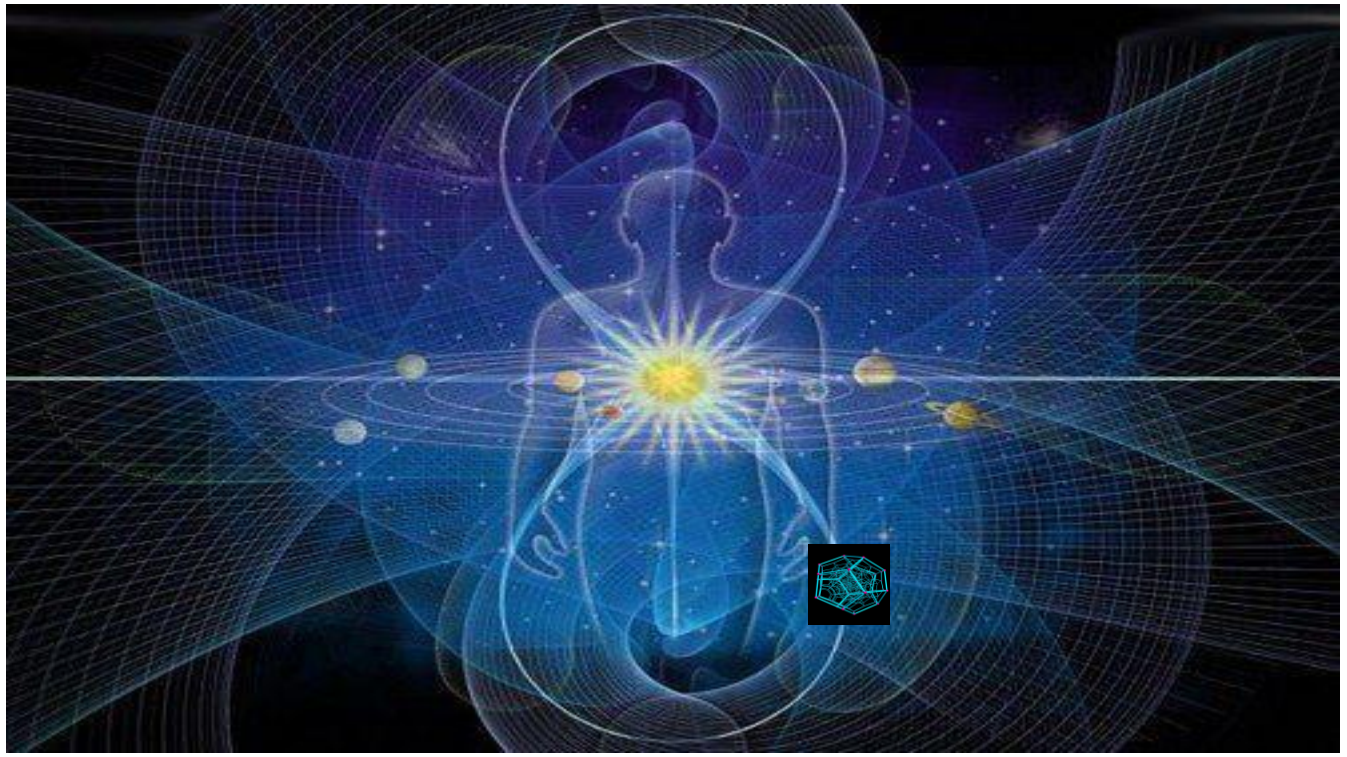
ПРОСТРАНСТВА РАЗЛИЧНОЙ РАЗМЕРНОСТИ

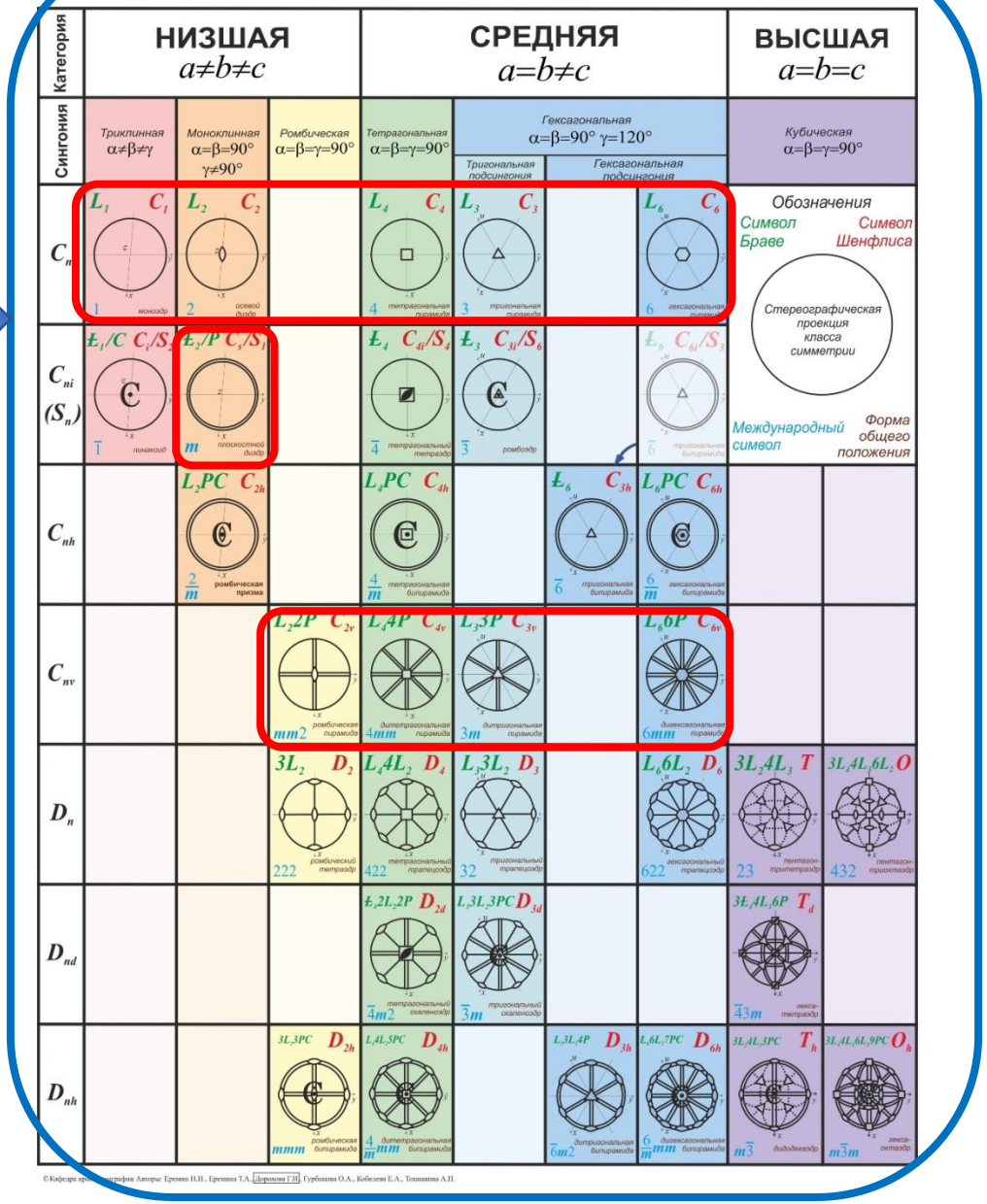


ЧИСЛО ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

Периодичность пространства \ Размерность пространства	0	1	2	3
0	1	2	10	32
1		2	7	75
2			17	80
3				230

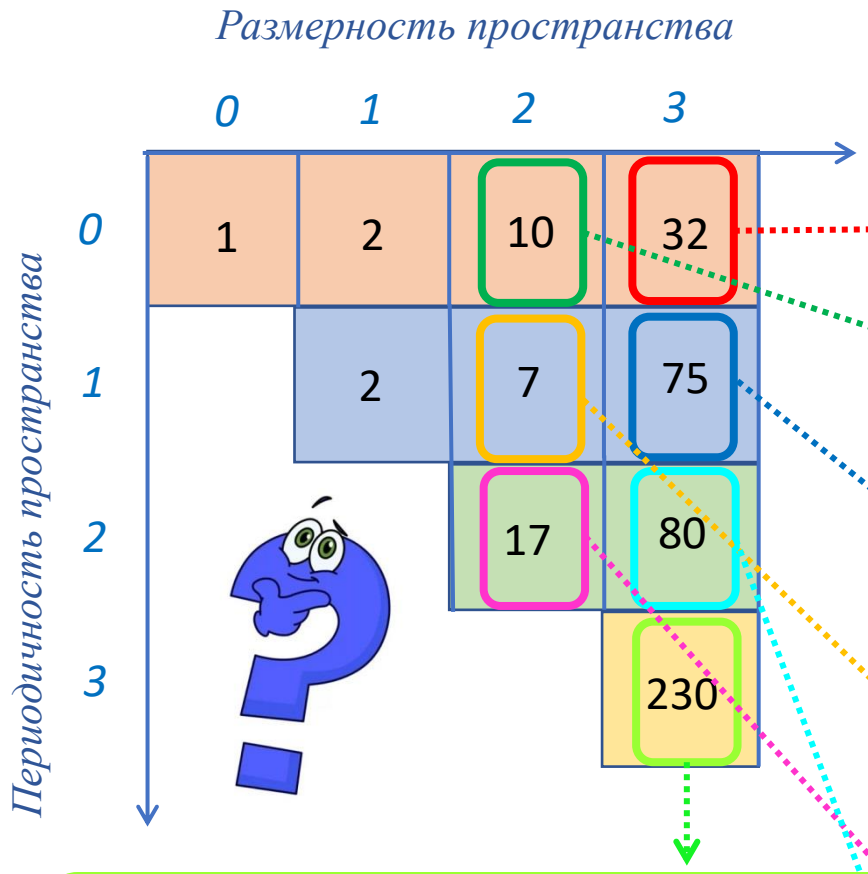


32 КЛАССА СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ



Попробуем разобраться…

Понятия размерность пространства и бесконечная протяженность – разные вещи.



32 точечных класса описывают трехмерные объекты, не имеющие бесконечной протяженности ни в одном направлении

10 из них – условно плоские группы – описывают двумерные объекты, не имеющие бесконечной протяженности ни в одном направлении. Так называемые «***группы розеток***»

75 пространственных групп – кристаллографические ***группы стержней*** - описывают объекты бесконечной протяженности в одном направлении.

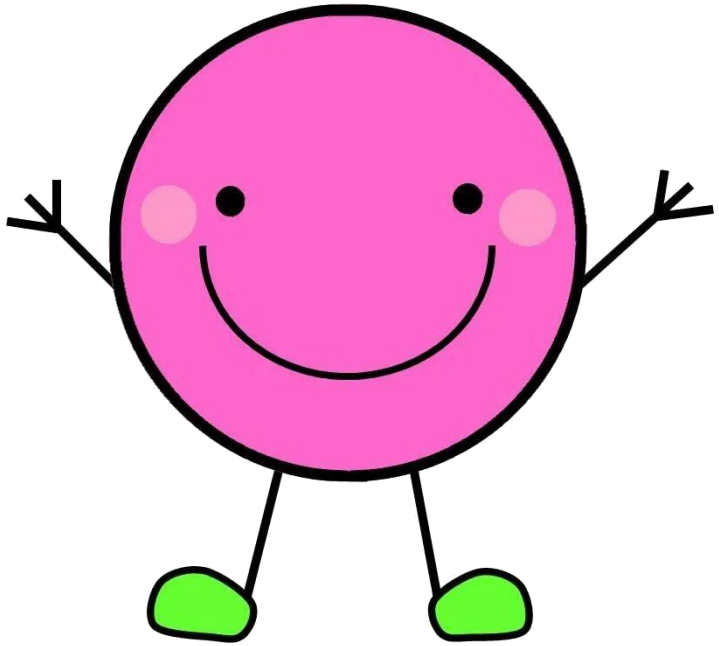
7 пространственных групп – кристаллографические ***группы бордюров (фризов)*** - описывают односторонние объекты бесконечной протяженности в одном направлении.

230 пространственных групп описывают объекты, имеющие бесконечную протяженности в трех направлениях.

17 пространственных групп – группы «обоев»- описывают плоские односторонние объекты, имеющие бесконечную протяженности в двух направлениях.

80 пространственных групп – группы «слоев»- описывают объекты, имеющие бесконечную протяженности в двух направлениях.

0-мерное пространство



Периодичность пространства \ Размерность пространства	0	1	2	3
0	1	2	10	32
1		2	7	75
2			17	80
3				230

В ***0-мерном пространстве*** существует только точка, не имеющая геометрических размеров (высоты, длины, ширины).

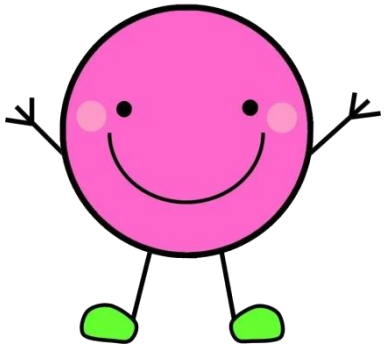
Таким образом 0-мерное пространство по сути и является этой точкой.

В ноль-мерном пространстве существует одна группа симметрии 1

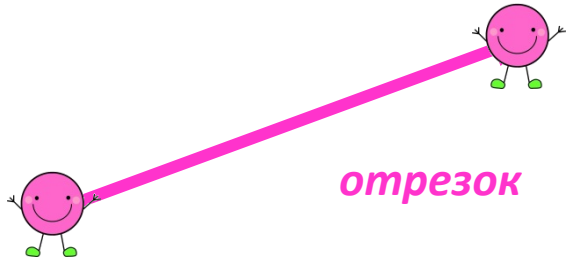


1-мерное пространство

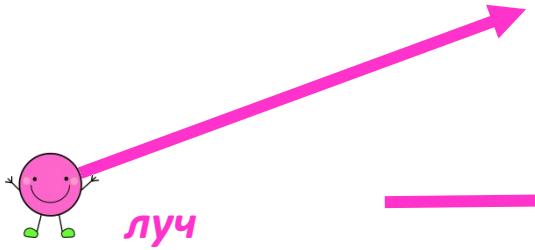
В ролях:



точка



отрезок



луч

прямая

Периодичность пространства \ Размерность пространства	0	1	2	3
0	1	2	10	32
1	2	7	75	
2	17	80		
3	230			

В отличие от 0-мерного в 1-мерном пространствах точка имеет координаты, чем и обуславливается наличие счётной характеристики: *длины*.

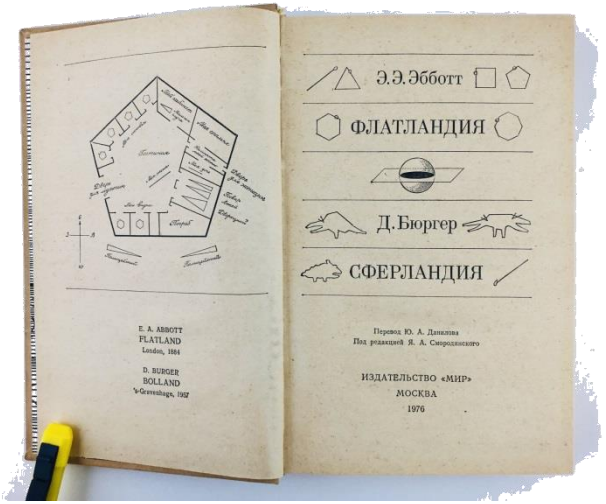
В одномерном пространстве базисными элементами являются *прямая, отрезок, луч и вектор*.
Можно считать, что отрезок это часть пространства, имеющая длину, а вектор — и длину, и направление.

В одномерном пространстве существует 2 группы симметрии



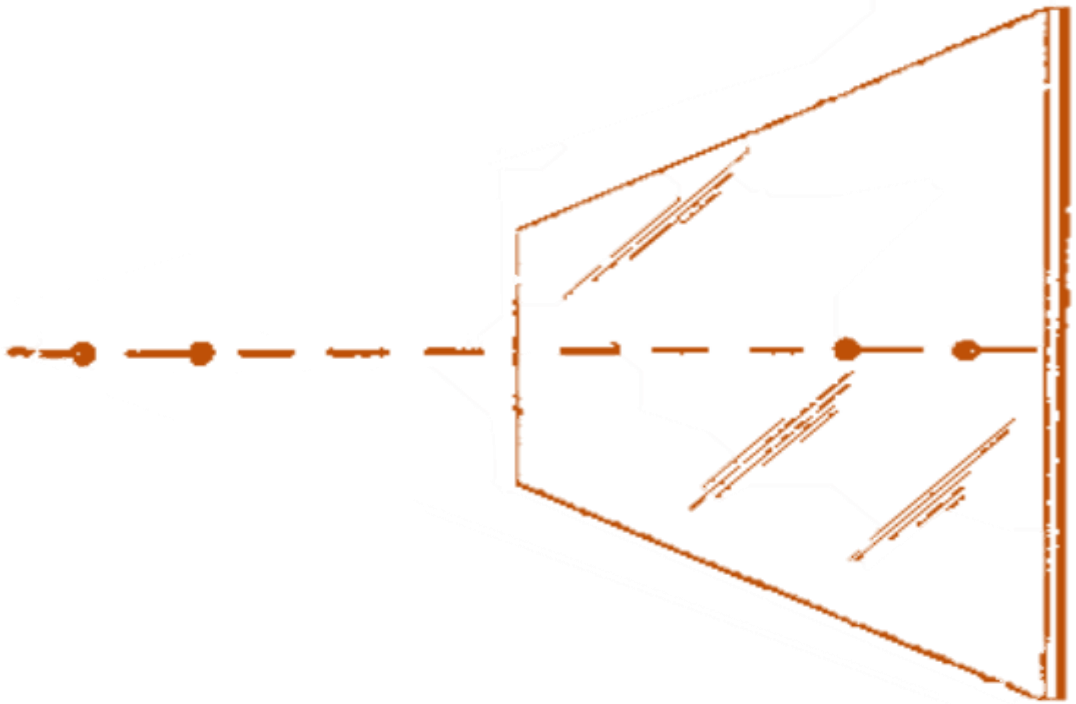
Эдвин Э. Эббот -английский теолог и писатель, 1976г.

