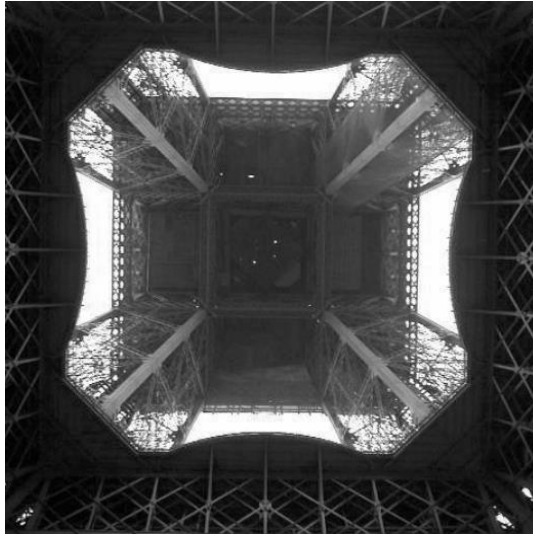


## Ομάδες Συμμετρίας Σημείου



Ένα αντικείμενο λέμε ότι είναι αναλλοίωτο σε μία διεργασία συμμετρίας αν με τη δράση αυτής της διεργασίας το αντικείμενο αυτό απεικονίζεται στον εαυτό του

Οι μετασχηματισμοί που αφήνουν αναλλοίωτες τις αποστάσεις και συνεπώς και τις γωνίες, ονομάζονται **ισομετρίες**

Μία **ισομετρία** είναι μια απεικόνιση  $f$ , 1-1 και επί του διανυσματικού χώρου  $V$  πάνω στον εαυτό του

• Γραμμική ισομετρία:

Ορισμός: μία ισομετρία  $f$  είναι γραμμική ισομετρία αν για κάθε  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{t}$  που ανήκουν στον  $V$  και κάθε  $x$  που ανήκει στο  $R$  ισχύει:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{t}) = f(\mathbf{r}) + f(\mathbf{t}) \text{ και } f(x \mathbf{r}) = x f(\mathbf{r})$$

• Αναπαράσταση των γραμμικών ισομετριών με πίνακες :

Έστω  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  τα ανύσματα βάσης του διανυσματικού χώρου  $V$  και  $f$  μια γραμμική ισομετρία του .

$V \xrightarrow{f} V$  Η απεικόνιση ενός ανύσματος  $\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}$  ,  $f(\mathbf{r}) = \mathbf{r}' \in V$  θα γράφεται:

$$f(\mathbf{r}) = x f(\mathbf{a}) + y f(\mathbf{b}) + z f(\mathbf{c})$$

$$\mathbf{r}' = x' \mathbf{a} + y' \mathbf{b} + z' \mathbf{c}$$

επειδή η  $f$  είναι  $V \xrightarrow{f} V$  , τα  $f(\mathbf{a}), f(\mathbf{b}), f(\mathbf{c})$  είναι ανύσματα του  $V$  και επομένως μπορούν να γραφούν

$$\mathbf{a}' = f(\mathbf{a}) = A_{11} \mathbf{a} + A_{21} \mathbf{b} + A_{31} \mathbf{c}$$

$$\mathbf{b}' = f(\mathbf{b}) = A_{12} \mathbf{a} + A_{22} \mathbf{b} + A_{32} \mathbf{c}$$

$$\mathbf{c}' = f(\mathbf{c}) = A_{13} \mathbf{a} + A_{23} \mathbf{b} + A_{33} \mathbf{c}$$

$$\mathbf{r}' = f(\mathbf{r}) \Rightarrow x' \mathbf{a} + y' \mathbf{b} + z' \mathbf{c} = x (A_{11} \mathbf{a} + A_{21} \mathbf{b} + A_{31} \mathbf{c}) + y (A_{12} \mathbf{a} + A_{22} \mathbf{b} + A_{32} \mathbf{c}) + z (A_{13} \mathbf{a} + A_{23} \mathbf{b} + A_{33} \mathbf{c}) \Rightarrow$$

$$x' \mathbf{a} + y' \mathbf{b} + z' \mathbf{c} = (x A_{11} + y A_{12} + z A_{13}) \mathbf{a} + (x A_{21} + y A_{22} + z A_{23}) \mathbf{b} + (x A_{31} + y A_{32} + z A_{33}) \mathbf{c}$$

Η ισομετρία  $f$  σε μορφή πίνακα:

$$x' = x A_{11} + y A_{12} + z A_{13}$$

$$y' = x A_{21} + y A_{22} + z A_{23}$$

$$z' = x A_{31} + y A_{32} + z A_{33}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Οι δυνατές τιμές της γωνίας  $\alpha$  που είναι συμβιβαστές με τις βάσεις ενός ευθέως πλέγματος:

$\alpha$	$60^\circ$	$90^\circ$	$180^\circ$	$240^\circ$	$270^\circ$	$300^\circ$	$360^\circ$
----------	------------	------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------

Συνδυάζοντας της παραπάνω διεργασίες συμμετρία με τη διεργασία κέντρου συμμετρίας και το επίπεδο κατοπτρισμού δημιουργούνται οι 32 κρυσταλλογραφικές ομάδες συμμετρίας

Θεώρημα: Το σύνολο των ισομετριών που αφήνουν αναλλοίωτο ένα αντικείμενο σχηματίζουν μία Ομάδα Συμμετρίας.

Ορισμός: Κρυσταλλογραφική Ομάδα Συμμετρίας ονομάζεται η ομάδα ισομετριών που αφήνει το ευθύ πλέγμα αναλλοίωτο.

Ορισμός: Κρυσταλλογραφική Ομάδα Συμμετρίας Σημείου (Κ.Ο.Σ.Σ) ονομάζεται η κρυσταλλογραφική ομάδα σημείου που αφήνει αναλλοίωτο ένα σημείο στο χώρο.

ΣΥΣΤΗΜΑ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΤΩΝ ΠΛΕΓΜΑΤΩΝ ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑ	ΣΥΜΒΟΛΑ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	Η ΦΥΣΗ ΤΗΣ ΜΟΝΑΔΙΑΙΑΣ ΚΥΨΕΛΙΔΑΣ ΑΞΟΝΕΣ ΚΑΙ ΓΩΝΙΕΣ	ΜΗΚΗ ΚΑΙ ΓΩΝΙΕΣ ΠΟΥ ΠΡΕΠΕΙ ΝΑ ΟΡΙΣΘΟΥΝ
Τρικλινές	1	<i>P</i>	$a \neq b \neq c$ $a \neq \beta \neq \gamma$	$a, b, c$ $\alpha, \beta, \gamma$
Μονοκλινές	2	<i>P</i> <i>C</i>	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$a, b, c$ $\beta$
Όρθορομβικό	4	<i>P</i> <i>C</i> <i>I</i> <i>F</i>	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a, b, c$
Τετραγωνικό	2	<i>P</i> <i>I</i>	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a, c$
Ρομβοεδρικό (Τριγωνικό)	1	<i>R</i>	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$ $< 120^\circ, \neq 90^\circ$	$a$ $\alpha$
Έξαγωνικό	1	<i>P</i>	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$a, c$
Κυβικό	3	<i>P</i> <i>I</i> <i>F</i>	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a$

## Συμμετρία και κρύσταλλος

### Κρυσταλλογραφικές Ομάδες Συμμετρίας Σημείου

Κρυσταλλικό Σύστημα	Ομάδα Συμμετρίας Σημείου
Τρικλινές	1, -1
Μονοκλινές	2, m, <b>2/m</b>
Ορθορομβικό	222, mm2, <b>mmm</b>
Τετραγωνικό	4, 422, -4, <b>4/m</b> , 4mm, -42m, <b>4/mmm</b>
Τριγωνικό	3, -3, 32, 3m, -3m
Εξαγωνικό	6, -6, 622, <b>6/m</b> , 6mm, -62m, <b>6/mmm</b>
Κυβικό	23, <b>m3</b> , 432, -43m, <b>m3m</b>

Μονοκλινές

$a \neq b \neq c$

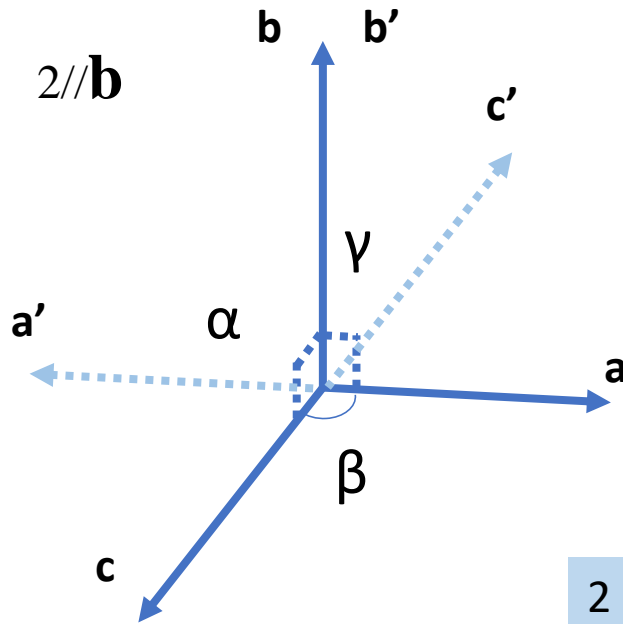
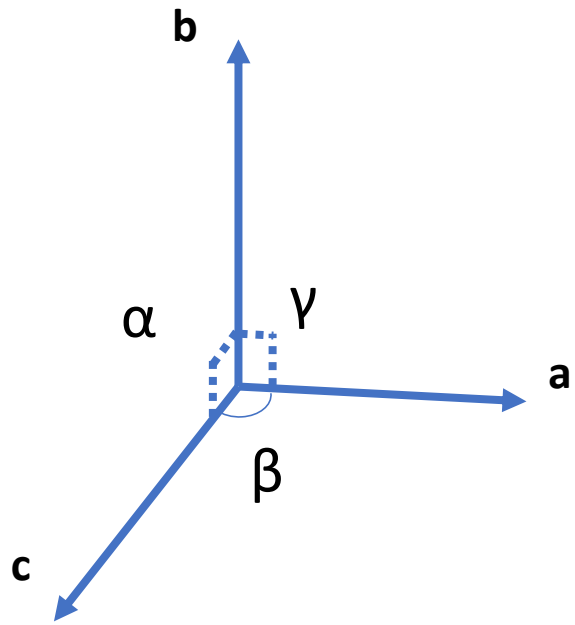
$\alpha = \gamma = 90$

