

Е. П. Макагонов, П. Е. Макагонов

**КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ
АСИММЕТРИЧНЫХ ЧАСТИЦ, НИЗШАЯ КАТЕГОРИЯ**

E. P. Makagonov, P. E. Makagonov

**CRYSTALLOGRAPHICAL SYSTEMS OF NON-SYMMETRIC
PARTICLES, LOWEST CATEGORY**

In the article were considered systems of equal non-symmetric figuries, lowest category. Mutual changes of figuries systems with change elements of their symmetry on example of pyroxene structure were described. Total quantity types crystallographic space systems non-symmetric figuries, lowest category, were received. Central points coordinates of non-symmetric figuries in the right system of the lowest category were adduced.

В структурной кристаллографии решаются две основные задачи: во-первых, определение строения кристаллов и, во-вторых, преобразование кристаллических структур при изменении условий существования.

Каркасом строения кристаллов служат пространственные федоровские группы симметрии. На их основе построены теории правильных систем фигур. Но известные теории не охватывают всех возможных в кристаллографии систем одинаковых фигур. Например, на рис. 1 изображены ряды систем одинаковых асимметричных фигур. Среди них в системах, обозначенных буквами *b*, *z*, ряды фигур связаны элементами, названными В. В. Нардовым, элементами совмещения [3]. Кроме того, элементами совмещения служат повороты фигур вокруг осей, не приводящие к симметричным расположениям (рис. 1, *e*, *m*).

Колонки систем фигур, показанные на рис. 1 *a-e* и *ж-м*, можно назвать трансформационными. Они характеризуют взаимные переходы систем фигур с изменением элементов симметрии. Рассмотрение подобных переходов позволяет решить вторую задачу структурной кристаллографии, что наглядно показано В. В. Нардовым с помощью сдвиговых деформаций [2]. Физически различаются смещения вдоль, поперек или косо по отношению к

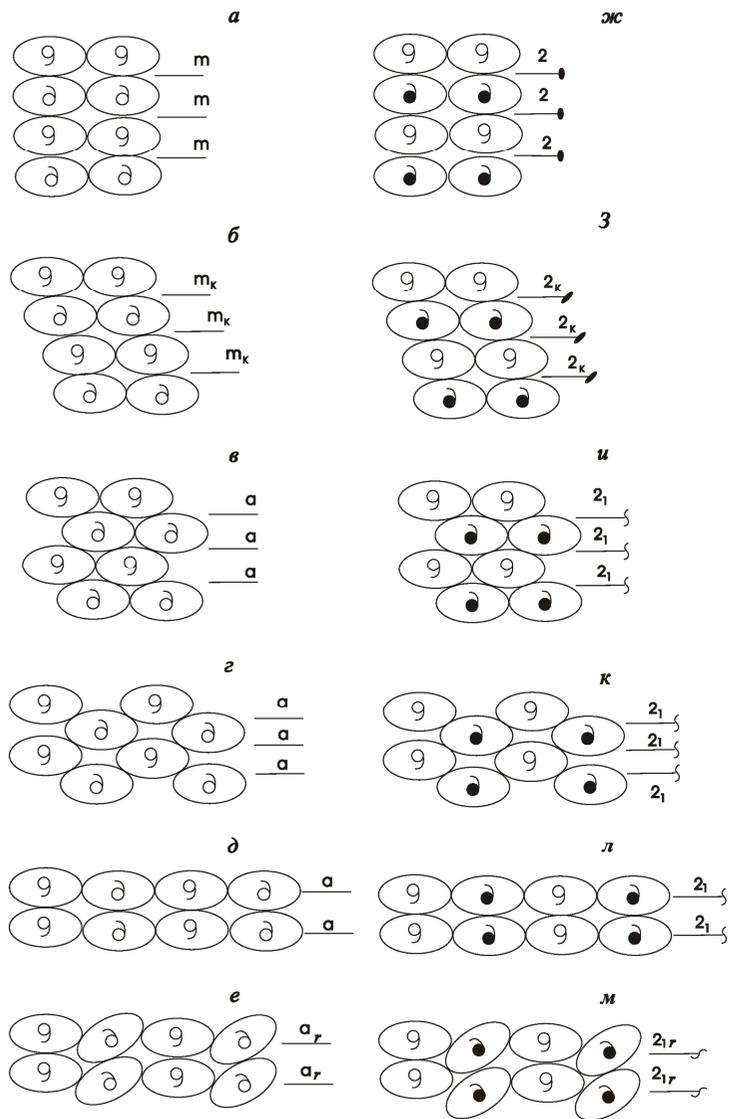


Рис. 1. Кристаллографические системы одинаковых асимметричных фигур, связанных плоскостями совмещения (а–е) и осями совмещения второго порядка (ж–м).

m – плоскости симметрии, m_k – плоскости косоугольного совмещения, a – плоскости скользящего отражения, a_r – плоскости скользящего отражения с разворотом частиц, 2 – оси симметрии второго порядка, 2_k – косые оси совмещения второго порядка, 2_1 – винтовые оси симметрии второго порядка, 2_{1r} – винтовые оси симметрии второго порядка с разворотом частиц.