Лайландия



Страну населяют лайландцы - плоские простейшие фигуры: *точки, лучи, отрезки, прямые.*

С их точки зрения, все сограждане выглядят как точки



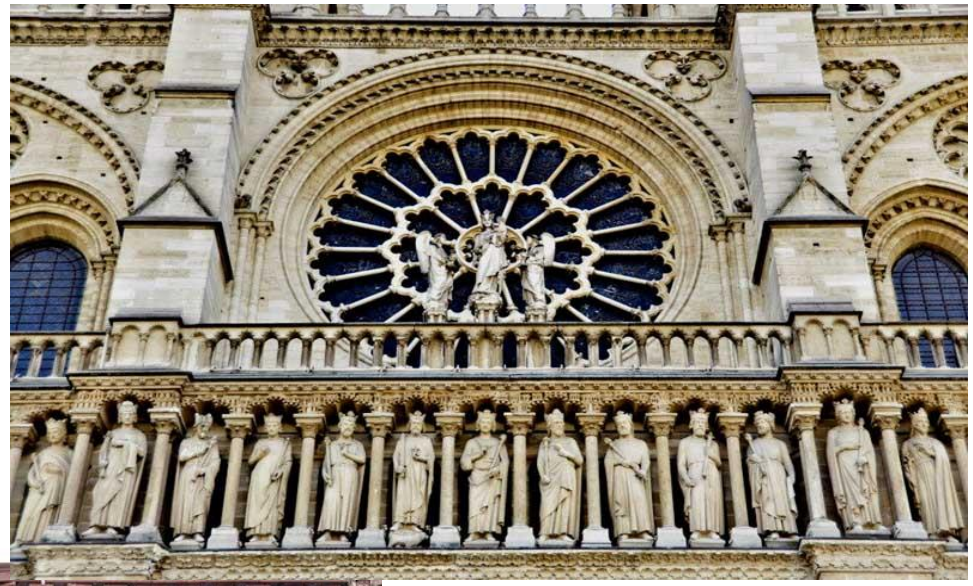
Лайландцы мужского пола представляют собой длинные отрезки с «глазом» на одном конце. Лайландцы женского пола — более короткие отрезки и тоже с глазом на конце. Глаза есть лишь у взрослых одномерцев.

Зрение всех лайландцев, кроме короля однонаправленно - поэтому если бы мир зеркально отразили, они не увидели бы разницы. Про длину они тоже не знают..



Бордюры

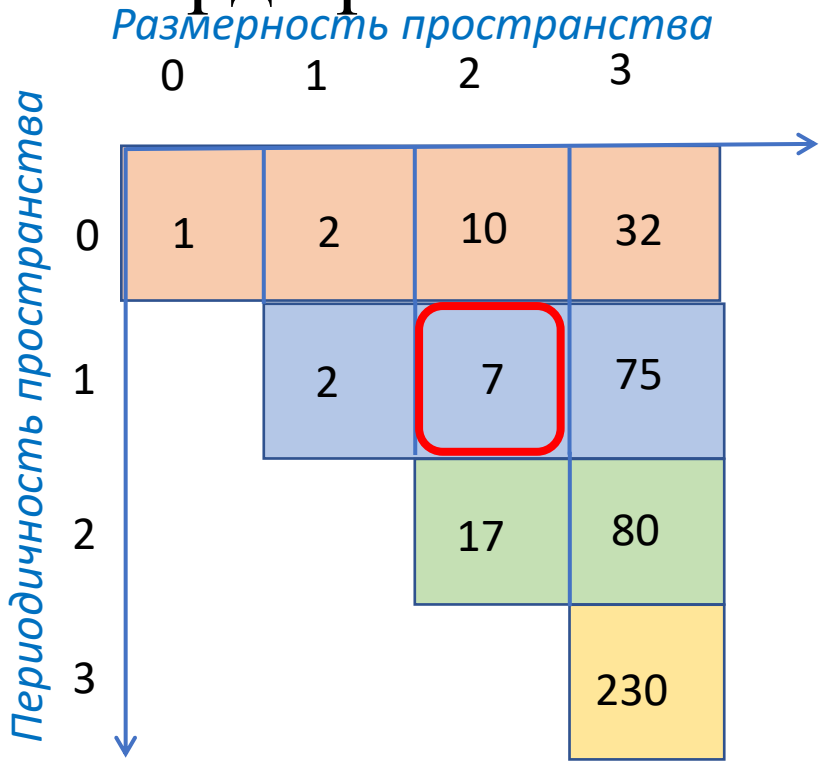












Бордюрами (фризами) называются условно «плоские» бесконечные в одном направлении постройки, которые, впрочем, вполне могут описывать трехмерные объекты. С точки зрения теории симметрии такие группы всегда содержат специфическую полярную плоскость, совпадающую в иллюстрациях с плоскостью рисунка.

Бордюры окружают нас повсюду

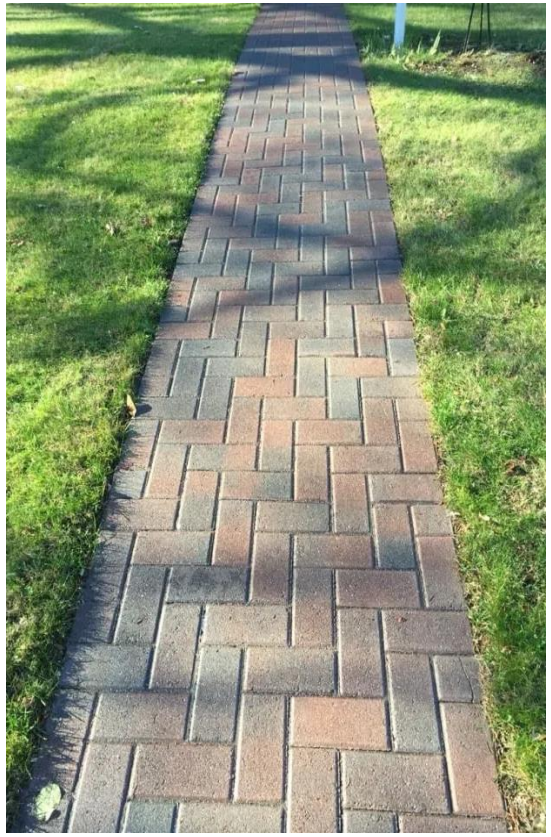


















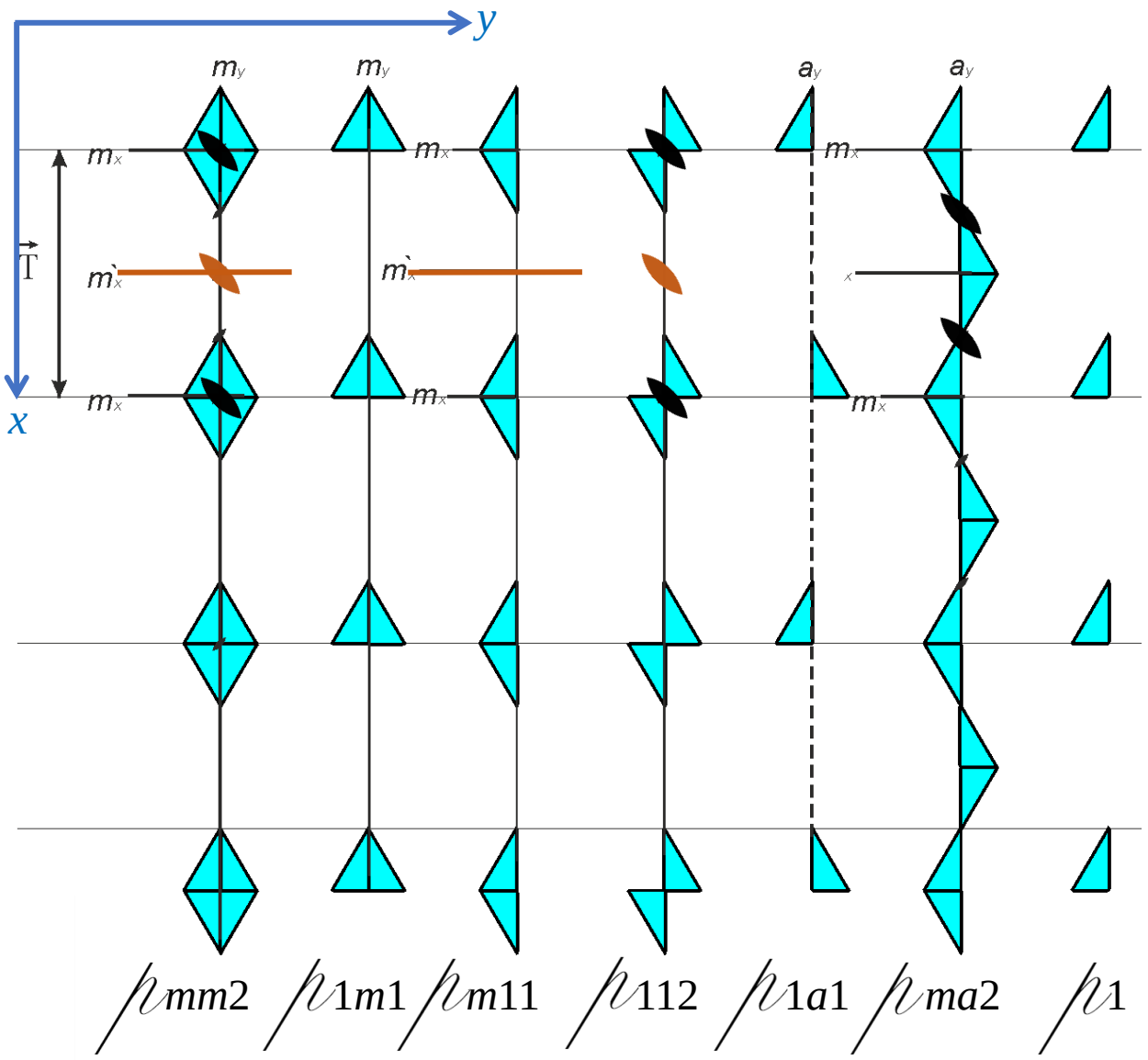






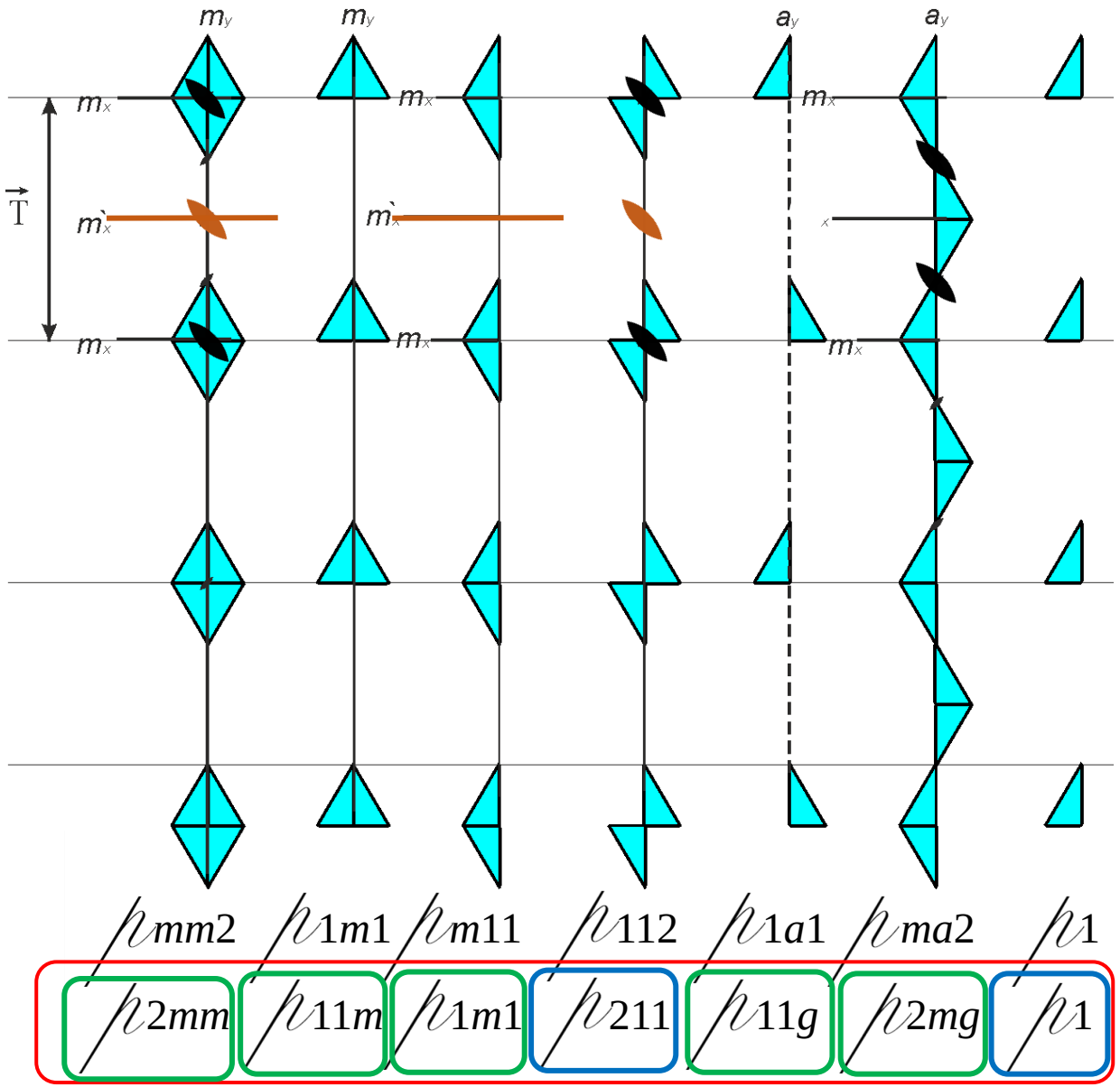


ДИСКРЕТНЫЕ БОРДЮРЫ



- Дискретные бордюры (или односторонние ленты) описываются только примитивной трансляционной «решеткой» (которая в данном случае одномерна).
- Дискретные бордюры могут содержать в качестве подрешеточных элементов симметрии только ось **2,** плоскости ***m*** или ***a***.
- Плоскость ***m*** может совпадать с бесконечным направлением или быть ему перпендикулярной;
- Плоскость ***a*** может проходить только вдоль направления бесконечной протяженности.
- Ось 2 может быть только перпендикулярна направлению бесконечной протяженности.
- Оси высших порядков не могут участвовать, так как либо размножат единственное бесконечное направление, либо придадут объем объекту.

ДИСКРЕТНЫЕ БОРДЮРЫ



Различные символы Германа-Могена для групп фризов в различных установках

Frieze group	Setting symbol	
	(*ab*)	(*b*$\bar{a}$)
	Hermann–Mauguin symbol	
F1	$\not_a 1$	$\not_b 1$
F2	$\not_a 211$	$\not_b 211$
F3	$\not_a 1m1$	$\not_b 11m$
F4	$\not_a 11m$	$\not_b 1m1$
F5	$\not_a 11g$	$\not_b 1g1$
F6	$\not_a 2mm$	$\not_b 2mm$
F7	$\not_a 2mg$	$\not_b 2gm$

Согласно стандартному написанию групп (*International Tables for Crystallography, v. E, 2002*), направление бесконечной протяженности совмещается с осью ***y***

SUBPERIODIC GROUP

INTERNATIONAL TABLES for CRYSTALLOGRAPHY

Volume E

прямоугольная

$p1m1$

$pmm2$

$pm11$

$pma2$

$p1a1$

Количество пространственных групп бордюров (*frieze groups*) насчитывается 7

Они подразделяются на 2 сингонии – прямоугольная (*rectangular*) и косоугольная (*oblique*)

косоугольная

$p112$

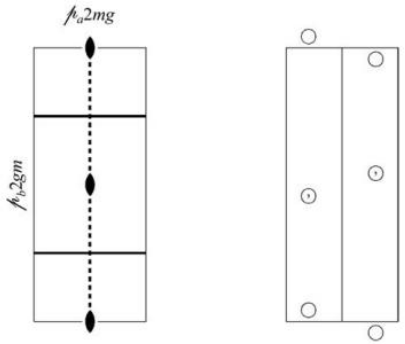
$p1$

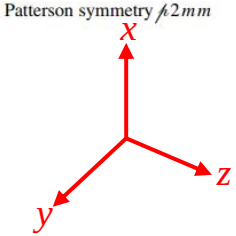
2*mm*

$p2mg$

Rectangular

Patterson symmetry $p2mm$





Origin at 21*g*

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{4}$

Symmetry operations

(1) 1 (2) 2 0,0 (3) m $\frac{1}{4},y$ (4) g $x,0$

Generators selected (1); $t(1)$; (2); (3)

Positions

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

Reflection conditions

General:

h : $h = 2n$

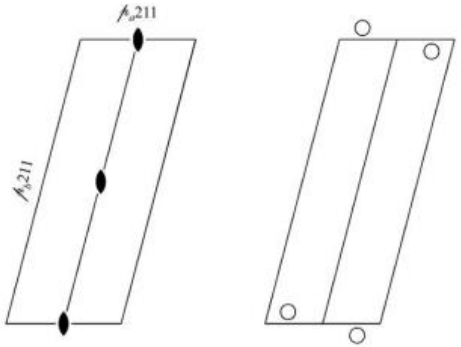
Special: no extra conditions

Oblique

2

$p211$

Patterson symmetry $p211$



Origin on 2

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{2}$

Symmetry operations

(1) 1 (2) 2 0,0

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

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates		
2 *c* 1	(1) x,y	(2) $\bar{x},\bar{y}$	
1 *b* 2	$\frac{1}{2},0$		
1 *a* 2	0,0		

Reflection conditions

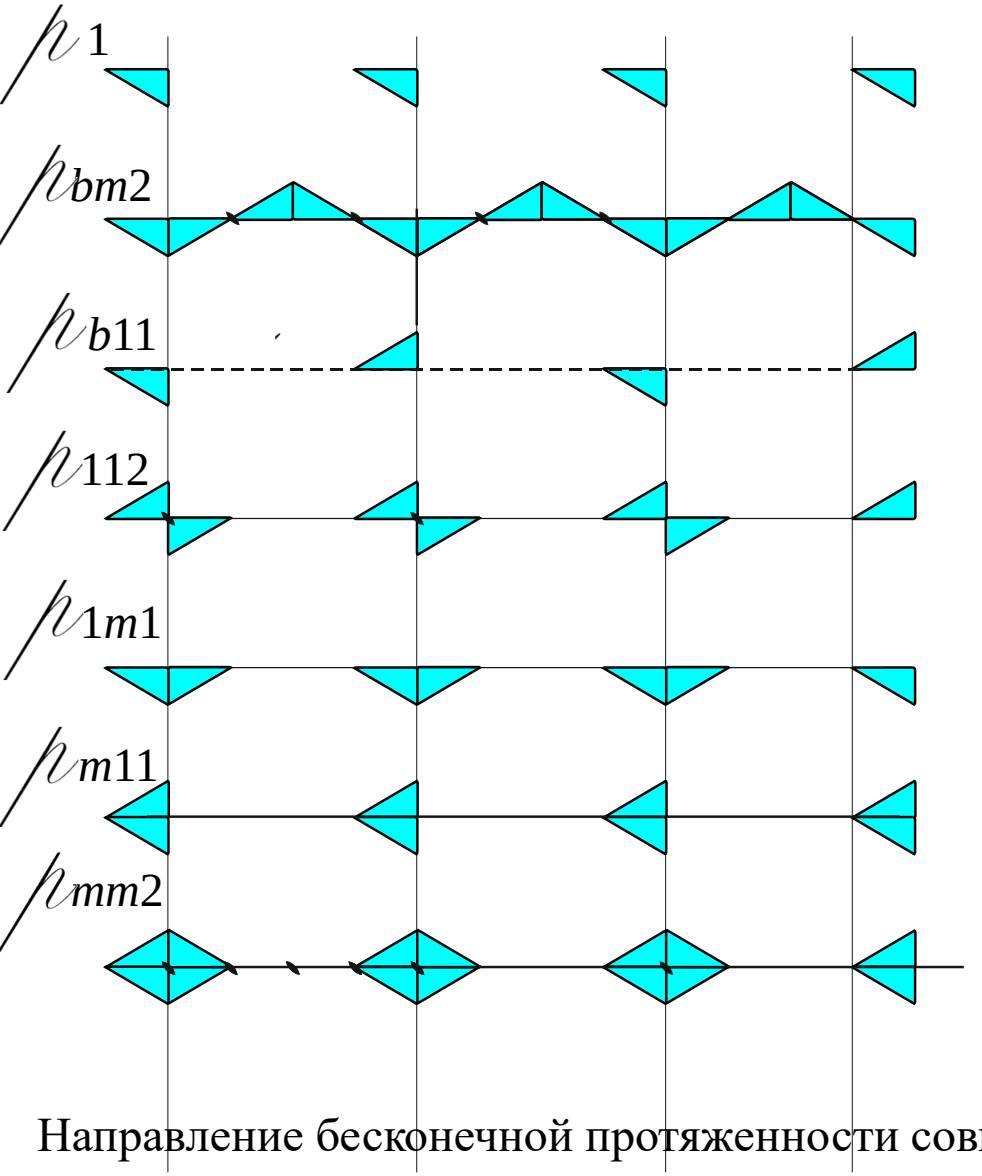
General:

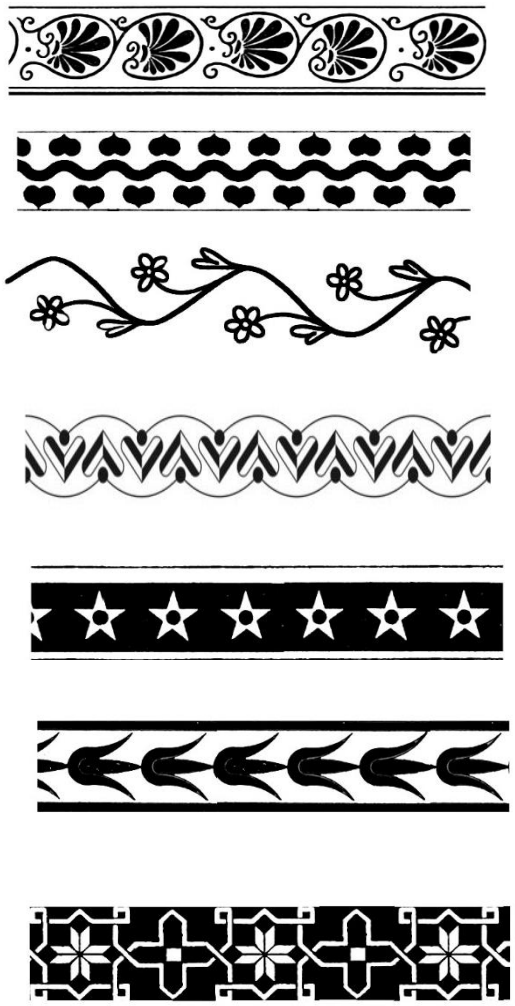
no conditions

Special: no extra conditions

Страницы из *International Tables for Crystallography, v. E, 2002*

ДИСКРЕТНЫЕ БОРДЮРЫ



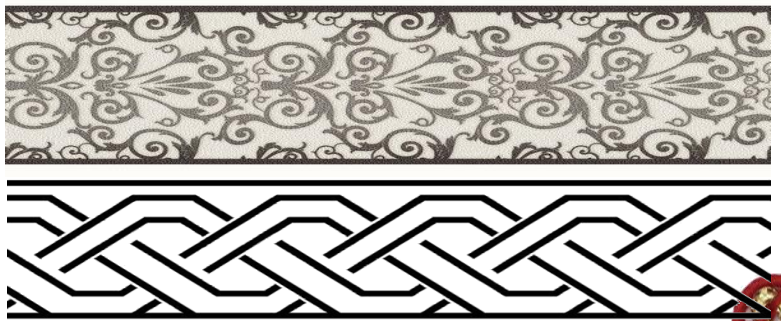


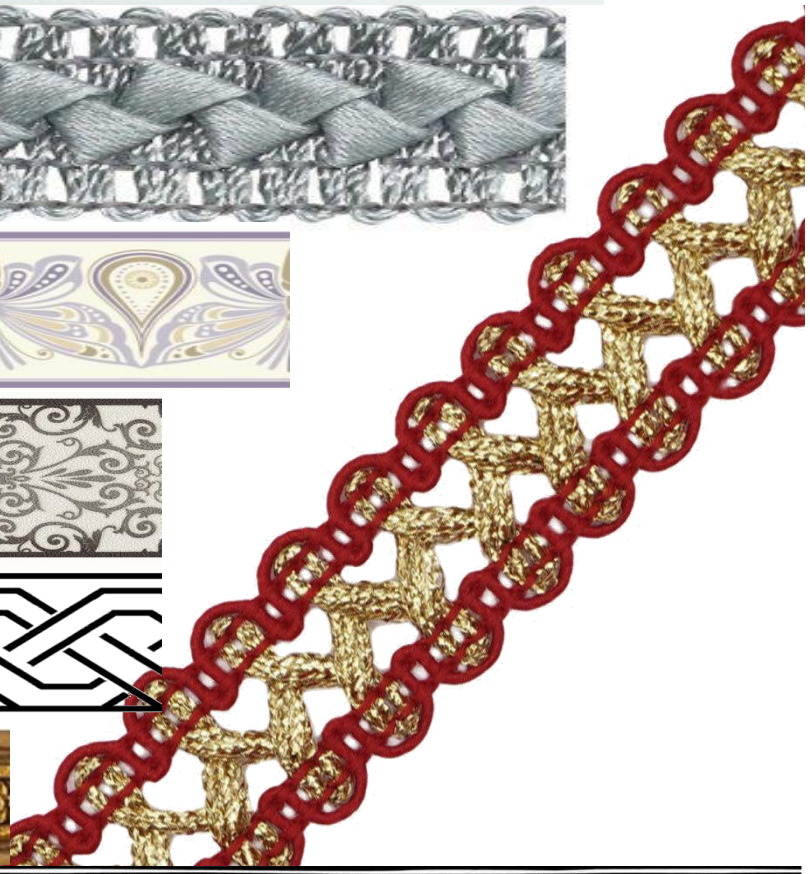


Направление бесконечной протяженности совмещено с осью *y*








ДВУСТОРОННИЕ ЛЕНТЫ







А где же здесь ленты?..

Размерность пространства

Периодичность пространства	0	1	2	3
0	1	2	10	32
1		2	7	75
2			17	80
3				230



В отличие от бордюров в двусторонних лентах допустимы «переворачивающие элементы» симметрии. Все группы симметрии лент порождены независимыми комбинациями шести элементов симметрии:

$$\vec{T},\ 2\ 2_1,\ m,\ a\ \bar{1}$$

Всего групп симметрии лент существует 31 (в том числе 7 рассмотренных ранее бордюров)

ДВУСТОРОННИЕ ЛЕНТЫ







А где же здесь ленты?..

Они здесь!

Размерность пространства

Периодичность пространства	0	1	2	3
0	1	2	10	32
1		2	7	75
2			17	80
3				230



В отличие от бордюров в двусторонних лентах допустимы «переворачивающие элементы» симметрии. Все группы симметрии лент порождены независимыми комбинациями шести элементов симметрии:

$$\vec{T},\ 2\ 2_1,\ m,\ a\ \bar{1}$$

Всего групп симметрии лент существует 31 (в том числе 7 рассмотренных ранее бордюров)

Геометрическая иллюстрация 31 группы симметрии лент

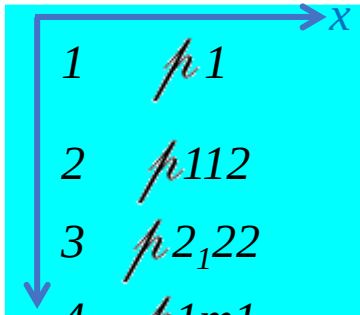
(Шубников А.В., Копцик В.А.)

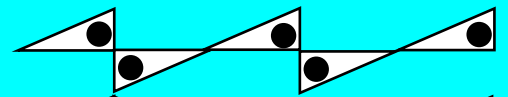
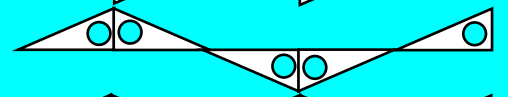
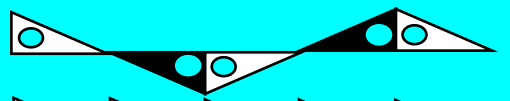
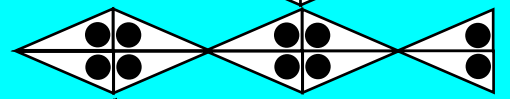
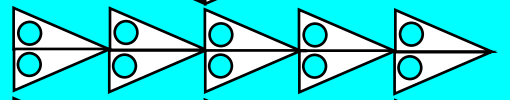
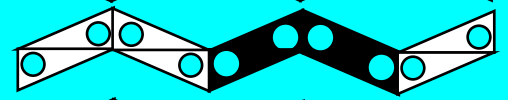
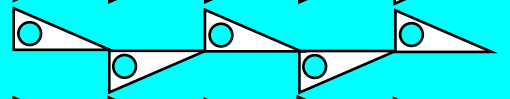
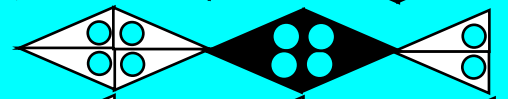
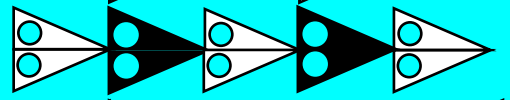
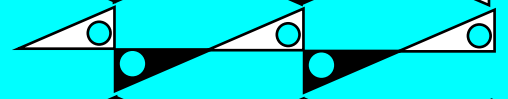
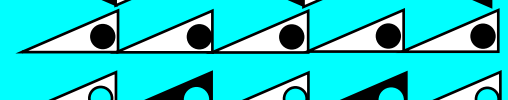
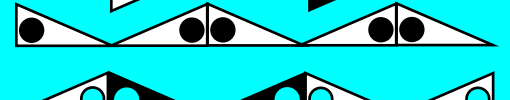
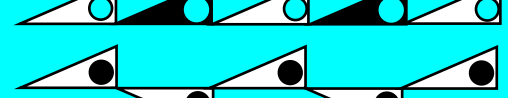
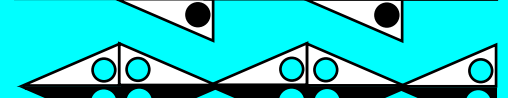
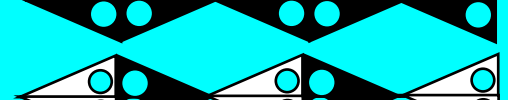
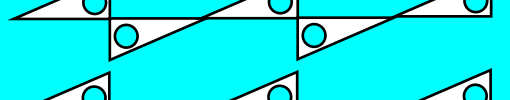
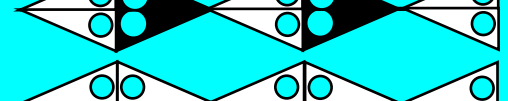
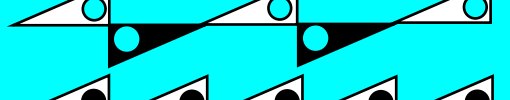
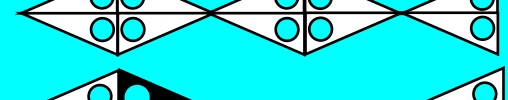
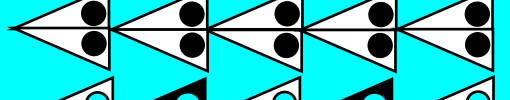
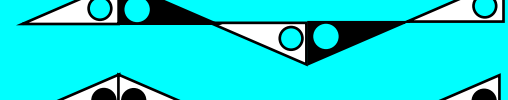
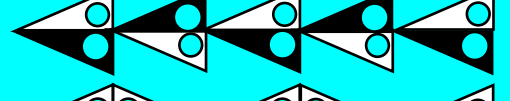
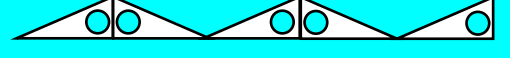


Треугольники, иллюстрирующие группы лент, имеют круглое отверстие и выкрашены с одной стороны в черный, с другой – в белый цвет.



Если треугольники находятся точно друг под другом, то верхний треугольник изображается с круглым отверстием, а нижний - нет, что был был виден его цвет

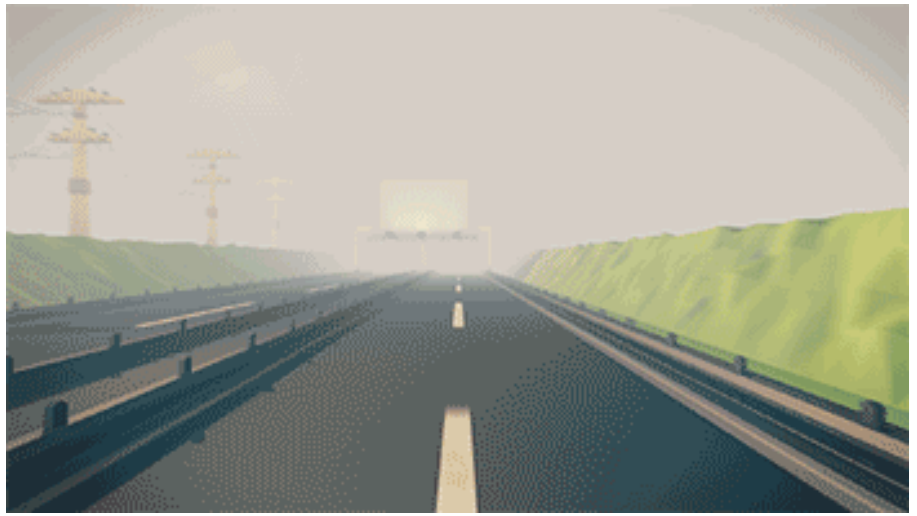


1	$p1$		17	$p11\frac{2}{m}$	
2	$p112$		18	$pma2$	
3	$p2_122$		19	$pmmm$	
4	$p1m1$		20	$pmaa$	
5	$p1a1$		21	$pmma$	
6	$p2_1ma$		22	$p2_111$	
7	$p\frac{2_1}{m}11$		23	$p222$	
8	$p11\frac{2}{a}$		24	$p11m$	
9	$pm2m$		25	$p11a$	
10	$pm2a$		26	$p2_1am$	
11	$p211$		27	$p\frac{2}{m}11$	
12	$p112$		28	$p1\frac{2}{m}1$	
13	$p\bar{1}1$		29	$pmm2$	
14	$p2mm$		30	$p1\frac{2}{a}1$	
15	$p2aa$		31	$pmam$	
16	$pm11$				

Ось бесконечной протяженности совмещена с осью x

СТЕРЖНИ









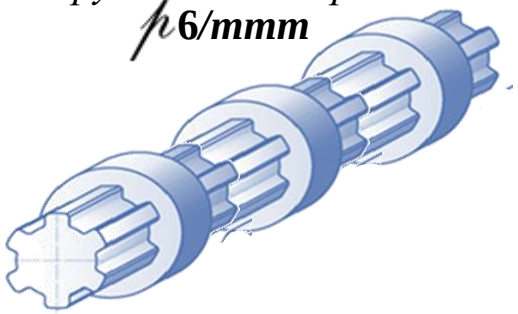
В пространственных группах, описывающих симметрию объектов с бесконечной протяженностью в одном направлении присутствую «бесконечные» элементы симметрии. Наибольшее разнообразие таких элементов – в группе стержней (хотя и в точечных группах, и в бордюрах, и в лентах они тоже существуют), в которых допустимы как *оси бесконечных переносов* (*бесконечно малая трансляция*), так и *оси бесконечных порядков*, совмещенные с особым направлением (или направлением бесконечной протяженности). Помимо них, единственное особое направление может быть совмещено с осью любого, даже некристаллографического, порядка. Количество плоскостей, проходящих через особое направление может быть любым. Таким образом групп симметрии стержней может быть *бесконечное количество*, но их можно поделить на ***шесть групп***.