$\beta \neq 90$

2

m

2/m



$a' = f(a) = -a$

$b' = f(b) = b$

$c' = f(c) = -c$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

2

1, 2

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Μονοκλινές

$a \neq b \neq c$

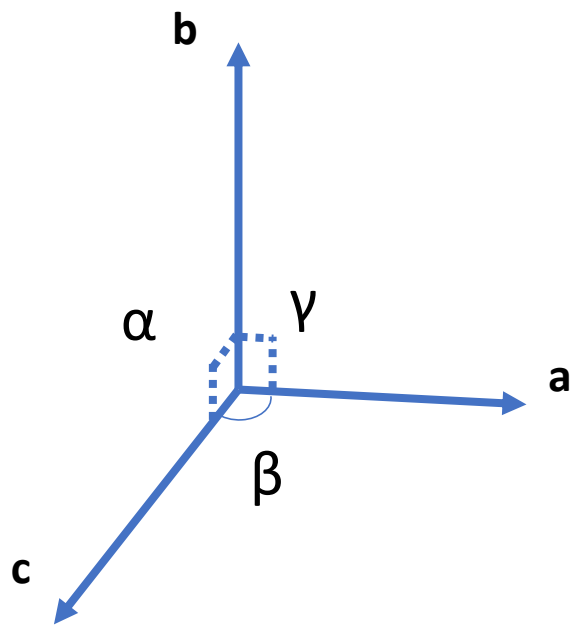
$\alpha = \gamma = 90$

$\beta \neq 90$

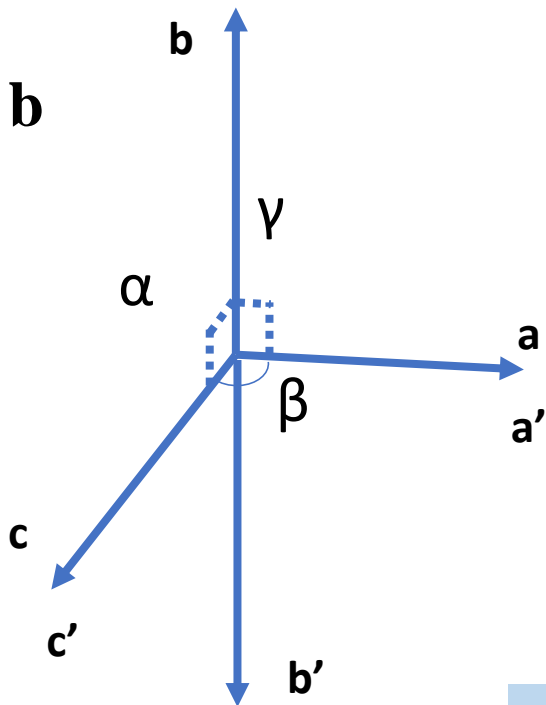
2

m

2/m



$m \perp b$



$a' = f(a) = a$

$b' = f(b) = -b$

$c' = f(c) = c$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

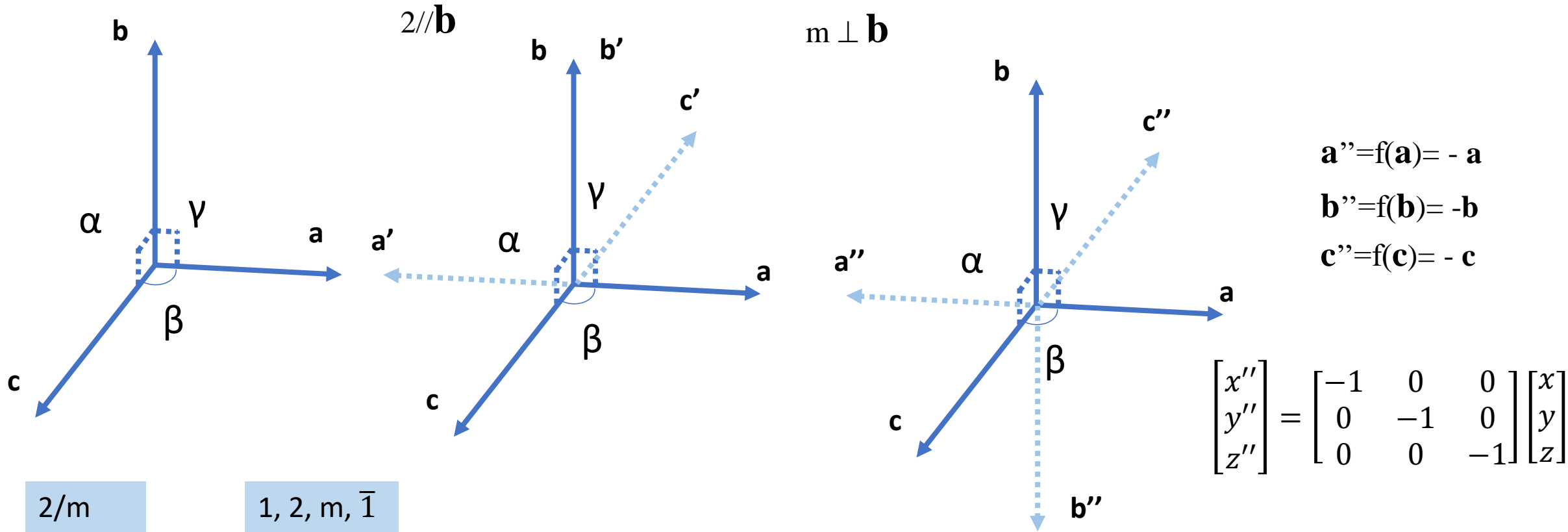
m

1, m

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$





$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 7 & -2 & 8 & -3 \\ 5 & -8 & 7 & 1 \\ 4 & 1 & -3 & 2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 2 & -8 & 6 \\ 6 & -7 & 7 & 4 \\ 2 & 9 & -3 & 2 \\ -4 & -7 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = 7 \times 1 + (-2) \times 6 + 8 \times 2 + (-3) \times (-4) = 23$$

Άρα για τον στοιχείο  $a_{11}$  του καινούριου πίνακα θα βρώ το εσωτερικό γινόμενο της πρώτης γραμμής του πρώτου πίνακα και της πρώτης στήλης του δεύτερου πίνακα

$$\begin{bmatrix} 7 & -2 & 8 & -3 \\ 5 & -8 & 7 & 1 \\ 4 & 1 & -3 & 2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 2 & -8 & 6 \\ 6 & -7 & 7 & 4 \\ 2 & 9 & -3 & 2 \\ -4 & -7 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

Με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε και τα άλλα στοιχεία

$$a_{11} = 7 \times 1 + (-2) \times 6 + 8 \times 2 + (-3) \times (-4) = 23$$

$$a_{12} = 7 \times 2 + (-2) \times (-7) + 8 \times 9 + (-3) \times (-7) = 121$$

$$a_{13} = 7 \times (-8) + (-2) \times 7 + 8 \times (-3) + (-3) \times 3 = -103$$

$$a_{14} = 7 \times 6 + (-2) \times 4 + 8 \times 2 + (-3) \times 3 = 41$$

$$\begin{bmatrix} 7 & -2 & 8 & -3 \\ 5 & -8 & 7 & 1 \\ 4 & 1 & -3 & 2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 2 & -8 & 6 \\ 6 & -7 & 7 & 4 \\ 2 & 9 & -3 & 2 \\ -4 & -7 & 3 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 23 & 121 & -103 & 41 \\ -33 & 122 & -114 & 15 \\ -4 & -40 & -10 & 28 \end{bmatrix}$$

Με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε και τα άλλα στοιχεία

$$a_{11} = 7 \times 1 + (-2) \times 6 + 8 \times 2 + (-3) \times (-4) = 23$$

$$a_{12} = 7 \times 2 + (-2) \times (-7) + 8 \times 9 + (-3) \times (-7) = 121$$

$$a_{13} = 7 \times (-8) + (-2) \times 7 + 8 \times (-3) + (-3) \times 3 = -103$$

$$a_{23} = 5 \times (-8) + (-8) \times 7 + 7 \times (-3) + 1 \times 3 = -114$$

$$a_{24} = 5 \times 6 + (-8) \times 4 + 7 \times 2 + 1 \times 3 = 15$$

$$a_{14} = 7 \times 6 + (-2) \times 4 + 8 \times 2 + (-3) \times 3 = 41$$

$$a_{31} = 4 \times 1 + 1 \times 6 + (-3) \times 2 + 2 \times (-4) = -4$$

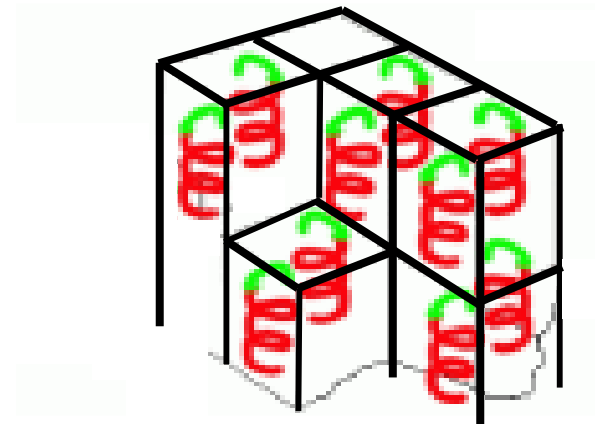
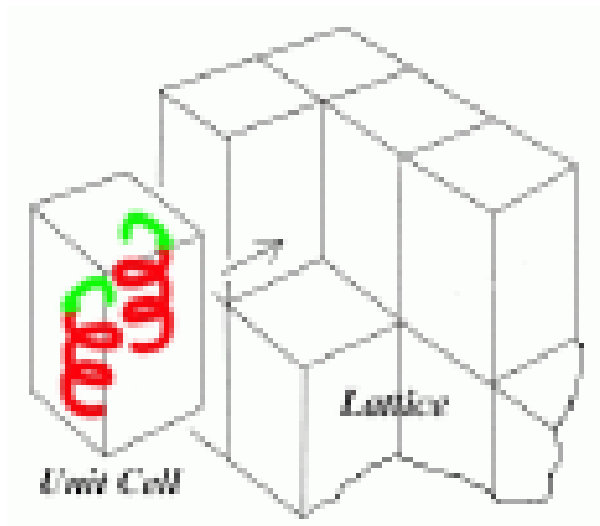
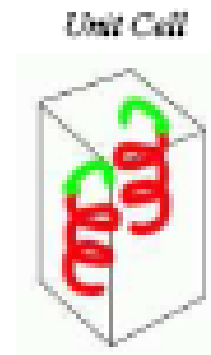
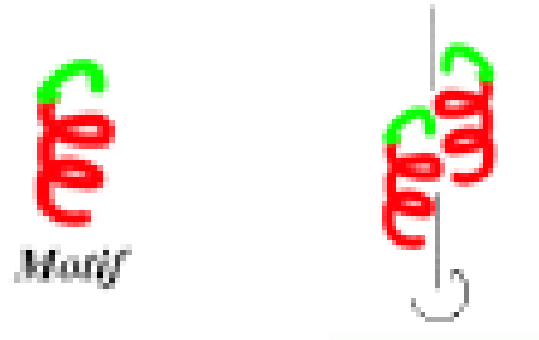
$$a_{32} = 4 \times 2 + 1 \times (-7) + (-3) \times 9 + 2 \times (-7) = -40$$

$$a_{21} = 5 \times 1 + (-8) \times 6 + 7 \times 2 + 1 \times (-4) = -33$$

$$a_{33} = 4 \times (-8) + 1 \times 7 + (-3) \times (-3) + 2 \times 3 = -10$$

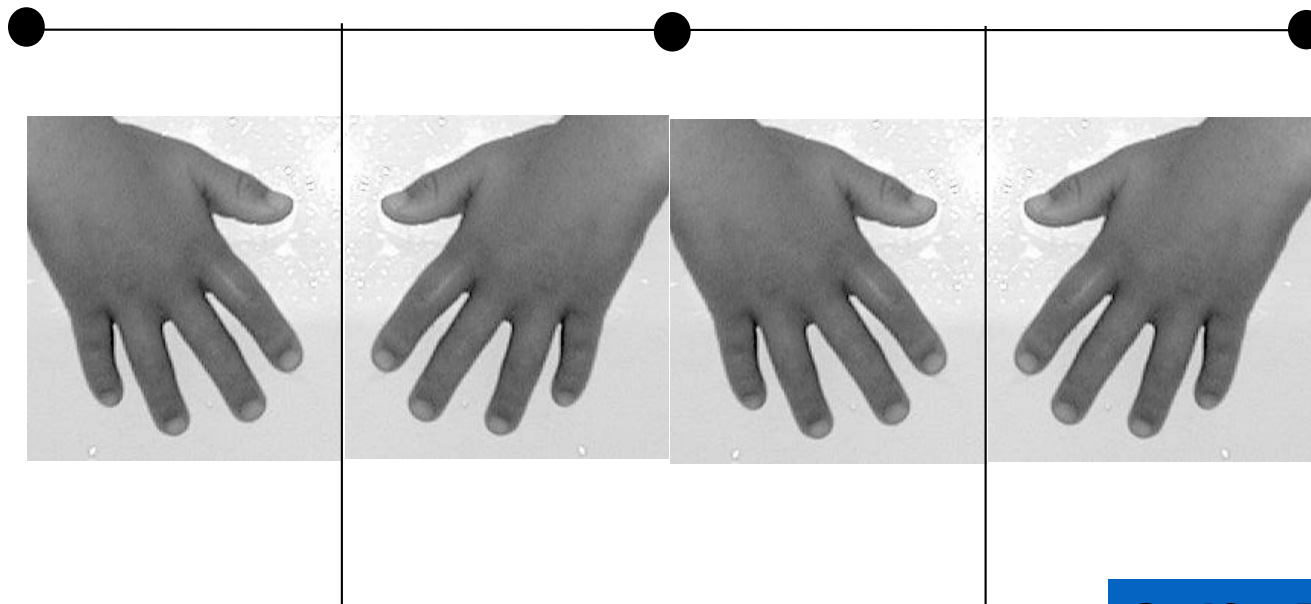
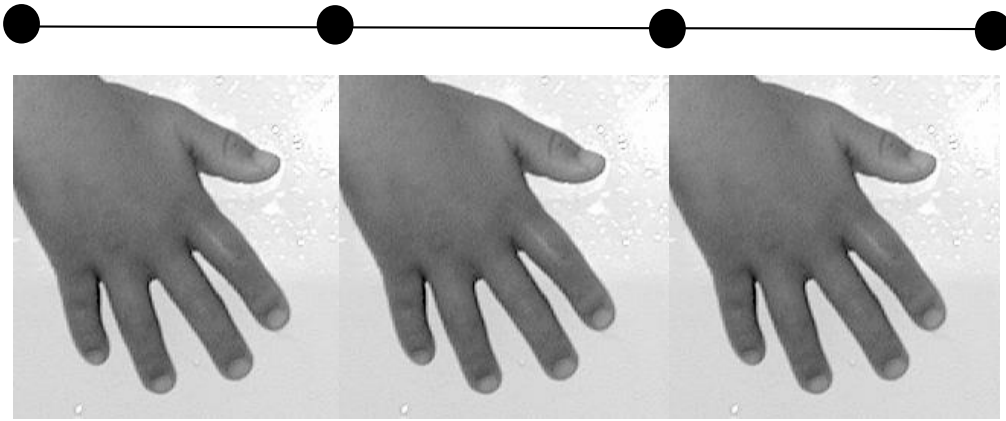
$$a_{22} = 5 \times 2 + (-8) \times (-7) + 7 \times 9 + 1 \times (-7) = 122$$