существующим осям симметрии. В последнем случае могут возникнуть элементы совмещения, названные разорванными осями [3, 4].

При трансформации систем могут периодически смещаться блоки, состоящие из двух и более слоев. Это явление можно назвать гофрировкой структур. В наиболее сложных случаях гофрировка возможна по нескольким направлениям. Подобная трансформация происходит не только в экспериментальных условиях, но и весьма широко распространена в природе, охватывая значительную часть минеральных видов.

Рассмотрим структурные переходы на примере структуры пироксенов состава $Mg_2Si_2O_6$. Идеализированная структура протопироксена должна отвечать симметрии $Cmcm$ с параметрами $a_0 = 9.30$, $b_0 = 8.91$, $c_0 = 5.2$ Å (рис. 2). Если соседние слои по (100), состоящие из кремнекислородных лент, сдвигать относительно предыдущих на 1.2 Å в направлении [001], получим структуру высокого клиноэнстатита симметрии $C12/c1$. Схематично можно представить эти структуры следующим образом. Возьмем за исходный рисунок (рис. 2, а) проекцию структуры на (010).

Вместо кремнекислородных тетраэдров изобразим частицы, симметрию которых показывает центральный треугольник. В результате получим рисунок 3, а – расположение частиц в протопироксене. При поступательном сдвигении лент тетраэдров вдоль [001] получим схему, иллюстрирующую структуру клиноэнстатита (рис. 3, б). Дополнительные развороты тетраэдров понижают симметрию высокого клиноэнстатита до группы $P2_1/c$, т. е. формируется низкий клиноэнстатит.

Если сдвигать слои из тетраэдров через один в идеализированном протопироксене, получается структура протозенстатита симметрии $Pbcp$ (рис. 3, в), которая при дополнительных разворотах тетраэдров понизится до еще одной ромбической разновидности – протозенстатита симметрии $P2_1cp$. При последовательном смещении пачек из двух слоев тетраэдров протопироксена в одном направлении, а следующих двух слоев в обратном направлении получается структура ортоэнстатита симметрии $Pbca$ с параметром a_0 в два раза выше проекции параметра a_0 клиноэнстатита на плоскость, перпендикулярную оси c (рис. 3, г).

Такие же смещения, но более крупными блоками, приводят к образованию двойников клиноэнстатита симметрии $pm'ca$. С некоторой долей условности структуру энстатита также можно рассматривать как двойниковую структуру клиноэнстатита, у которой параллельно оси a проходят двойниковые оси $2'_1$, а перпендикулярно оси c проходят двойниковые плоскости скользящего отражения a' .

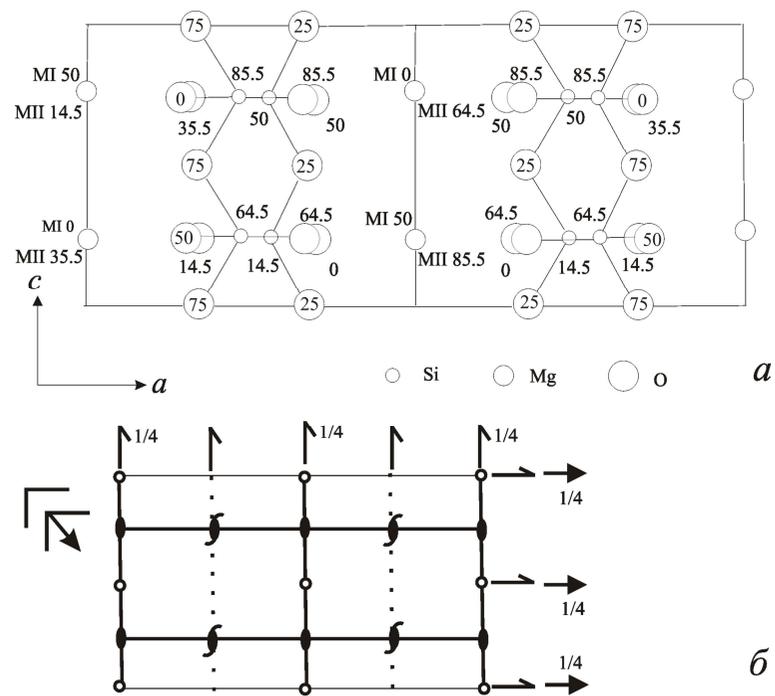


Рис. 2. Структура идеализированного протопироксена состава $Mg_2Si_2O_6$ в проекции на плоскость (010) :
а – структура, б – элементы симметрии структуры.