СТЕРЖНИ

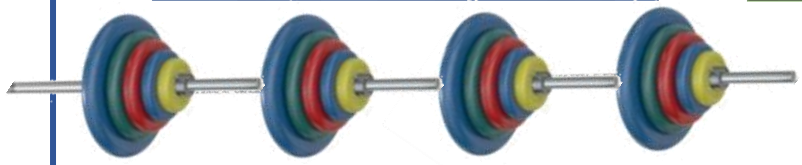
СТЕРЖНИ С ДИСКРЕТНЫМИ ПЕРЕНОСАМИ

Стержни с осями конечных порядков

Пространственная группа симметрии $P6/mmm$

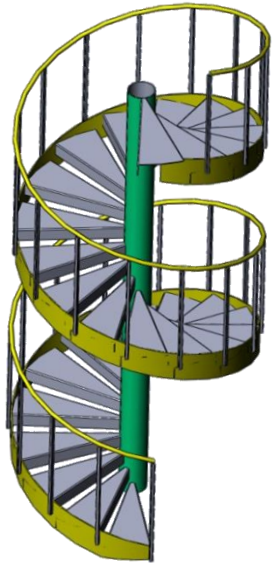


Стержни с осями бесконечного порядка



Бесконечный гриф с повторяющими блинами - стержень с симметрией $P\infty\infty m$

Ось бесконечного ∞ порядка и бесконечное количество параллельных плоскостей ∞m

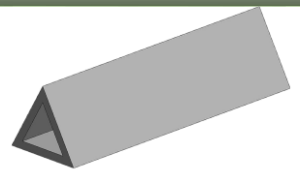


Стержни с винтовыми осями

Бесконечная винтовая лестница – некристаллографической с стержень с некристаллографической симметрией:: ось 14-ого порядка с иррациональным углом поворота (25,71°...) и скольжением на 1/14 *трансляции*

СТЕРЖНИ С БЕСКОНЕЧНО МАЛОЙ ТРАНСЛЯЦИЕЙ

Стержни с осями конечных порядков



Бесконечная треугольная в сечении труба обладает симметрией $P_0\bar{6}m2$

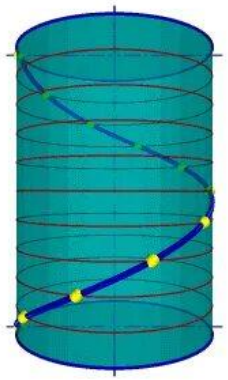
Бесконечно малая трансляция P_0*, ось 3-его порядка* **3**, *три параллельных ей плоскости и бесконечное количество перпендикулярных плоскостей*

Стержни с осями бесконечных порядков

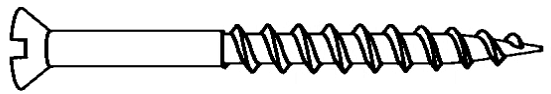


Бесконечная цилиндрическая труба, по которой непрерывно в одну сторону течет вода обладает симметрией $P_0\infty\infty m$

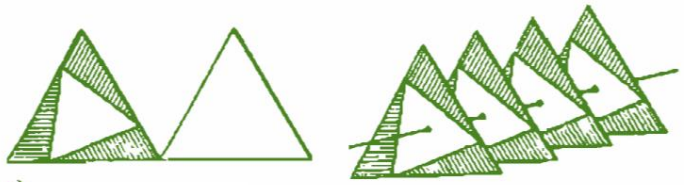
Бесконечно малая трансляция P_0*, ось бесконечного порядка ∞ и бесконечное количество проходящих нее плоскостей* ∞m



Стержни с винтовыми осями



Кристаллографические группы симметрии стержней (лент, бордюров)



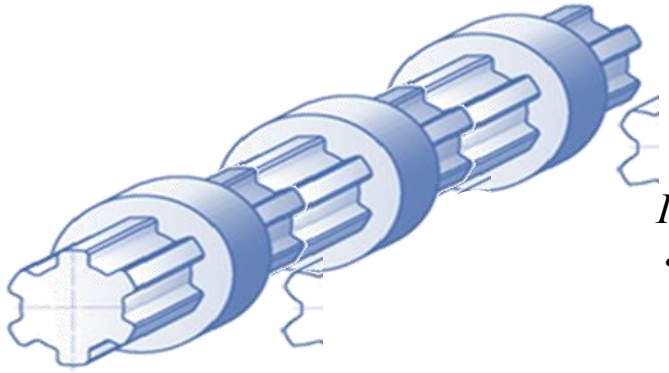
Стержень $p3$



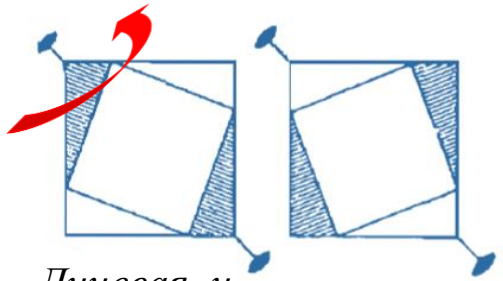
Стержень $p6_3$ *Стержень* $p3_n$



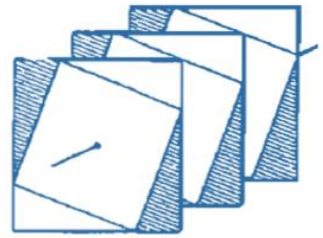
Стержень $p\bar{3}m$ *Стержень* $p3_n$ *с иррациональным углом поворота тройной оси*



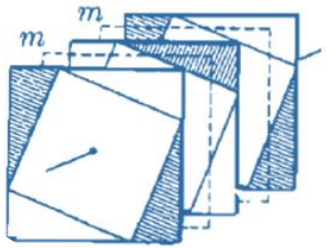
Пространственная группа симметрии p**6/mmm**



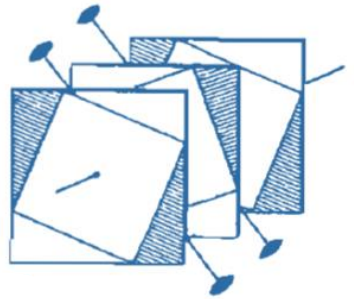
Лицевая и оборотная сторона фигуры симметрии $\bar{4}$



Симметрия стержня $p\bar{4}$



Симметрия стержня $p4_2/m$



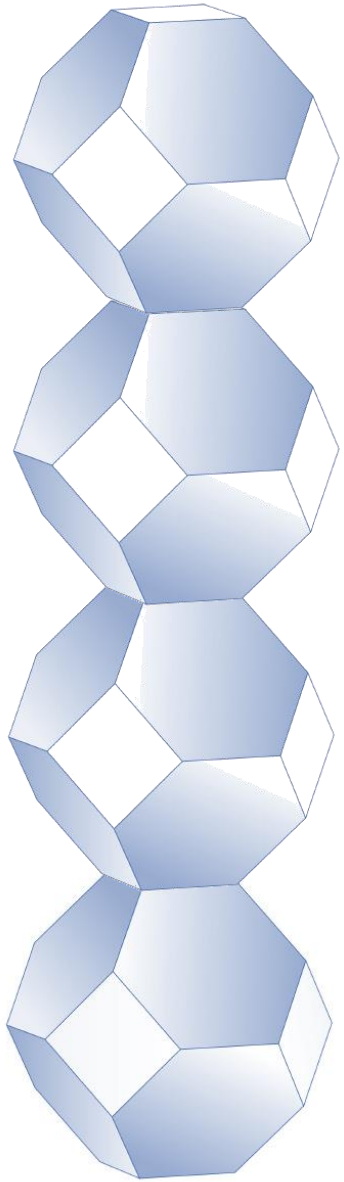
Симметрия стержня $p\bar{4}aa$



Пространственная группа симметрии $\mathbf{\not{p}6/mmm}$



Пространственная группа симметрии $\mathbf{\not{p}6}$



Пространственная группа симметрии $\mathbf{\not{p}4/mmm}$

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СТЕРЖНИ

1	$p1$	16	$pcc2$	31	$p4_122$	46	$p312$	61	$p\frac{6_3}{m}$
2	$p\bar{1}$	17	$pmc2_1$	32	$p4_222$	47	$p3_112$	62	$p622$
3	$p211$	18	$p2mm$	33	$p4_322$	48	$p3_212$	63	$p6_122$
4	$pm11$	19	$p2cm$	34	$p4mm$	49	$p3m1$	64	$p6_222$
5	$pc11$	20	$pmmm$	35	$p4_2cm$	50	$p3c1$	65	$p6_322$
6	$p\frac{2_1}{m}11$	21	$pccm$	36	$p4cc$	51	$p\bar{3}1m$	66	$p6_422$
7	$p\frac{2_1}{c}11$	22	$pmcm$	37	$p\bar{4}2m$	52	$p\bar{3}1c$	67	$p6_522$
8	$p112$	23	$p4$	38	$p\bar{4}2c$	53	$p6$	68	$p6mm$
9	$p112_1$	24	$p4_1$	39	$p\frac{4}{m}mm$	54	$p6_1$	69	$p6cc$
10	$p11m$	25	$p4_2$	40	$p\frac{4}{m}cc$	55	$p6_2$	70	$p6_3mc$
11	$p11\frac{2_1}{m}$	26	$p4_3$	41	$p\frac{4_2}{m}mc$	56	$p6_3$	71	$p\bar{6}m2$
12	$p11\frac{2_1}{m}$	27	$p\bar{4}$	42	$p3$	57	$p6_4$	72	$p\bar{6}c2$
13	$p222$	28	$p\frac{4}{m}$	43	$p3_1$	58	$p6_5$	73	$p\frac{6}{m}mm$
14	$p222_1$	29	$p\frac{4_2}{m}$	44	$p3_2$	59	$p\bar{6}$	74	$p\frac{6}{m}cc$
15	$pmm2$	30	$p422$	45	$p\bar{3}$	60	$p\frac{6}{m}$	75	$p\frac{6_3}{m}mc$

Стержни с осями конечных порядков и дискретными трансляциями

Пространственных групп стержней с осями конечных порядков существует бесконечное множество. С осями кристаллографических порядков – 75. В них допустимы все кристаллографические оси.

Оси высших порядков могут проходить только в направлении бесконечной протяженности. Допустимы как поворотные, так и винтовые и инверсионные оси.

Плоскости ***m*** допустимы в любой ориентации.

Оси 2-ого порядка могут проходить как перпендикулярно, так и параллельно направлению бесконечной протяженности

Плоскости скользящего отражения допустимы только параллельно направлению бесконечной протяженности (нормаль перпендикулярна этому направлению)

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СТЕРЖНИ

1 $p1$	16 $pcc2$	31 $p4_122$	46 $p312$	61 $p\frac{6_3}{m}$
2 $p\bar{1}$	17 $pmc2_1$	32 $p4_222$	47 $p3_112$	62 $p622$
3 $p211$	18 $p2mm$	33 $p4_322$	48 $p3_212$	63 $p6_122$
4 $pm11$	19 $p2cm$	34 $p4mm$	49 $p3m1$	64 $p6_222$
5 $pc11$	20 $pmmm$	35 $p4_2cm$	50 $p3c1$	65 $p6_322$
6 $p\frac{2_1}{m}11$	21 $pccm$	36 $p4cc$	51 $p\bar{3}1m$	66 $p6_422$
7 $p\frac{2_1}{c}11$	22 $pmcm$	37 $p\bar{4}2m$	52 $p\bar{3}1c$	67 $p6_522$
8 $p112$	23 $p4$	38 $p\bar{4}2c$	53 $p6$	68 $p6mm$
9 $p112_1$	24 $p4_1$	39 $p\frac{4}{m}mm$	54 $p6_1$	69 $p6cc$
10 $p11m$	25 $p4_2$	40 $p\frac{4}{m}cc$	55 $p6_2$	70 $p6_3mc$
11 $p11\frac{2}{m}$	26 $p4_3$	41 $p\frac{4_2}{m}mc$	56 $p6_3$	71 $p\bar{6}m2$
12 $p11\frac{2_1}{m}$	27 $p\bar{4}$	42 $p3$	57 $p6_4$	72 $p\bar{6}c2$
13 $p222$	28 $p\frac{4}{m}$	43 $p3_1$	58 $p6_5$	73 $p\frac{6}{m}mm$
14 $p222_1$	29 $p\frac{4_2}{m}$	44 $p3_2$	59 $p\bar{6}$	74 $p\frac{6}{m}cc$
15 $pmm2$	30 $p422$	45 $p\bar{3}$	60 $p\frac{6}{m}$	75 $p\frac{6_3}{m}mc$



А где же здесь ленты?..

Светлым цветом выделены группы симметрии лент, различающиеся симметрии, ***но не ориентацией!***

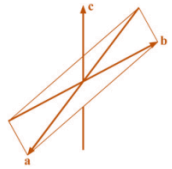
Темным цветом выделены группы симметрии бордюров.

А почему групп симметрии лент 22?..

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СТЕРЖНИ

1 $p1$	16 $pcc2$	31 $p4_122$	46 $p312$	61 $p\frac{6_3}{m}$
2 $p\bar{1}$	17 $pmc2_1$	32 $p4_222$	47 $p3_112$	62 $p622$
3 $p211$	18 $p2mm$	33 $p4_322$	48 $p3_212$	63 $p6_122$
4 $pm11$	19 $p2cm$	34 $p4mm$	49 $p3m1$	64 $p6_222$
5 $pc11$	20 $pmmm$	35 $p4_2cm$	50 $p3c1$	65 $p6_322$
6 $p\frac{2}{m}11$	21 $pccm$	36 $p4cc$	51 $p\bar{3}1m$	66 $p6_422$
7 $p\frac{2}{c}11$	22 $pmcm$	37 $p\bar{4}2m$	52 $p\bar{3}1c$	67 $p6_522$
8 $p112$	23 $p4$	38 $p\bar{4}2c$	53 $p6$	68 $p6mm$
9 $p112_1$	24 $p4_1$	39 $p\frac{4}{m}mm$	54 $p6_1$	69 $p6cc$
10 $p11m$	25 $p4_2$	40 $p\frac{4}{m}cc$	55 $p6_2$	70 $p6_3mc$
11 $p11\frac{2}{m}$	26 $p4_3$	41 $p\frac{4_2}{m}mc$	56 $p6_3$	71 $p\bar{6}m2$
12 $p11\frac{2_1}{m}$	27 $p\bar{4}$	42 $p3$	57 $p6_4$	72 $p\bar{6}c2$
13 $p222$	28 $p\frac{4}{m}$	43 $p3_1$	58 $p6_5$	73 $p\frac{6}{m}mm$
14 $p222_1$	29 $p\frac{4_2}{m}$	44 $p3_2$	59 $p\bar{6}$	74 $p\frac{6}{m}cc$
15 $pmm2$	30 $p422$	45 $p\bar{3}$	60 $p\frac{6}{m}$	75 $p\frac{6_3}{m}mc$

Триклинная (*Triclinic*)



Моноклинная (*Monoclinic*)

Моноклинная/косоугольная (*Monoclinic/oblique*)

Моноклинная/прямоугольная (*Monoclinic/rectangular*)

Ромбическая (*Orthorhombic*)



Тетрагональная (*Tetragonal*)

Тригональная (*Trigonal*)

Гексагональная (*Hexagonal*)

В группах стержней выделяется 7 сингоний

Three-dimensional crystal system	Crystallographic point groups	No. of rod-group types	Restrictions on conventional coordinate system
Triclinic	1, $\bar{\mathbf{1}}$	2	None
Monoclinic (inclined)	2, *m*, ***2/m***	5	$\beta = \gamma = 90^\circ$
Monoclinic (orthogonal)		5	$\alpha = \beta = 90^\circ$
Orthorhombic	222, 2*mm*, ***mmm***	10	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	4, $\bar{4}$, ***4/m***	19	
	422, 4*mm*, $\bar{4}$2*m*, ***4/mmm***		
Trigonal	3, $\bar{\mathbf{3}}$	11	$\alpha = \beta = 90$, $\gamma = 120^\circ$
	32, 3*m*, $\bar{\mathbf{3}}$***m***		
Hexagonal	6, $\bar{6}$, ***6/m***	23	
	622, 6*mm*, $\bar{6}$*m*2, ***6/mmm***		

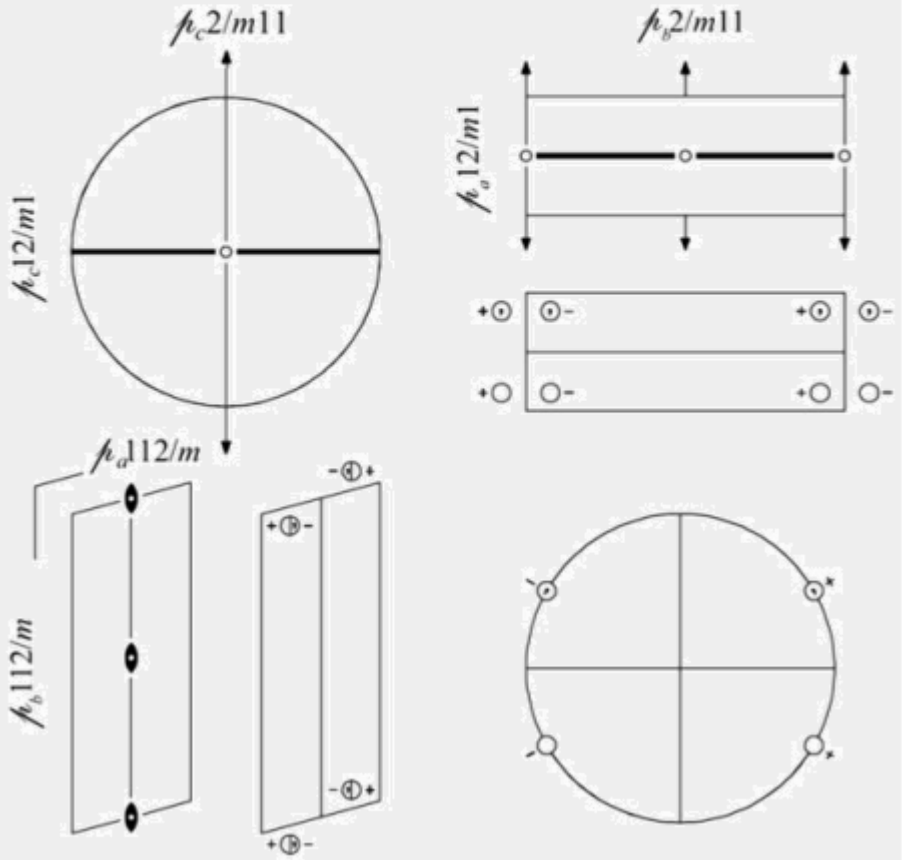
Представление групп стержней в Интернациональных таблицах

$p2/m11$

No. 6 $2/m$ Monoclinic/Oblique

$p2/m11$

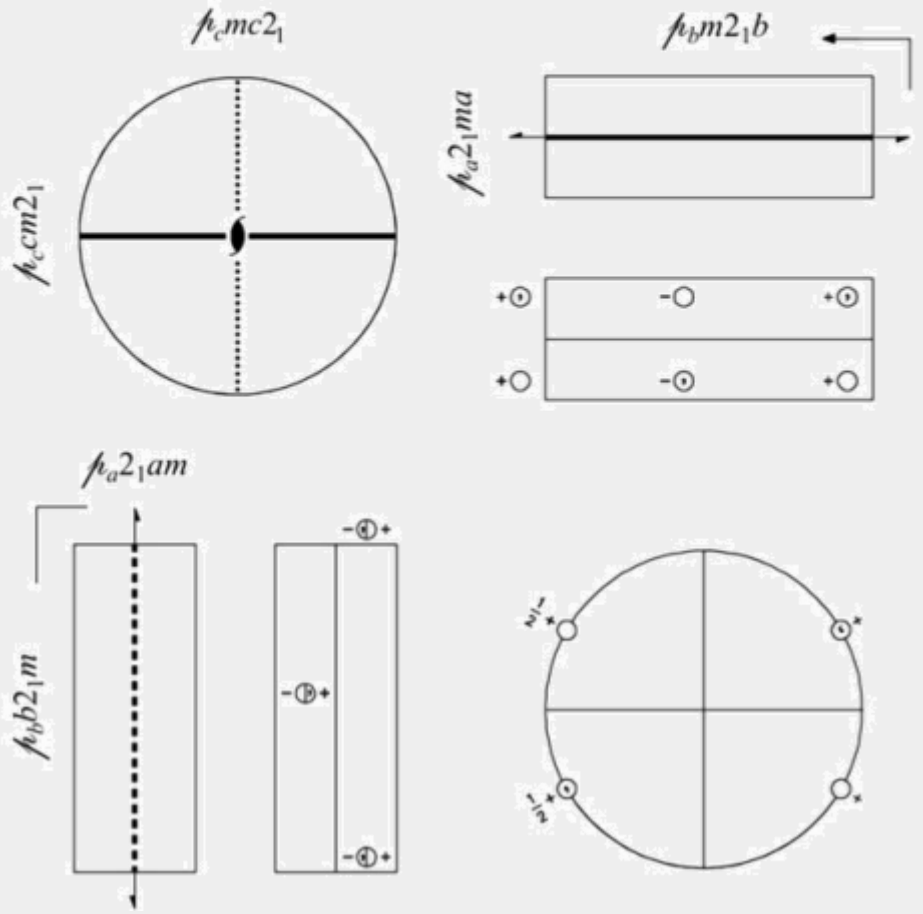
Patterson symmetry $p2/m11$



$pmc2_1$ $mm2$

No. 17 $pmc2_1$ Orthorhombic

Patterson symmetry $pmmm$



КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СТЕРЖНИ

Стержни с осями конечных порядков и дискретными трансляциями

1 $p1$	16 $pcc2$	31 $p4_122$	46 $p312$	61 $p\frac{6_3}{m}$
2 $p\bar{1}$	17 $pmc2_1$	32 $p4_222$	47 $p3_112$	62 $p622$
3 $p211$	18 $p2mm$	33 $p4_322$	48 $p3_212$	63 $p6_122$
4 $pm11$	19 $p2cm$	34 $p4mm$	49 $p3m1$	64 $p6_222$
5 $pc11$	20 $pmmm$	35 $p4_2cm$	50 $p3c1$	65 $p6_322$
6 $p\frac{2_1}{m}11$	21 $pccm$	36 $p4cc$	51 $p\bar{3}1m$	66 $p6_422$
7 $p\frac{2_1}{c}11$	22 $pmcm$	37 $p\bar{4}2m$	52 $p\bar{3}1c$	67 $p6_522$
8 $p112$	23 $p4$	38 $p\bar{4}2c$	53 $p6$	68 $p6mm$
9 $p112_1$	24 $p4_1$	39 $p\frac{4}{m}mm$	54 $p6_1$	69 $p6cc$
10 $p11m$	25 $p4_2$	40 $p\frac{4}{m}cc$	55 $p6_2$	70 $p6_3mc$
11 $p11\frac{2_1}{m}$	26 $p4_3$	41 $p\frac{4_2}{m}mc$	56 $p6_3$	71 $p\bar{6}m2$
12 $p11\frac{2_1}{m}$	27 $p\bar{4}$	42 $p3$	57 $p6_4$	72 $p\bar{6}c2$
13 $p222$	28 $p\frac{4}{m}$	43 $p3_1$	58 $p6_5$	73 $p\frac{6}{m}mm$
14 $p222_1$	29 $p\frac{4_2}{m}$	44 $p3_2$	59 $p\bar{6}$	74 $p\frac{6}{m}cc$
15 $pmm2$	30 $p422$	45 $p\bar{3}$	60 $p\frac{6}{m}$	75 $p\frac{6_3}{m}mc$



Пространственных групп стержней Зонке не содержат элементы симметрии II рода. Это группы только собственными поворотами (группы движений).