$$a_{34} = 4 \times 6 + 1 \times 4 + (-3) \times 2 + 2 \times 3 = 28$$

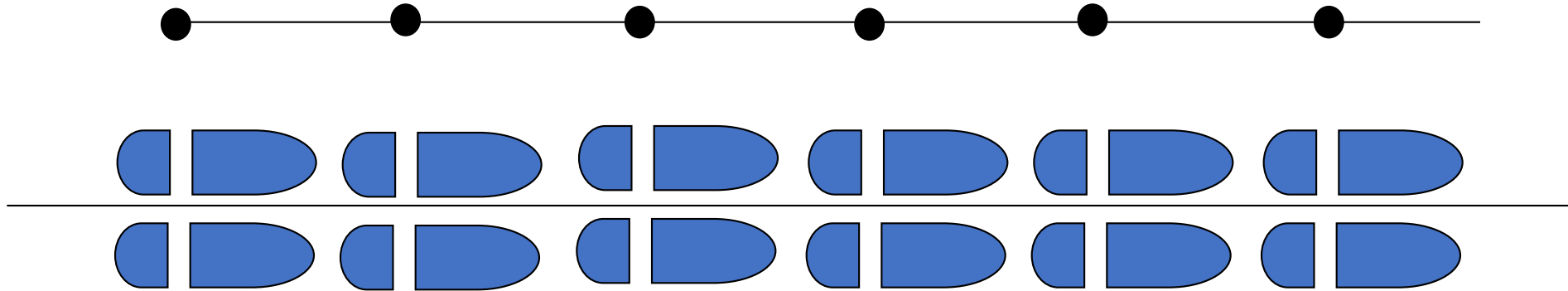


1880s-90s

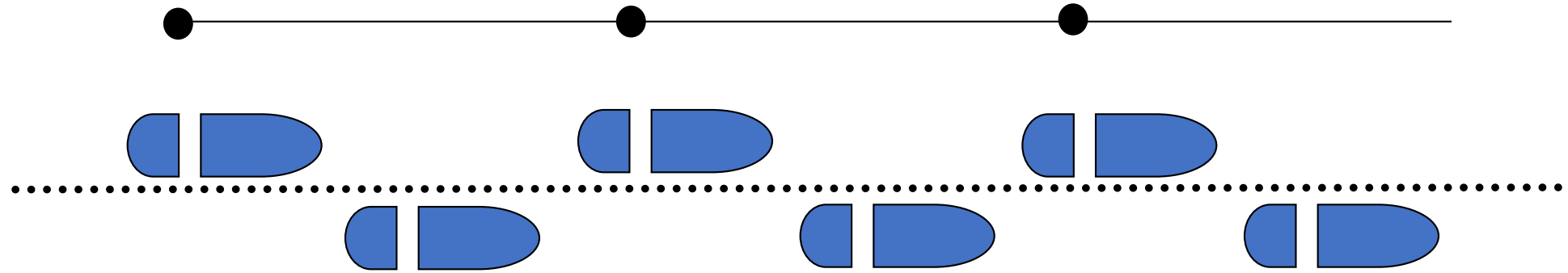
Sohncke, Federov, [Schönflies](#) & Barlow develop theories of internal symmetry of crystals, 230 space groups



**Ομάδες Συμμετρίας Χώρου**

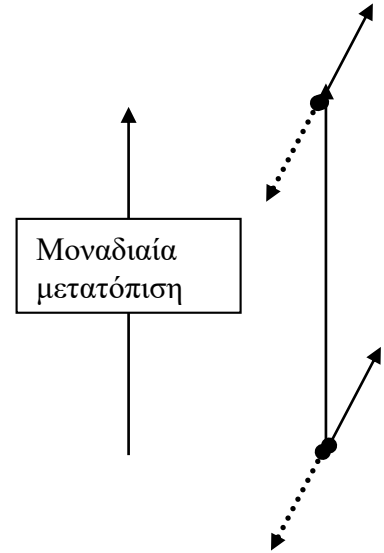
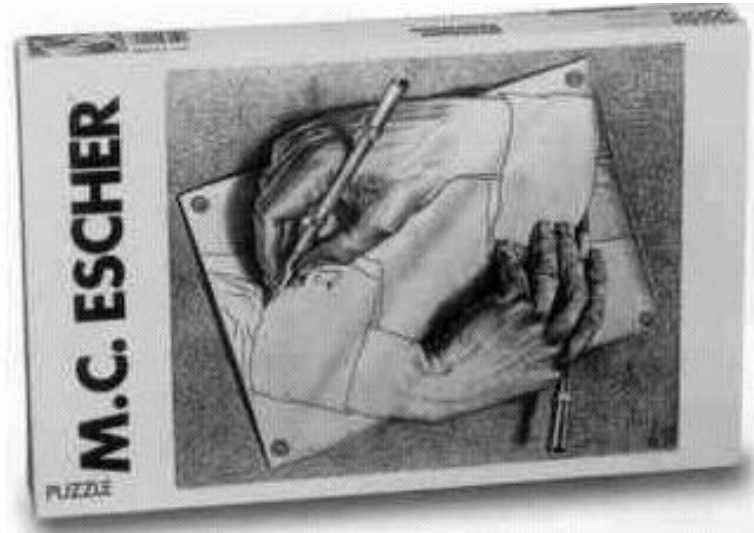


**Απλό Επίπεδο κατοπτρισμού**



**Επίπεδο ολίσθησης**

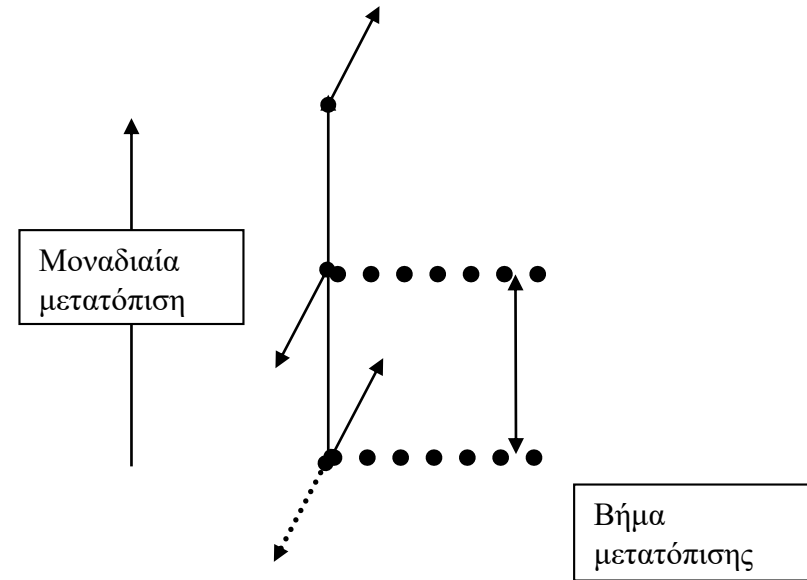
Απλός άξονας δεύτερης τάξης



# Άξονας ελίκωσης



έξονας ελίκωσης 2ης τάξης





Η ύπαρξη διεργασιών συμμετρίας με συνιστώσες μετατόπισης έχει σαν αποτέλεσμα για την πληρέστερη αναπαράσταση τους να χρησιμοποιείται η μορφή του επαυξημένου πίνακα  $(\mathbf{W}, \mathbf{w})$  όπου  $\mathbf{W}$  είναι πίνακας  $(3 \times 3)$  και  $\mathbf{w}$  είναι το άνυσμα μετατόπισης που είναι πίνακας  $(3 \times 1)$ . Η δράση μιας διεργασίας συμμετρίας περιγράφεται από την εξίσωση:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{C}\mathbf{r} = (\mathbf{W}, \mathbf{w})\mathbf{r} = \mathbf{W}\mathbf{r} + \mathbf{w}$$

Σύμβολο Herman-Mauguin (HM) [Long (εκτενές)-Short(σύντομο )]

$P 6_3/m 2/m 2/c$

$P6_3/mmc$

Το πρώτο γράμμα δηλώνει το τύπο πλέγματος:

- P απλό
- I χωροκεντρομένο
- F εδροκεντρομένο
- C εδροκεντρομένο στην έδρα C
- B εδροκεντρομένο στην έδρα B
- A εδροκεντρομένο στην έδρα A

w άνωσμα μετατόπισης

- (0, 0, 0)
- (1/2,1/2,1/2)
- (1/2,1/2,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2)
- (1/2,1/2,0)
- (1/2,0,1/2)
- (0,1/2,1/2)

Το εκτενές σύμβολο δείχνει και τον άξονα στροφής/ελίκωσης που υπάρχει παράλληλα σε κάθε διεύθυνση και το επίπεδο κατοπτρισμού/ολίσθησης που υπάρχει κάθετα στην ίδια διεύθυνση. Τα δύο σύμβολα χωρίζονται με την /.

