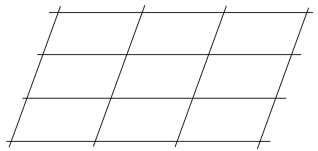
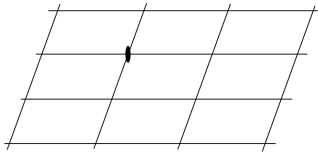
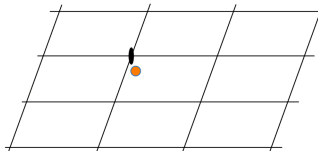
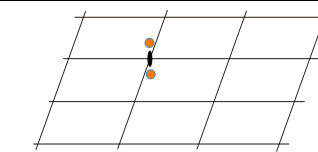
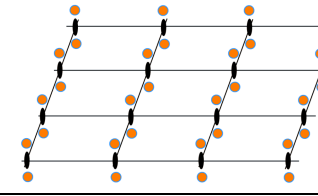
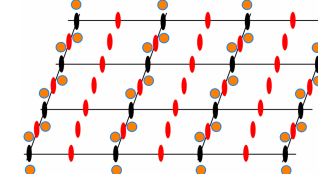
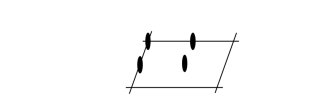




## Tworzenie opisu pozycji Wyckoff'a w grupie P2

<p>Rysuję kilka komórek elementarnych (rzut na podstawie komórki). Jest to układ jednoskośny więc boki nie są równe. Wygodniej jest rysować w rzucie x-y na ścianę skośną więc wybieram grupę P112</p>	
<p>W tej grupie symetria punktu (0,0,0) jest taka jak grupy punktowej do której należy ta grupa przestrzenna. Tutaj jest to „2”. (Czyli przez ten punkt przechodzi oś „2”)</p>	
<p>Umieszczam w komórce elementarnej punkt (x,y,z). Punkt powinien leżeć asymetrycznie i blisko (0,0,0)</p>	
<p>Rysuję punkty symetrycznie równoważne</p>	
<p>Powielam translacyjnie te punkty i elementy symetrii (równoważność translacyjna)</p>	
<p>Szukam wtórnych elementów symetrii</p>	
<p>Usuwa elementy równoważne translacyjnie i symetrycznie (w tym przykładzie nie ma takich symetrycznie równoważnych, które nie były by jednocześnie translacyjnie równoważne)</p>	
<p>Kolejno wypisuję znalezione niezależne elementy symetrii oraz ich kombinacje (tu kombinacji nie ma). Wypisuję je kolejno liniami od góry według rosnącej symetrii.</p>	<p>1 2 2 2 2</p>
<p>Określam liczebność każdej pozycji. W tym celu dla każdej pozycji umieszczam w komórce elementarnej punkt o zadanej symetrii własnej i badam gdzie pojawiają się punkty wtórne. Zliczam te punkty i wpisuję ich liczbę obok:</p>	<p>Np. punkt leżący w pozycji „szczególnej” - na osi „2” jest tylko jeden w komórce (pozostałe są translacyjnie równoważne):</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p style="text-align: center;">2 1 1 2 1 2 1 2 1 2</p>
<p>Określam położenia punktów wtórnych. Każdą linijkę oznaczam alfabetycznie zaczynając od najniższej. Każda taka linia jest znaną pozycją Wyckoff'a. Tak skonstruowaną tabelę odczytuje się np.: W grupie P2 pozycja Wyckoff'a „a” ma liczebność 1 (jeden) i symetrię „2”. Współrzędne tej pozycji to (0,0,z).</p>	<div style="text-align: center;">  </div> <p>2 e 1 x, y, z -x, -y, z 1 d 2 1/2, 1/2, z 1 c 2 1/2, 0, z 1 b 2 0, 1/2, z 1 a 2 0, 0, z</p>