Пространственных групп стержней Зонке обладают нетривиальной хиральностью.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ГРУППЫ СТЕРЖНЕЙ ЗОНКЕ

1 $p1$	16 $p3_1$	31 $p6_422$
2 $p211$	17 $p3_2$	32 $p6_522$
3 $p112$	18 $p312$	
4 $p112_1$	19 $p3_112$	
5 $p222$	20 $p3_212$	
6 $p222_1$	21 $p6$	
7 $p4$	22 $p6_1$	
8 $p4_1$	23 $p6_2$	
9 $p4_2$	24 $p6_3$	
10 $p4_3$	25 $p6_4$	
11 $p\bar{4}$	26 $p6_5$	
12 $p422$	27 $p622$	
13 $p4_122$	28 $p6_122$	
14 $p4_222$	29 $p6_222$	
15 $p4_322$	30 $p6_322$	

В кристаллах действуют строгие ограничения: винтовые оси могут иметь только кристаллографические порядки (2, 3, 4, 6) и величину трансляционной компоненты, соответствующую порядку оси, обусловленные совместимостью с трёхмерной трансляционной решёткой.

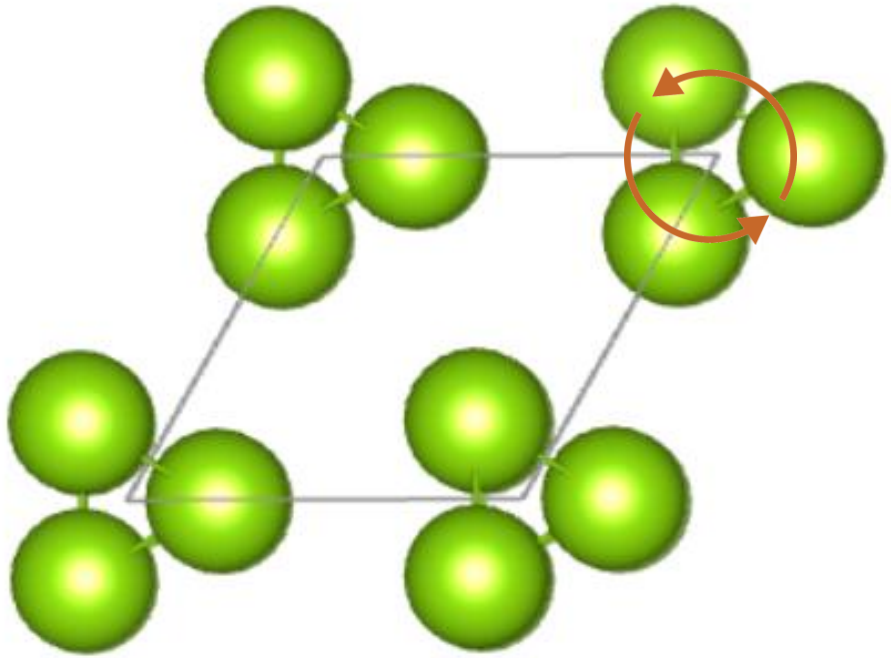
Но в ультратонких наностержнях и атомных цепочках эти ограничения могут нарушаться: закрученные цепочки могут описываться винтовой осью **нецелого порядка,** другими словами допускается непрерывное варьирование параметров винтовых осей. Это явление нельзя описать стандартными 1D-группами, но можно — стержневыми группами Зонке Именно для таких случаев стержневые группы Зонке дают корректный математический аппарат.

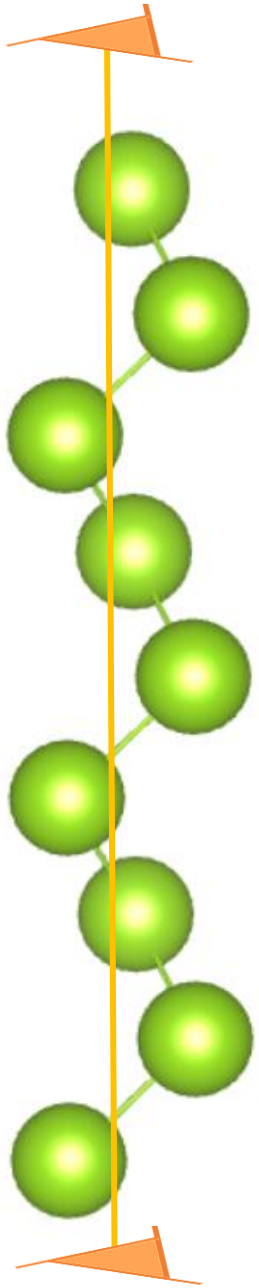
Зачем нужны?

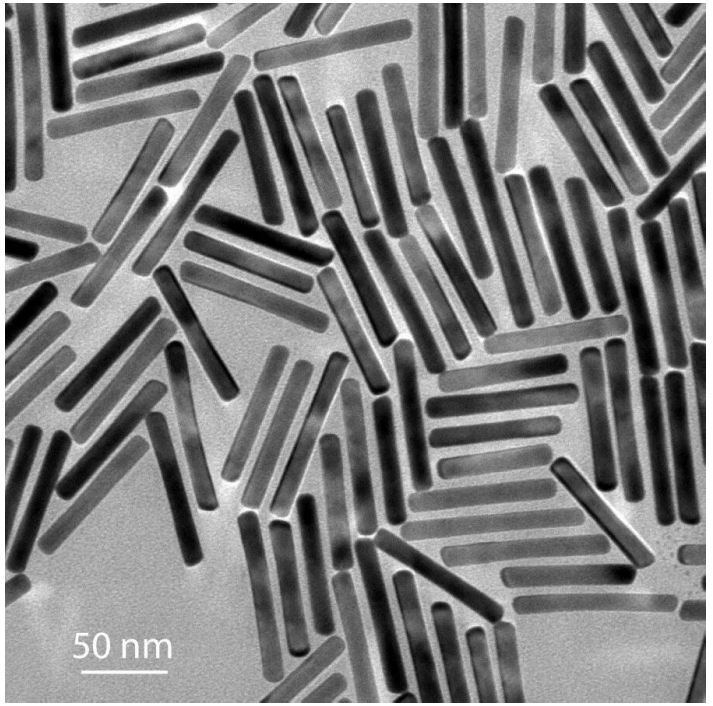
1. Построение модели наностержней в квантово-химических расчётах
2. Интерпретация картины дифракции для тонких стержней, которые отличаются от картин рассеяния для объёмных кристаллов
3. Предсказание на основе симметрии некоторых свойств (например, разрешённые оптические переходы, фононные моды, пьезоэлектрические эффекты и т. д.)

Структура теллура *Te* $P3_121$

Атомные цепочки халькогенов (S, Se, Te) — имеют спиральную структуру, которую удобно описывать стержневыми группами с винтовыми осями.

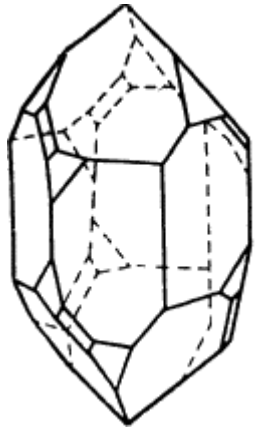


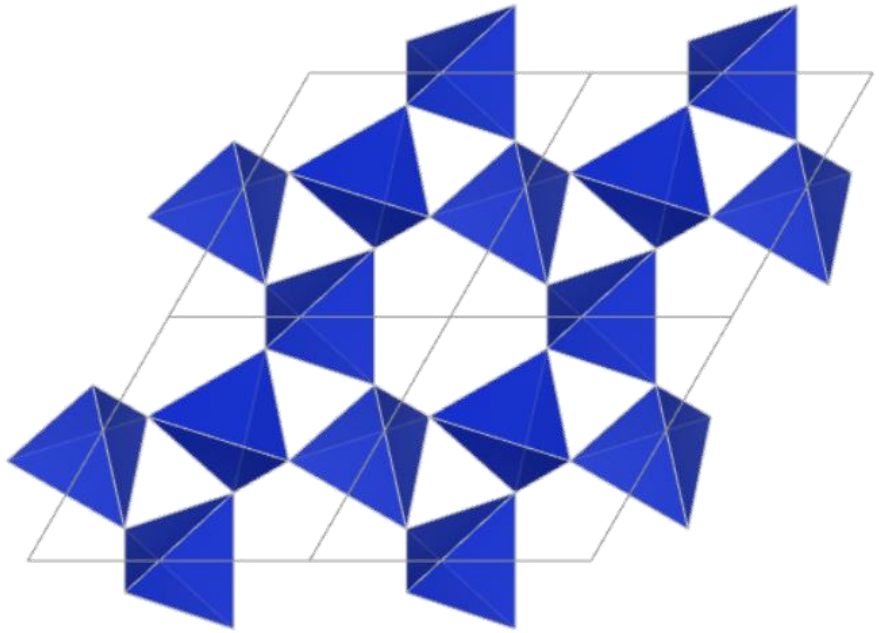


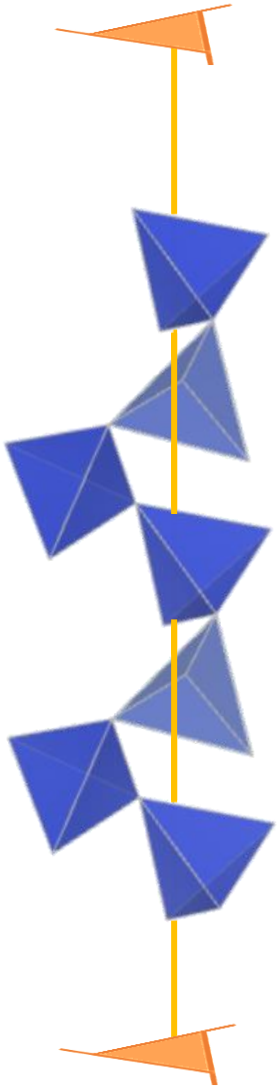


Объёмный теллур имеет тригональную структуру с винтовой осью 3_1. Но в ультратонких наностержнях порядок винтовой оси отличается от кристаллографического значения и зависит от толщины стержня. Это явление нельзя описать стандартными 1D-группами, но можно — стержневыми группами Зонке или специальными спиральными группами симметрии

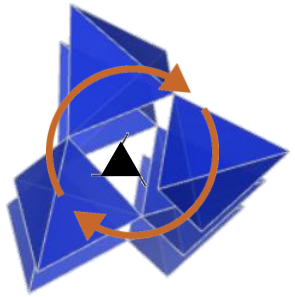








Полиэдрическая модель структуры кварца α-SiO_2.
Пространственная группа симметрии $P3_22$

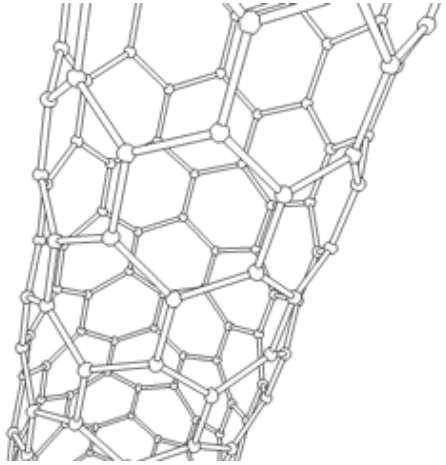


Поворот на 120° по часовой стрелки и подъем на $\frac{1}{3}$ трансляции

Фрагмент структуры кварца: закрученная спираль из тетраэдров [SiO_4] можно описать как стержень с группой симметрии 3_22, которая полностью совпадает с пространственной группой структуры

Наностержни α-кварца в виде наностержней тоже могут проявлять спонтанное кручение и описываться стержневыми группами Зонке

УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ



Original hochgeladen von Schwarzm am 30. Aug 2004; Selbst gemacht mit C4D/Cartoonrenderer, GNU FDL. German Wikipedia, original upload 29. Dez 2004 by APPER, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=350208

$$D=\frac{\sqrt{3}d}{\pi}\sqrt{n^2+m^2+nm}$$

$$\sin\alpha=\frac{m\sqrt{3}}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}}$$

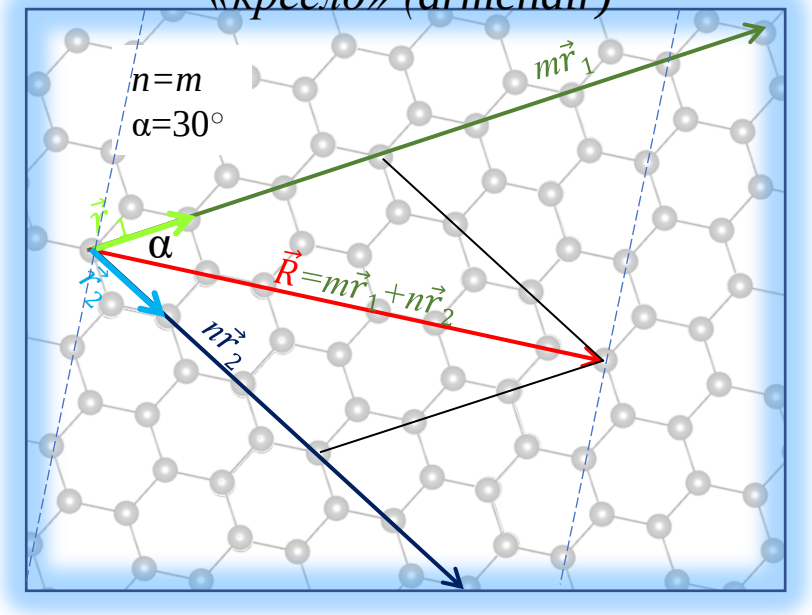
D – диаметр нанотрубки

α – угол хиральноси

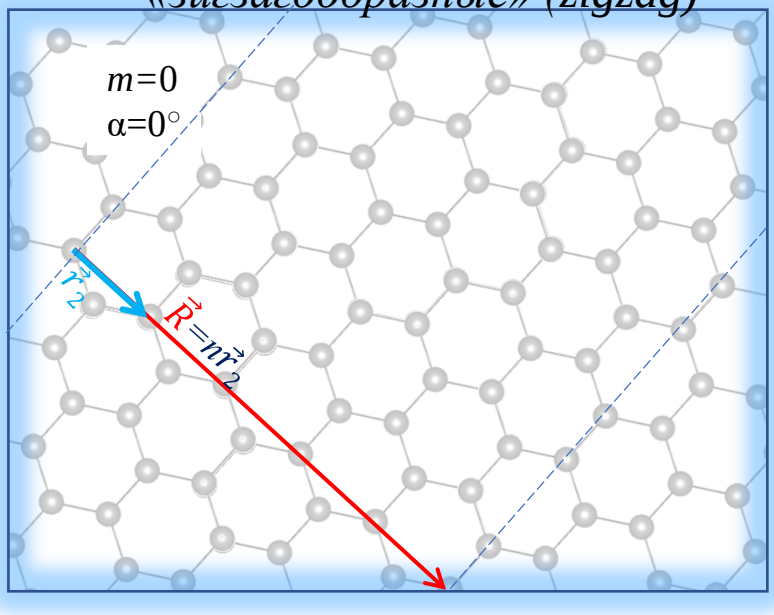
n, *m* – индексы хиральности

d – минимальное расстояние между атомами углерода в графитовом слое (0,142 нм).

