

Uniwersytet Śląski – Instytut Chemii – Zakład Krystalografii  
Laboratorium z Krystalografii

Międzynarodowe Tablice Krystalograficzne

*(International Tables for Crystallography)*

2 godz.

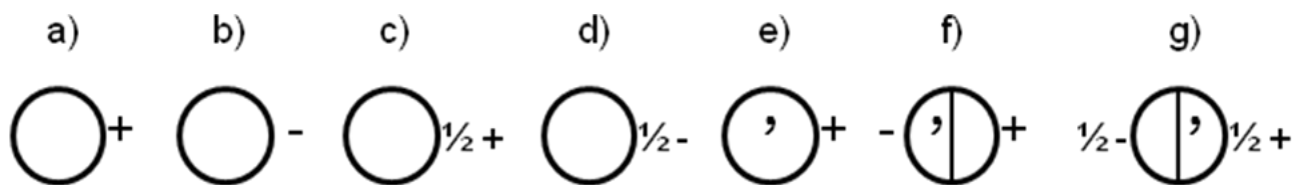
**Cel ćwiczenia:** analiza informacji zawartych w Międzynarodowych Tablicach Krystalograficznych, nabycie umiejętności odczytywania podstawowych danych charakterystycznych dla danej grupy przestrzennej.

**Pomoce naukowe:** Międzynarodowe Tablice Krystalograficzne

Wstęp teoretyczny.

Międzynarodowe Tablice Krystalograficzne zawierają dokładną charakterystykę 230 grup przestrzennych. Prezentują symetrię grup przestrzennych i współrzędne pozycji równoważnych. O czym informują:

- w pierwszej linii prezentują nazwę układu, skrócony symbol międzynarodowy klasy krystalograficznej, pełny i skrócony symbol międzynarodowy grupy przestrzennej, jej numer wśród 230 grup oraz symbol Schoenfliesa.
- następnie tablice podają rzut komórki elementarnej z zaznaczonymi punktami symetrycznie równoważnymi dla zespołu pozycji ogólnych. Komórka jest wykreślana w rzucie wzdłuż osi Z na płaszczyznę (001). Osie krystalograficzne X i Y leżą w płaszczyźnie rzutu, oś X jest skierowana w dół rysunku, oś Y skierowana od lewej strony do prawej (kąt między osiami zależy od układu krystalograficznego).
- elementy symetrii na takich rzutach oznacza się standardowymi symbolami graficznymi, a punkty w zespołach pozycji – kółkami, na poniższym rysunku przedstawiono symbole pozycji punktu.



- a) pkt. nad płaszczyznę rzutu, dla którego  $z \neq 0$
- b) pkt. pod płaszczyznę rzutu, dla którego  $z \neq 0$
- c) pkt. nad płaszczyznę rzutu, dla którego  $z = 1/2 + z$
- d) pkt. pod płaszczyznę rzutu, dla którego  $z = 1/2 - z$
- e) pkt., który powstał w wyniku odbicia w płaszczyźnie lub środku symetrii
- f i g) dwa punkty znajdujące się jeden nad drugim, z których jeden powstał w wyniku odbicia w płaszczyźnie lub środku symetrii (znaczenia + i – oraz  $1/2+$  i  $1/2-$  jak wyżej).

- każda grupa przestrzenna ma umownie przedstawiony początek układu (powinien znajdować się na elemencie symetrii o najwyższej krotności),
- w tablicach podaje się dla każdej grupy przestrzennej zespół pozycji ogólnych i szczególnych punktów równoważnych.

Każdy punkt w komórce elementarnej, który przedstawia położenie atomu (jonu), przekształcony symetrycznie względem występujących w komórce elementów symetrii – daje zbiór punktów spokrewnionych symetrycznie tzw. punktów lub pozycji równoważnych.

Liczebność punktów symetrycznie równoważnych, zależy od:

- elementów symetrii, charakterystycznych dla grup przestrzennych,
- umiejscowienia punktu, który poddajemy przekształceniom symetrycznym.

Punkty mogą zajmować pozycje ogólne i szczególne (specjalne).

