execution is followed by production of a plain-English job report. Four examples among the numerous possible applications of the *ToolKit* illustrate the fact that daunting topics, like the symmetry of chlorapatite, the voids and channels in the hydrogen-storage material EuNi₃, the energy per unit area of the contact plane for spinel twin in diamond, and the hardness of lonsdaleite *versus* diamond, are amenable to processing by materials scientists more versed in experiment than theory. The manual with tutorials and availability information can be found at <http://www.tothcanada.com/toolkit/>.



Protein Data Bank

- <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

Банк данных структур белков, в настоящее время содержит около 111956 записей (включая координаты атомов), каждый год поступает 7-8 тысяч записей

36319 Distinct Protein Sequences

29406 Structures of Human Sequences

7910 Nucleic Acid Containing Structures

Данные рентгеновской дифракции, ЯМР, электронной микроскопии

Кристаллографический класс:

Все закрытые операции + все сходственные операции ПГС

Принцип симметрии Кюри:

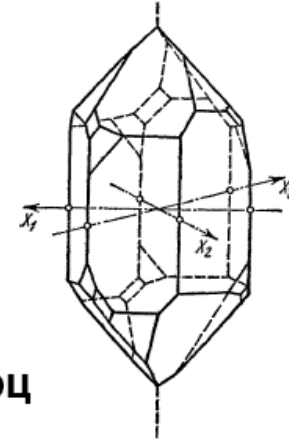
Если определенные причины вызывают соответствующие следствия, то элементы симметрии причин должны проявляться в вызванных ими следствиях.

Положение, обратное этому, неправильно, следствия могут обладать более высокой симметрией, чем вызвавшие их причины.

*Основной закон кристаллофизики (**принцип Нейманна**):*

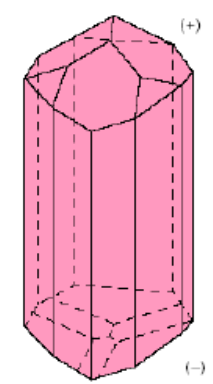
Физическое свойство кристалла может обладать и более высокой симметрией, чем кристалл, но оно обязательно должно включать в себя симметрию точечной группы кристалла.

Пьезоэлектрики - материалы, в которых поляризация и электрический заряд противоположных граней возникают под действием приложенного механического напряжения.



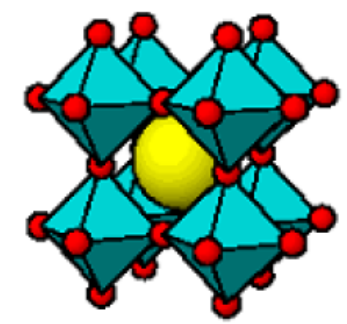
Кварц

Пироэлектрики - материалы, в которых при определенных температурах возникает спонтанная поляризация, направление которой не может быть изменено внешним электрическим полем.



Турмалин

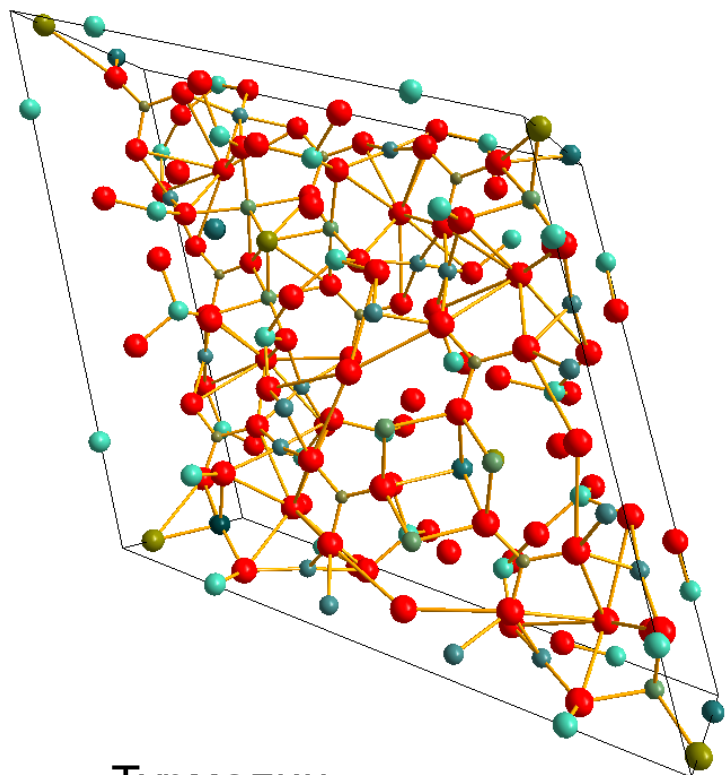
Сегнетоэлектрики - материалы, сохраняющие остаточную поляризацию, направление которой можно изменить внешним электрическим полем.