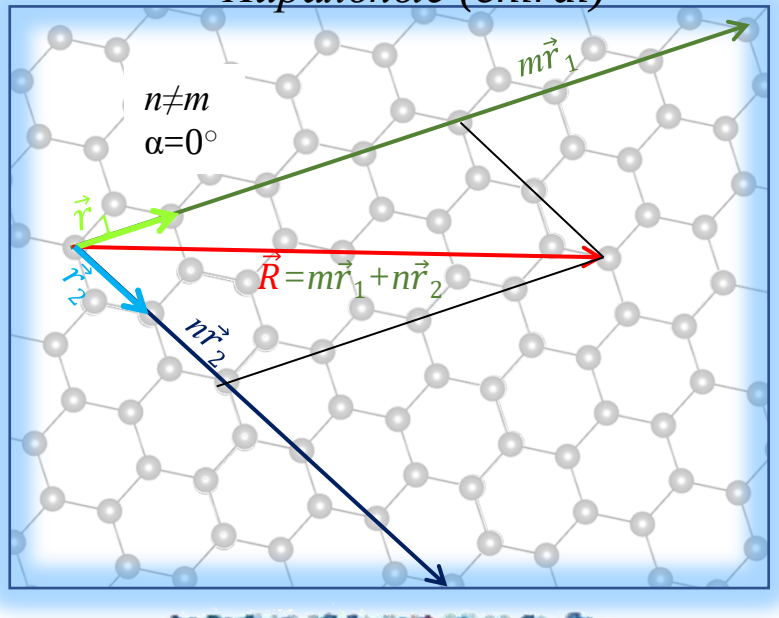
«кресло» (armchair)

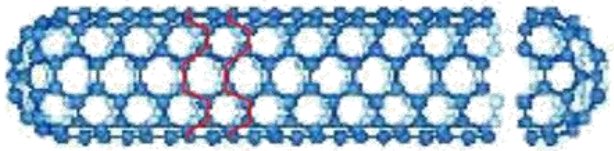


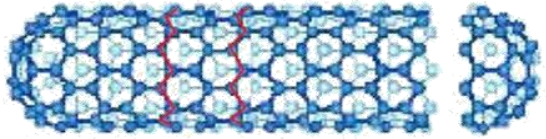
«зигзагообразные» (zigzag)

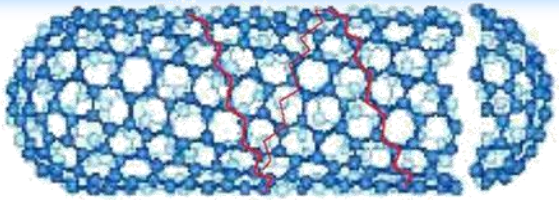


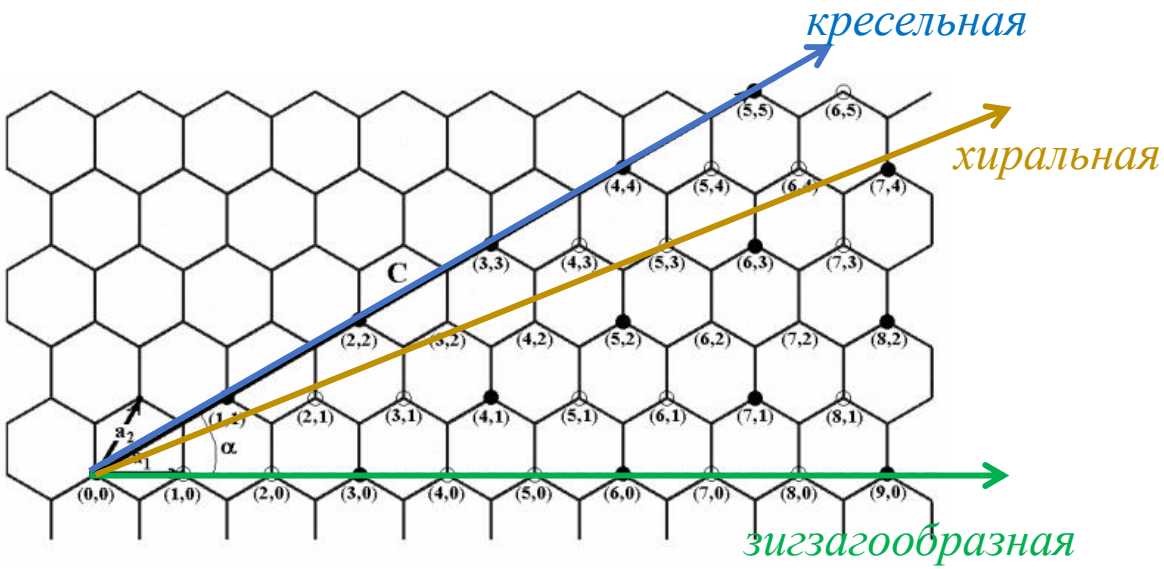
Хиральные (chiral)



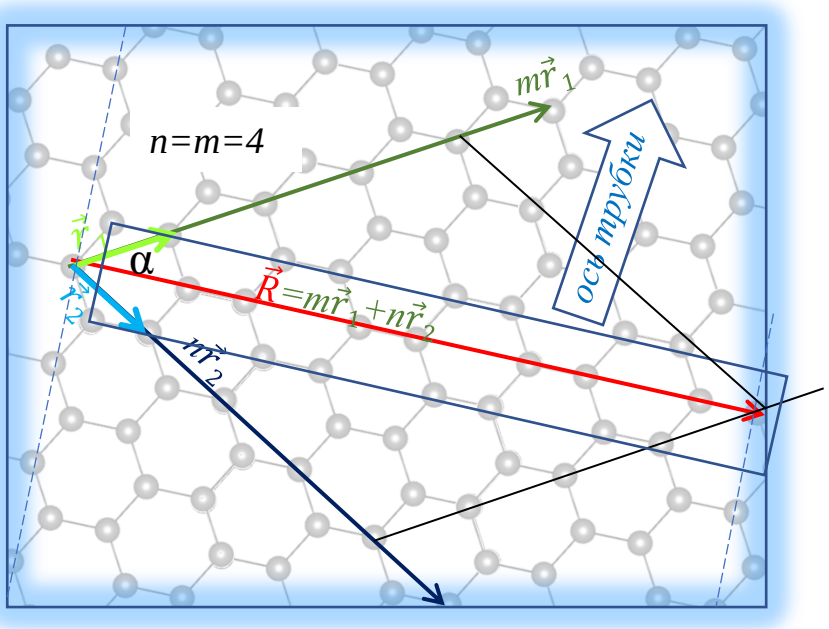




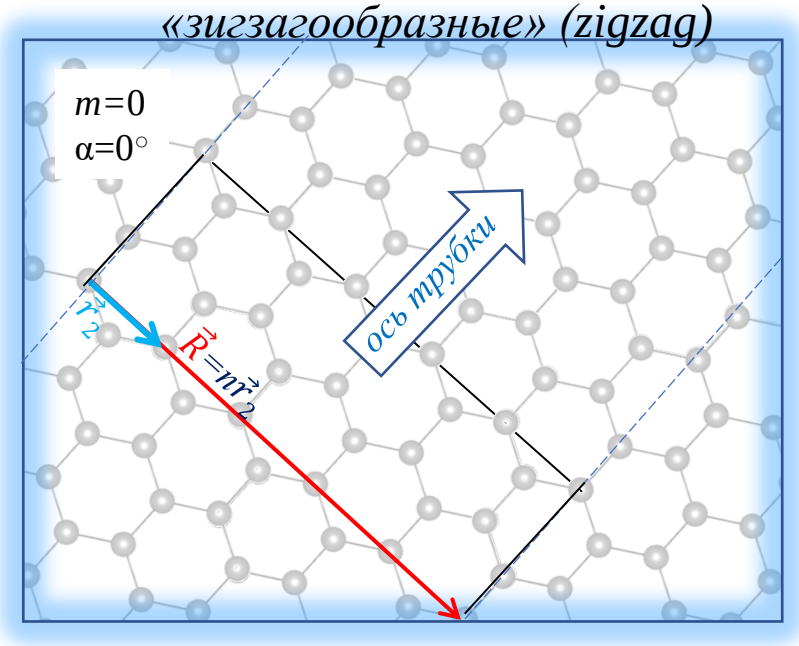




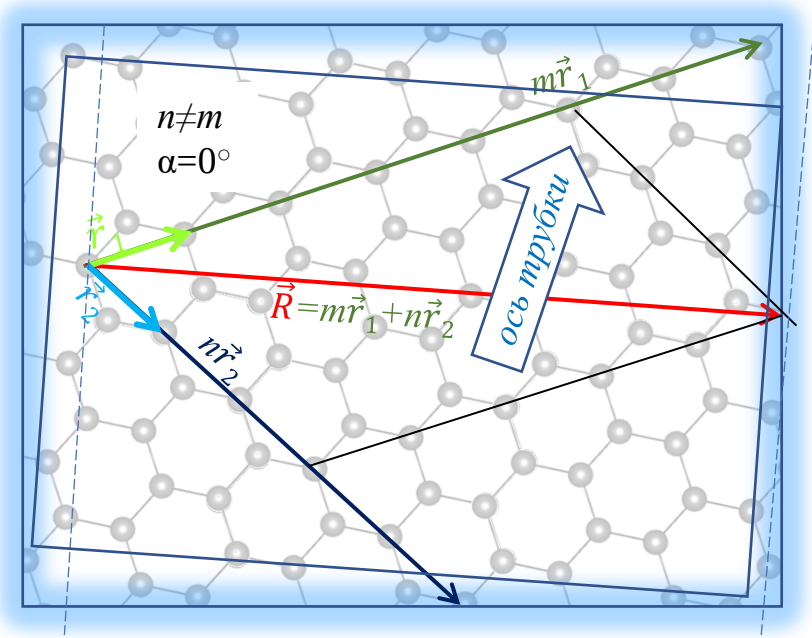
«зигзагообразные» (zigzag)



Элементарная ячейка кресельной трубки (4,4)

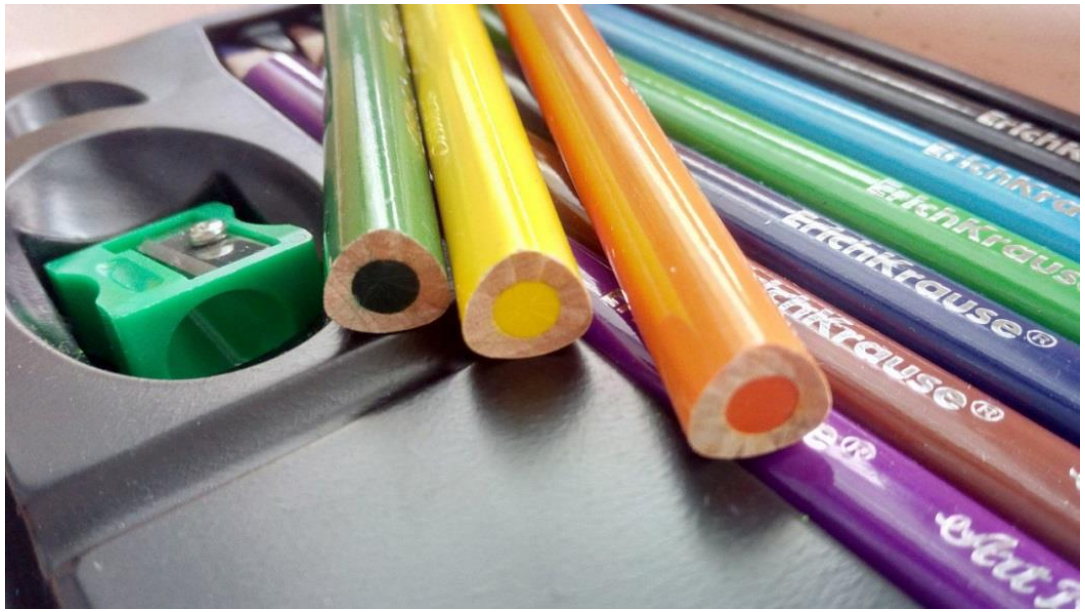


Элементарная ячейка зигзагообразной трубки (4,0)

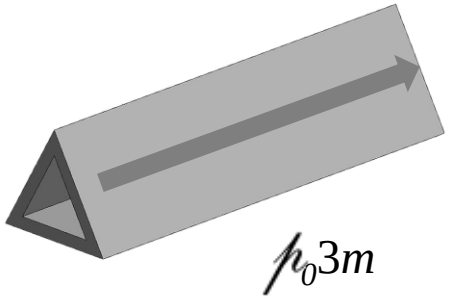


Элементарная ячейка хиральной трубки (5,3)

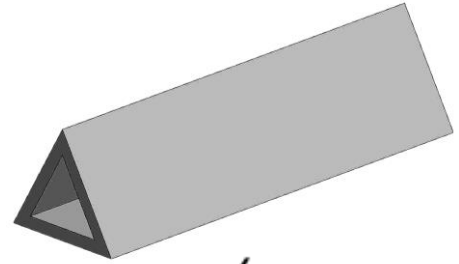
Стержни с осями бесконечно малых переносов и осями конечных порядков







$p_0 3m$



$p_0 3/mm$



$p_0 3/m$



$p_0 3$



Стержни с предельной симметрией и дискретной трансляцией



Блины и гриф покоятся: *ось бесконечного порядка и проходящее через нее бесконечное количество плоскостей*

Блины вместе с грифом равномерно вращаются в одну сторону: *ось бесконечного порядка*

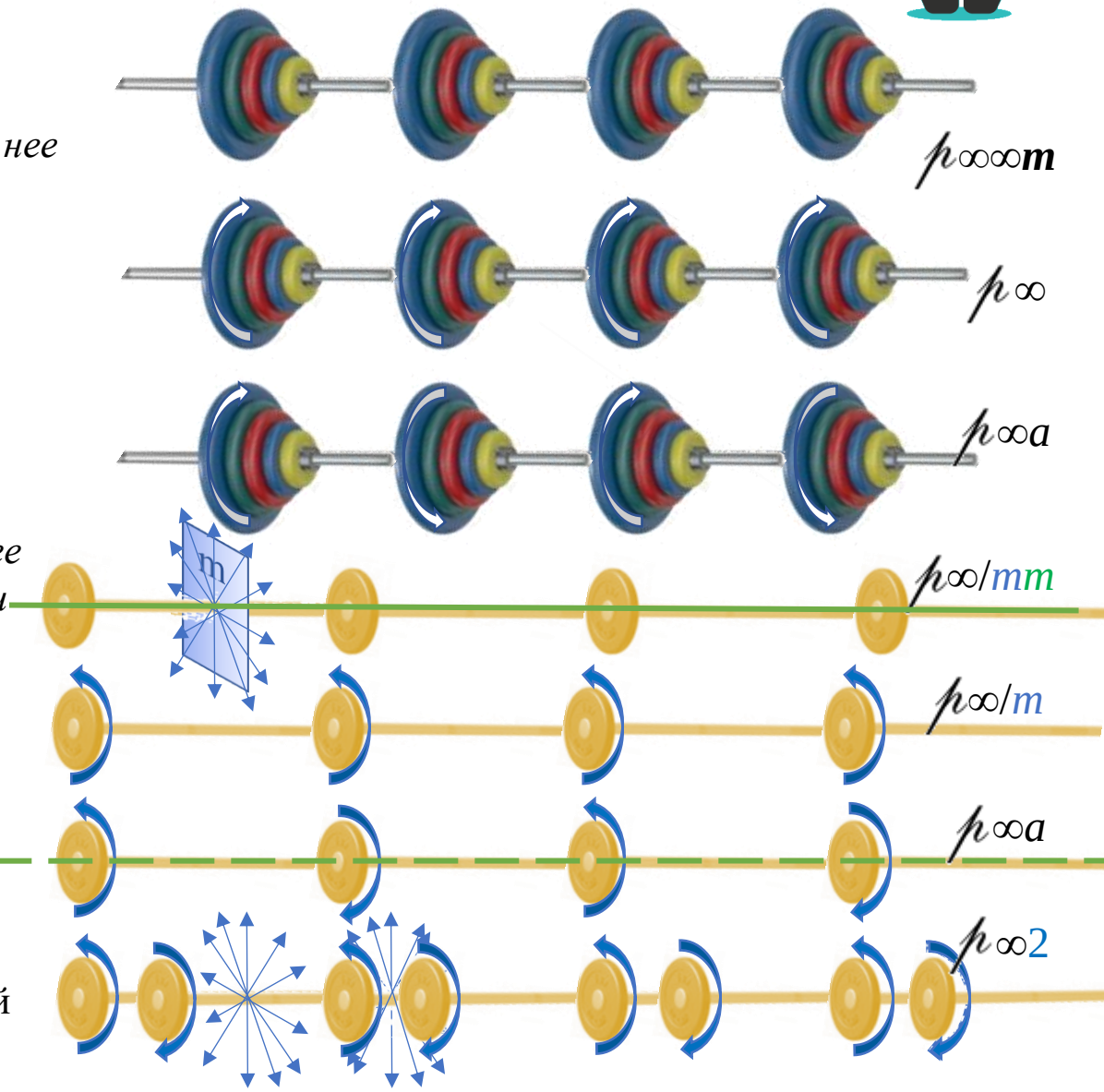
Блины вращаются в разные стороны, а гриф покоится: *плоскость скользящего отражения*

Блины и гриф покоятся: *ось бесконечного порядка, проходящее через нее бесконечное количество плоскостей и плоскость, перпендикулярная оси бесконечного порядка*

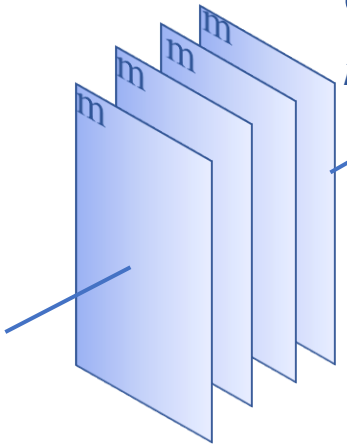
Блины и гриф вращаются в одну сторону: *ось бесконечного порядка и перпендикулярная плоскость*

Блины поочередно вращаются в разные стороны, а гриф покоится: *ось бесконечного порядка и плоскость скользящего отражения*

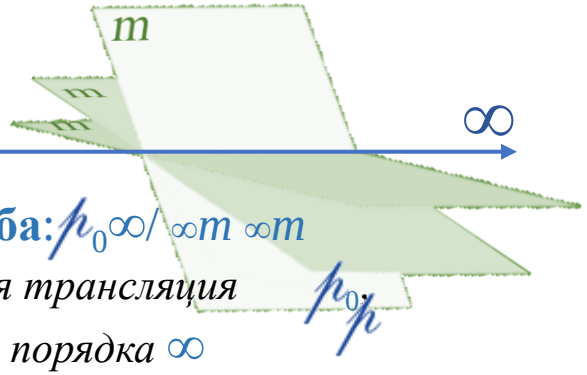
Блины группируются попарно и вращаются в разные стороны в каждой паре, гриф покоится: *ось бесконечного порядка и бесконечное количество осей 2-ого порядка*