При всех преобразованиях несохраняющиеся элементы симметрии не исчезают, а превращаются в элементы совмещения. При превращении протопироксена в высокий клиноэнстатит плоскости симметрии (001) преобразуются в разорванные плоскости совмещения, а плоскости симметрии и плоскости скользящего отражения (100) переходят в плоскости косоугольного совмещения. Плоскости n и c (010) остаются в новой структуре. В протозэнстатите плоскости (001) преобразуются в плоскости скользящего отражения a , плоскости (100) – в плоскости косоугольного совмещения.

Полная классификация кристаллографических систем одинаковых фигур должна включать системы фигур, связанных элементами симметрии, и переходные типы. Такую классификацию, включающую системы правильных фигур и группы гомологии, пытался создать В. В. Нардов. Часть из его систем низшей категории была опубликована коллективом кафедры Ленинградского университета [4]. В построениях В. В. Нардова основным структурным

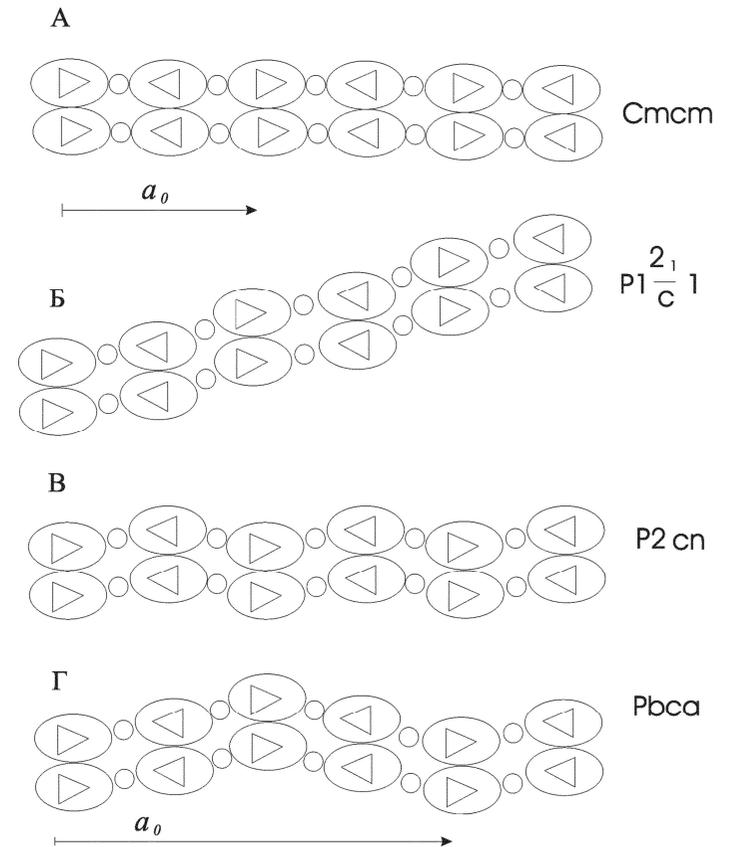


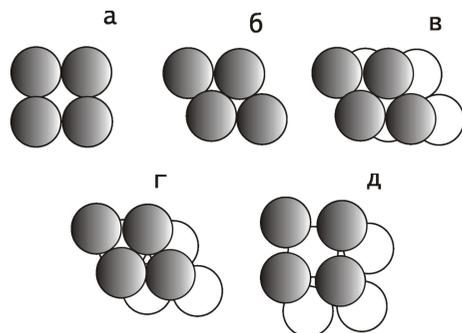
Рис. 3. Смещения частиц при образовании пироксеновых структур: А – исходная структура протопироксена, Б – клиноэнстатит, В – протозэнстатит, Г – энстатит.

элементом служат асимметричные эллипсоидальные частицы. В реальных кристаллах частицы могут быть представлены атомами, ионами, молекулами или их комбинациями.

Исходная нардовская система представлена триклинной структурой с примитивными ячейками, в узлах которой и располагаются одинаковые частицы. По степени упаковки выделяются четыре основных вида, которые различаются плотностью укладки фигур в слоях. Эти виды можно проиллюстрировать на примере упаковок шаровых частиц, которые рассматриваются в качестве частных случаев эллипсоидальных частиц. К этим видам логично добавить пятый вид, приводящий к объемноцентрированной упаковке (рис. 4).

Рис. 4. Основные типы укладок частиц в правильных структурах.

Пояснения в тексте.



Все упаковки взаимно связаны сдвиговыми деформациями. Помимо сдвиговых деформаций возможны деформации растяжения

(сжатия), изменяющие степень заполнения пространства и ажурность построек из фигур. На рис. 1 подобным образом из фигур под буквами *в, и* получены фигуры *з, к* соответственно.

Заменой частиц примитивной триклинной системы одинаковыми группами из равных двух, трех и более асимметричных частиц получаются надсистемы взаимопроникающих примитивных систем. Частицы этих групп могут быть связаны элементами симметрии. В этом случае и взаимопроникающие примитивные системы асимметричных фигур будут связаны элементами симметрии (см. рис. 1, *а, ж*).

