На основе определённых правил из симморфных пространственных групп можно извлечь нетривиальные подгруппы, что даёт ещё 157 **несимморфных** пространственных групп. Всего пространственных групп 230. Операции симметрии при преобразовании точки x в симметрично равную ей x' (а значит, и всего пространства в себя) записываются в виде: $x' = Dx + \alpha(D) + t + t_c$, где D — точечные преобразования, $\alpha(D)$ — компоненты винтового переноса или скользящего отражения, $t + t_c$ — операции трансляц. группы Браве. Операции винтовой симметрии и соответствующие им элементы симметрии — винтовые оси имеют угл. компоненту $\alpha_s = 2\pi/N$ ($N = 2, 3, 4, 6$) и трансляционную $t_s = tq/N$, где t — трансляция решётки, поворот на α_s происходит одновременно с трансляцией вдоль оси N, q — индекс винтового поворота. Общий символ винтовых осей N_q (рис. 6). Винтовые оси направлены вдоль гл. осей или диагоналей элементарной ячейки. Оси 3_1 и 3_2, 4_1 и 4_3, 6_1 и 6_5, 6_2 и 6_4 соответствуют попарно правым и левым винтовым поворотам. Кроме операции зеркальной симметрии в пространственных группах возможны также плоскости скользящего отражения a, b, c: отражение сочетается с переносом на половину

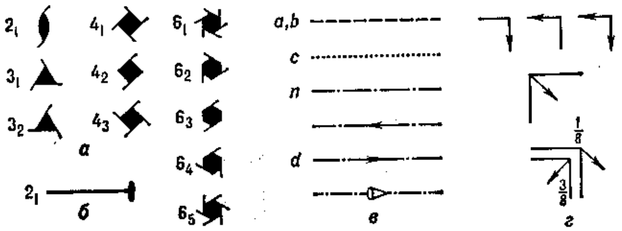

Рис. 6. a — Графические обозначения винтовых осей, перпендикулярных плоскости рис.; $б$ — винтовая ось, лежащая в плоскости рис.; $в$ — плоскости скользящего отражения, перпендикулярные плоскости рис., где a, b, c — периоды элементарной ячейки, вдоль осей которой происходит скольжение (трансляционная компонента $a/2$), n — диагональная плоскость скользящего отражения [трансляционная компонента $(a + b)/2$], d — алмазная плоскость скольжения $[(a \pm b \pm c)/4]$; $г$ — то же в плоскости рисунка.

соответствующего периода решётки. Переносу на половину диагонали грани ячейки соответствует т. н. **клиноплоскость скольжения** n, кроме того, в тетрагональных и кубич. группах возможны «алмазные» плоскости d.

В табл. 2 даны интернациональные символы всех 230 пространственных групп в соответствии с их принадлежностью к одной из 7 сингоний и классу точечной симметрии.

Трансляц. компоненты операций микросимметрии пространственных групп макроскопически в точечных группах не проявляются; напр., винтовая ось в огранке кристаллов проявляется как соответствующая по порядку простая поворотная ось. Поэтому каждая из 230 групп G_3^3 макроскопически сходственна (гомоморфна) с одной из 32 точечных групп. Напр., на точечную группу D_{2h}—mmm гомоморфно отображаются 28 пространственных групп.

Обозначения Шёнфлиса пространственных групп — это обозначение соответственной точечной группы (напр., D_{2h}, табл. 1), к-рому сверху приписан принятый исторически порядковый номер, напр. D_{2h}^1—D_{2h}^{28}. В международных обозначениях указывается символ решётки Браве и порождающие операции симметрии каждой группы — $P2_1$, $Cmc2_1$, $R\bar{3}c$, $Im3m$ и т. д. Последовательность расположения пространственных групп в табл. 2 в международных обозначениях соответствует номеру (верхнему индексу) в обозначениях Шёнфлиса.

На рис. 7 дано изображение пространств. группы D_{2h}^{16} — $Pnma$ согласно Интернациональным кристаллографич. таблицам. Операции (и соответствующие им элементы) симметрии каждой пространственной группы, указываемые для элементарной ячейки, действуют на всё кристаллич. пространство, всю атомную структуру кристалла и друг на друга.

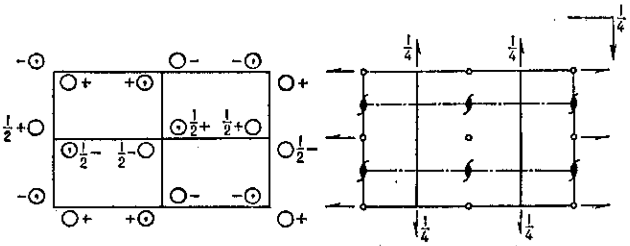

Рис. 7. Изображение группы D_{2h}^{16} — $Pnma$ в Интернациональных таблицах.

Если задать внутри элементарной ячейки к.-н. точку x ($x_1x_2x_3$), то операции симметрии преобразуют её в симметрично равные ей точки во всём кристаллич. пространстве; таких точек бесконечное множество. Но достаточно описать их положение в одной элементарной ячейке, и эта совокупность уже будет размножаться трансляциями решётки. Совокупность точек, выводимых из данной операциями g_i группы G — x_1, $x_2, \ldots, x_{n-1}$, наз. **правильной системой точек** (ПСТ). На рис. 7 справа дано расположение элементов симметрии группы D_{2h}^{16}, слева — изображение ПСТ **общего положения** этой группы. Точки общего положения — это такие точки, к-рые не расположены на элементе точечной симметрии пространственной группы. Число (кратность) таких точек равно порядку группы. Точки, расположенные на элементе (или элементах) точечной симметрии, образуют ПСТ **частного положения** и обладают соответственной симметрией, количество их в целое число раз меньше кратности ПСТ общего положения. На рис. 7 слева кружками указаны точки общего положения, их внутри элементарной ячейки 8, символы «+» и «—», «1/2 +» и «1/2 —» означают соответственно координаты $+z$, $-z$, $1/2 + z$, $1/2 - z$. Запятые или их отсутствие означают попарное зеркальное равенство соответствующих точек относительно плоскостей симметрии m, имеющихся в данной группе при $y = 1/4$ и $3/4$. Если же точка попадает на плоскость m, то она этой плоскостью не удваивается, как в случае точек общего положения, и число (кратность) таких точек частного положения 4, их симметрия —m. То же имеет место при попадании точки в центры симметрии.

Для каждой пространственной группы имеются свои совокупности ПСТ. Правильная система точек общего положения для каждой группы одна. Но нек-рые из ПСТ частного положения могут оказаться одинаковыми для различных групп. В Интернациональных таблицах указаны кратность ПСТ, их симметрия и координаты и все др. характеристики каждой пространственной группы. Важность понятия ПСТ состоит в том, что в любой кристаллич. структуре, принадлежащей данной пространственной группе, атомы или центры молекул располагаются по ПСТ (одной или нескольким). При структурном анализе распределение атомов по одной или неск. ПСТ данной пространственной группы производится с учётом хим. ф-лы кристалла и данных дифракц. эксперимента, позволяет находить координаты точек частных или общих положений, в к-рых расположены атомы. Поскольку каждая ПСТ состоит из одной или кратного числа решёток Браве, то и расположение атомов можно представлять себе как совокупность «вдвину-