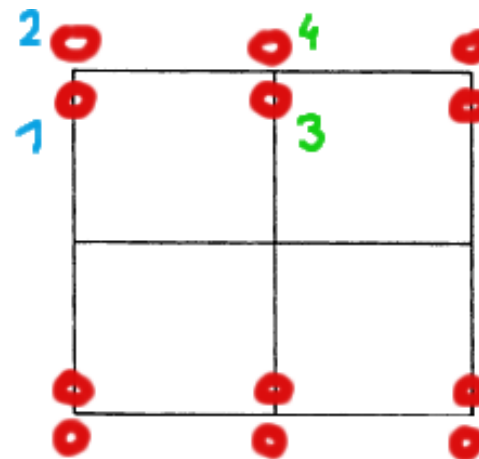
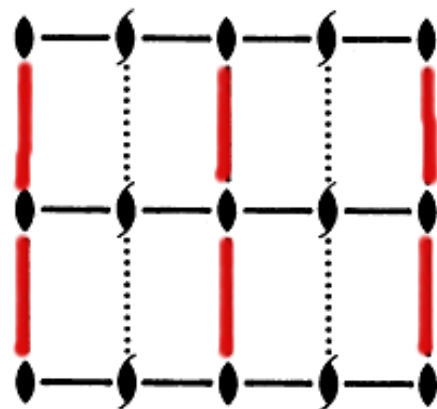


– Zadanie

Narysuj wszystkie atomy na pozycji Wyckoff'a „c” w grupie Amm2



Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) x, \bar{y}, z	(4) \bar{x}, y, z
8	<i>f</i>	1	x, y, z	\bar{x}, \bar{y}, z	x, \bar{y}, z	\bar{x}, y, z
4	<i>e</i>	$m..$	$\frac{1}{2}, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$		
4	<i>d</i>	$m..$	$0, y, z$	$0, \bar{y}, z$		
4	c	$.m.$	$x, 0, z$	$\bar{x}, 0, z$		
2	<i>b</i>	$mm2$	$\frac{1}{2}, 0, z$			
2	<i>a</i>	$mm2$	$0, 0, z$			

– Rozwiązanie

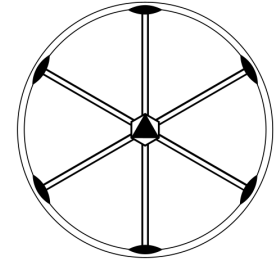
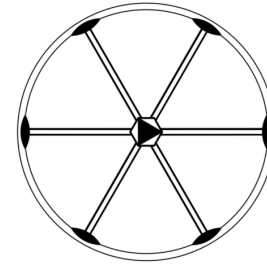
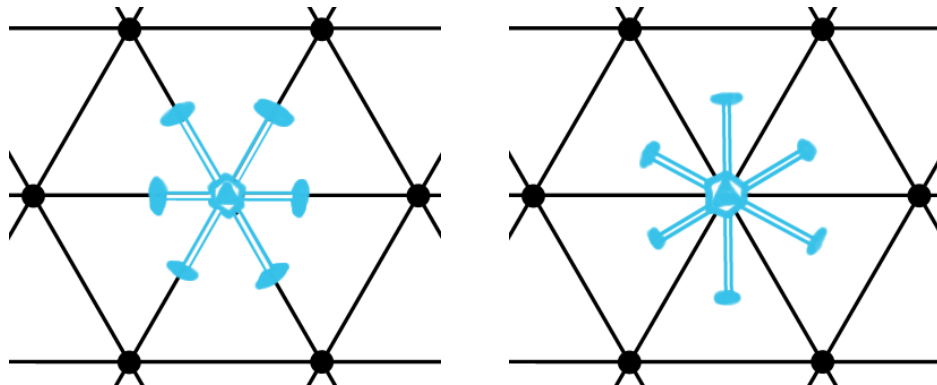
Zgodnie z liczebnością, takich pozycji jest cztery i oznaczono je na rysunku numerami od 1 do 4

Zadanie

– Czy symbole $P \bar{6}2c$ i $P \bar{6}c2$ są równoważne?

