

# Все точечные группы (по Шёнфлису)

1. **Низшая** категория: нет осей порядка выше 2.

Возможные элементы:  $C_2$ ,  $\sigma=S_1$ ,  $i=S_2$  ( $e=C_1$ )

**7 групп:**  $(C_1)$   $C_2$ ,  $C_s$ ,  $C_i$ ,  $C_{2h}$ ,  $C_{2v}$ ,  $D_2$ ,  $D_{2h}$

2. **Средняя** категория: ОДНА (и только одна)

ось  $C_n$  или  $S_n$  порядка  $n > 2$

**7 семейств:**  $C_n$ ,  $S_n$  ( $n=2k$ ),  $C_{nh}$ ,  $C_{nv}$ ,  $D_n$ ,  $D_{nd}$ ,  $D_{nh}$

3. **Высшая** категория: БОЛЬШЕ ОДНОЙ оси

$C_n$  или  $S_n$  порядка  $n > 2$ .

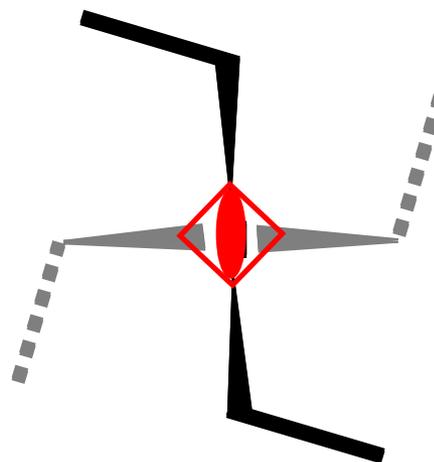
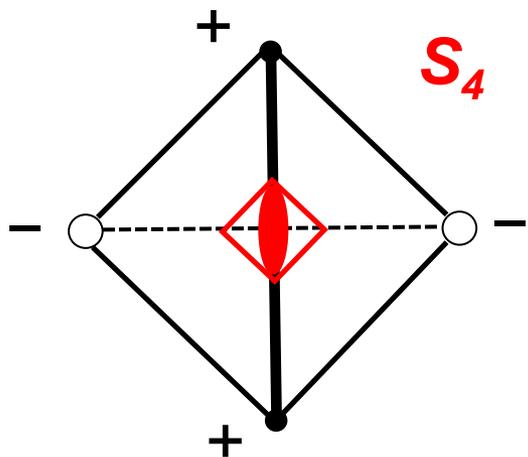
**7 групп:**  $T$ ,  $T_h$ ,  $T_d$ ,  $O$ ,  $O_h$ ,  $I$ ,  $I_h$

4. **Предельные** точечные группы бесконечного порядка

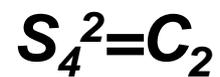
**7 групп:**  $C_\infty$ ,  $S_\infty (=C_{\infty h})$ ,  $C_{\infty v}$ ,  $D_\infty$ ,  $D_{\infty h} (=D_{\infty d})$ ,  $K$ ,  $K_h$

**7 + 7 + 7 + 7**

Несобственное вращение тетраэдра:  
поворот в плоскости экрана на  $90^\circ$   
с отражением в этой плоскости



катион тетраэтиламмония



# Строение кристаллических веществ и материалов

## Лекция № 2 Система Германа - Могена

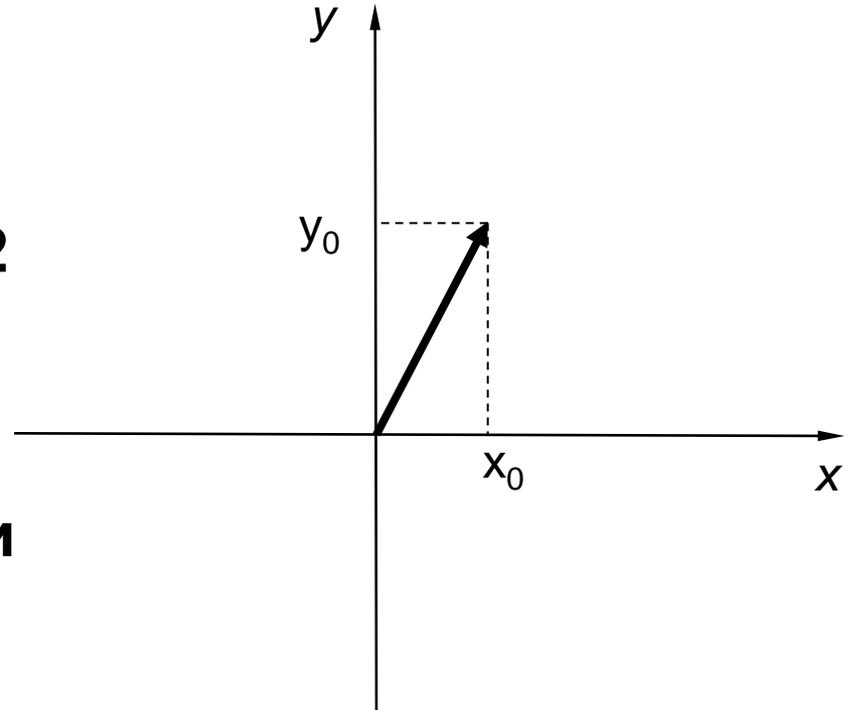
**IUCr**: International Union of Crystallography  
Международный союз кристаллографов

Почему имеется два (и только два) вида  
закрытых операций симметрии  
в трехмерном пространстве?

# Как преобразовать пространство: матрицы

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \text{ матрица } 2 \times 2$$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \text{ вектор на плоскости}$$

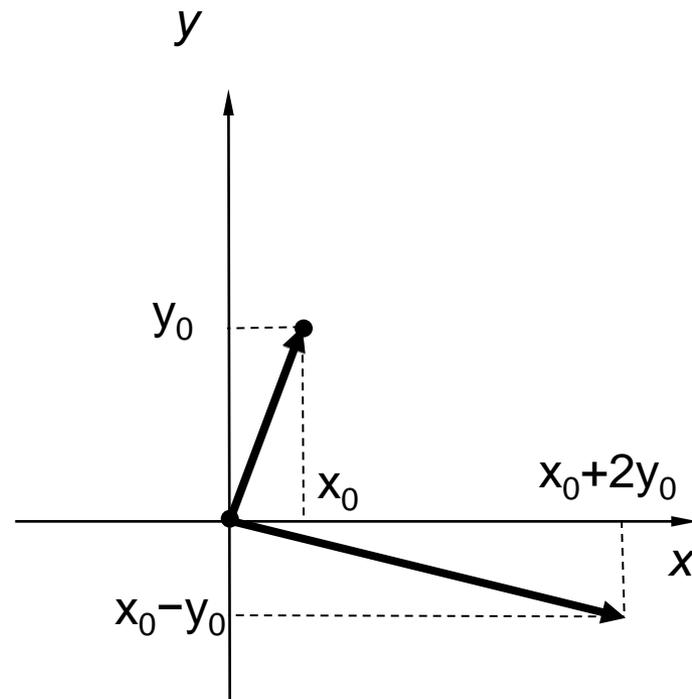


$$A \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x_0 + a_{12}y_0 \\ a_{21}x_0 + a_{22}y_0 \end{pmatrix}$$

# Преобразования симметрии: расстояния между точками должны сохраняться

$$\cancel{A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}$$

$$A \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 + 2y_0 \\ x_0 - y_0 \end{pmatrix}$$

