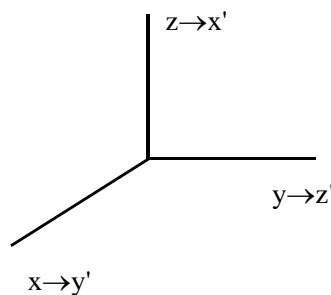


## Пример контрольной работы 1

### Задача №1 (30 баллов)

В системе координат  $xyz$  группы симметрии имеют символы  $C_{mca}$ ,  $Imm2$ ,  $Pban$ ,  $P\bar{4}3m$ . Какие символы будут иметь те же группы, если произвести смену системы координат  $xyz \rightarrow x'y'z'$  так, как это показано на рисунке?



### Задача №2 (50 баллов)

Даны координаты точек общего положения пространственной группы.

$x, y, z$

$-x, y, -z + 1/2$

$-x, -y, -z$

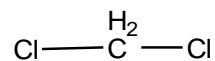
$x, -y, z + 1/2$

Ответьте на следующие вопросы:

1. Напишите матричные представления всех операций симметрии группы. Для каждой операции указать является ли она открытой или закрытой, к какому роду (первому или второму) относится.
2. К какой кристаллической системе (сингонии) относится данная группа?
3. Выделите генераторы группы.
4. Приведите символ ПГС.

### Задача №3 (50 баллов).

Известно, что молекулы  $CH_2Cl_2$  (см. рис.), в твердой фазе образуют упорядоченный молекулярный кристалл с ПГС  $Pbcn$ . При этом число формульных единиц в элементарной ячейке  $Z = 4$ . Какие позиции (с какой симметрией и кратностью) могут занимать молекулы в данной ПГС? *Пояснение:* под термином "молекула занимает позицию" имеется в виду, что ее геометрический центр занимает эту позицию.



К задаче прилагается копия позиций в данной группе из международных таблиц.

### Задача №4 (50 баллов)

Какие из представленных ниже обозначений ПГС являются неправильными:

$P422$ ,  $Pamd$ ,  $Imbm$ ,  $Im3m$ ,  $Pnnn$ ,  $Pmnc$ ,  $P222$ ,  $R3$ ,  $P36m$ ,  $Fmmm$

Если ПГС существует, определите соответствующие кристаллографический класс и кристаллическую систему (сингонию).

### Задача №5 (20 баллов)

В кристаллической структуре состава  $A_xB_2C_y$  атомы А и С совместно образуют плотнейшую шаровую упаковку, а атомы В занимают  $1/4$  октаэдрических пустот. В другой структуре того же состава упаковку образуют атомы В и С, а атомы А занимают  $1/2$  тетраэдрических пустот. Найти  $x$  и  $y$ .

*Pbcn*

$D_{2h}^{14}$

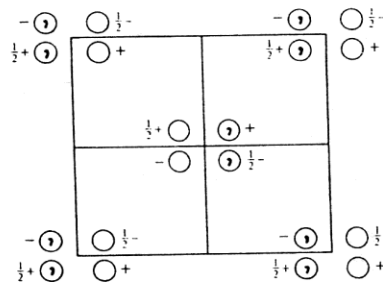
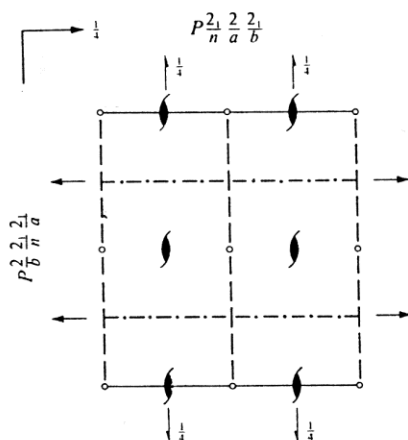
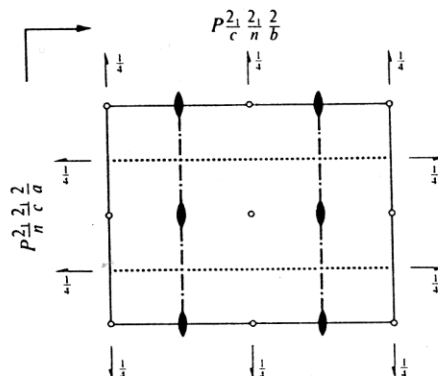
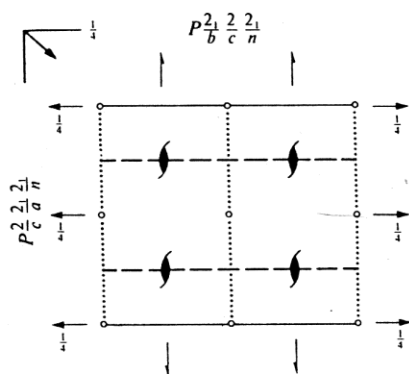
*mmm*