Το σύντομο σύμβολο δείχνει μόνο το επίπεδο κατοπτρισμού/ολίσθησης κάθετα στην κύρια, στη δευτερεύουσα και στην τριτεύουσα διεύθυνση ή αν δεν υπάρχουν επίπεδα κατοπτρισμού/ολίσθησης τους άξονες στροφής/ελίκωσης που υπάρχει παράλληλα σε κάθε διεύθυνση

Κρυσταλλικό σύστημα	Διεύθυνσης συμμετρίας		
	Πρωτεύουσα	Δευτερεύουσα	Τριτεύουσα
Τρικλινές	None		
Μονοκλινές	[010]		
Ορθορομβικό	[100]	[010]	[001]
Τετραγωνικό	[001]	[100]/[010]	[110]
Εξαγωνικό/ τριγωνικό	[001]	[100]/[010]	[120]/[1(-1)0]
Κυβικό	[100]/[010]/[001]	[111]	[110]

Σύμβολο Herman-Mauguin (HM) [Long (εκτενές)-Short(σύντομο )]

Εκτενές σύμβολο

C 1 2/m 1  
P 2<sub>1</sub> 2<sub>1</sub> 2  
P 2/m 2/n 2<sub>1</sub>/a  
I 4<sub>1</sub>/a 2/m 2/d  
P 6<sub>3</sub>/m 2/m 2/c  
F 4/m (-3) 2/m

Σύντομο σύμβολο

C2/m  
P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2  
Pmna  
I4<sub>1</sub>/amd  
P6<sub>3</sub>/mmc  
Fm(-3)m

Τρικλινές – Το σύμβολο πλέγματος ακολουθείται από το 1 ή -1

Μονοκλινές – Τό σύμβολο πλέγματος ακολουθείται από επίπεδο ολίσθησης ή κατοπτρισμού ή ένα άξονα ελίκωσης/στροφής δευτερης τάξης (π.χ. Cc, P2, P2<sub>1</sub>/n)

Ορθορομβικό – Τα τρία σύμβολα θα είναι ή επίπεδα καταπτρισμού ή επίπεδα ολίσθησης ή άξονες στροφής ή άξονες ελίκωσης 2ης τάξης (π.χ. Pnma, Cmc2<sub>1</sub>, Pnc2)

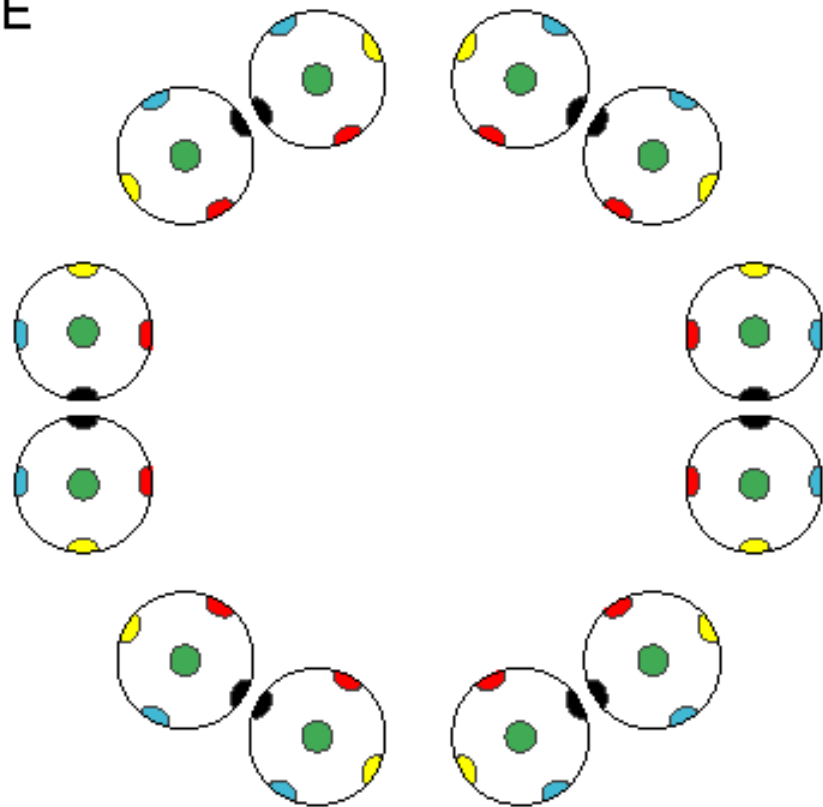
Τριγωνικό – Η κύρια διεύθυνση είναι πάντα 3, (-3) 3<sub>1</sub> ή 3<sub>2</sub> (π.χ. P31m, R3, R3c, P312)

Εξαγωνικό – Η κύρια διεύθυνση είναι πάντα 6, (-6), 6<sub>1</sub>, 6<sub>2</sub>, 6<sub>3</sub>, 6<sub>4</sub> ή 6<sub>5</sub> (π.χ. P6mm, P6<sub>3</sub>/mcm)

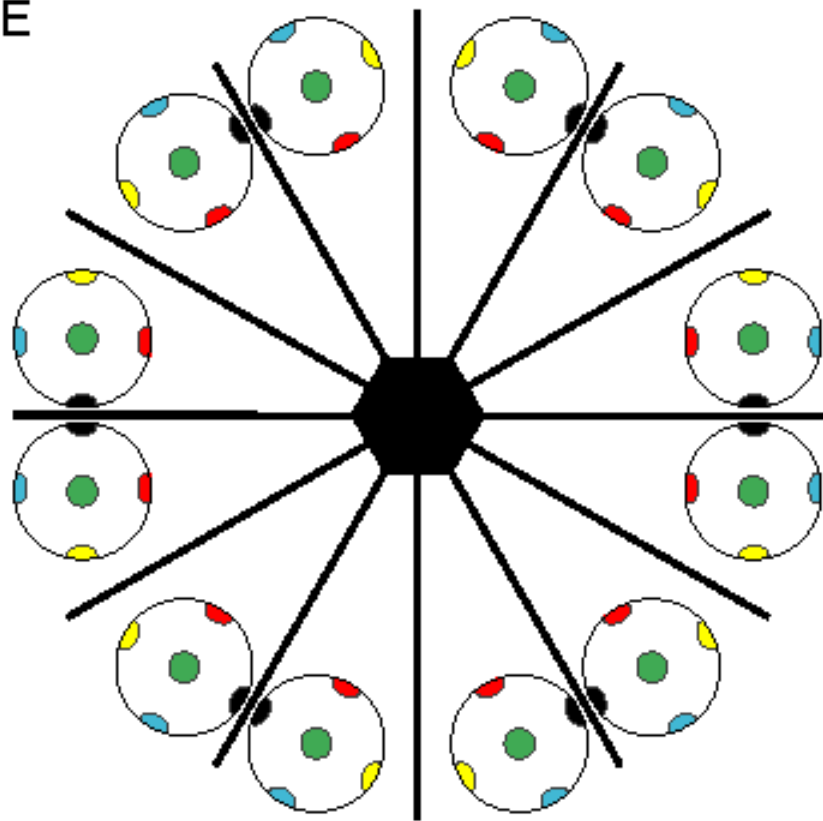
Τετραγωνικό – Η κύρια διεύθυνση είναι 4, (-4), 4<sub>1</sub>, 4<sub>2</sub> ή 4<sub>3</sub> (π.χ. P4<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2, I4/m, P4/mcc)

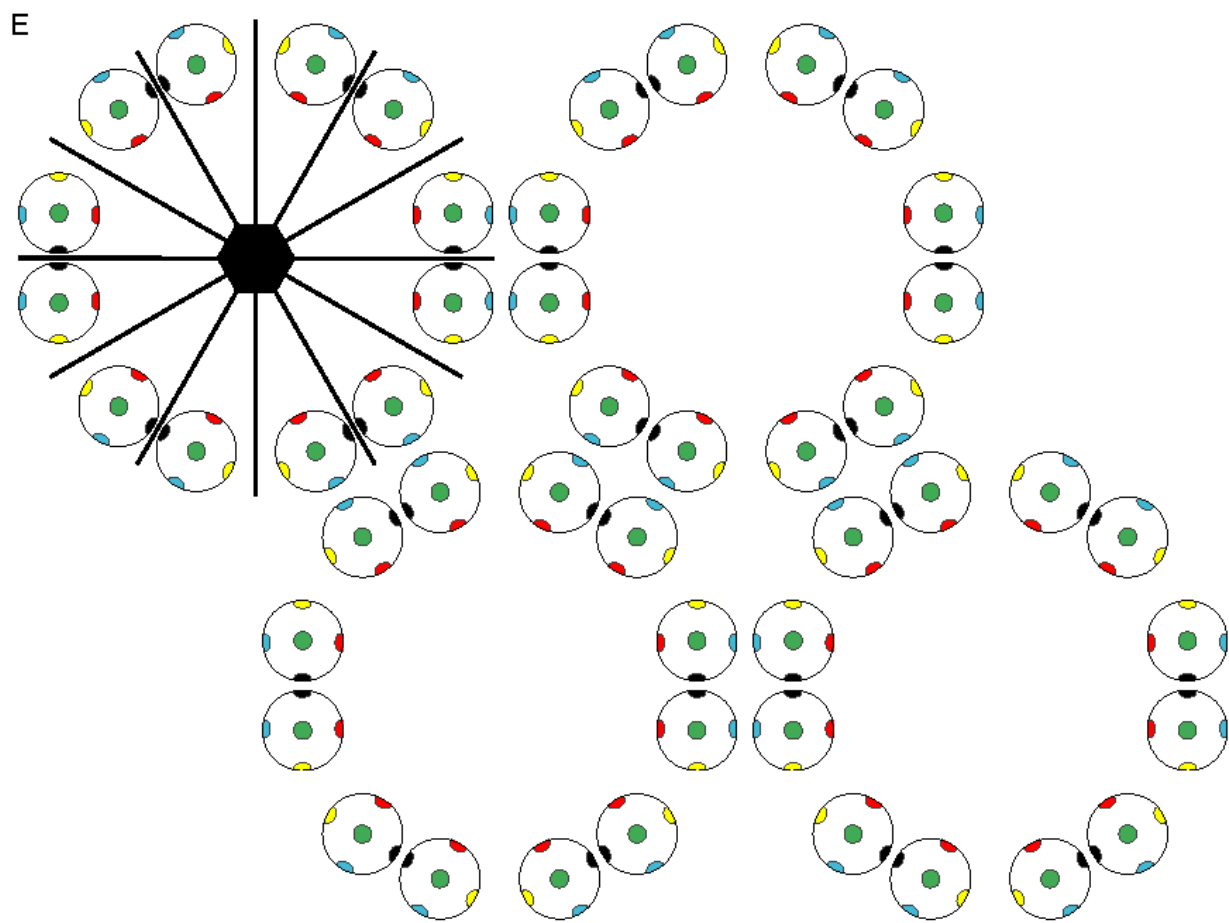
Κυβικό – Η δευτερεύουσα διεύθυνση είναι πάντα 3 ή -3 (π.χ. Ia3, Pm3m, Fd3m)