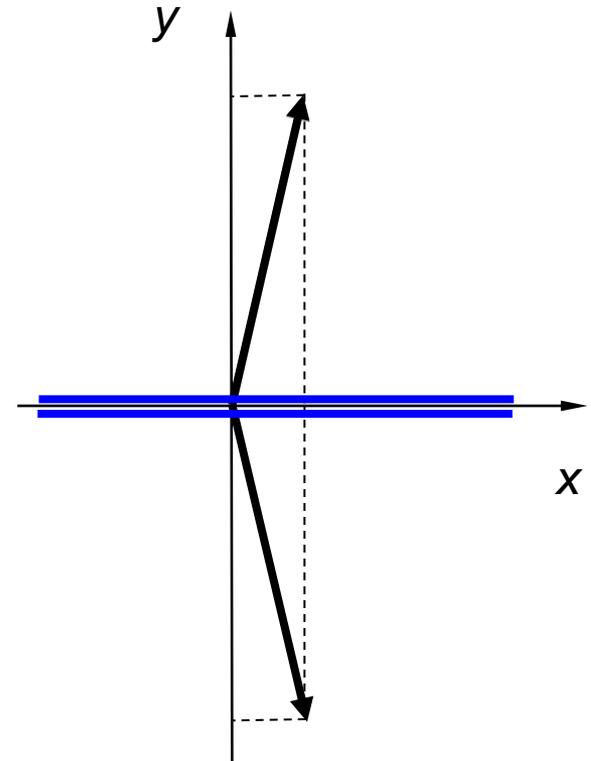


*не всякая матрица задает преобразование симметрии*

# Какие матрицы для этого подходят?

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$A_1 \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 \\ -y_0 \end{pmatrix}$$

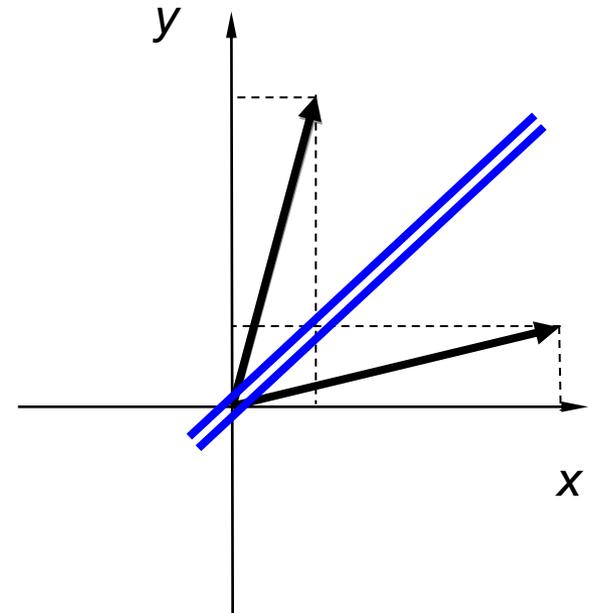


матрица  $A_1$ : отражение относительно оси  $x$

# Какие еще матрицы для этого подходят?

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A_2 \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ x_0 \end{pmatrix}$$



матрица  $A_2$ : отражение относительно диагонали

# Детерминант (определитель) матрицы

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

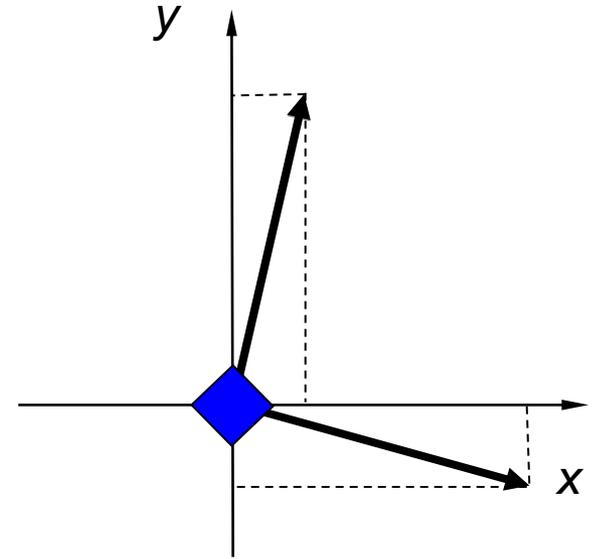
$$\det A_1 = \det A_2 = -1$$

**это общее свойство всех матриц отражения**

# Матрицы поворота

$$A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A_3 \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ -x_0 \end{pmatrix}$$



общий вид матрицы поворота:

$$A = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$$

$$\det A = \cos^2 \phi + \sin^2 \phi = +1$$

Два вида преобразований симметрии: **det A = 1**

# Матрицы и операции симметрии

1. Умножение матриц некоммутативно:  $AB \neq BA$

операции симметрии в общем случае  
тоже некоммутативны

2.  $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  – единичная матрица:

$AE = EA$  для любой  $A$

совсем как тождественное преобразование в группе

*Операции симметрии в  $n$ -мерном пространстве  
можно задавать матрицами  $n \times n$ , у которых  $\det = 1$*

# Симметрические преобразования трехмерного пространства: матрицы 3 3

$$A = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \det A = (\pm 1)(\cos^2 \phi + \sin^2 \phi) = \pm 1$$

приводятся к этому виду выбором системы координат (x,y,z)

Для конечных точечных групп  $\phi = \underline{2\pi/n}$

$\det A = +1$ : собственные вращения  $C_n$   
(включая тождественное преобразование  $C_1 = e$ )

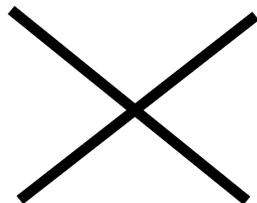
$\det A = -1$ : несобственные вращения  $S_n$   
(включая отражение  $S_1 = \sigma$  и инверсию  $S_2 = i$ )

Зачем (нам) еще одна система обозначений операций симметрии и точечных групп?

# Симметрия молекул и конечных фрагментов кристалла: **точечные группы**

система  
Шёнфлиса

система  
Германа-Могена



# Симметрия кристаллов и бесконечных «структурных мотивов»: **пространственные группы**



## **Артур Шёнфлис (Arthur Shönflies), 1853 – 1928**

Немецкий математик, ученик Вейерштрасса и Клейна, работал в областях кинематики, геометрии, топологии, кристаллографии. В 1888-1891, параллельно с Е.С.Федоровым, вывел 230 пространственных групп. Символы кристаллографических классов «по Шёнфлису» стали основной системой обозначения точечных групп в физике, химии и спектроскопии



Charles MAUGUIN  
1878 - 1958

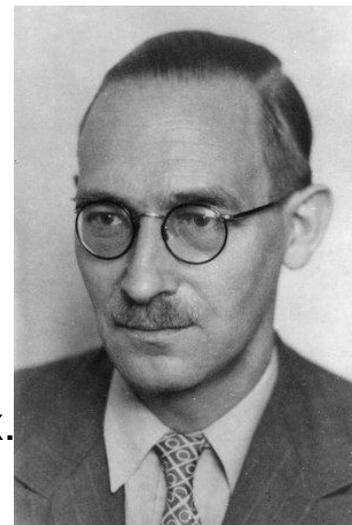
**C.-V. Mauguin**

## **Шарль Моген (Charles Mauguin), 1878–1958**

Французский кристаллограф и минералог, изучал слюды, жидкие кристаллы, один из основателей **IUCr**. В 1931 г. предложил систему обозначения групп, основанную на символах их элементов симметрии.