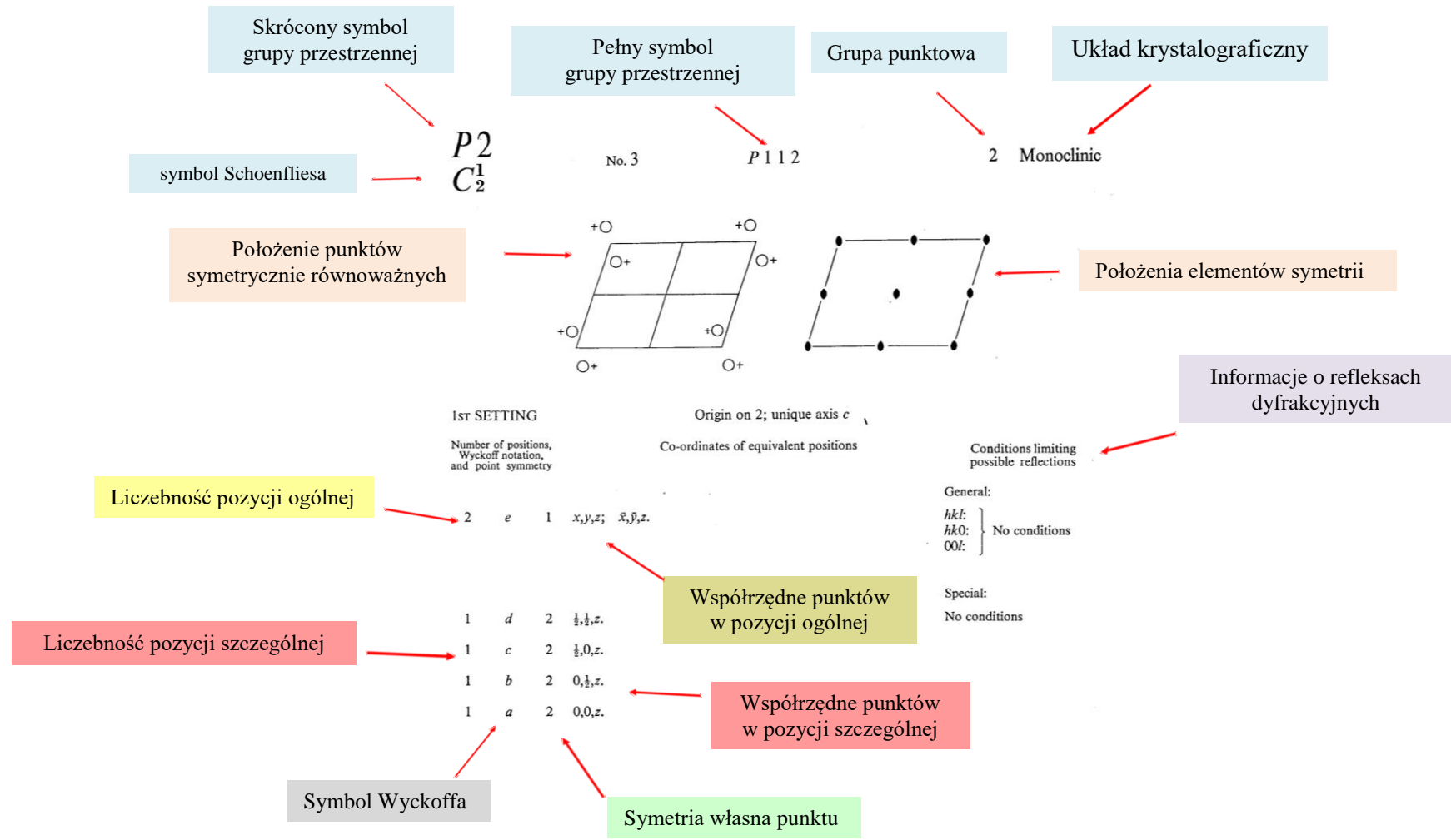
**Pozycję ogólną** posiadają punkty o współrzędnych  $x, y, z$  (wyrażone ułamkami odcinków translacji wzdłuż krawędzi komórki) nie leżące na żadnym z elementów symetrii. Na punkty w położeniu ogólnym działają wszystkie przekształcenia symetryczne zapisane w symbolu grupy przestrzennej.