В. В. Нардов в последних публикациях отнес к гомологичным системы, полученные смещением слоев, а также растяжением – сжатием. Но его гомология принципиально отличается от гомологии В. И. Михеева, в которой к гомологичным преобразованиям относятся однородные деформации, одинаково деформирующие и весь объем исходных симметричных структур, их частиц, и их связи [2]). В гомологии же В. В. Нардова допускаются смещения пачек, рядов, лент и слоев без изменения формы самих фигур или с другим характером смещения фигур внутри пачек.

В результате возникают такие элементы как косая инверсия в точке, разорванные оси симметрии и разорванные плоскости. Поэтому правильнее будет оставить за такими элементами первое название «элементы совмещения», а нардовские гомологические пространственные группы назвать группами совмещения.

При выводе правильных систем фигур и групп симметрии, кроме симметрических преобразований В. В. Нардовым [3] использованы сдвиговые преобразования, превращающие исходные системы в другие той же или иной пространственной группы симметрии. Например, из систем симметрии $pm11$ и $p211$, изображенных на рис. 1, *а, ж* при сдвиге одних слоев параллельно элементам симметрии относительно соседних на $1/2$ длины частиц, выводятся системы симметрии $pa11$ и $p2_111$, изображенные на рис. 1, *в, и*.

**Координаты центральных точек асимметричных фигур
в правильных системах низшей категории**

<i>1. P1</i>	<i>11. P2/c</i>	6. 1/4, 1/8, 1/4
1. x, y, z	1. 1/4, 0, 1/4	7. 1/8, 1/8, 1/4
	2. 1/4, 1/4, 1/4	8. 1/8, 1/8, 0
<i>2. P1̄</i>	3. 1/4, 0, 0	9. 0, 1/4, 1/4
1. 1/4, 0, 0	4. 0, 1/4, 0	
2. 1/4, 1/4, 0	5. 1/4, 1/4, 0	<i>15. C2/c</i>
3. 1/4, 1/4, 1/4	6. 1/4, 0, 1/8	1. 1/4, 0, 1/4
	7. 0, 0, 1/8	2. 1/4, 1/8, 0
<i>3. P2</i>	8. 0, 1/4, 1/8	3. 1/8, 1/8, 0
1. 1/4, y, 0	9. 1/4, 1/4, 1/8	4. 1/8, 0, 1/4
2. 1/4, y, 1/4		5. 1/4, 1/8, 1/4
	<i>12. P2₁/m</i>	6. 1/8, 1/8, 1/4
<i>4. P2₁</i>	1. 0, 1/8, 0	7. 1/4, 1/8, 1/8
1. 0, y, 0	2. 1/4, 0, 0	8. 1/4, 1/4, 1/4
2. 1/4, y, 2	3. 1/4, 1/8, 0	9. 1/4, 0, 1/8
3. 1/4, y, 1/4	4. 1/4, 0, 1/4	10. 1/8, 1/4, 1/4
	5. 1/4, 1/8, 1/4	11. 1/4, 1/4, 1/8
<i>5. C2₂</i>		12. 1/4, 0, 0
1. 1/4, y, 0	<i>13. P2₁/c</i>	13. 0, 1/4, 0
2. 1/8, y, 0	1. 0, 1/8, 0	14. 1/8, 1/8, 1/8
3. 0, y, 1/4	2. 0, 1/4, 0	15. 1/8, 0, 1/8
4. 1/4, y, 1/4	3. 1/4, 0, 0	16. 1/8, 0, 0
5. 1/8, y, 1/4	4. 1/4, 1/8, 0	17. 1/8, 1/4, 1/8
	5. 1/4, 1/4, 0	18. 1/8, 1/4, 0
<i>6. Pm</i>	6. 0, 0, 1/8	19. 0, 1/8, 0
1. x, 1/4, z	7. 0, 1/8, 1/8	20. 0, 1/8, 1/8
	8. 0, 1/4, 1/8	21. 0, 0, 1/8
<i>7. Pc</i>	9. 1/4, 0, 1/8	22. 0, 1/4, 1/8
1. x, 0, z	10. 1/4, 1/8, 1/8	
2. x, 1/4, z	11. 1/4, 1/4, 1/8	<i>16. Pmm2</i>
	12. 0, 0, 1/4	1. 1/4, 1/4, z
<i>8. Cm</i>	13. 0, 1/8, 1/4	
1. x, 1/4, z	14. 0, 1/4, 1/4	<i>17. Pcc2</i>
2. x, 1/8, z	15. 1/4, 0, 1/4	1. 0, 1/4, z
	16. 1/4, 1/8, 1/4	2. 1/4, 1/4, z
<i>9. Cc</i>	17. 1/4, 1/4, 1/4	
1. x, 0, z		<i>18. Pma2</i>
2. x, 1/4, z	<i>14. C2/m</i>	1. 0, 1/8, z
3. x, 1/8, z	1. 1/8, 1/4, 0	2. 1/8, 0, z
	2. 1/4, 1/8, 0	3. 1/8, 1/4, z
<i>10. P2/m</i>	3. 1/4, 1/4, 1/4	
1. 1/4, 1/4, 0	4. 0, 1/8, 1/4	<i>19. Pnc2</i>
2. 1/4, 1/4, 1/4	5. 1/8, 1/4, 1/4	1. 0, 1/4, z

Продолжение табл.