## **Карл Герман (Carl Hermann), 1898–1961**

Немецкий кристаллограф, составитель первого «банка» рентгеноструктурных данных. Соавтор современной кристаллографической системы обозначений групп и элементов симметрии



**C. Hermann**

Чем различаются системы Шенфлиса и Германа-Могена (международная)?

# Международные кристаллографические обозначения операций и групп симметрии: **система Германа – Могена**

1. Другие обозначения операций симметрии.
2. Другой геометрический образ для операции несобственного вращения:  
по Шёнфлису – зеркальный поворот,  
по Герману-Могену – поворот с инверсией.
3. Символы групп – из символов операций, «привязанных» к системе координат

# Собственные вращения (повороты на $360^\circ/n$ )

по Шёнфлису ( $n=N$ )  $C_n$ :  $C_1=e$   $C_2$   $C_3$   $C_4$   $C_5$   $C_6 \dots$   $C_\infty$

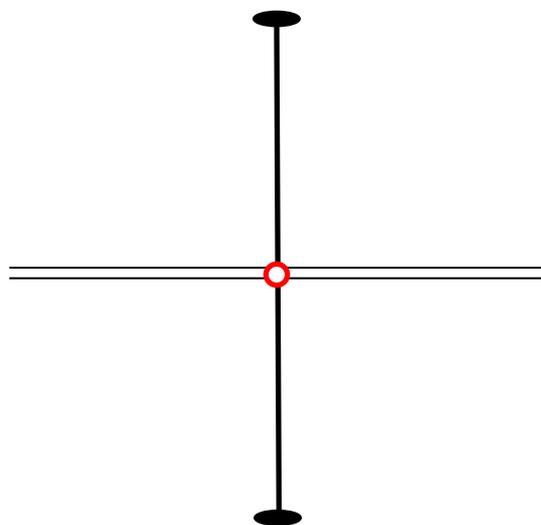
по Герману-Могену  $N$  : 1 2 3 4 5 6 ...  $\infty$



и так далее

Для несобственных вращений всё сложнее

Порядки зеркально-поворотной оси (по Шёнфлису)  
и инверсионной оси (по Герману – Могену)  
**для одного и того же несобственного вращения  
могут различаться**



$$C_2 \sigma = i$$

$$S_n \leftrightarrow \bar{N} : \left\{ \begin{array}{l} \text{если } n=4k, \text{ то } N=n, \\ \text{если } n=4k+2, \text{ то } N=n/2 \\ \text{если } n=2k+1, \text{ то } N=2n \end{array} \right.$$

# Несобственные вращения на $360^\circ/n$

по Герману-Могену  $\bar{N}$ :  $\bar{1}$   ~~$\bar{2}$~~   $\bar{3}$   $\bar{4}$   $\bar{5}$   $\bar{6}$   $\bar{7}$   $\bar{8}$  ...  $\infty$

$m$ :  $\left| \begin{array}{l} (\perp) \\ \square \end{array} \right. \begin{array}{l} (\parallel) \\ \circ \end{array} \quad \begin{array}{c} \triangle \\ \blacktriangle$

по Шёнфлису  $S_n$ , но

$S_2=i$        $S_6$        $S_4$        $S_{10}$        $S_8...$

$S_1=\sigma$        $S_3$        $S_{14}$       ... }  $S_\infty$

...

Поворот с инверсией ( $\bar{N}$ ) и зеркальный поворот ( $S_n$ ):  
**разные обозначения одной и той же операции**  
**(несобственного вращения)**

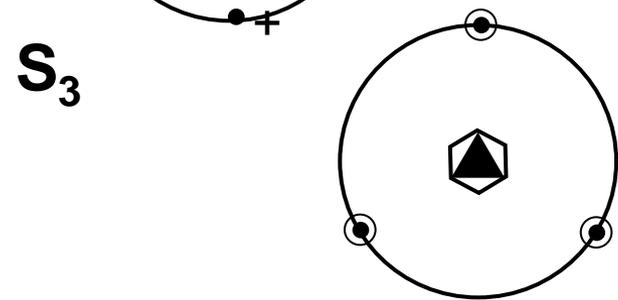
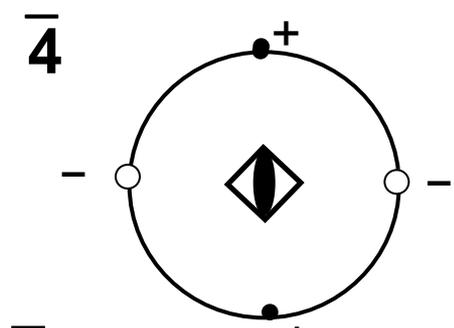
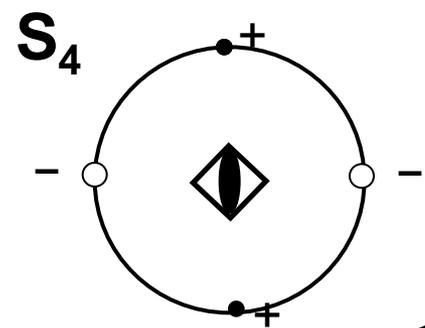
$N=4k$ :  $n=N$   
 нет ни  $m$ ,  
 ни  $\bar{1}$

$N=4k+2$ :  
 $n=N/2$   
**есть  $m$**

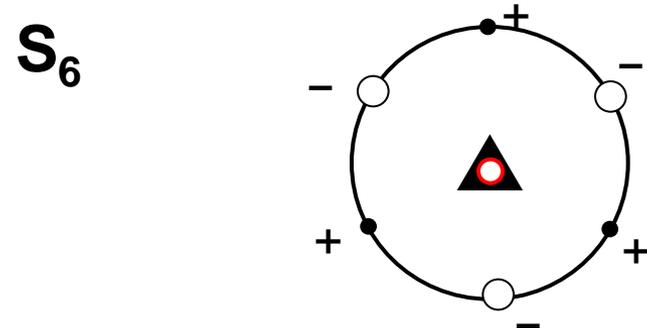
$N=2k+1$ :  
 $n=2N$   
**есть  $\bar{1}$**

по Шёнфлису

по Герману-Могену



$\bar{6}=3/m$   
 вершины  
 призмы



$\bar{3}: 3$  и  $\bar{1}$   
 вершины  
 антипризмы

Какие элементы симметрии содержит ось  $\bar{N}$  ?

$N=2k+1$ : поворотная ось  $N$  + центр  $\bar{1}$  (  $\bar{3}$ ,  $\bar{5}$ ,  $\bar{7}$ , ... )

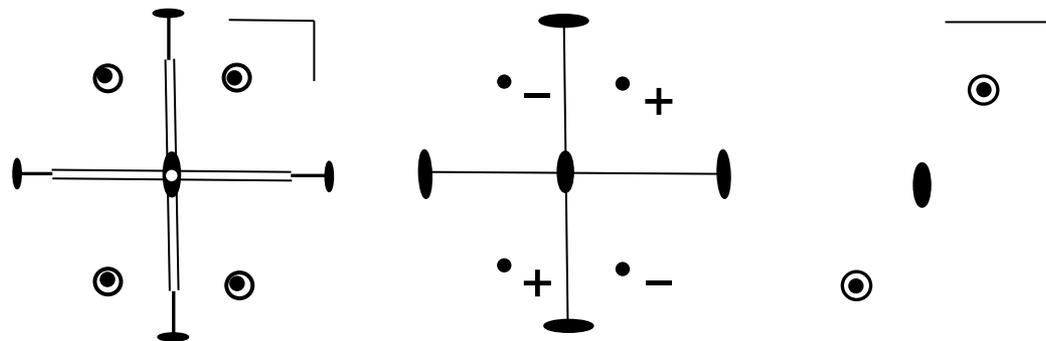
$N=4k+2$ : поворотная ось  $N/2$  + перпендикулярная плоскость  $m$  (  $\bar{6}=3/m$ , и т.д.)