Orthorhombic

No. 60

$P 2_1/b 2/c 2_1/n$

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) $\bar{1} 0,0,0$ | (6) $n(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0) x,y,\frac{1}{2}$ | (7) $c x,0,z$            | (8) $b \frac{1}{2},y,z$                  |

Generators selected (1);  $t(1,0,0)$ ;  $t(0,1,0)$ ;  $t(0,0,1)$ ; (2); (3); (5)

## Positions

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

## Coordinates

## Reflection conditions

8 *d* 1 (1)  $x, y, z$  (2)  $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$  (3)  $\bar{x}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$  (4)  $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z}$   
(5)  $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$  (6)  $x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$  (7)  $x, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$  (8)  $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z$

## General:

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

Special: as above, plus

4 *c* .2.  $0, y, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$   $0, \bar{y}, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$hkl: h+k=2n$

4 *b*  $\bar{1}$   $0, \frac{1}{2}, 0$   $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$   $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, 0, 0$

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

4 *a*  $\bar{1}$   $0, 0, 0$   $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$   $0, 0, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

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

## Symmetry of special projections

Along [001] *c2mm*

$a'=a$   $b'=b$

Origin at  $0, 0, z$

Along [100] *p2gm*

$a'=\frac{1}{2}b$   $b'=c$

Origin at  $x, 0, 0$

Along [010] *p2gm*

$a'=\frac{1}{2}c$   $b'=a$

Origin at  $0, y, 0$

## Maximal non-isomorphic subgroups

I [2]*P*<sub>2</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>(*P*<sub>2</sub>2<sub>1</sub>2) 1; 2; 3; 4  
[2]*P*112<sub>1</sub>/*n*(*P*<sub>2</sub>/*c*) 1; 2; 5; 6  
[2]*P*12/*c*1(*P*2/*c*) 1; 3; 5; 7  
[2]*P*2<sub>1</sub>/*b*11(*P*2<sub>1</sub>/*c*) 1; 4; 5; 8  
[2]*Pbc*2<sub>1</sub>(*Pca*2<sub>1</sub>) 1; 2; 7; 8  
[2]*Pb*2*n*(*Pnc*2) 1; 3; 6; 8  
[2]*P*2<sub>1</sub>*cn*(*Pna*2<sub>1</sub>) 1; 4; 6; 7

IIa none

IIb none

## Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIIc [3]*Pbcn*( $a'=3a$ ); [3]*Pbcn*( $b'=3b$ ); [3]*Pbcn*( $c'=3c$ )

## Minimal non-isomorphic supergroups

I none

II [2]*Abma*(*Cmca*); [2]*Bbab*(*Ccca*); [2]*Cmcm*; [2]*Ibam*; [2]*Pbcb*( $2a'=a$ )(*Pcca*);  
[2]*Pmca*( $2b'=b$ )(*Pbcm*); [2]*Pbmn*( $2c'=c$ )(*Pmna*)