2. $1/4, 1/4, z$	8. $1/8, 1/4, z$	8. $1/8, 1/8, z$
3. $1/4, 0, z$	9. $1/8, 0, z$	
4. $1/4, 1/8, z$		33. <i>Fmm2</i>
5. $0, 1/8, z$	26. <i>Cmm2</i>	1. $1/4, 1/8, z$
	1. $1/8, 1/4, z$	2. $1/8, 1/8, z$
20. <i>Pnn2</i>	2. $1/8, 1/8, z$	
1. $0, 1/4, z$		34. <i>Fdd2</i>
2. $1/4, 1/4, z$	27. <i>Ccc2</i>	1. $0, 1/8, z$
3. $0, 1/8, z$	1. $0, 1/4, z$	2. $1/8, 1/8, z$
4. $1/8, 1/4, z$	2. $1/4, 1/8, z$	3. $0, 1/16, z$
5. $1/8, 1/8, z$	3. $1/4, 1/4, z$	4. $1/16, 1/8, z$
	4. $0, 1/8, z$	5. $1/16, 1/16, z$
21. <i>Pva2</i>		6. $0, 3/16, z$
1. $0, 1/4, z$	28. <i>Cmc2₁</i>	7. $0, 1/4, z$
2. $1/4, 1/4, z$	1. $1/4, 1/4, z$	8. $1/16, 3/16, z$
3. $0, 1/8, z$	2. $1/8, 1/4, z$	
4. $1/8, 1/4, z$	3. $1/4, 0, z$	35. <i>Imm2</i>
5. $1/8, 1/8, z$	4. $1/8, 0, z$	1. $1/4, 1/4, z$
	5. $1/4, 1/8, z$	2. $1/8, 1/8, z$
22. <i>Pmc2₁</i>	6. $1/8, 1/8, z$	3. $1/8, 1/4, z$
1. $1/4, 0, z$		
2. $1/4, 1/4, z$	29. <i>Amm2</i>	36. <i>Ima2</i>
	1. $1/8, 1/4, z$	1. $1/8, 1/8, z$
23. <i>Pmn2₁</i>	2. $1/8, 1/8, z$	2. $1/8, 0, z$
1. $1/4, 0, z$		3. $1/8, 1/4, z$
2. $1/4, 1/4, z$	30. <i>Asm2</i>	4. $0, 1/8, z$
3. $1/8, 1/4, z$	1. $0, 1/8, z$	5. $0, 1/4, z$
4. $1/8, 0, z$	2. $1/8, 0, z$	
	3. $1/8, 1/8, z$	37. <i>Iva2</i>
24. <i>Pca2₁</i>		1. $1/4, 1/4, z$
1. $0, 0, z$	31. <i>Ama2</i>	2. $1/4, 0, z$
2. $1/4, 0, z$	1. $0, 1/8, z$	3. $1/8, 1/8, z$
3. $0, 1/4, z$	2. $1/8, 0, z$	4. $1/8, 0, z$
4. $1/4, 1/4, z$	3. $1/8, 1/8, z$	5. $1/4, 1/8, z$
5. $1/8, 1/4, z$	4. $0, 1/4, z$	
6. $1/8, 0, z$	5. $1/8, 1/4, z$	38. <i>P222</i>
		1. $1/4, 1/4, 1/4$
25. <i>Pna2₁</i>	32. <i>Ava2</i>	2. $1/4, 1/4, 0$
1. $0, 0, z$	1. $1/4, 0, z$	
2. $0, 1/4, z$	2. $1/4, 1/4, z$	39. <i>P222₁</i>
3. $1/4, 0, z$	3. $0, 1/8, z$	1. $0, 0, 1/8$
4. $1/4, 1/4, z$	4. $0, 1/4, z$	2. $1/4, 1/4, 1/4$
5. $1/8, 1/8, z$	5. $1/8, 0, z$	3. $1/4, 0, 1/4$
6. $1/4, 1/8, z$	6. $1/4, 1/8, z$	4. $1/4, 0, 1/8$
7. $0, 1/8, z$	7. $1/8, 1/4, z$	5. $1/4, 1/4, 1/8$