$N=4k$ : ТОЛЬКО поворотная ось  $N/2$ ;  
плоскости  $m$  и центра  $\bar{1}$  **НЕТ** (  $\bar{4}$ ,  $\bar{8}$  и т.д.)

# Обозначения точечных групп по Герману-Могену. Низшая категория

$\underbrace{2/m}_x \underbrace{2/m}_y \underbrace{2/m}_z = mmm$      $1$      $1$      $2/m=2/m$      $mm2$      $222$      $m$      $2$      $\bar{1}$     **1**    по Г. – М.  
 $D_{2h}$      $C_{2h}$      $C_{2v}$      $D_2$      $C_s$      $C_2$      $C_i$      **$C_1$**     по Ш.

В каждом направлении:  
 1, 2,  $1/m (= \bar{2})$  или  $2/m$   
 (полный символ группы)



**mmm**

**222**

**2/m**

Система точек, связанных операциями симметрии группы: орбита

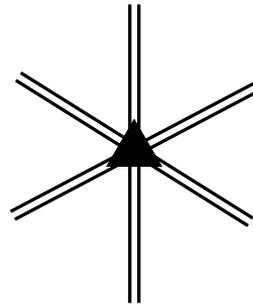
«1» не записывают;  
 вместо « $1/m$ » пишут « $m$ »;  
 $m$  «старше» 2  
 (краткий символ группы)

« $\bar{1}$ » записывают только для группы  $\bar{1} (=C_i)$ , хотя инверсия есть во всех группах с нечетной  $\bar{N}$  или с  $N/m$  при четной  $N$

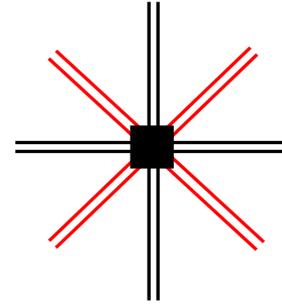
# Обозначения точечных групп по Герману-Могену. Средняя категория

z x(y)

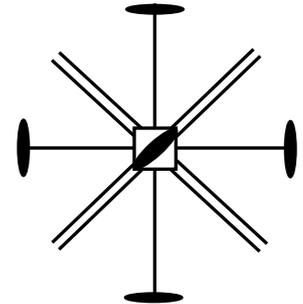
диагональный элемент (если есть)



$3m (C_{3v})$



$4mm (C_{4v})$



$\bar{4}2m (D_{2d})$

Например:

семейства групп

по Шёнфлису

$C_n$

$S_{2n}$

$C_{nh}$

$C_{nv}$

$D_n$

$D_{nd}$

$D_{nh}$

по Герману-Могену  
( $N=n$ )

	—					—	
$n=2k$	$N$	$2N$	$N/m$	$Nmm$	$N22$	$2N 2m$	$N/mmm$
	—	—				—	—
$n=2k+1$	$N$	$N$	$2N(=N/m)$	$Nm$	$N2$	$\bar{N}m$	$2N m2$

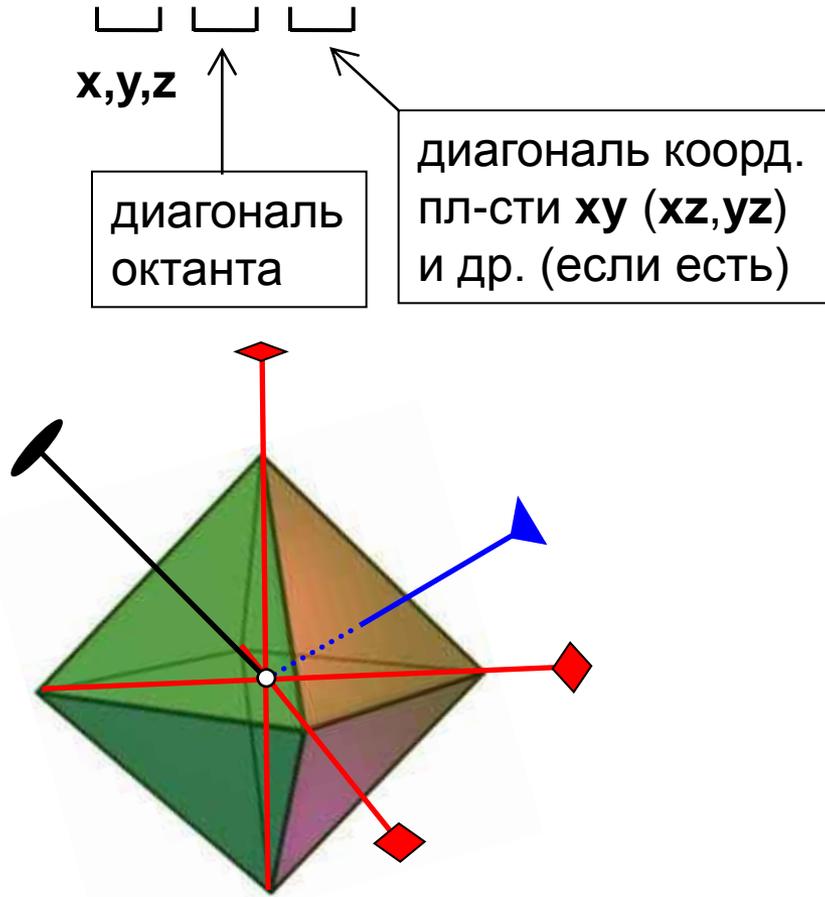
## Семейства точечных групп средней категории симметрии в обозначениях по Шенфлису и по Герману-Могену

Символ группы по Шенфлису	n	Символ по Герману-Могену	примеры
$C_n$	все	N	$C_2=2, C_3=3, C_4=4, \dots, C_\infty=\infty$
$S_n$	n=4k	$\bar{N}$	$S_4 = \bar{4}, S_8 = \bar{8}, \dots, S_\infty = \bar{\infty}$
	n=4k+2	$(\bar{N}/2)$	$S_6 = \bar{3}, S_{10} = \bar{5}, \dots, S_\infty = \bar{\infty}$
$C_{nh}$	n=2k+1	$(N/m)=(\bar{2N})$	$C_{3h}=6, \dots, C_{\infty h}=S_\infty = \bar{\infty}$
	n=2k	N/m	$C_{2h}=2/m, C_{4h}=4/m, \dots, C_{\infty h} = \bar{\infty}$
$C_{nv}$	n=2k+1	Nm	$C_{3v}=3m, C_{5v}=5m, \dots, C_{\infty v}=\infty m$
	n=2k	Nmm	$C_{2v}=mm2, C_{4v}=4mm, C_{6v}=6mm, \dots, C_{\infty v}=\infty m$
$D_n$	n=2k+1	N2	$D_3=32, D_5=52, \dots, D_\infty=\infty 2$
	n=2k	N22	$D_2=222, D_4=422, \dots, D_\infty=\infty 2$
$D_{nd}$	n=2k+1	$\bar{N}m$	$D_{3d} = \bar{3}m, D_{5d} = \bar{5}m, \dots$
	n=2k	$(\bar{2N})2m$	$D_{2d} = \bar{4}2m, D_{4d} = \bar{8}2m, \dots$
$D_{nh}$	n=2k+1	$(\bar{2N})m2$	$D_{3h} = \bar{6}m2, D_{5h} = \bar{10}m2, \dots$
	n=2k	N/mmm	$D_{4h}=4/mmm, D_{6h}=6/mmm, \dots$