E

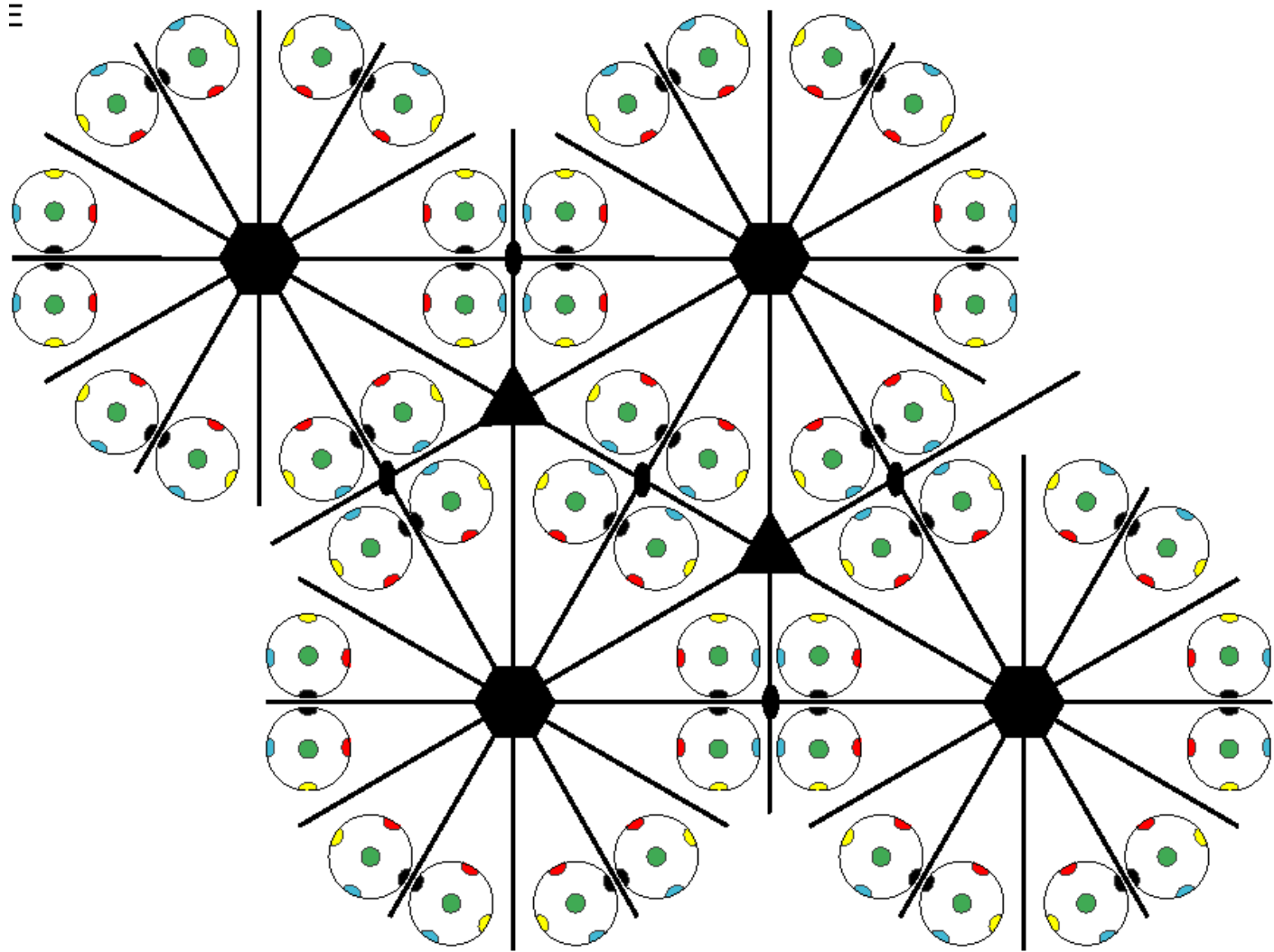


E

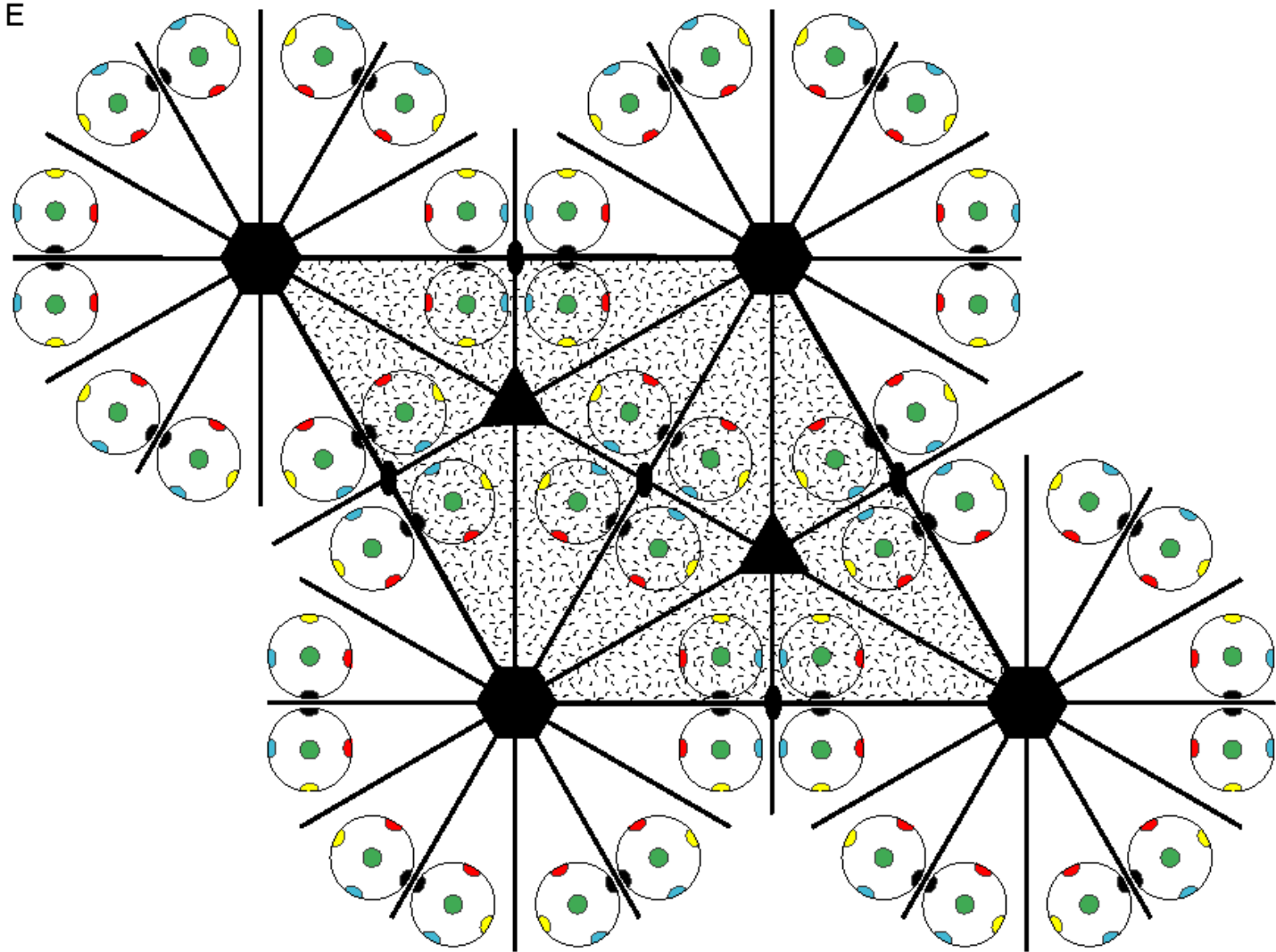




III

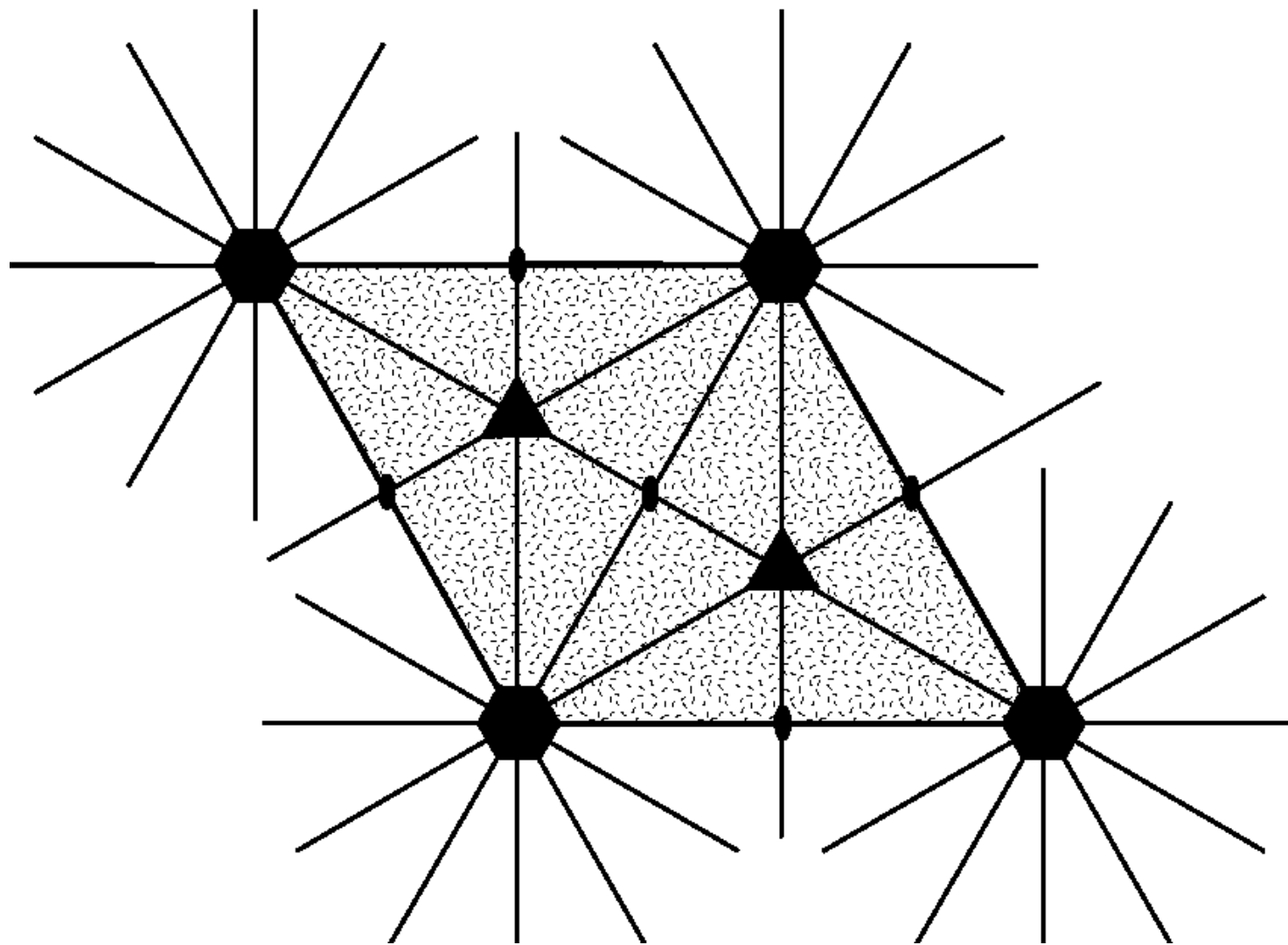


E





[http://www.chemistry.gatech.edu/faculty/williams/xtallography/space\\_groups/p6mm/p6mm.html](http://www.chemistry.gatech.edu/faculty/williams/xtallography/space_groups/p6mm/p6mm.html)



$P1$

No. 1

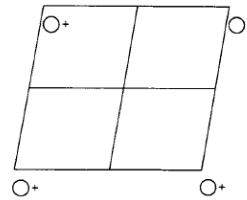
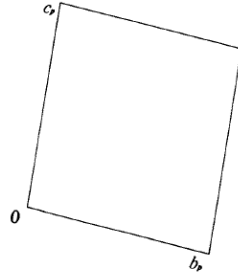
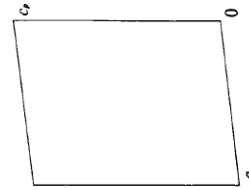
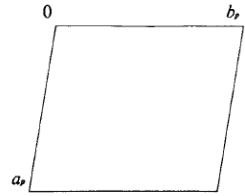
$C_1^1$

$P1$

1

Triclinic

Patterson symmetry  $P\bar{1}$



**Generators selected** (1);  $t(1,0,0)$ ;  $t(0,1,0)$ ;  $t(0,0,1)$

**Positions**

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

1  $a$  1 (1)  $x,y,z$

General:

no conditions

**Symmetry of special projections**

Along  $[001]$   $p1$   
 $\mathbf{a}' = \mathbf{a}_p$   $\mathbf{b}' = \mathbf{b}_p$   
Origin at  $0,0,z$

Along  $[100]$   $p1$   
 $\mathbf{a}' = \mathbf{b}_p$   $\mathbf{b}' = \mathbf{c}_p$   
Origin at  $x,0,0$

Along  $[010]$   $p1$   
 $\mathbf{a}' = \mathbf{c}_p$   $\mathbf{b}' = \mathbf{a}_p$   
Origin at  $0,y,0$

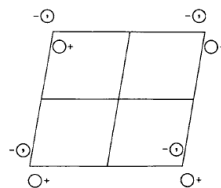
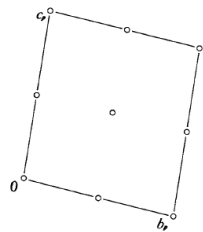
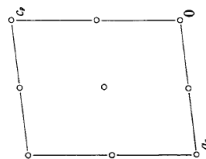
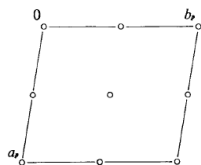
$P\bar{1}$   
No. 2

$C_i^1$   
 $P\bar{1}$

$\bar{1}$

Triclinic

Patterson symmetry  $P\bar{1}$



CONTINUED

No. 2

$P\bar{1}$

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

**Positions**

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates
2 <i>i</i> 1	(1) $x,y,z$ (2) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$
1 <i>h</i> $\bar{1}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
1 <i>g</i> $\bar{1}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
1 <i>f</i> $\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$
1 <i>e</i> $\bar{1}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
1 <i>d</i> $\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$
1 <i>c</i> $\bar{1}$	$0, \frac{1}{2}, 0$
1 <i>b</i> $\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2}$
1 <i>a</i> $\bar{1}$	$0, 0, 0$