40. $P2_12_12$	3. $1/8, 1/8, 1/8$	1. $0, 1/4, 1/4$
1. $1/4, 1/4, 0$		2. $1/8, 1/4, 1/4$
2. $1/4, 1/8, 0$	45. $I222$	3. $1/8, 1/4, 0$
3. $1/4, 0, 0$	1. $1/4, 1/4, 0$	
4. $1/4, 1/4, 1/4$	2. $1/4, 1/8, 0$	52. $Pmna$
5. $1/4, 0, 1/4$	3. $1/8, 1/8, 0$	1. $1/4, 1/4, 0$
6. $1/4, 1/8, 1/4$	4. $1/4, 1/4, 1/4$	2. $1/8, 1/4, 0$
7. $1/8, 1/8, 0$	5. $1/4, 1/8, 1/4$	3. $1/4, 1/4, 1/8$
8. $1/8, 1/8, 1/4$	6. $1/8, 1/8, 1/4$	4. $1/8, 1/4, 1/8$
9. $1/8, 0, 0$	7. $1/8, 1/8, 1/8$	5. $1/4, 0, 1/8$
10. $1/8, 0, 1/4$		6. $1/8, 0, 1/8$
	46. $I2_12_12_1$	7. $1/8, 1/4, 1/4$
41. $P2_12_12_1$	1. $0, 1/8, 1/4$	8. $1/8, 0, 1/4$
1. $0, 0, 0$	2. $1/4, 1/4, 1/4$	
2. $1/4, 0, 0$	3. $1/8, 1/8, 1/4$	53. $Pcca$
3. $1/4, 0, 1/8$	4. $1/8, 0, 1/4$	1. $1/4, 1/4, 1/4$
4. $1/8, 0, 0$	5. $1/4, 1/8, 1/4$	2. $1/8, 1/4, 1/4$
5. $1/8, 0, 1/8$	6. $1/8, 1/8, 1/8$	3. $1/8, 0, 1/4$
6. $1/8, 1/8, 1/8$		4. $1/4, 1/4, 1/8$
	47. $Pmmm$	5. $1/8, 1/4, 1/8$
42. $C222$	1. $1/4, 1/4, 1/4$	6. $0, 1/4, 1/8$
1. $1/4, 0, 1/4$		7. $0, 0, 1/8$
2. $1/4, 1/8, 0$	48. $Pccm$	8. $1/8, 0, 1/8$
3. $1/8, 1/8, 0$	1. $0, 1/4, 1/8$	9. $1/4, 1/4, 0$
4. $1/8, 1/8, 1/4$	2. $1/4, 1/4, 1/8$	10. $1/8, 1/4, 0$
5. $1/8, 0, 1/4$	3. $1/4, 1/4, 1/4$	11. $0, 1/4, 0$
6. $1/4, 1/8, 1/4$		12. $1/8, 0, 0$
	49. $Pvan$	
43. $C222_1$	1. $0, 1/4, 1/4$	54. $Pnna$
1. $0, 1/4, 0$	2. $1/4, 1/4, 1/4$	1. $0, 0, 1/4$
2. $1/8, 1/4, 0$	3. $0, 1/8, 1/4$	2. $1/8, 0, 1/4$
3. $1/4, 1/4, 0$	4. $1/8, 1/4, 1/4$	3. $1/4, 1/8, 1/4$
4. $0, 1/8, 0$	5. $1/8, 1/8, 1/4$	4. $1/8, 1/8, 1/4$
5. $1/8, 1/8, 0$	6. $1/8, 1/4, 0$	5. $0, 1/8, 1/4$
6. $1/4, 1/8, 0$	7. $1/8, 1/8, 0$	6. $0, 0, 1/8$
7. $1/4, 0, 1/8$		7. $1/8, 0, 1/8$
8. $1/4, 1/8, 1/8$	50. $Pnnn$	8. $1/4, 1/8, 1/8$
9. $1/4, 1/4, 1/8$	1. $1/8, 1/8, 0$	9. $1/8, 1/8, 1/8$
10. $1/8, 0, 1/8$	2. $1/8, 1/4, 0$	10. $0, 1/8, 1/8$
11. $1/8, 1/8, 1/8$	3. $1/4, 1/4, 0$	11. $1/4, 1/4, 1/8$
12. $0, 0, 1/8$	4. $1/8, 1/4, 1/8$	12. $1/8, 1/4, 1/8$
	5. $1/4, 1/4, 1/8$	13. $1/8, 0, 0$
44. $F222$	6. $1/8, 1/8, 1/8$	14. $1/4, 1/8, 0$
1. $1/4, 1/8, 0$		15. $1/8, 1/8, 0$
2. $1/8, 1/8, 0$	51. $Pnma$	16. $0, 1/8, 0$

Продолжение табл.