СТЕРЖНИ С ОСЯМИ БЕСКОНЕЧНЫХ ПОРЯДКОВ И БЕСКОНЕЧНО МАЛЫМИ ТРАНСЛЯЦИЯМИ

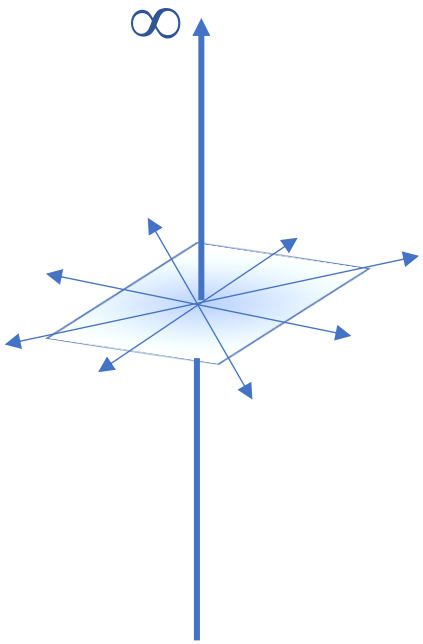


∞ ***ось бесконечного порядка***



Покоящаяся труба: $p_0\infty/\infty m\ \infty m$

- *бесконечно малая трансляция* p_0;
- *ось бесконечного порядка* ∞
- *бесконечное количество плоскостей, перпендикулярных оси* $\infty m_{\perp}$,
- *бесконечное количество проходящих через ось бесконечного порядка* ∞ *плоскостей* $\infty m_{\parallel}$
- *бесконечное количество центров инверсии* $\infty\bar{1}$

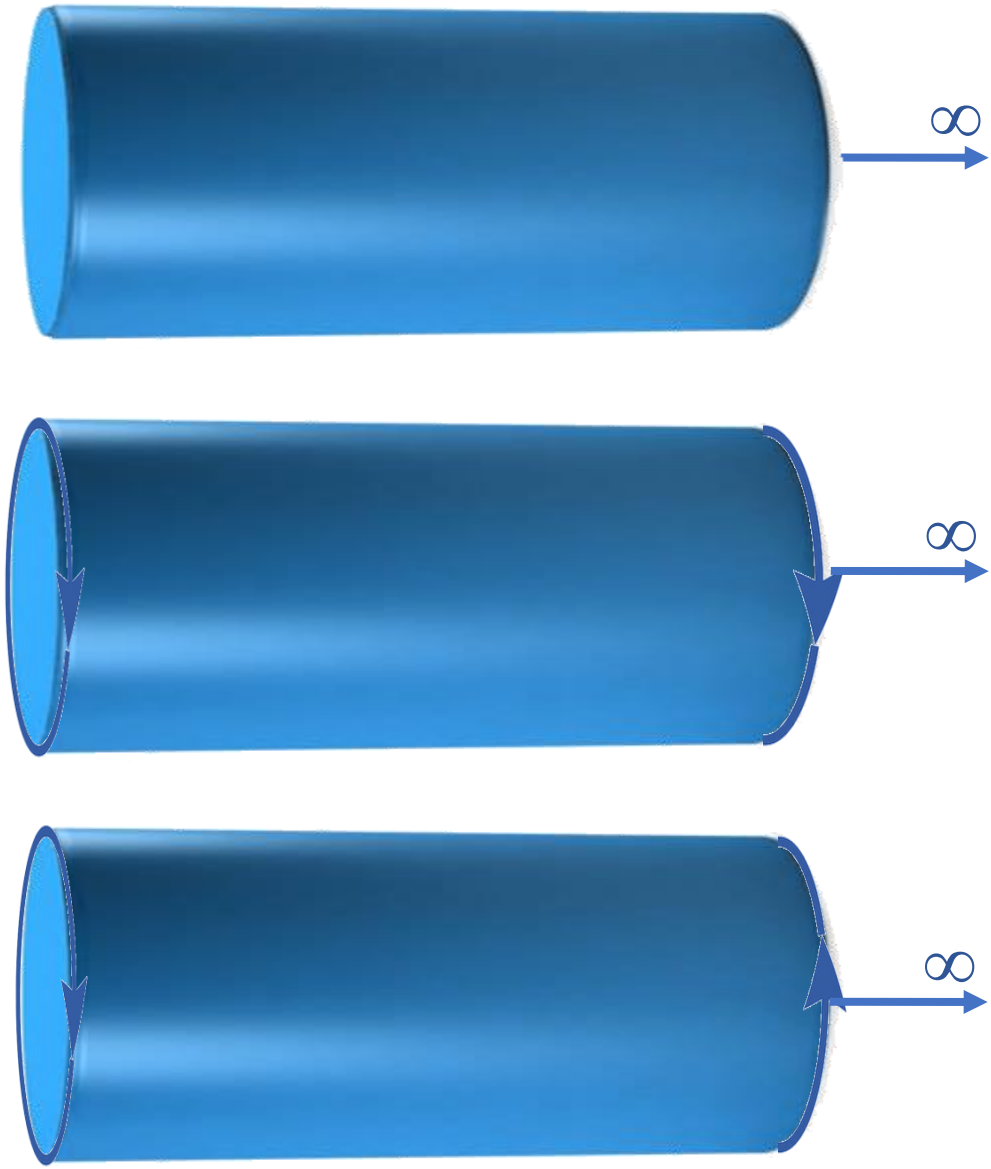


Вращающаяся труба: $p_0\infty/m$

- *бесконечно малая трансляция* p_0,
- *ось бесконечного порядка*
- *бесконечное количество плоскостей, перпендикулярных этой оси* $m_{\perp}$

Закрученная труба или цилиндрическая нить: $p_0\infty\infty 2$

- *бесконечно малая трансляция* p_0,
- *ось бесконечного порядка* ∞
- *бесконечное количество осей 2-ого порядка, перпендикулярных этой оси* $\infty 2$



СТЕРЖНИ С ОСЯМИ БЕСКОНЕЧНЫХ ПОРЯДКОВ И БЕСКОНЕЧНО МАЛЫМИ ТРАНСЛЯЦИЯМИ

Пущенная по трубе вода делает ось бесконечно малой трансляции полярной, что исключает перпендикулярные ей плоскости, оси 2-ого порядка и центры инверсии



$p_0 \infty m$



$p_0 \infty$



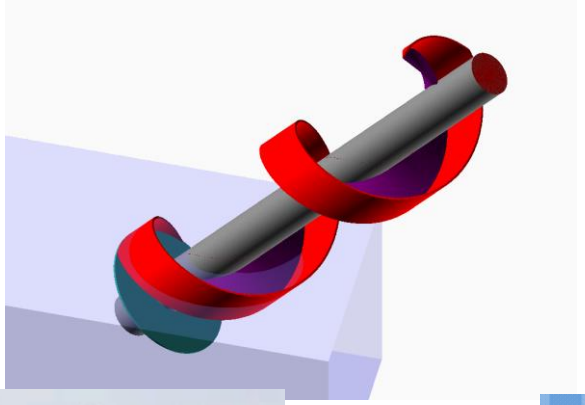
$p_0 \infty \infty \bar{1}$



СТЕРЖНИ С ОСЯМИ БЕСКОНЕЧНЫХ ПОРЯДКОВ И БЕСКОНЕЧНО МАЛЫМИ ТРАНСЛЯЦИЯМИ







Винтовые оси могут быть правыми и левыми. Правые оси при повороте против часовой стрелки увеличивают высоту

Правый поворот



Левый поворот



Двери тоже бывают правыми и левыми







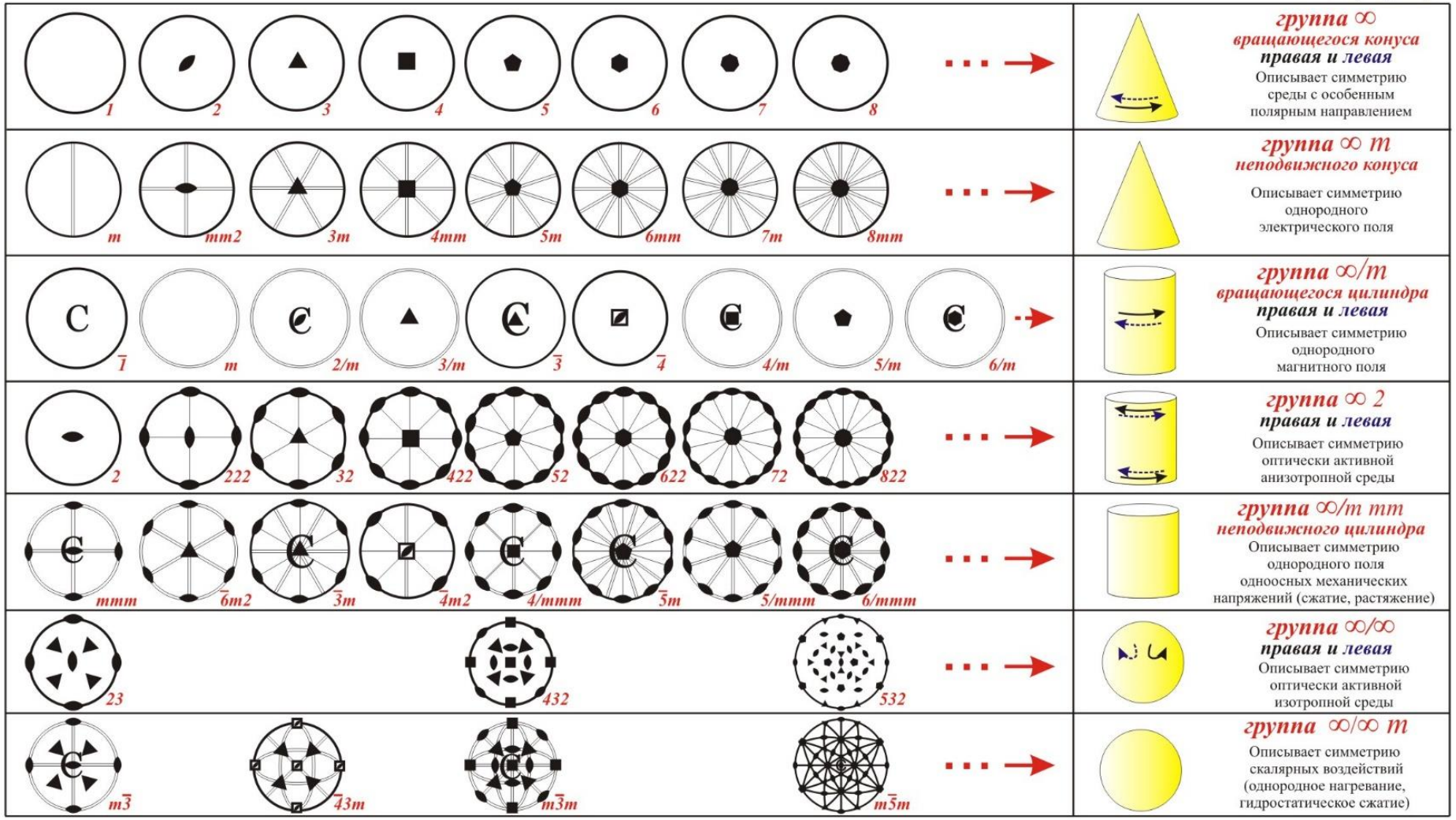
Предельные группы симметрии Кюри

Группы Кюри являются обобщениями конечных точечных групп при условии, что порядок оси симметрии стремится к бесконечности.



П.Кюри
Nobel Prize
1903 (Physics)

Принцип суперпозиции Кюри - кристалл под внешним воздействием будет обладать теми элементами симметрии, которые являются общими для кристалла при отсутствии воздействия и для воздействия при отсутствии кристалла





Пьер Кюри
(1859 – 1906)

ПРЕДЕЛЬНЫЕ ГРУППЫ симметрии Кюри.

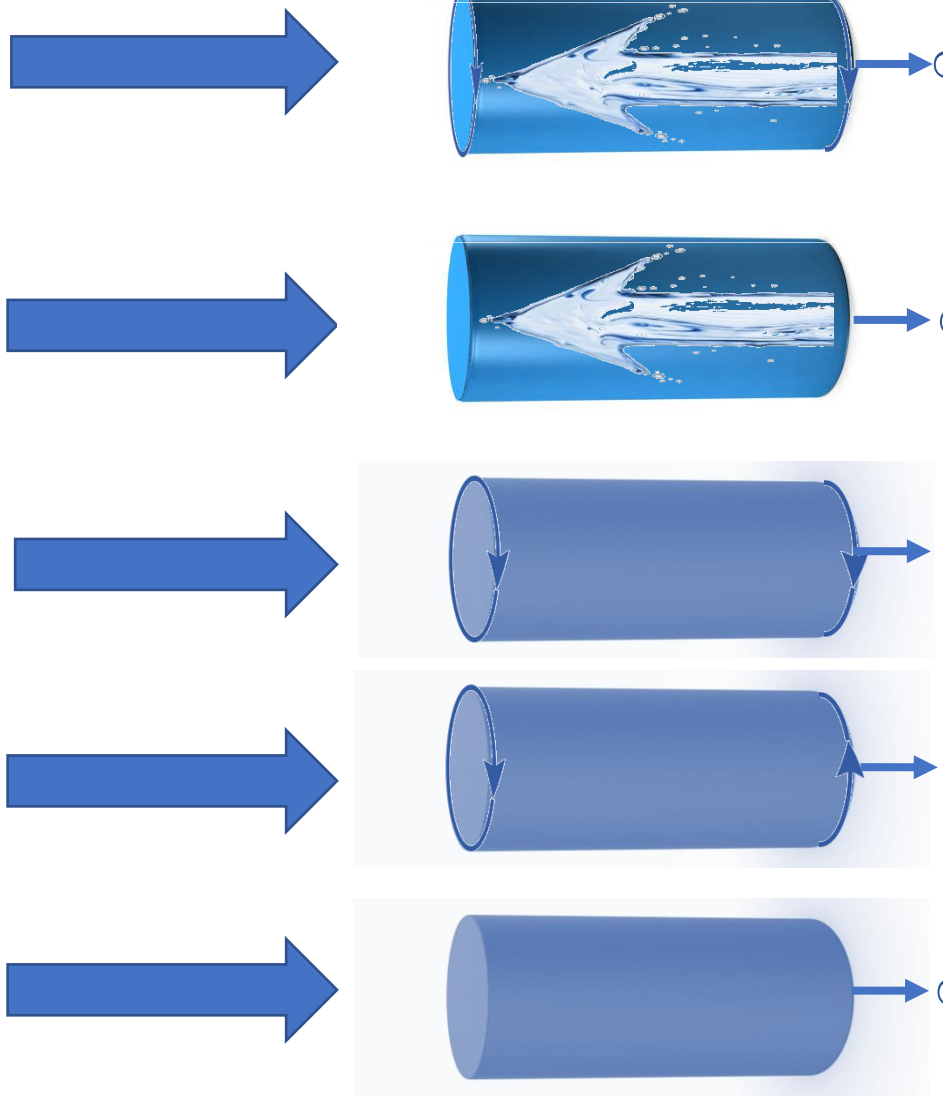
«Кюри охватил значение симметрии в физических явлениях тогда, когда связь симметрии с фактами физики не сознавалась. Он указал его там, где его не видели»

В.И.Вернадский о
П.Кюри



Группы симметрии с осями бесконечных порядков и предельной симметрией получаются как сочетание бесконечно малой трансляции и предельных точечных групп симметрии Кюри с единичным направлением





Ось бесконечного порядка ∞ и бесконечно малая трансляция $p_0\infty$

Ось бесконечного порядка ∞, бесконечно малая трансляция p_0 *и бесконечное количество плоскостей по особому направлению плоскостей* $\infty m_{\parallel}$

$p_0\infty\infty m_{\parallel}$

Ось бесконечного порядка ∞, бесконечно малая трансляция p_0 *и бесконечное количество плоскостей, проходящих перпендикулярно особому направлению* ∞m

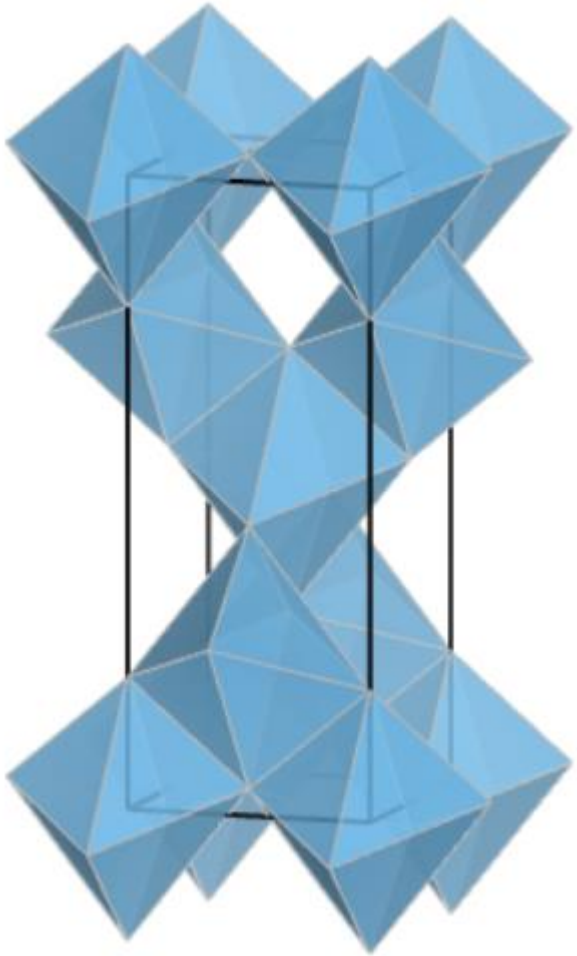
$p_0\infty/\infty m_{\perp}$

Ось бесконечного порядка ∞, бесконечно малая трансляция p_0 *и бесконечное количество плоскостей, проходящих как перпендикулярно, так и параллельно особому направлению* $\infty m_{\perp}$ $\infty m_{\parallel}$

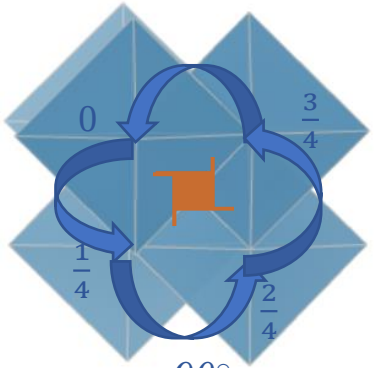
$p_0\infty/\infty m_{\perp}\infty m_{\parallel}$







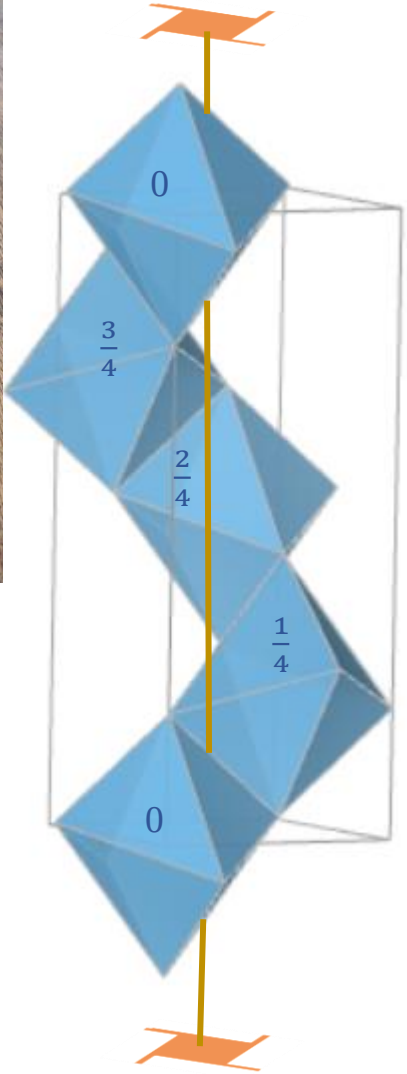
Полиэдрическая модель структуры анатаза TiO_2. Пространственная группа симметрии $I4_1/amd$