Reflection conditions

General:

no conditions

Special: no extra conditions

$P2$

No. 3

$C_2^1$

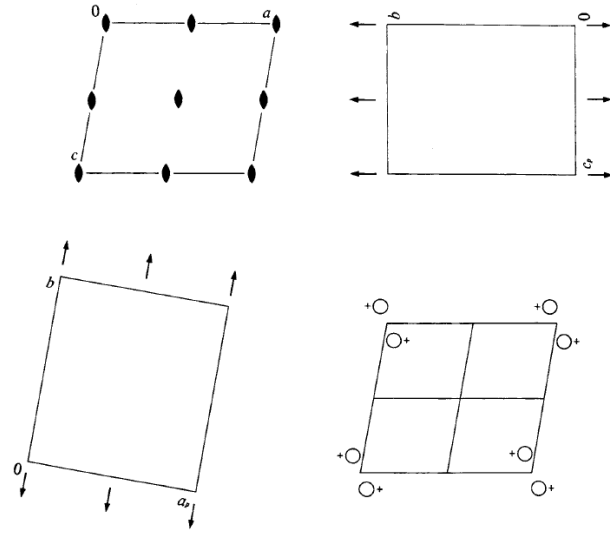
$P121$

2

Monoclinic

Patterson symmetry  $P12/m1$

UNIQUE AXIS  $b$



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

**Positions**

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

2  $e$  1 (1)  $x,y,z$  (2)  $\bar{x},y,\bar{z}$

General:

no conditions

Special: no extra conditions

1  $d$  2  $\frac{1}{2},y,\frac{1}{2}$

1  $c$  2  $\frac{1}{2},y,0$

1  $b$  2  $0,y,\frac{1}{2}$

1  $a$  2  $0,y,0$

$P 2/m$

$C_{2h}^1$

$2/m$

Monoclinic

No. 10

$P 1 2/m 1$

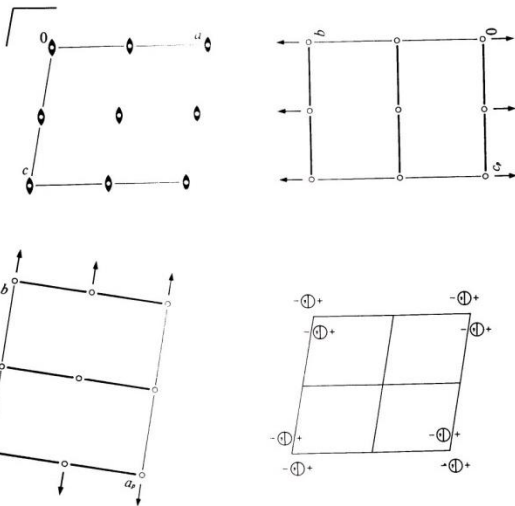
Patterson symmetry  $P 1 2/m 1$

CONTINUED

No. 10

$P 2/m$

UNIQUE AXIS  $b$



Origin at centre ( $2/m$ )

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

Symmetry operations

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

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc  $[2]P 1 2/m 1 (b' = 2b)(P 2/m); [2]P 1 2/m 1 (c' = 2c \text{ or } a' = 2a \text{ or } a' = a + c, c' = -a + c)(P 2/m)$

Minimal non-isomorphic supergroups

I  $[2]P m m m; [2]P c c m; [2]P m m a; [2]P m n a; [2]P b a m; [2]P n n m; [2]C m m m; [2]C c c m; [2]P 4/m; [2]P 4_2/m$   
 $[3]P 6/m$

II  $[2]C 1 2/m 1 (C 2/m); [2]A 1 2/m 1 (C 2/m); [2]I 1 2/m 1 (C 2/m)$

150

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  $o \ 1$  (1)  $x, y, z$  (2)  $\bar{x}, y, \bar{z}$  (3)  $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$  (4)  $x, \bar{y}, z$

2  $n \ m$   $x, \frac{1}{2}, z$   $\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{z}$

2  $m \ m$   $x, 0, z$   $\bar{x}, 0, \bar{z}$

2  $l \ 2$   $\frac{1}{2}, y, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, \bar{y}, \frac{1}{2}$

2  $k \ 2$   $0, y, \frac{1}{2}$   $0, \bar{y}, \frac{1}{2}$

2  $j \ 2$   $\frac{1}{2}, y, 0$   $\frac{1}{2}, \bar{y}, 0$

2  $i \ 2$   $0, y, 0$   $0, \bar{y}, 0$

1  $h \ 2/m$   $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

1  $g \ 2/m$   $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$

1  $f \ 2/m$   $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

1  $e \ 2/m$   $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

1  $d \ 2/m$   $\frac{1}{2}, 0, 0$

1  $c \ 2/m$   $0, 0, \frac{1}{2}$

1  $b \ 2/m$   $0, \frac{1}{2}, 0$

1  $a \ 2/m$   $0, 0, 0$

Symmetry of special projections

Along  $[001]$   $p 2m m$   
 $a' = a_p$   $b' = b$   
Origin at  $0, 0, z$

Along  $[100]$   $p 2m m$   
 $a' = b$   $b' = c_p$   
Origin at  $x, 0, 0$

Along  $[010]$   $p 2$   
 $a' = c$   $b' = a$   
Origin at  $0, y, 0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I  $[2]P 1 2 1 (P 2)$  1; 2  
 $[2]P \bar{1}$  1; 3  
 $[2]P 1 m 1 (P m)$  1; 4

IIa none

IIb  $[2]P 1 2/m 1 (b' = 2b)(P 2/m); [2]P 1 2/c 1 (c' = 2c)(P 2/c); [2]P 1 2/a 1 (a' = 2a)(P 2/c);$   
 $[2]B 1 2/a 1 (a' = 2a, c' = 2c)(P 2/c); [2]C 1 2/m 1 (a' = 2a, b' = 2b)(C 2/m);$   
 $[2]A 1 2/m 1 (b' = 2b, c' = 2c)(C 2/m); [2]F 1 2/m 1 (a' = 2a, b' = 2b, c' = 2c)(C 2/m)$

(Continued on preceding page)

151

## Συμμετρία του αντιστρόφου πλέγματος

Στον αντίστροφο χώρο παρατηρούμε εν δυνάμει ένταση στα σημεία του αντιστρόφου πλέγματος που ορίζονται από όλα τα ανύσματα:

$$\vec{H} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

Όλα τα πιθανά αντίστροφα πλέγματα δίνονται από τον πίνακα:

Κρυσταλλικά Συστήματα	Παράμετροι μοναδιαίας κυψελίδας	Παράμετροι του αντίστροφου χώρου
Τρικλινές	$a \neq b \neq c \neq a, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha$	$a^* \neq b^* \neq c^* \neq a^*, \alpha^* \neq \beta^* \neq \gamma^* \neq \alpha^*$
Μονοκλινές	$a \neq b \neq c \neq a, \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	$a^* \neq b^* \neq c^* \neq a^*, \alpha^* = \gamma^* = 90^\circ, \beta^* \neq 90^\circ$
Ορθορομβικό	$a \neq b \neq c \neq a, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a^* \neq b^* \neq c^* \neq a^*, \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$
Τετραγωνικό	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a^* = b^* \neq c^*, \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$
Τριγωνικό	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$a^* = b^* = c^*, \alpha^* = \beta^* = \gamma^* \neq 90^\circ$
Εξαγωνικό	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$a^* = b^* \neq c^*, \alpha^* = \beta^* = 90^\circ, \gamma^* = 60^\circ$
Κυβικό	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a^* = b^* = c^*, \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$

Τα πλέγματα στον αντίστροφο χώρο είναι επτά (7), όσα και τα κρυσταλλικά συστήματα.

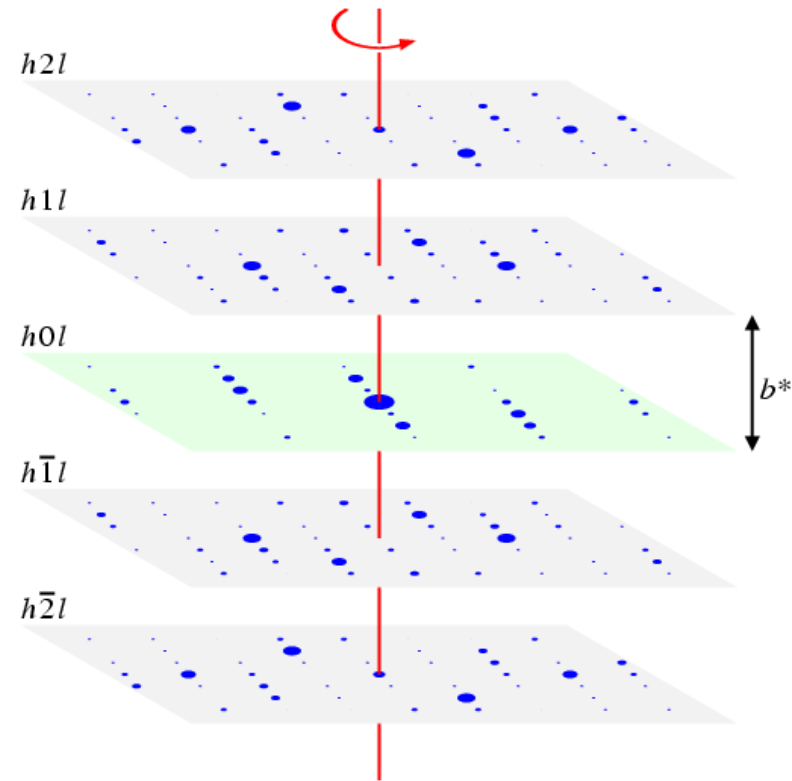
Σε κάθε σημείο του αντιστρόφου πλέγματος μετράμε τις εντάσεις από κάθε ανάκλαση Bragg.

$$I(\vec{\mathbf{H}}) \propto |F(\vec{\mathbf{H}})|^2 \Rightarrow F(\vec{\mathbf{H}}) = \text{παράγοντας δομής} \Rightarrow$$

$$F(\vec{\mathbf{H}}) = \sum_j f_j \exp 2\pi i(\vec{\mathbf{H}} \cdot \vec{\mathbf{r}}_j)$$

$$f_j = \text{ατομικός παράγοντας δομής}$$

Στο σχήμα που ακολουθεί έχουμε ένα μέρος του αντιστρόφου πλέγματος για δομή που κρυσταλλώνεται στο μονοκλινές κρυσταλλικό σύστημα.



Οι θέσεις των εντάσεων ορίζονται από τις διαστάσεις της κυψελίδας και οι εντάσεις (ορίζονται) από το είδος και τη θέση των ατόμων μέσα στην κυψελίδα.



Λέγοντας Κρυσταλλικό ή αντίστροφο πλέγμα , εννοούμε τα σύνολα των σημείων που ορίζονται από τα διανύσματα αντίστοιχα:

$$\vec{\mathbf{R}}(n,m,g) = n\vec{\mathbf{a}} + m\vec{\mathbf{b}} + g\vec{\mathbf{c}}$$

$$\vec{\mathbf{H}} = h\vec{\mathbf{a}}^* + k\vec{\mathbf{b}}^* + l\vec{\mathbf{c}}^*$$

Όπως γνωρίζουμε το μονοκλινές κρυσταλλικό σύστημα χαρακτηρίζεται από την Ομάδα Συμμετρία Σημείου (Ο.Σ.Σ.) 2/m.

Το ευθύ κρυσταλλικό πλέγμα και το αντίστροφο κρυσταλλικό πλέγμα στο μονοκλινές κρυσταλλικό σύστημα έχουν την ίδια συμμετρία (2/m).

Το σύνολο των σημείων μιας κρυσταλλικής δομής ορίζει τον ευθύ χώρο και η συμμετρία της περιγράφεται από την Ομάδα Συμμετρίας Χώρου (Ο.Σ.Χ.).