Примечание:  $D_{nd}, D_{nh} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty/m m$

# Точечные группы по Герману-Могену.

## Высшая категория



Герман-  
Моген

Шёнфлис

2 3

$T$

$m \bar{3}$

$T_h$

$\bar{4} 3 m$

$T_d$

4 3 2

$O$

$m \bar{3} m$

$O_h$

2 3 5

$I$

$m \bar{3} \bar{5}$

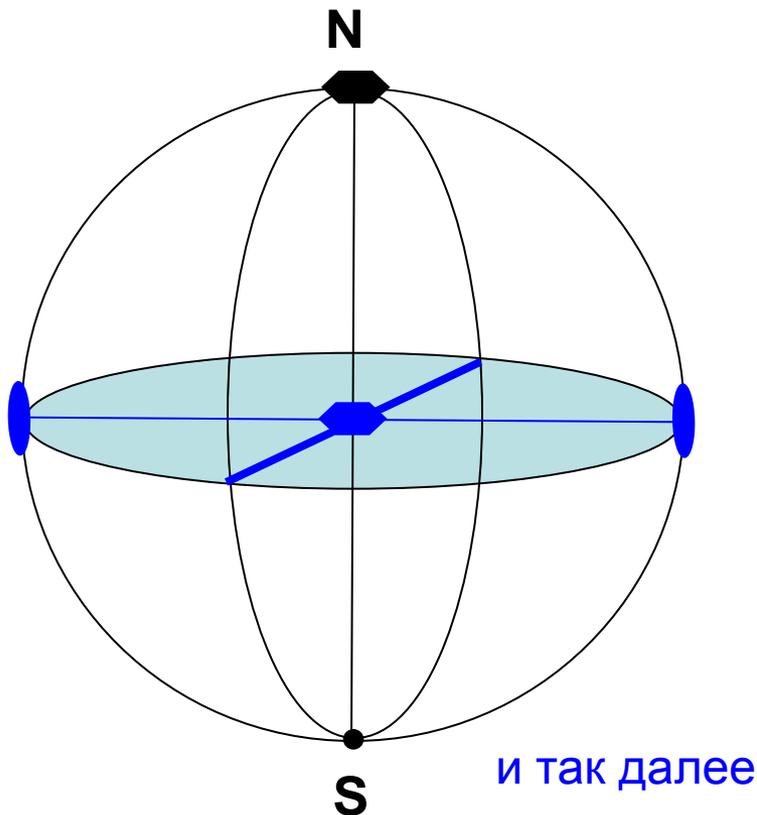
$I_h$

октаэдр  $4/m \bar{3} 2/m = m \bar{3} m$

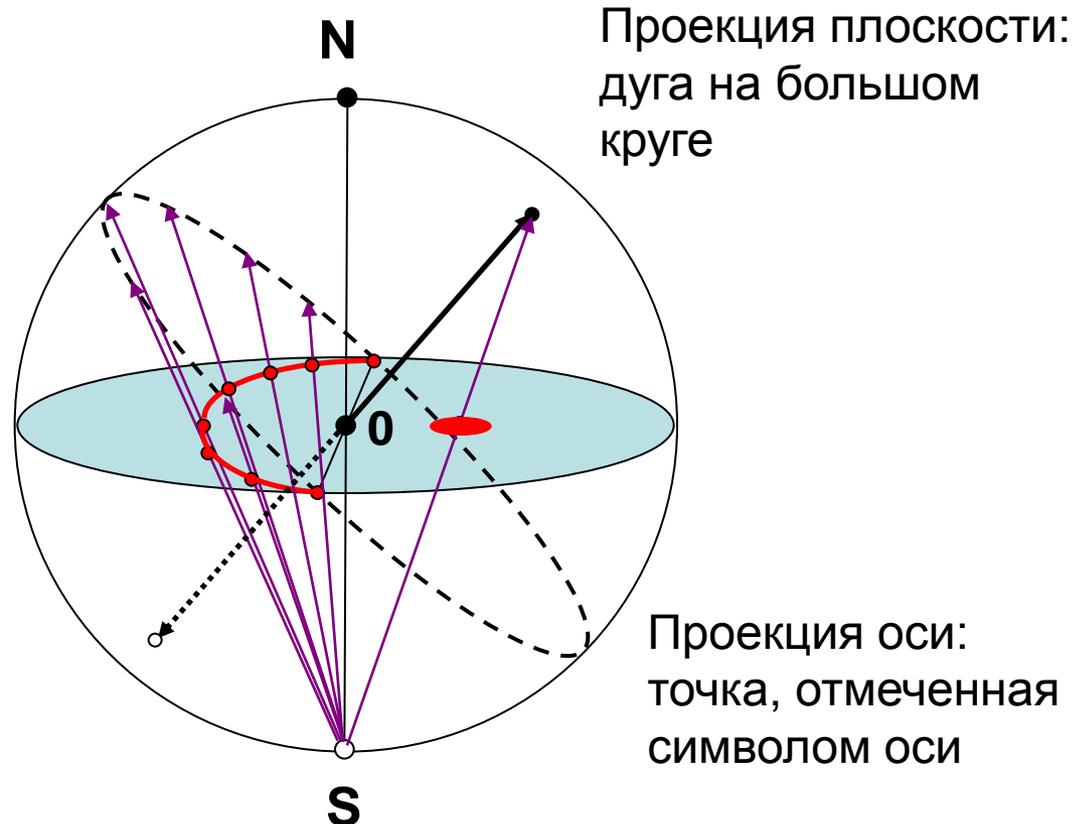
# Стереографическая проекция

Проекция пересечений плоскостей и осей с «северной» полусферой на «экваториальный» большой круг

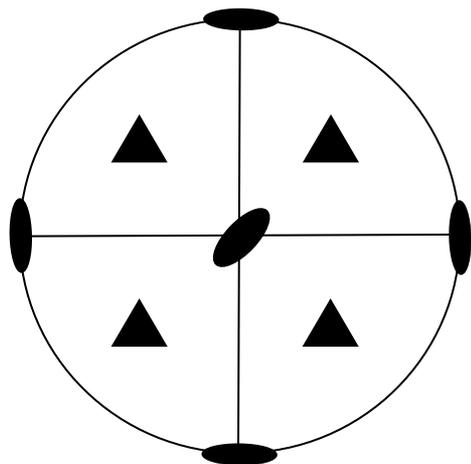
Прямая проекция



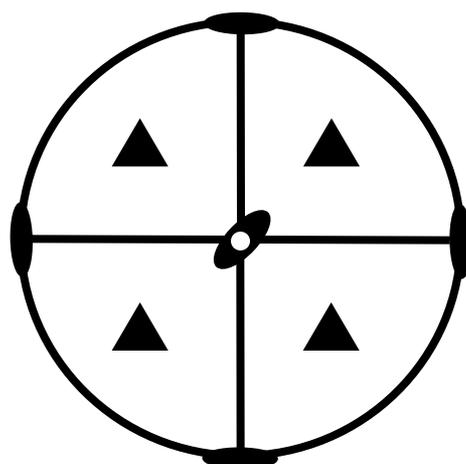
Наклонные элементы



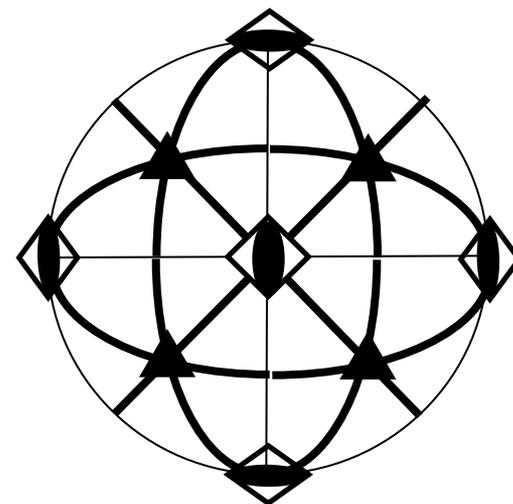
Семейство тетраэдра:  $T$  ( $23$ ),  $T_h$  ( $m \bar{3}$ ),  $T_d$  ( $\bar{4}3m$ )