17. $1/4, 1/4, 0$
18. $1/8, 1/4, 0$
19. $0, 1/4, 0$

55. Pват

1. $1/4, 1/4, 1/4$
2. $0, 1/4, 1/4$
3. $1/8, 1/8, 1/4$
4. $0, 1/8, 1/4$
5. $1/8, 1/4, 1/4$

56. Pвст

1. $1/4, 0, 0$
2. $0, 1/8, 0$
3. $1/4, 0, 1/8$
4. $1/4, 1/4, 1/8$
5. $0, 1/8, 1/8$
6. $0, 0, 1/8$
7. $0, 1/4, 1/8$

57. Pmmn

1. $1/4, 1/4, 1/4$
2. $1/4, 1/8, 0$
3. $1/8, 1/8, 0$
4. $1/8, 1/8, 1/4$
5. $1/4, 1/8, 1/4$

58. Pnnm

1. $1/4, 1/4, 1/4$
2. $0, 1/4, 1/4$
3. $0, 1/8, 1/4$
4. $1/8, 1/8, 1/4$
5. $1/4, 1/4, 1/8$
6. $0, 1/4, 1/8$
7. $0, 1/8, 1/8$
8. $1/8, 1/8, 1/8$
9. $1/8, 1/4, 1/4$
10. $1/8, 1/4, 1/8$

59. Pbcn

1. $0, 1/4, 0$
2. $1/8, 1/4, 0$
3. $1/4, 1/4, 0$
4. $0, 1/8, 0$
5. $1/8, 1/8, 0$

6. $1/4, 1/8, 0$
7. $1/8, 0, 0$
8. $1/4, 0, 0$
9. $0, 1/4, 1/8$
10. $1/8, 1/4, 1/8$
11. $1/4, 1/4, 1/8$
12. $0, 1/8, 1/8$
13. $1/8, 1/8, 1/8$
14. $1/4, 1/8, 1/8$
15. $0, 0, 1/8$
16. $1/8, 0, 1/8$
17. $1/4, 0, 1/8$
18. $1/8, 1/4, 1/4$
19. $1/4, 1/4, 1/4$
20. $1/8, 1/8, 1/4$
21. $1/4, 1/8, 1/4$
22. $1/8, 0, 1/4$
23. $1/4, 0, 1/4$

60. Pccn

1. $0, 0, 1/4$
2. $0, 1/8, 1/4$
3. $0, 1/4, 1/4$
4. $1/8, 1/4, 1/4$
5. $1/8, 1/8, 1/4$
6. $0, 0, 1/8$
7. $0, 1/8, 1/8$
8. $0, 1/4, 1/8$
9. $1/8, 1/4, 1/8$
10. $1/8, 1/8, 1/8$
11. $0, 1/8, 0$
12. $0, 1/4, 0$
13. $1/8, 1/4, 0$
14. $1/8, 1/8, 0$

61. Pnta

1. $1/8, 0, 0$
2. $1/4, 0, 0$
3. $0, 0, 1/8$
4. $1/8, 0, 1/8$
5. $1/4, 0, 1/8$
6. $0, 0, 1/4$
7. $1/8, 0, 1/4$
8. $1/4, 0, 1/4$
9. $0, 1/8, 0$

10. $0, 1/8, 1/8$
11. $0, 1/8, 1/4$
12. $1/8, 1/8, 0$
13. $1/8, 1/8, 1/8$
14. $1/8, 1/8, 1/4$
15. $1/4, 1/8, 0$
16. $1/4, 1/8, 1/8$
17. $1/4, 1/8, 1/4$

62. Pвса

1. $1/4, 1/4, 0$
2. $1/8, 1/4, 0$
3. $0, 1/4, 0$
4. $1/4, 1/8, 0$
5. $1/8, 1/8, 0$
6. $0, 1/8, 0$
7. $1/4, 1/4, 1/8$
8. $1/8, 1/4, 1/8$
9. $1/8, 1/8, 1/8$
10. $1/4, 1/4, 1/4$

63. Cmnm

1. $1/4, 1/8, 1/4$
2. $1/8, 1/8, 1/4$

64. Cccm

1. $1/4, 1/8, 1/4$
2. $1/8, 1/8, 1/4$
3. $1/4, 1/8, 1/8$
4. $1/8, 1/8, 1/8$
5. $1/4, 0, 1/8$
6. $1/8, 0, 1/8$

65. Cmna

1. $1/4, 1/8, 1/4$
2. $1/8, 1/8, 1/4$
3. $1/8, 1/8, 0$

66. Ccca

1. $1/4, 1/8, 0$
2. $1/8, 1/8, 0$
3. $1/4, 1/8, 1/8$
4. $1/8, 1/8, 1/8$
5. $1/4, 0, 1/8$
6. $1/8, 0, 1/8$