Οι Ομάδες Συμμετρίας Χώρου (Ο.Σ.Χ.) του μονοκλινούς κρυσταλλικού συστήματος είναι:

$$P_2, P_2, C_2, P_m, P_c, C_m, C_c, P2/m, P2_1/m, C2/m, P2/c, P2_1/c, C2/c$$

Παρόλο που αυτό που μετράμε είναι εντάσεις, για να γίνουν τα πράγματα πιο απλά, έχει επινοηθεί ο αντίστροφος χώρος όπου σε κάθε σημείο που ορίζεται από το άνυσμα:

$$\vec{\mathbf{H}} = h\vec{\mathbf{a}}^* + k\vec{\mathbf{b}}^* + l\vec{\mathbf{c}}^*$$

αποδίδεται η τιμή:  $|\mathbf{F}(h, k, l)|$

Όπως θα δούμε στη συνέχεια ο αντίστροφος χώρος που δημιουργείται με αυτόν τον τρόπο χαρακτηρίζεται από μία Ο.Σ.Σ., δηλαδή και το αντίστροφο πλέγμα έχει συμμετρία

Επειδή η ανάλυση του αντιστρόφου χώρου βασίζεται στον παράγοντα δομής, δημιουργήθηκε ένα νέο κεφάλαιο στην κρυσταλλογραφία γνωστό ως «Άλγεβρα των παραγόντων δομής»

Για όλες τις Ο.Σ.Χ. του μονοκλινούς κρυσταλλικού συστήματος η Ο.Σ.Σ. των αντίστοιχων αντίστροφων χώρων είναι  $2/m$ .

Αυτό συμβαίνει διότι:

- 1ον: Ισχύει ο νόμος του Friedel:  $|\mathbf{F}(h, k, l)| = |\mathbf{F}(-h, -k, -l)|$

δηλαδή όλα τα αντίστροφα πλέγματα έχουν κέντρο συμμετρίας.

- 2ον: Η συμμετρία σημείου του ευθέος πλέγματος είναι και συμμετρία του αντιστρόφου πλέγματος.

Παραδείγματα:

α): Έστω ότι υπάρχει 2ης τάξης άξονας στο ευθύ πλέγμα, τότε θα αποδειχθεί ότι υπάρχει 2ης τάξης άξονας και στο αντίστροφο πλέγμα. Θεωρούμε ότι ο άξονας στροφής 2ης τάξης είναι παράλληλος στον άξονα **b**

$$\vec{\mathbf{r}} = (x, y, z) \rightarrow \vec{\mathbf{r}}' = (-x, y, -z)$$

$$\mathbf{F}(\vec{\mathbf{H}}) = \mathbf{F}_{(h,k,l)} = \sum_{j=1}^N \mathbf{f}_j \cdot e^{2\pi i \vec{\mathbf{H}} \cdot \vec{\mathbf{r}}_j} = \sum_{j=1}^N \mathbf{f}_j \cdot \exp\left[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)\right] =$$

$$\sum_{j=1}^{N/2} \mathbf{f}_j \left( e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)} + e^{2\pi i (-hx_j + ky_j - lz_j)} \right)$$

$$\mathbf{F}_{(-h,k,-l)} = \sum_{j=1}^N \mathbf{f}_j \cdot e^{2\pi i \vec{\mathbf{H}} \cdot \vec{\mathbf{r}}'} = \sum_{j=1}^{N/2} \mathbf{f}_j \cdot \left( e^{2\pi i (-hx_j + ky_j - lz_j)} + e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)} \right) \Rightarrow$$

$$\mathbf{F}_{(-h,k,-l)} = \sum_{j=1}^{N/2} \mathbf{f}_j \left( e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)} + e^{2\pi i (-hx_j + ky_j - lz_j)} \right) \Rightarrow$$

$$\mathbf{F}_{(h,k,l)} = \mathbf{F}_{(-h,k,-l)} \Rightarrow \text{άξονας 2ης τάξης στο αντίστροφο πλέγμα}$$

β): Έστω ότι υπάρχει ένα επίπεδο κατοπτρισμού στο ευθύ πλέγμα, τότε (θα αποδειχθεί) ότι υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού και στο αντίστροφο πλέγμα, δηλ.

Έστω ότι το επίπεδο κατοπτρισμού είναι κάθετο στον άξονα  $\mathbf{b}$ :  $\mathbf{m} \perp \mathbf{b}$ :

$$\vec{\mathbf{r}} = (x, y, z) \rightarrow \vec{\mathbf{r}}' = (x, -y, z)$$

$$\left| \mathbf{F}_{(h,k,l)} \right| = \left| \sum_{j=1}^N \mathbf{f}_j \cdot e^{2\pi i \bar{\mathbf{H}} \cdot \vec{\mathbf{r}}_j} \right| = \left| \sum_{j=1}^{N/2} \mathbf{f}_j \left( e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)} + e^{2\pi i (hx_j - ky_j + lz_j)} \right) \right| = \left| \sum_{j=1}^{N/2} \mathbf{f}_j \left( e^{2\pi i (hx_j - ky_j + lz_j)} + e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)} \right) \right|$$

$$\left| \mathbf{F}_{(h,-k,l)} \right| = \left| \sum_{j=1}^{N/2} \mathbf{f}_j \left( e^{2\pi i (hx_j - ky_j + lz_j)} + e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)} \right) \right| \Rightarrow \left| \mathbf{F}_{(h,k,l)} \right| = \left| \mathbf{F}_{(h,-k,l)} \right|$$

$\Rightarrow$  υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού και στο αντίστροφο πλέγμα

**Από τις 13 Ο.Σ.Χ. του μονοκλινούς κρυσταλλικού συστήματος**

$P_2$	$P_{2_1}$	$C_2$	$P_m$	$P_c$	$C_m$	$C_c$	$P2/m$	$P2_1/m$	$C2/m$	$P2/c$	$P2_1/c$	$C2/c$
2	2	2	$m$	$m$	$m$	$m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$
-1*	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↕	↕	↕	↕	↕
$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$	$2/m$

\* επειδή ισχύει ο νόμος του Friedel.

**Προκύπτει 1 Ο.Σ.Σ. στο αντίστροφο πλέγμα :  $2/m$ .**

Αντί για τις 32 Ο.Σ.Σ., στο αντίστροφο πλέγμα έχουμε μόνο τις 11 κεντροσυμμετρικές, που είναι οι ομάδες (τάξεις) Laue.

Crystal System	Laue Class	Space Group
triclinic	$\bar{1}$	$P1, P\bar{1}$
monoclinic	$2/m$	$P2, P2_1, C2, Pm, Pc, Cm, Cc, P2/m, P2_1/m, C2/m, P2/c, P2_1/c, C2/c$
orthorhombic	$mmm$	$P222, P222_1, P2_12_12, P2_12_12_1, C222_1, C222, F222, I222, I2_12_12_1, Pmm2, Pmc2_1, Pcc2, Pma2, Pca2_1, Pnc2, Pmn2_1, Pba2, Pna2_1, Pnn2, Cmm2, Cmc2_1, Ccc2, Amm2, Aem2, Ama2, Aea2, Fmm2, Fdd2, Imm2, Iba2, Ima2, Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna, Pmna, Pcca, Pbam, Pccn, Pbcm, Pnmm, Pmmm, Pbcn, Pbca, Pnma, Cmcm, Cmce, Cmmm, Cccm, Cmme, Ccce, Fmmm, Fddd, Immm, Ibam, Ibca, Imma$
tetragonal	$4/m$	$P4, P4_1, P4_2, P4_3, I4, I4_1, P\bar{4}, I\bar{4}, P4/m, P4_2/m, P4/n, P4_2/n, I4/m, I4_1/a$
tetragonal	$4/mmm$	$P422, P4_212, P4_122, P4_12_12, P4_222, P4_212, P4_322, P4_32_12, I422, I4_122, P4mm, P4bm, P4_2cm, P4_2nm, P4cc, P4nc, P4_2mc, P4_2bc, I4mm, I4cm, I4_1md, I4_1cd, P\bar{4}2m, P\bar{4}2c, P\bar{4}2_1m, P\bar{4}2_1c, P\bar{4}m2, P\bar{4}c2, P\bar{4}b2, P\bar{4}n2, I\bar{4}m2, I\bar{4}c2, I\bar{4}2m, I\bar{4}2d, P4/mmm, P4/mcc, P4/nbm, P4/nnc, P4/mbm, P4/mnc, P4/nmm, P4/mcc, P4_2/mmc, P4_2/mcm, P4_2/nbc, P4_2/nnm, P4_2/mbc, P4_2/mnm, P4_2/nmc, P4_2/ncm, I4/mmm, I4/mcm, I4/amd, I4_1acd$
trigonal	$\bar{3}$	$P3, P3_1, P3_2, R3, P\bar{3}, R\bar{3}$
trigonal	$\bar{3}m$	$P312, P321, P3_112, P3_121, P3_212, P3_221, R32, P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c, P\bar{3}1m, P\bar{3}1c, P\bar{3}m1, P\bar{3}c1, R\bar{3}m, R\bar{3}c$
hexagonal	$6/m$	$P6, P6_1, P6_5, P6_2, P6_4, P6_3, P\bar{6}, P6/m, P6_3/m$
hexagonal	$6/mmm$	$P622, P6_122, P6_522, P6_222, P6_422, P6_322, P6mm, P6cc, P6_3cm, P6_3mc, P\bar{6}m2, P\bar{6}c2, P\bar{6}2m, P\bar{6}2c, P6/mmm, P6/mcc, P6_3/mcm, P6_3/mmc$
cubic	$m\bar{3}$	$P23, F23, I23, P2_13, I2_13, Pm\bar{3}, Pn\bar{3}, Fm\bar{3}, Fd\bar{3}, Im\bar{3}, Pa\bar{3}, Ia\bar{3}$
cubic	$m\bar{3}m$	$P432, P4_32, F432, F4_132, I432, P4_332, P4_132, I4_132, P\bar{4}3m, F\bar{4}3m, I\bar{4}3m, P\bar{4}3n, F\bar{4}3c, I\bar{4}3d, Pm\bar{3}m, Pn\bar{3}n, Pm\bar{3}n, Pn\bar{3}m, Fm\bar{3}m, Fm\bar{3}c, Fd\bar{3}m, Fd\bar{3}c, Im\bar{3}m, Ia\bar{3}d$

$P2_1$

No. 4

UNIQUE AXIS  $b$

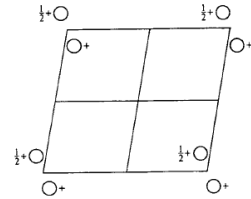
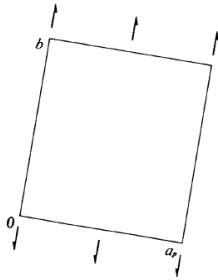
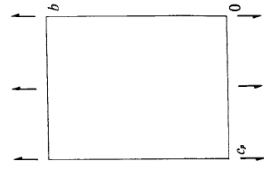
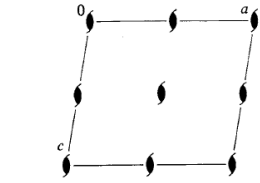
$C_2^2$

$P12_11$

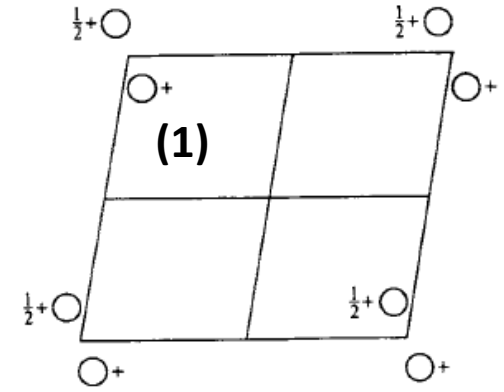
2

Monoclinic

Patterson symmetry  $P12/m1$



(1)



2 a 1

(1)  $x, y, z$

(2)  $\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$

CONTINUED

No. 4

$P2_1$

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

Positions

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

General:

2 a 1

(1)  $x, y, z$

(2)  $\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$

$0k0 : k = 2n$

Reflection conditions

General:

$0k0 : k = 2n$



$$F(\bar{\mathbf{H}}) = F_{(h,k,l)} = \sum_{j=1}^N f_j \cdot e^{2\pi i \bar{\mathbf{H}} \cdot \bar{\mathbf{r}}_j} = \sum_{j=1}^N f_j \cdot \exp[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)]$$