группа  $23$



группа  $2/m \bar{3} 1 = m \bar{3}$

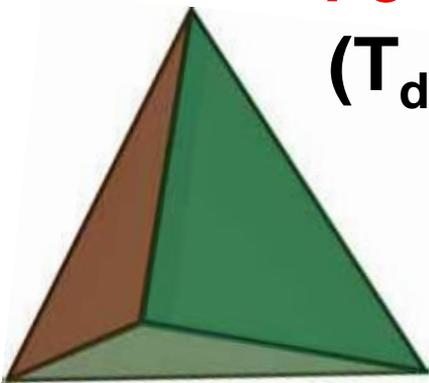


группа  $\bar{4}3m$

# Точечные группы правильных многогранников

$\bar{4} 3 m$

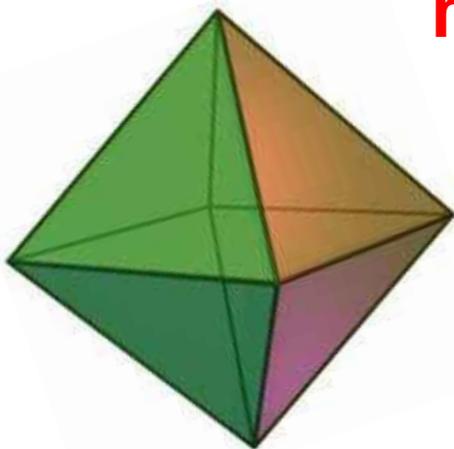
$(T_d)$



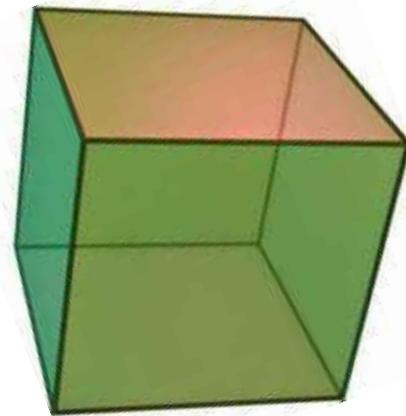
тетраэдр

$m \bar{3} m$

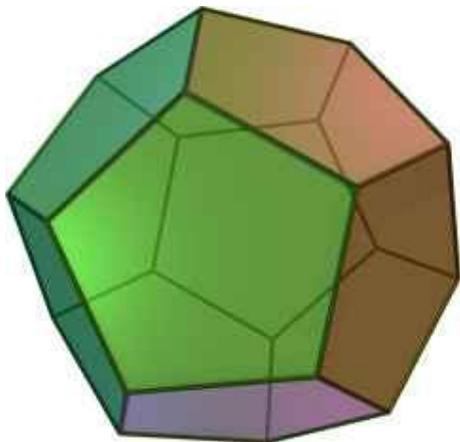
$(O_h)$



октаэдр



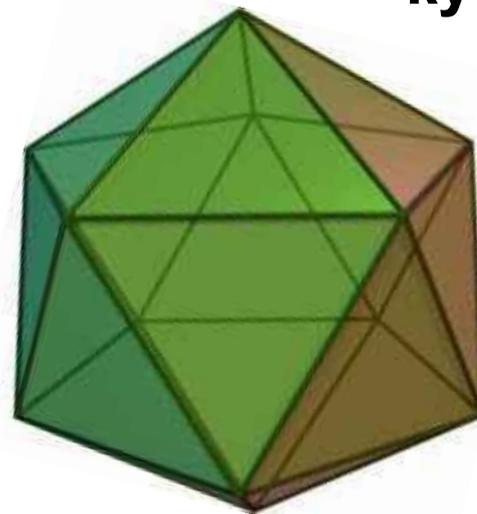
куб



пентагон-додекаэдр

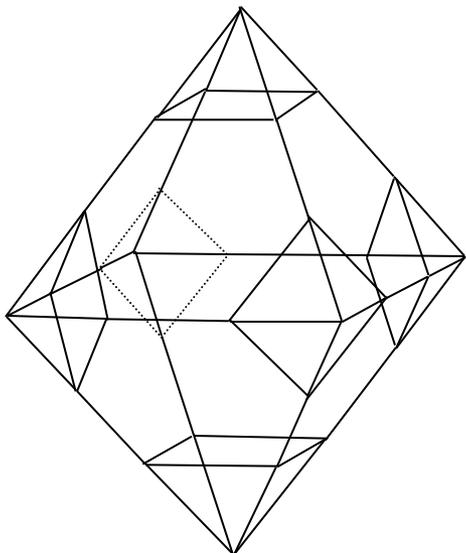
$m \bar{3} \bar{5}$

$(I_h)$

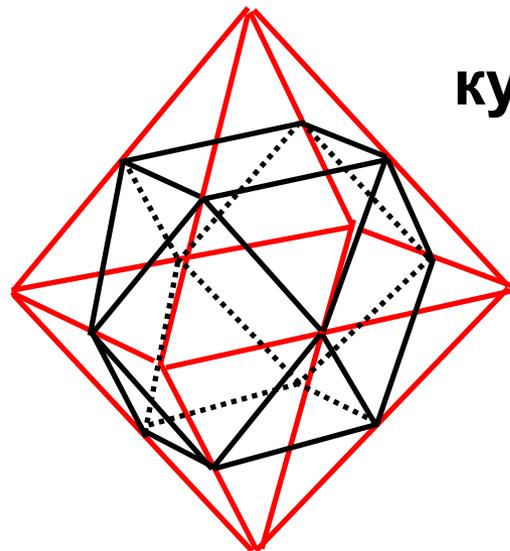


икосаэдр

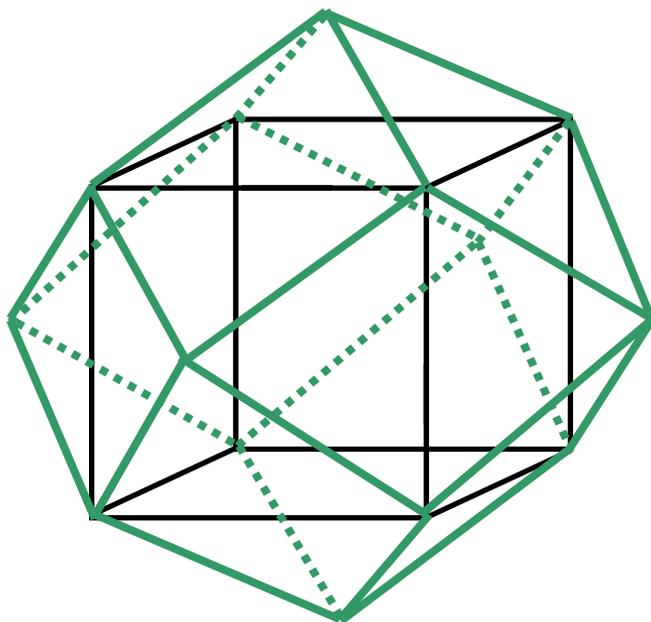
# Важные полиэдры симметрии $m \bar{3} m$ ( $O_h$ )