Поворот на 90° против часовой стрелки и подъем на $\frac{1}{4}$ трансляции

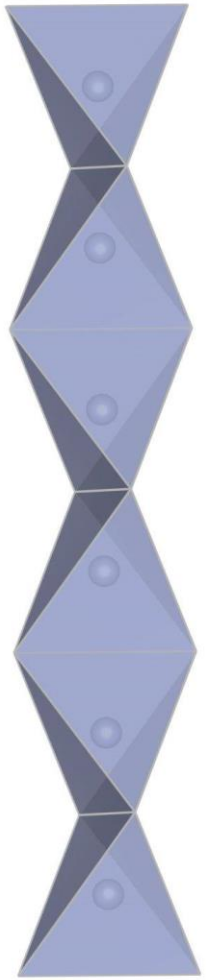


А это поворот на 90° по часовой стрелки и подъем на $\frac{1}{4}$ трансляции



Фрагмент структуры анатаза: закрученная спираль из октаэдров $[TiO_6]$ можно описать как стержень с группой симметрии 4_122, которая в полном соответствии *с принципом Кюри* является подгруппой пространственной группы анатаза $I4_1/amd$

Конформация катионных цепочек (анионцентрированных)



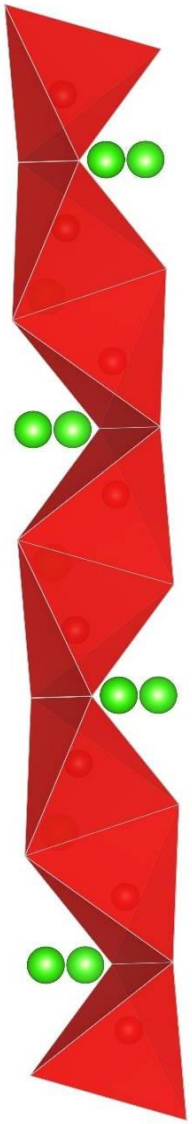
Симметрия цепочки

$p\,4_2/mmm$

Фрагмент структуры

Cd_2NCl_3

PIbam



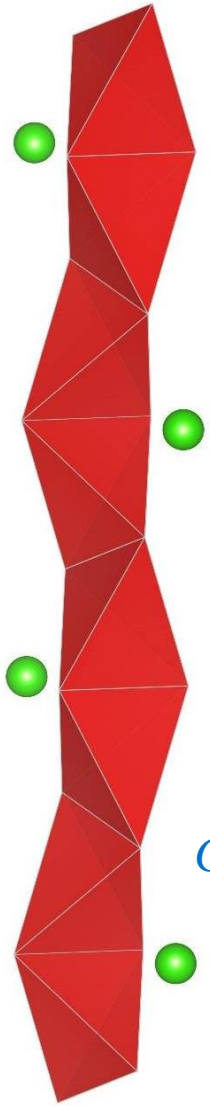
Симметрия цепочки

$p\,2_1/m$

Фрагмент структуры

$NaPr_4O_2Cl_9$

$P2_1/m$



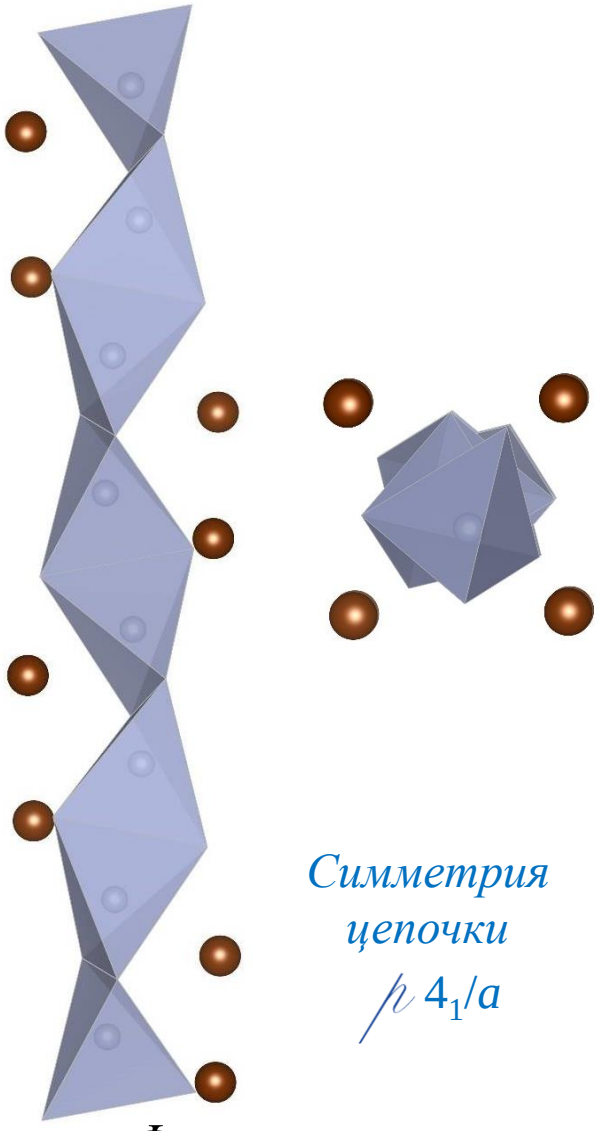
Симметрия цепочки

$p\,2_1/m$

Фрагмент структуры

копарсита $[Cu_4O_2]((As,V)O_4)Cl$

Pbcm



Симметрия цепочки

$p\,4_1/a$

Фрагмент структуры

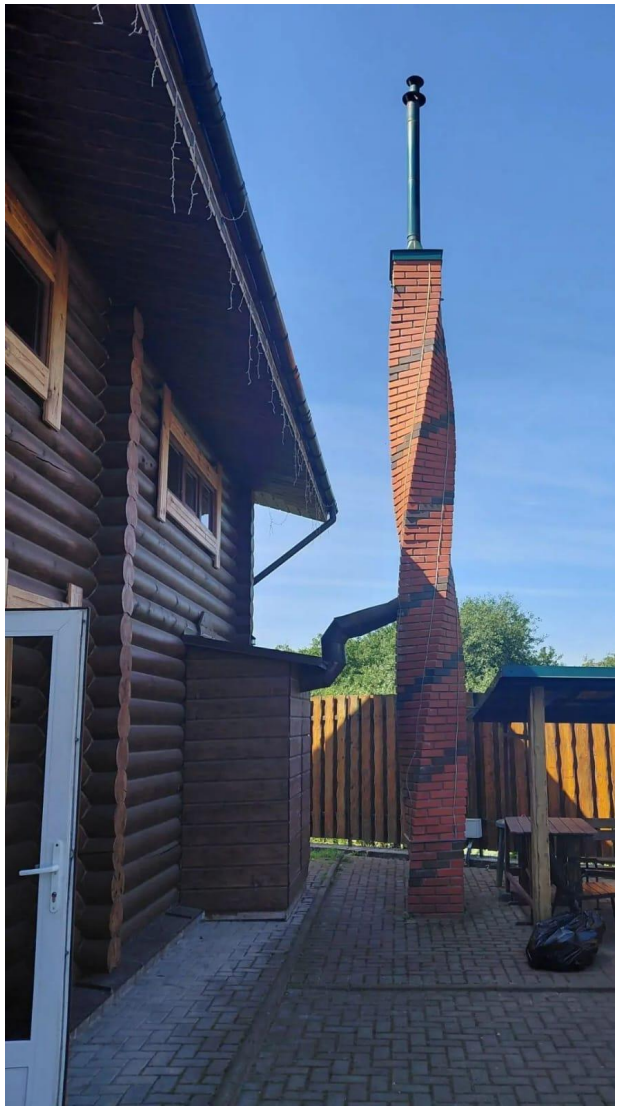
$Ce_2[NBr_3]$

$I4_1/a$



Винтовая труба. Псков. 2026





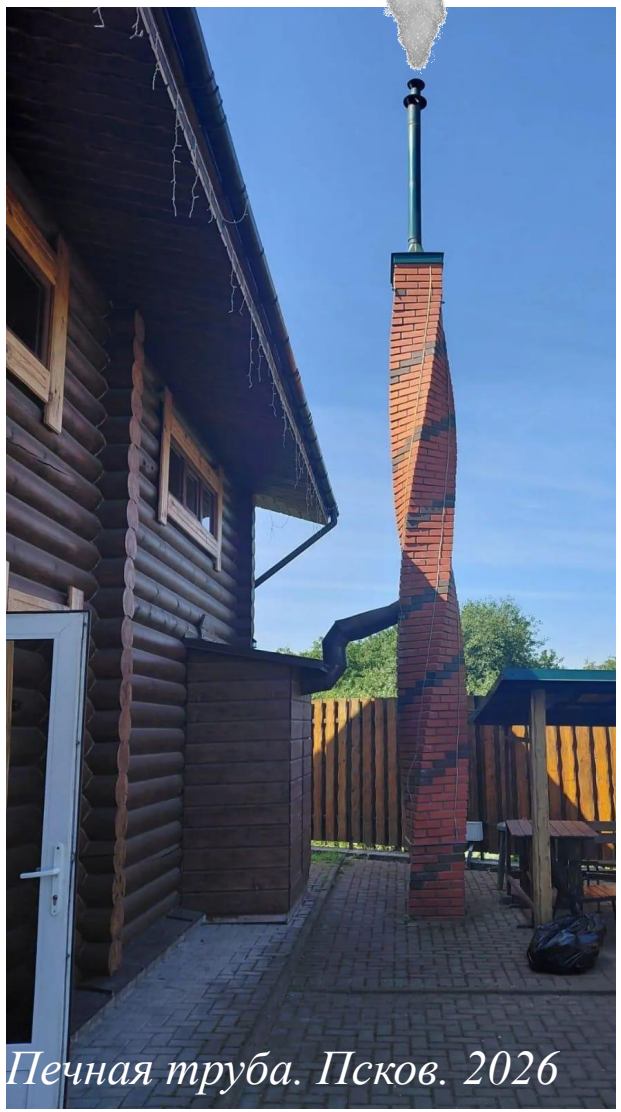
В обоих случаях присутствует правая винтовая ось бесконечного порядка: $\infty\infty$.

Поворот на бесконечно малый угол сопровождается бесконечно малым скольжением

Кристаллографическая группа $p422$

Из трубы идет дымок…

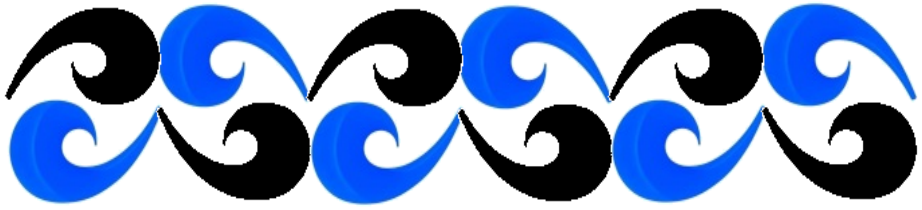


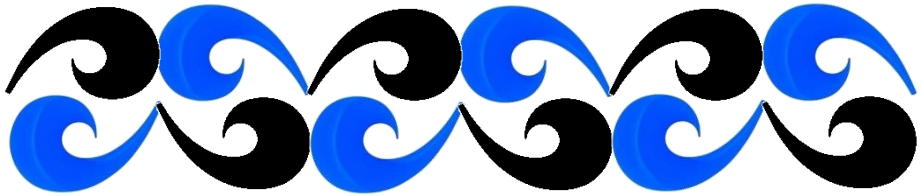


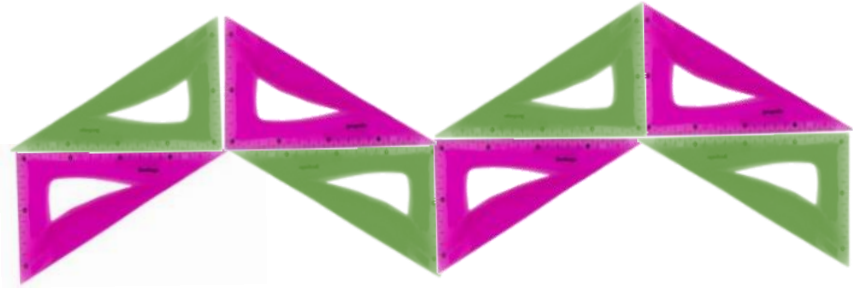
Печная труба. Псков. 2026

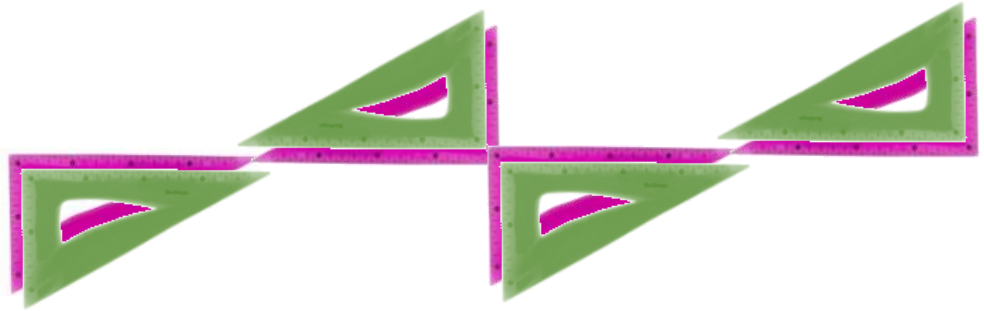
Кристаллографическая группа $p4$

Примеры геометрических одномерных узоров





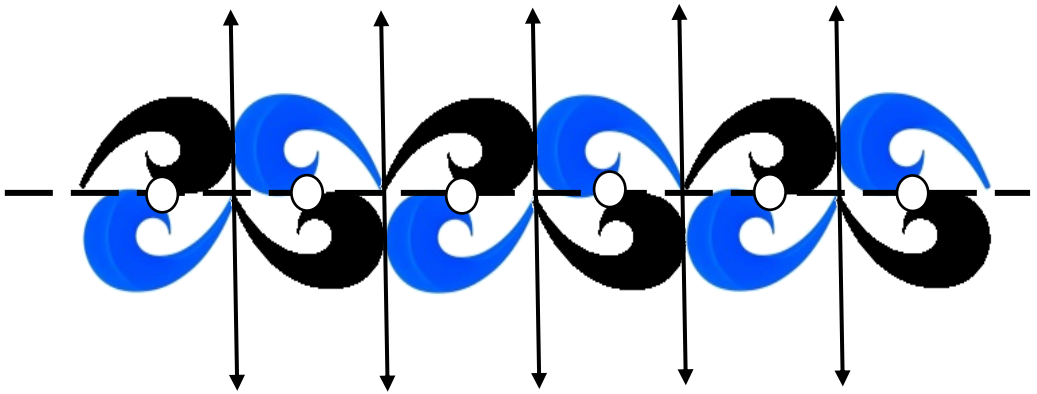


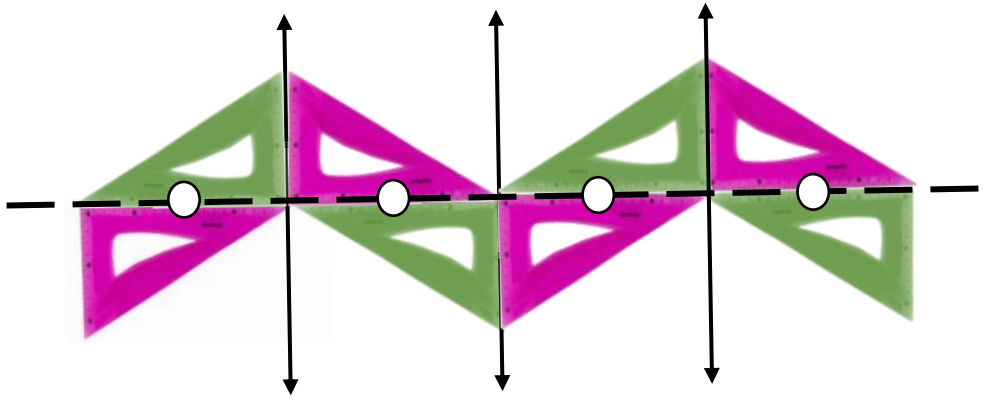


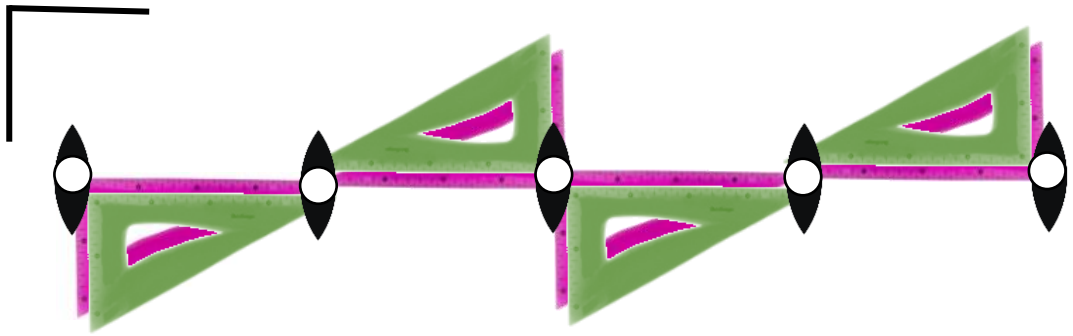


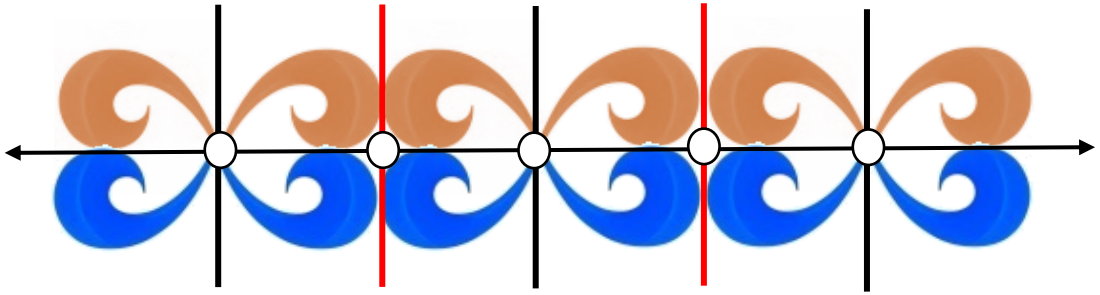


Примеры геометрических одномерных узоров











А. В. Шубников
В. А. Копцик

СИММЕТРИЯ
В
НАУКЕ И ИСКУССТВЕ