(1)  $x, y, z$                       (2)  $\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \left\{ \exp[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)] + \exp[2\pi i (-hx_j + k\{\frac{1}{2} + y_j\} - lz_j)] \right\}.$$

$$F(0k0) = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \left\{ \exp(2\pi i ky_j) + \exp[2\pi i k(\frac{1}{2} + y_j)] \right\}$$

$$= \sum f_j \{ \exp(2\pi i ky_j) + \exp(2\pi i k(1/2)) \exp(2\pi i ky_j) \} = \sum f_j \exp(2\pi i ky_j) \{ 1 + \exp(2\pi i k(1/2)) \} =$$

$$= \{ 1 + \exp(2\pi i k(1/2)) \} \sum f_j \exp(2\pi i ky_j) = \{ 1 + [\exp(\pi i)]^k \} \sum f_j \exp(2\pi i ky_j)$$

$$\exp(\pi i) = \cos \pi + i \sin \pi = -1$$

$$F(0k0) = [1 + (-1)^k] \sum_{j=1}^{N/2} f_j \exp(2\pi i ky_j)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} = & 0 \text{ if } k = 2n + 1 \quad (\text{odd}) \\ \neq & 0 \text{ if } k = 2n \quad (\text{even}) \end{array} \right\},$$

$P2_1/c$

$C_{2h}^5$

$2/m$

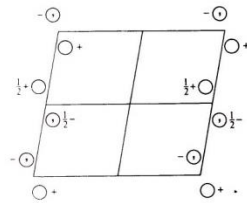
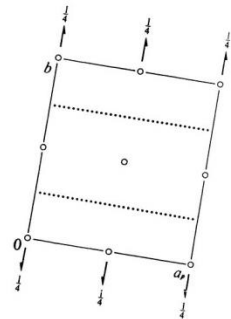
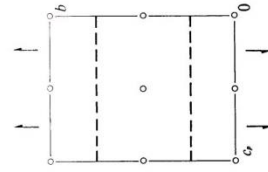
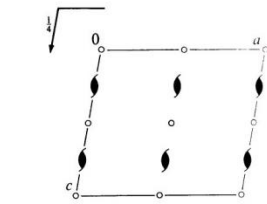
Monoclinic

No. 14

$P12_1/c1$

Patterson symmetry  $P12_1/m$

UNIQUE AXIS  $b$ , CELL CHOICE 1



Origin at  $\bar{1}$

Asymmetric unit  $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1; 0 \leq z \leq 1$

Symmetry operations

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

CONTINUED

No. 14

$P2_1/c$

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

General:

$h0l: l = 2n$   
 $0k0: k = 2n$   
 $00l: l = 2n$

Special: as above, plus

$hkl: k + l = 2n$

$hkl: k + l = 2n$

$hkl: k + l = 2n$

$hkl: k + l = 2n$

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

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

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

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

Symmetry of special projections

Along [001]  $p2gm$

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

Origin at  $0, 0, z$

Along [100]  $p2gg$

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

Origin at  $x, 0, 0$

Along [010]  $p2$

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

Origin at  $0, y, 0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I  $[2]P12_11(P2_1)$  1; 2

$[2]P\bar{1}$  1; 3

$[2]P1c1(Pc)$  1; 4

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc  $[3]P12_1/c1(b' = 3b)(P2_1/c)$ ;  $[2]P12_1/c1(a' = 2a \text{ or } a' = 2a, c' = 2a + c)(P2_1/c)$

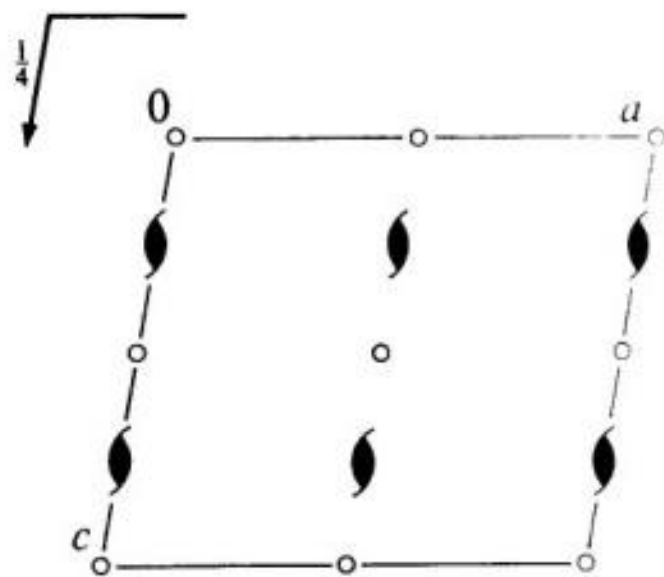
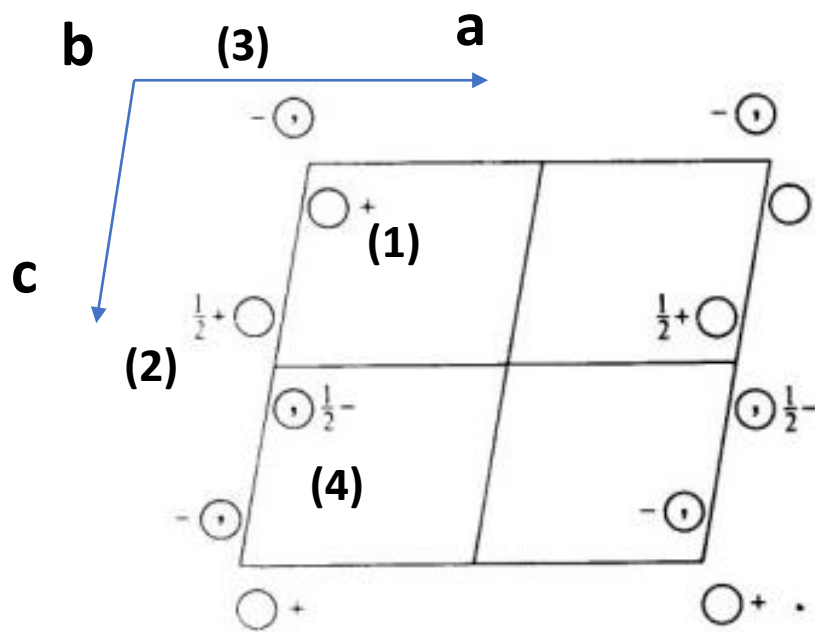
Minimal non-isomorphic supergroups

I  $[2]Pnna$ ;  $[2]Pmna$ ;  $[2]Pcca$ ;  $[2]Pbam$ ;  $[2]Pccn$ ;  $[2]Pbcm$ ;  $[2]Pnmm$ ;  $[2]Pbcn$ ;  $[2]Pbca$ ;  $[2]Pnma$ ;  $[2]Cmca$

II  $[2]C12/c1(C2/c)$ ;  $[2]A12/m1(C2/m)$ ;  $[2]I12/c1(C2/c)$ ;  $[2]P12_1/m1(2c' = c)(P2_1/m)$ ;  $[2]P12/c1(2b' = b)(P2/c)$

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)  $x, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$

UNIQUE AXIS  $b$ , CELL CHOICE 1



General:

$$h0l: l = 2n$$

$$0k0: k = 2n$$

$$00l: l = 2n$$

Crystal System	Laue Class	Space Group
triclinic	$\bar{1}$	$P1, P\bar{1}$
monoclinic	$2/m$	$P2, P2_1, C2, Pm, Pc, Cm, Cc, P2/m, P2_1/m, C2/m, P2/c, P2_1/c, C2/c$
orthorhombic	$mmm$	$P222, P222_1, P2_12_12, P2_12_12_1, C222_1, C222, F222, I222, I2_12_12_1, Pmm2, Pmc2_1, Pcc2, Pma2, Pca2_1, Pnc2, Pmn2_1, Pba2, Pna2_1, Pnn2, Cmm2, Cmc2_1, Ccc2, Amm2, Aem2, Ama2, Aea2, Fmm2, Fdd2, Imm2, Iba2, Ima2, Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna, Pmna, Pcca, Pbam, Pccn, Pbcm, Pnmm, Pmmm, Pbcn, Pbca, Pnma, Cmcm, Cmce, Cmmm, Cccm, Cmme, Ccce, Fmmm, Fddd, Immm, Ibam, Ibca, Imma$
tetragonal	$4/m$	$P4, P4_1, P4_2, P4_3, I4, I4_1, P\bar{4}, I\bar{4}, P4/m, P4_2/m, P4/n, P4_2/n, I4/m, I4_1/a$
tetragonal	$4/mmm$	$P422, P4_212, P4_122, P4_12_12, P4_222, P4_22_12, P4_322, P4_32_12, I422, I4_122, P4mm, P4bm, P4_2cm, P4_2nm, P4cc, P4nc, P4_2mc, P4_2bc, I4mm, I4cm, I4_1md, I4_1cd, P\bar{4}2m, P\bar{4}2c, P\bar{4}2_1m, P\bar{4}2_1c, P\bar{4}m2, P\bar{4}c2, P\bar{4}b2, P\bar{4}n2, I\bar{4}m2, I\bar{4}c2, I\bar{4}2m, I\bar{4}2d, P4/mmm, P4/mcc, P4/nbm, P4/nnc, P4/mbm, P4/mnc, P4/nmm, P4/mcc, P4_2/mmc, P4_2/mcm, P4_2/nbc, P4_2/nnm, P4_2/mbc, P4_2/mnm, P4_2/nmc, P4_2/ncm, I4/mmm, I4/mcm, I4/amd, I4_1acd$
trigonal	$\bar{3}$	$P3, P3_1, P3_2, R3, P\bar{3}, R\bar{3}$
trigonal	$\bar{3}m$	$P312, P321, P3_112, P3_121, P3_212, P3_221, R32, P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c, P\bar{3}1m, P\bar{3}1c, P\bar{3}m1, P\bar{3}c1, R\bar{3}m, R\bar{3}c$
hexagonal	$6/m$	$P6, P6_1, P6_5, P6_2, P6_4, P6_3, P\bar{6}, P6/m, P6_3/m$
hexagonal	$6/mmm$	$P622, P6_122, P6_522, P6_222, P6_422, P6_322, P6mm, P6cc, P6_3cm, P6_3mc, P\bar{6}m2, P\bar{6}c2, P\bar{6}2m, P\bar{6}2c, P6/mmm, P6/mcc, P6_3/mcm, P6_3/mmc$
cubic	$m\bar{3}$	$P23, F23, I23, P2_13, I2_13, Pm\bar{3}, Pn\bar{3}, Fm\bar{3}, Fd\bar{3}, Im\bar{3}, Pa\bar{3}, Ia\bar{3}$
cubic	$m\bar{3}m$	$P432, P4_232, F432, F4_132, I432, P4_332, P4_132, I4_132, P\bar{4}3m, F\bar{4}3m, I\bar{4}3m, P\bar{4}3n, F\bar{4}3c, I\bar{4}3d, Pm\bar{3}m, Pn\bar{3}n, Pm\bar{3}n, Pn\bar{3}m, Fm\bar{3}m, Fm\bar{3}c, Fd\bar{3}m, Fd\bar{3}c, Im\bar{3}m, Ia\bar{3}d$

Space group frequency ranking for the 807,190 CSD structures for which the space group is fully defined. Statistics for enantiomorphous space groups are as reported in the CSD. 631,404 (78.2 %) of structures adopt centrosymmetric space groups, 175,787 (21.8 %) adopt non-centrosymmetric space groups, and 132,700 (16.4 %) structures adopt Sohncke space groups.

<i>Rank</i>	<i>SG No.</i>	<i>Space Group</i>	<i>No. in CSD</i>	<i>% of CSD</i>
1	14	P21/c	279041	34.6
2	2	P-1	198014	24.5
3	15	C2/c	67434	8.4
4	19	P212121	58438	7.2
5	4	P21	41791	5.2
6	61	Pbca	26951	3.3
7	33	Pna21	11145	1.4
8	62	Pnma	8734	1.1
9	9	Cc	8450	1.0
10	1	P1	7662	0.9
11	60	Pbcn	6867	0.9
12	5	C2	6826	0.8
13	29	Pca21	5968	0.7
14	13	P2/c	5232	0.6
15	148	R-3	5217	0.6
16	12	C2/m	4094	0.5
17	11	P21/m	4023	0.5
18	7	Pc	3447	0.4
19	18	P21212	3293	0.4
20	88	I41/a	2927	0.4
21	56	Pccn	2848	0.4

**2016**