7. $1/4, 1/8, 1/4$	69. <i>Fmmm</i>	2. $1/4, 1/8, 1/8$
8. $1/8, 1/8, 1/4$	1. $1/8, 1/8, 1/4$	3. $1/4, 1/4, 1/8$
9. $1/8, 0, 1/4$	2. $1/8, 1/8, 1/8$	4. $1/4, 1/8, 1/4$
	3. $0, 1/8, 1/8$	5. $1/8, 1/4, 1/4$
67. <i>Cmcm</i>	70. <i>Fddd</i>	72. <i>Ivav</i>
1. $1/4, 1/8, 0$	1. $1/16, 1/16, 0$	1. $1/4, 1/8, 1/4$
2. $1/8, 1/4, 0$	2. $1/8, 1/8, 0$	2. $1/8, 1/8, 1/4$
3. $1/8, 1/8, 0$	3. $1/8, 1/16, 0$	3. $1/4, 1/8, 1/8$
4. $1/4, 1/8, 1/8$	4. $3/16, 1/16, 0$	4. $1/8, 1/8, 1/8$
5. $1/8, 1/4, 1/8$	5. $1/4, 1/16, 0$	5. $1/4, 1/4, 1/8$
6. $1/8, 1/8, 1/8$	6. $1/4, 1/8, 0$	6. $1/4, 0, 1/8$
7. $1/4, 0, 1/8$	7. $3/16, 1/8, 0$	7. $1/8, 0, 1/8$
8. $1/8, 0, 1/8$	8. $1/4, 1/16, 1/16$	
9. $1/4, 1/4, 1/8$	9. $3/16, 1/16, 1/16$	73. <i>Imma</i>
	10. $1/16, 1/16, 1/16$	1. $1/8, 1/8, 0$
68. <i>Cmca</i>	11. $1/8, 1/16, 1/16$	2. $1/4, 1/8, 0$
1. $1/4, 1/8, 0$	12. $1/8, 1/8, 1/16$	3. $1/8, 1/8, 1/8$
2. $1/8, 1/4, 0$	13. $3/16, 1/8, 1/16$	4. $1/4, 1/8, 1/8$
3. $1/8, 1/8, 0$	14. $5/16, 1/16, 1/16$	5. $1/4, 0, 1/8$
4. $1/8, 1/8, 1/8$	15. $3/8, 1/16, 1/16$	
5. $1/4, 1/8, 1/8$	16. $5/16, 1/8, 1/16$	74. <i>Ivca</i>
6. $1/4, 1/4, 1/8$	17. $3/8, 1/8, 1/16$	1. $1/8, 1/8, 0$
7. $1/8, 1/4, 1/8$	18. $3/8, 1/16, 1/16$	2. $1/8, 0, 0$
8. $1/4, 0, 1/8$	19. $3/8, 1/8, 1/8$	3. $1/8, 1/4, 0$
9. $1/8, 0, 1/8$		4. $1/8, 1/8, 1/8$
10. $1/8, 1/4, 1/4$	71. <i>Immm</i>	
11. $1/8, 1/8, 1/4$	1. $1/8, 1/8, 1/8$	
12. $1/8, 0, 1/4$		

В целом эти группы характеризуют системы, промежуточные (переходные) между правильными (симметричными) системами асимметричных фигур. Количество кристаллографических правильных систем таких фигур конечно, но нет публикаций ни полного списка для всех групп, ни для отдельных категорий.

Нами применен способ вывода, который состоит в следующем: для пространственных групп низшей категории выбирается $1/16$ часть элементарной ячейки, ограниченная плоскостями (100), (010), (001) и с максимальным числом элементов симметрии.

В такой подячейке ставится точка либо в каком-нибудь узле, либо в середине ребра, либо в середине грани, либо в центре. Точка не может располагаться в плоскости симметрии, центре инверсии или на оси симметрии. С помощью элементов симметрии данная точка размножается и вокруг каждой точки описываются эллипсоиды с увеличивающимся радиусом до соприкосновения с

другими эллипсоидами. Для сохранения жесткости структуры и обеспечения максимального количества контактов в некоторых случаях дальнейшее расширение объемов эллипсоидов производится совместно со смещением центра в стороны от первоначальных точек соприкосновения.

Описанный способ дал возможность получить общее количество типов кристаллографических пространственных систем асимметричных фигур низшей категории. После исключения эквивалентных систем их оказалось 472 (табл.). Разновидности этих систем, отличающиеся степенью упаковки, можно получить меняя в пространстве ориентировку эллипсоидов и параметры исходных ячеек.

Для вывода структур из частиц, обладающих симметрией, можно использовать позиции Уайкова [1]. Исходные точки этих позиций располагаются на элементах симметрии.

Литература

1. *Галулин Р. В.* Лекции по геометрическим основам кристаллографии. Челябинск: Челябинский гос. ун-т, 1989. 81 с.
2. *Михеев В. И.* Гомология кристаллов. Л.: Гостоптехиздат, 1961. 208 с.
3. *Нардов В. В.* Элементы совмещения // Кристаллография. Труды Федоровской научной сессии 1953 года. Л., 1955. С. 155–158.
4. *Нардов В. В.* Кристаллографические системы фигур и пространственные группы гомологии (низшая категория) // Вопросы генетической и структурной кристаллографии. Л.: Ленигр. ун-т, 1978. С. 25–71.