Rozwiązanie

1. Symbol klasy $\bar{6}2m$ i $\bar{6}m2$ to ta sama klasa
(bo zapisy odpowiadają tej samej bryle, tyle że przekręconej)
2. Elementy symetrii leżą różnie względem węzłów



– Wniosek: są to grupy nierównoważne

(3. Wektory $\bar{\tau}$ leżą tak samo względem węzłów (są równoległe do [001]))

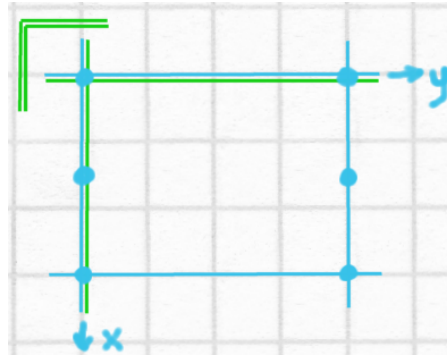
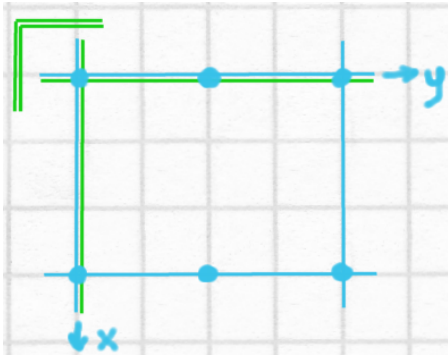
Zadanie

– Czy symbole $Abma$ i $Bbcm$ są równoważne?

Rozwiązanie

1. Obie grupy przestrzenne należą do tej samej klasy mmm ($2/m2/m2/m$)

2. Elementy symetrii klasy leżą tak samo względem węzłów

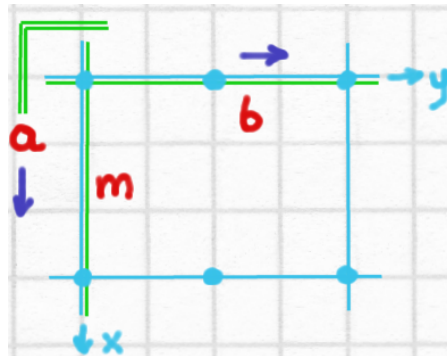
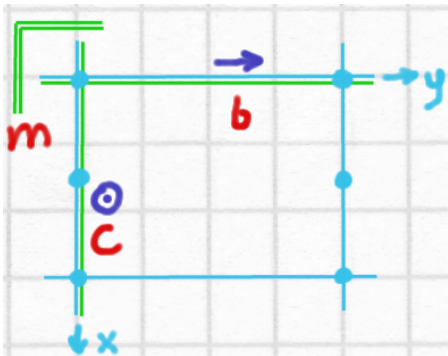


(w obu grupach jedna z trzech wzajemnie prostopadłych płaszczyzn zawiera te dodatkowe węzły,

analogicznie osie dwukrotne, których dla przejrzystości nie ma na rysunku)

3. Wektory $\bar{\tau}$ leżą tak samo względem węzłów

(jeden wskazuje kierunek związany z dodatkowymi węzłami a drugi jest do niego prostopadły)



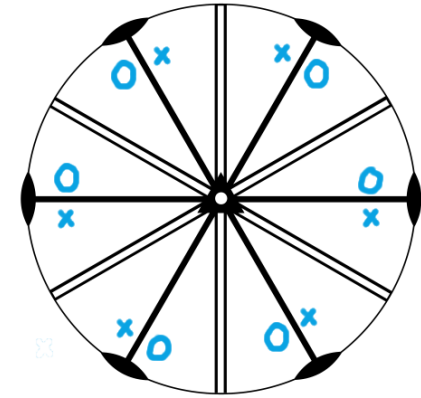
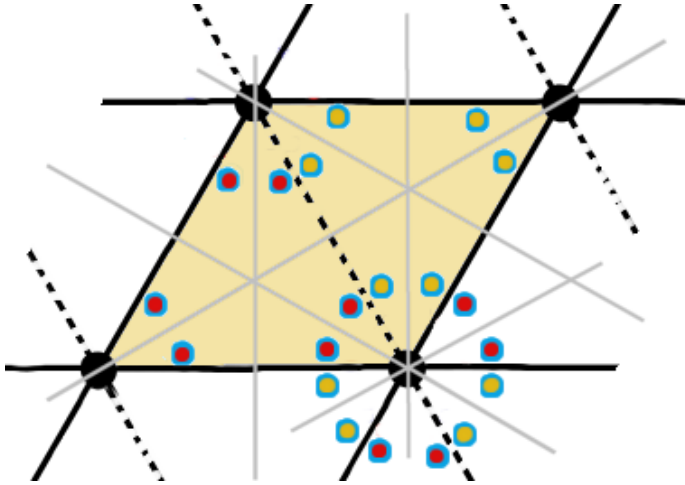
– Wniosek: są to grupy równoważne