усеченный  
октаэдр



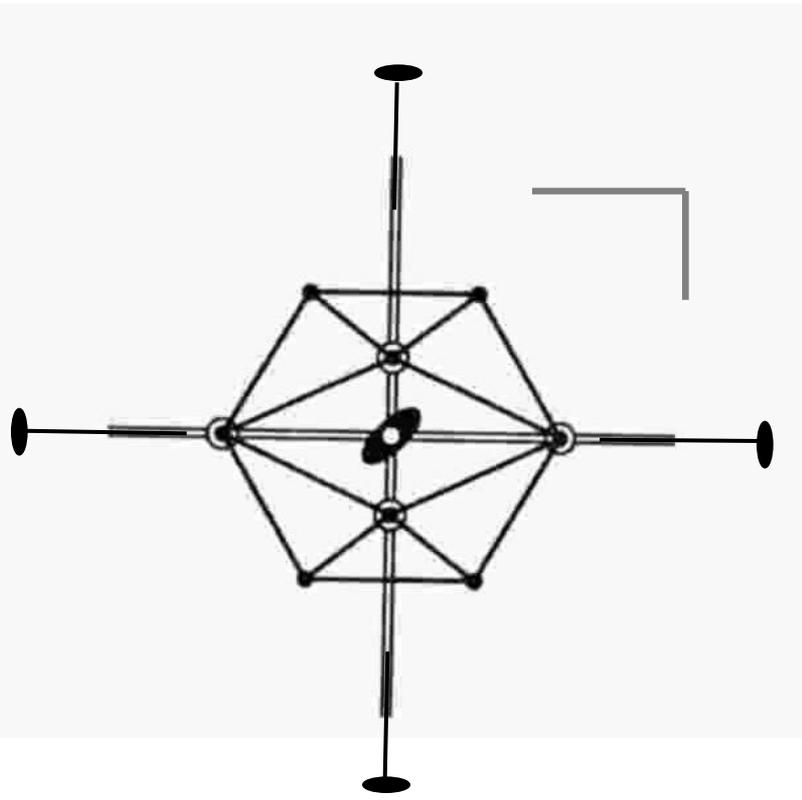
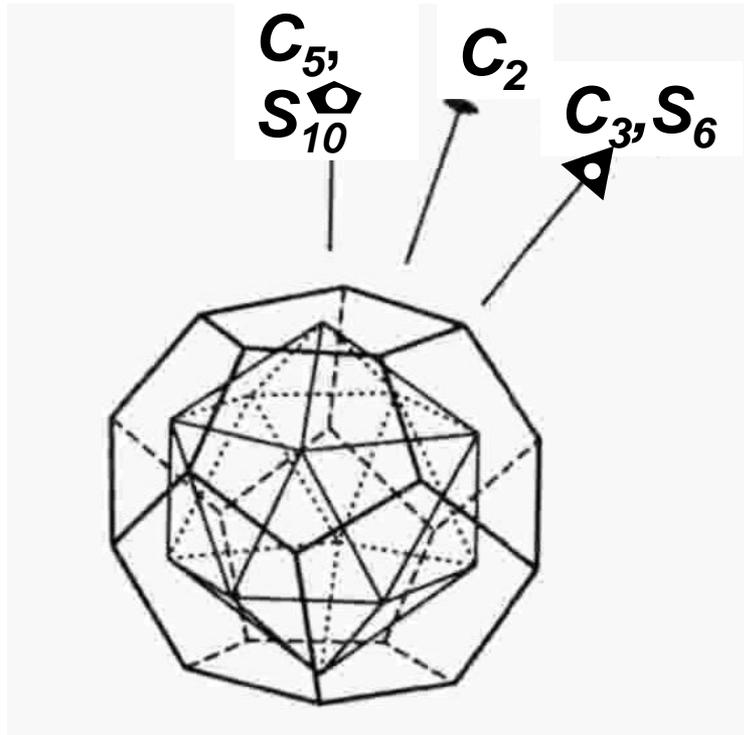
кубооктаэдр



куб с 6 «шапками»

ромбододекаэдр

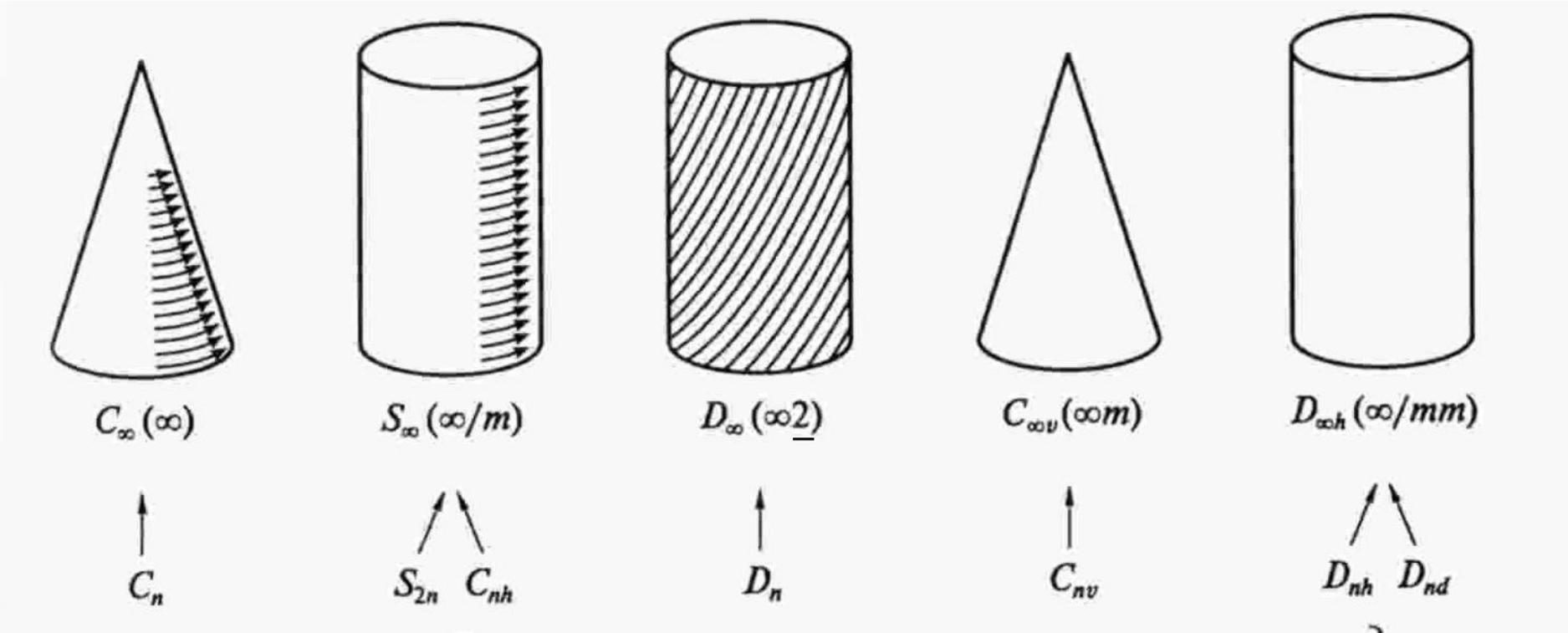
# Элементы симметрии группы $m \bar{3} \bar{5} (I_h)$