Jeśli punkt leży na płaszczyźnie, w środku symetrii na osi właściwej lub inwersyjnej to ma **pozycję szczególną** (jest w położeniu specjalnym) i nie jest przez ten element powielany. Jeśli punkt leży na osiach śrubowych lub na płaszczyznach poślizgu to działa na niego wektor ślizgu - jest wówczas symetrycznie powielony.

- przyjmuje się, że punkt w pozycji ogólnej jest asymetryczny (symetria 1), natomiast punkty w pozycjach szczególnych wykazują symetrię tych pozycji.

W *Tablicach Krystalograficznych* podaje się:

- **liczebność pozycji** ogólnej i pozycji szczególnej,
- **symbol Wyckoffa** (mała litera alfabetu) charakteryzuje pozycje punktu początkowego,
- **symetrię własną punktu** (położenie punktu w stosunku do elementów symetrii).
- **współrzędne punktów** symetrycznie równoważnych.



## Wykonanie ćwiczenia:

### Zadanie 1

Korzystając z *Międzynarodowych Tablic Krystalograficznych* podać dla podanych poniżej grup przestrzennych następujące dane:

- nazwę układu;
- symbol międzynarodowy klasy krystalograficznej;
- pełny i skrócony symbol międzynarodowy grupy przestrzennej;
- symbol Schoenfliesa;
- liczebność pozycji ogólnej i współrzędne punktów symetrycznie równoważnych;
- liczebność pozycji szczególnej dla punktu o danej symetrii własnej;
- symbol Wyckoffa dla pozycji punktu początkowego i pozycji ogólnej;
- symetrię własną punktu dla danej pozycji szczególnej.

### Wybrane grupy przestrzenne:

P121, P222, P4, P4<sub>1</sub>, P $\frac{4}{m}$ , P6, P6<sub>3</sub>, Pm3m.

### Zadanie 2

Dla kilku wybranych grup przestrzennych przedstawiono poniżej rozmieszczenie elementów symetrii. Przedstaw zespół ogólnych pozycji równoważnych (we wszystkich przypadkach uwzględnij komórkę typu P) oraz podaj współrzędne punktów równoważnych w pozycjach ogólnych. Wskaż wtórne elementy symetrii.

Rozmieszczenie elementów symetrii	Zespół ogólnych pozycji równoważnych

### Zadanie 3

Dla kilku wybranych grup przestrzennych przedstawiono poniżej rozmieszczenie elementów symetrii oraz odpowiadający mu zespół ogólnych pozycji równoważnych. Podaj symbole przedstawionych grup przestrzennych. Wskaż wtórne elementy symetrii.

Rozmieszczenie elementów symetrii	Zespół ogólnych pozycji równoważnych

### Zadanie 4

Dla grup przestrzennych  $P4_2/m$ ,  $P6_3$ ,  $P6_2$  i  $P6_3/m$  podać współrzędne pozycji symetrycznie równoważnych dla szczególnej pozycji punktu wyjściowego  $0,0,z$ .

### Literatura

1. Z.Trzaska-Durski, H.Trzaska-Durska, "Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej", PWN Warszawa 1994.
2. Z. Trzaska-Durski i H. Trzaska-Durska „Podstawy krystalografii”, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2003.
3. Z.Bojarski, M.Gigła, K.Stróż, M.Surowiec, „Materiały do nauki krystalografii – podręcznik wspomagany komputerowo” PWN Warszawa 1996.
4. Z. Bojarski, M. Gigła, K. Stróż, M. Surowiec, „Krystalografia”, PWN, Warszawa 2007.
5. Z. Kosturkiewicz, „Metody krystalografii”, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2004.
6. M. Van Meerssche i J. Feneau-Dupont, „Krystalografia i chemia strukturalna“, PWN, Warszawa 1984.