Zadanie

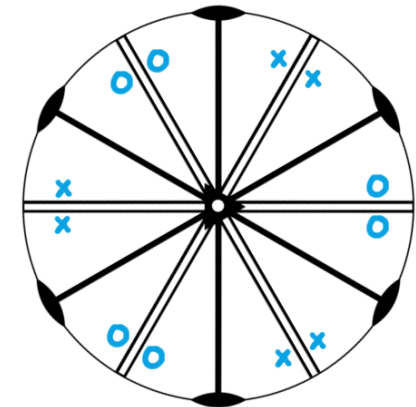
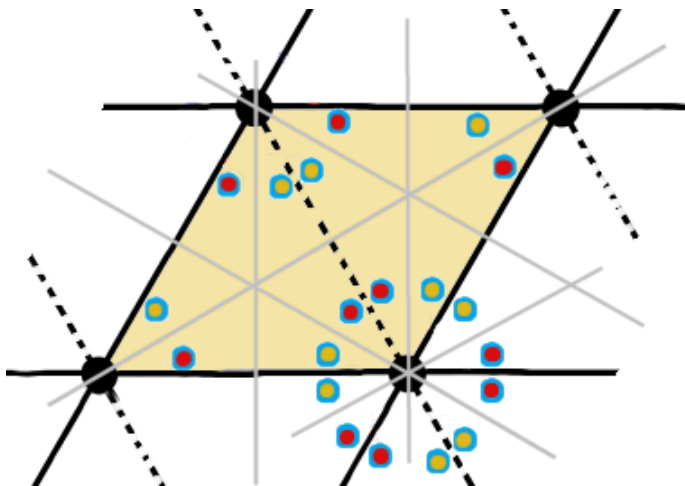
– Czy symbole $P \bar{3}m1$ i $P \bar{3}1m$ są równoważne?

Rozwiązanie za pomocą rozkładu położenia (dla porównania też grupa punktowa)

– Rozkład położenia w jednej komórce w grupie $P \bar{3}m$ ($P \bar{3}2/m$)



– Rozkład położenia w jednej komórce w grupie $P \bar{3}1m$ ($P \bar{3}12/m$)



– Wniosek: Atomy na pozycji ogólnej leżą różnie względem węzłów,
więc są to grupy nierównoważne

Zad.

Na podstawie poniższego fragmentu z Tablic Krystalograficznych dla grupy przestrzennej I4 podaj:

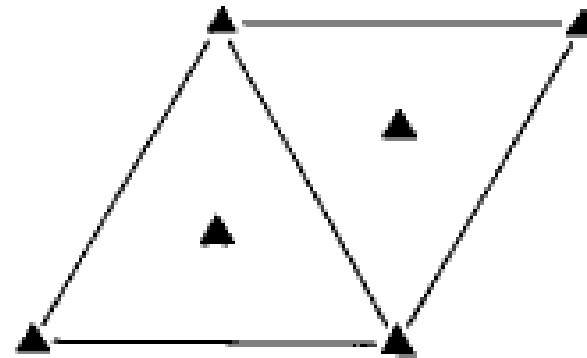
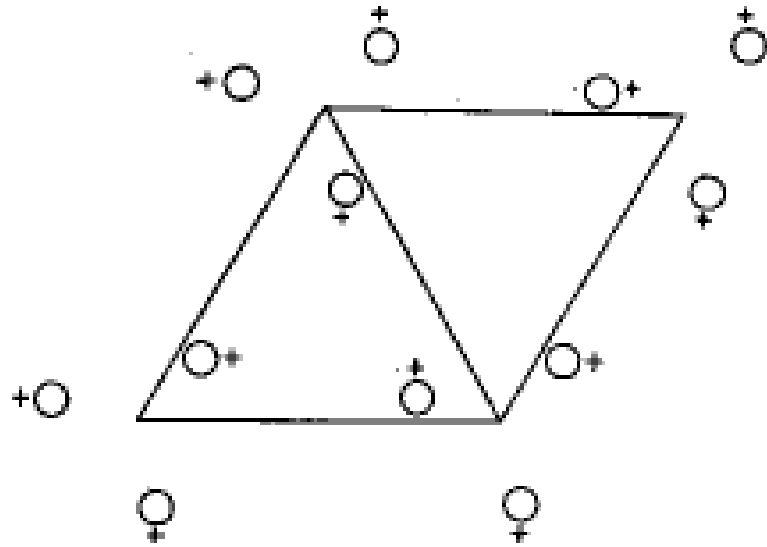
- ile atomów będzie wypadło średnio na komórkę elementarną jeśli dwa różne atomy leżą na pozycji Wyckoff'a „a” i jeden na pozycji ogólnej.
- na której pozycji Wyckoff'a leży atom jeżeli ma współrzędne 0.5, 0.5, 0.5.