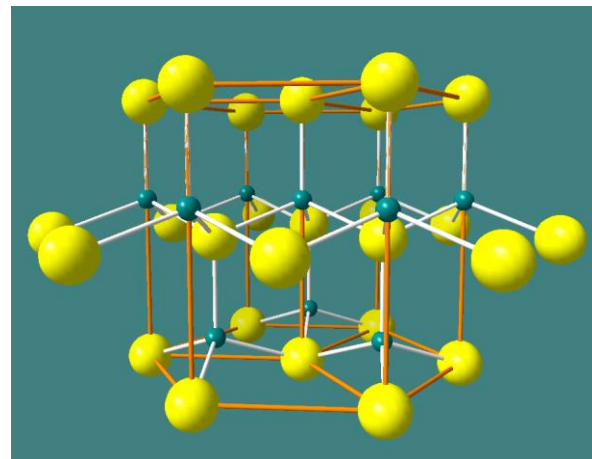
BaTiO₃

Состояние наблюдается при $T < T_c$,
где T_c - сегнетоэлектрическая точка Кюри

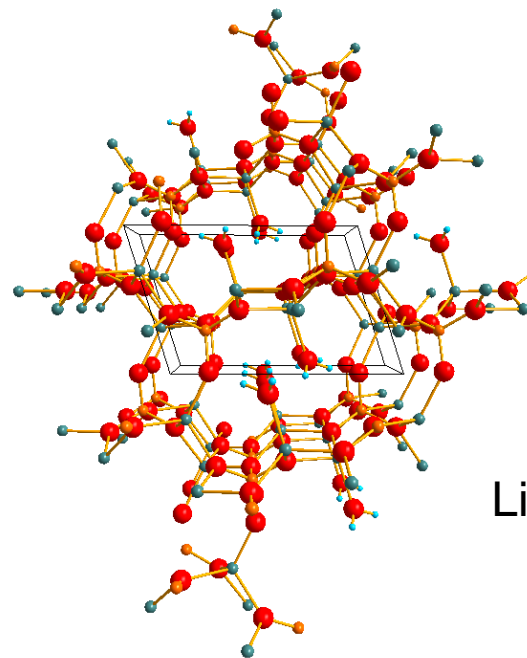
Пирозлектрики



Турмалин
 $\text{NaMg}_3[\text{Al}_6\text{B}_3\text{Si}_6\text{O}_{27}(\text{OH})_4]$



ZnO со структурой вюрцита



$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Сегнетоэлектричество.

Для *сегнетоэлектриков* характерно наличие некоторой температуры (точки Кюри), при которой в кристалле возникает спонтанная поляризация и он разбивается на домены. Первый представитель – сегнетова соль $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. Её свойства активно изучались Курчатовым (30-е годы), он и ввёл понятие **сегнетоэлектричество**. В 1944 был открыт новый класс сегнетоэлектриков на основе перовскита BaTiO_3 .

В сегнетоэлектриках возникновение спонтанной поляризации происходит в результате фазового перехода. Температура при которой это происходит называется температурой Кюри.

По механизму возникновения спонтанной поляризации сегнетоэлектрики делят на две группы:

- 1) *Сегнетоэлектрики типа смещения*, имеющие кислородно-октаэдрический тип структуры. Поляризация связана со смещением определенных ионов и имеет направление совпадающее с направлением смещения.
- 2) *Упорядочивающиеся сегнетоэлектрики*. Переход в поляризованное состояние связан с упорядочением определенных элементов структуры (как правило протонов).

Вопросы:

1. Дайте определения следующим понятиям: пространственная группа симметрии, кристаллографический класс, кристаллическая система (сингония), категория.
2. К каким кристаллическим системам относятся ПГС $Pnma$, $P1$, $C2/c$, $P6/mmc$, $I4/mmm$ и $Fm\bar{3}m$? Опишите тип элементарной ячейки и расположение элементов симметрии относительно координатных осей в каждой из этих ПГС?
3. Как можно однозначно задать структуру кристалла (два варианта)?
4. Что такое CIF? Какие Вы знаете базы структурных данных?
5. Сформулируйте принцип Неймана. Почему центрально симметричный кристалл не может быть пьезоэлектриком, сегнетоэлектриком и пироэлектриком?