Группа поворотов:  $I = 2 3 5$   
 Группа симметрии  $I_h = 2/m \bar{3} \bar{5}$   
 $= m \bar{3} \bar{5}$

координатные оси  $C_2^{(x,y,z)}$

# Обозначение групп Кюри по международной системе



**N**       **$\bar{N}$**     **N/m**      **N2**      **Nm**       **$\bar{N}m2$**      **$\bar{N}m$**   
**N22**      **Nmm**      **N/mmm**     **$\bar{N}2m$**

**K:**  $\infty\infty$ ;    **K<sub>h</sub>:**  $\infty/m \infty$



Лаборатория кристаллохимии  
**обновленный сайт:**  
<http://www.chem.msu.ru/rus/lab/phys/crychem/welcome.html>



Заведующий лабораторией - доктор химических наук, профессор  
Словохотов Юрий Леонидович  
Телефон: (495)-939-54-34  
e-mail: [slov@phys.chem.msu.ru](mailto:slov@phys.chem.msu.ru),  
[cryst@phys.chem.msu.ru](mailto:cryst@phys.chem.msu.ru)

- [Учебные материалы](#)
- [Полезные ссылки](#)

Сотрудники лаборатории

Основные направления научных исследований

- Исследование строения кристаллов органических и координационных соединений
- Теоретическая неорганическая кристаллохимия
- Структурные исследования частично упорядоченных соединений и материалов
- Комплексное изучение межчастичных взаимодействий в жидких системах
- История химии

Предлагаемые темы работ для студентов и аспирантов

Экспериментальные исследования

- Кристаллическая структура некоторых антагонистов  $\text{Ca}^{2+}$  и анальгетиков
- Исследование строения наночастиц металлов методами рентгеновской дифракции, малоуглового рентгеновского рассеяния и XAFS-спектроскопии на синхротронном излучении
- Микрогетерогенность в растворах хлорсодержащих веществ
- Объемные и вискозиметрические исследования жидкофазных систем, включая растворы лекарственных препаратов
- Взаимосвязь физических и кристаллографических свойств манганитов редкоземельных металлов – материалов для спинтроники

Теоретические исследования

- Симметричный анализ основных структурных типов неорганических соединений
- Статистический анализ строения и химических превращений органических и металлоорганических соединений по Кембриджскому банку структурных данных
- Связь симметрии и топологии межмолекулярных взаимодействий с физическими характеристиками молекулярных конденсированных фаз



## Учебные материалы по курсу кристаллохимии

### Лекции по кристаллохимии

Профессор Юрий Леонидович Словохотов

- [Программа курса](#)
- [Лекция 1](#)

**здесь будут все лекции в pdf  
разработки и пособия по курсу**

- [Методическое пособие, часть 1 \(Словохотов Ю.Л.\)](#)
- [Методическое пособие, часть 2 \(Словохотов Ю.Л.\)](#)
- [Рентгеновская дифракция \(Богдан Т.В.\)](#)

### Вест А. "Химия твердого тела. Теория и приложения"

- Глава 5. "Дифракция рентгеновских лучей" [pdf](#)
- Глава 6. "Точечные группы, пространственные группы, кристаллическая структура" [pdf](#)
- Глава 7. "Описательная кристаллохимия" [pdf](#)
- Глава 8. "Некоторые факторы, влияющие на структуру кристаллов" (отрывки) [pdf](#)
- Глава 13. "Типичные ионные кристаллы" (отрывки) [pdf](#)
- Глава 16. "Примеры магнитных материалов". 16.3.3. "Шпинели" [pdf](#)

### Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений

- Главы 9-25 [djvu](#)

### Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений

- Глава 1. "Основные понятия и элементы структурной кристаллографии" [pdf](#)
- Глава 2. "Дифракция рентгеновских лучей в кристалле" [pdf](#)
- Глава 3. "Первый этап анализа структуры. Определение параметров решетки и симметрии кристалла" [pdf](#)
- Глава 4. "Основные понятия и элементы структурной кристаллографии" [pdf](#)
- Глава 5. "Сравнительные возможности и перспективы дифракционных методов исследования. Задачи рентгеноструктурного анализа в химии" [pdf](#)

### Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии

- [Содержание и полный текст книги](#)



## Химический факультет МГУ

Лаборатория кристаллохимии

### Полезные ссылки

- [Международный союз кристаллографов \(учебные материалы\)](#)
- [Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий](#)
- [Кембриджский банк структурных данных](#)
- [Банк кристаллических структур неорганических соединений](#)
- [Банк белковых структур](#)
- [Старый сайт](#)
- [Сайт Гриневой О.В.](#)

**сайты Международного союза кристаллографов, Курчатовского центра СИ, банков структурных данных**

### Полезные приложения

- [Diamond](#) (demo-версия, Windows)
- [Mercury](#) (академическая версия, Windows/Linux/Max OS X)
- [Olex2](#) (BSD лицензия, требуется регистрация, Windows/Linux/Max OS X)

**программы визуализации структур, программы для РФА и РСА**



### Поиск по серверу

Сервер создается при поддержке [Российского фонда фундаментальных исследований](#)  
**Не разрешается** копирование материалов и размещение на других Web-сайтах  
Вебдизайн: Copyright (C) [И. Минайлова](#) и [В. Минайлов](#)  
Copyright (C) [Химический факультет МГУ](#)  
[Написать письмо редактору](#)

**Здесь будут текстовые файлы с кристаллическими структурами по курсу кристаллохимии**

**IUCr Journals**

SUBMIT TO IUCrJ

IUCrData

## Welcome to the **из раздела «Полезные ссылки»** International Union of Crystallography

The IUCr is an International Scientific Union. Its objectives are to promote international cooperation in crystallography and to contribute to all aspects of crystallography, to promote international publication of crystallographic research, to facilitate standardization of methods, units, nomenclatures and symbols, and to form a focus for the relations of crystallography to other sciences.

### press release



### The birth of IUCrData: a new era in data publication

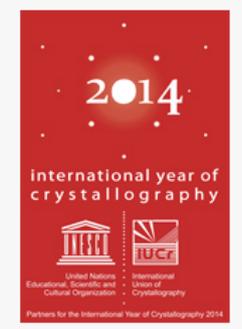
The International Union of Crystallography is delighted to announce the launch of a new open-access data publication, *IUCrData*. This innovative publication aims to provide short descriptions of crystallographic datasets and datasets from related scientific disciplines, as well as facilitating access to the data.

The first phase of this venture enables authors rapidly to publish brief, peer-reviewed *Data Reports* on individual crystal structures, making them readily available to the scientific community.

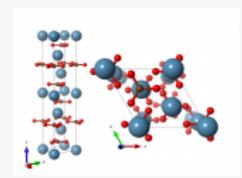
A global team of 25 editors forms the editorial board of *IUCrData*, bringing a wealth of experience and enthusiasm to the new data publication.

*Data Reports* in *IUCrData* include the following components:

- a short abstract
- an interactive 3D structure representation
- a structure description section
- a structure description section



### Structure of the day



Seeing Double – Caloite

Log in to your entry in the World Directory:

IUCr ID\*

Password\*

Login

If you have forgotten your password [click here](#)