Positions		Coordinates				
Multiplicity,	Wyckoff letter,					
Site symmetry		(0,0,0)+	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+$			
8	c	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) \bar{y}, x, z	(4) y, \bar{x}, z
4	b	2..	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$		
2	a	4..	$0, 0, z$			



Zadanie

– Narysuj wszystkie atomy w obrębie komórki elementarnej leżące na pozycji Wyckoffa „b” w grupie P3.



Origin on 3

?

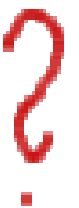
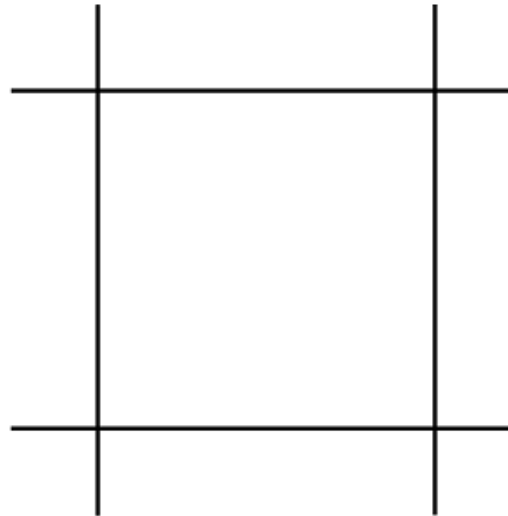
Number of positions,
Wyckoff notation,
and point symmetry

Co-ordinates of equivalent positions

3	<i>d</i>	1	$x, y, z; \bar{y}, x - y, z; y - x, \bar{x}, z.$
1	<i>c</i>	3	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z.$
1	<i>b</i>	3	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z.$
1	<i>a</i>	3	$0, 0, z.$

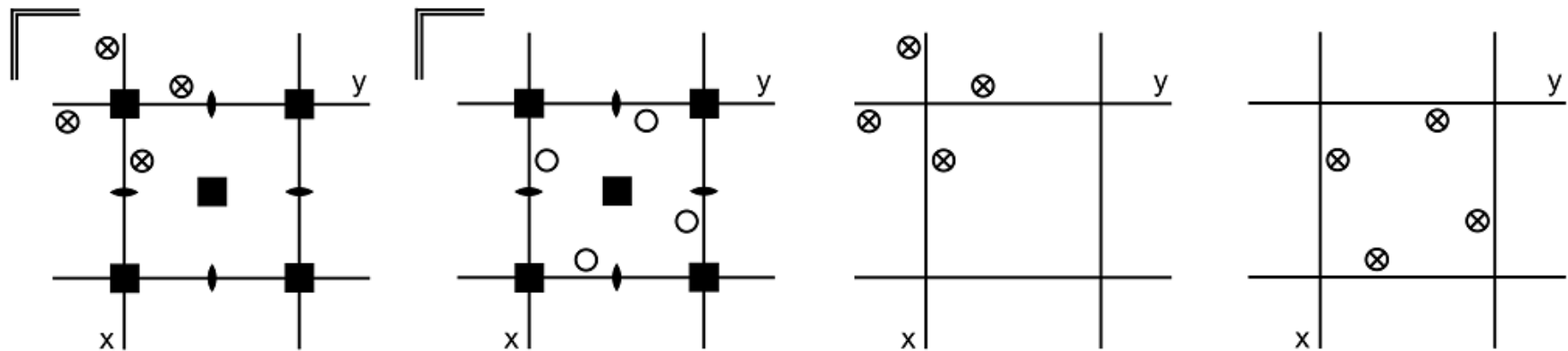
Zad.

Narysuj wszystkie atomy w komórce elementarnej jeżeli wiadomo, że kryształ opisano grupą $P4/m$ i zawiera on tylko jeden atom symetrycznie nierównoważny. Atom leży na ogólnej pozycji Wyckoff'a i ma współrzędne $0.3, 0.1, 0.4$. Narysuj je w obrębie tej samej komórki w rzucie na podstawę komórki.



Zad.

Który rysunek przedstawia rozkład położenia w jednej komórce elementarnej charakterystyczny dla pozycji ogólnej w grupie $P4/m$?



- a. Pierwszy. b. Drugi. c. Trzeci. d. Czwarty.