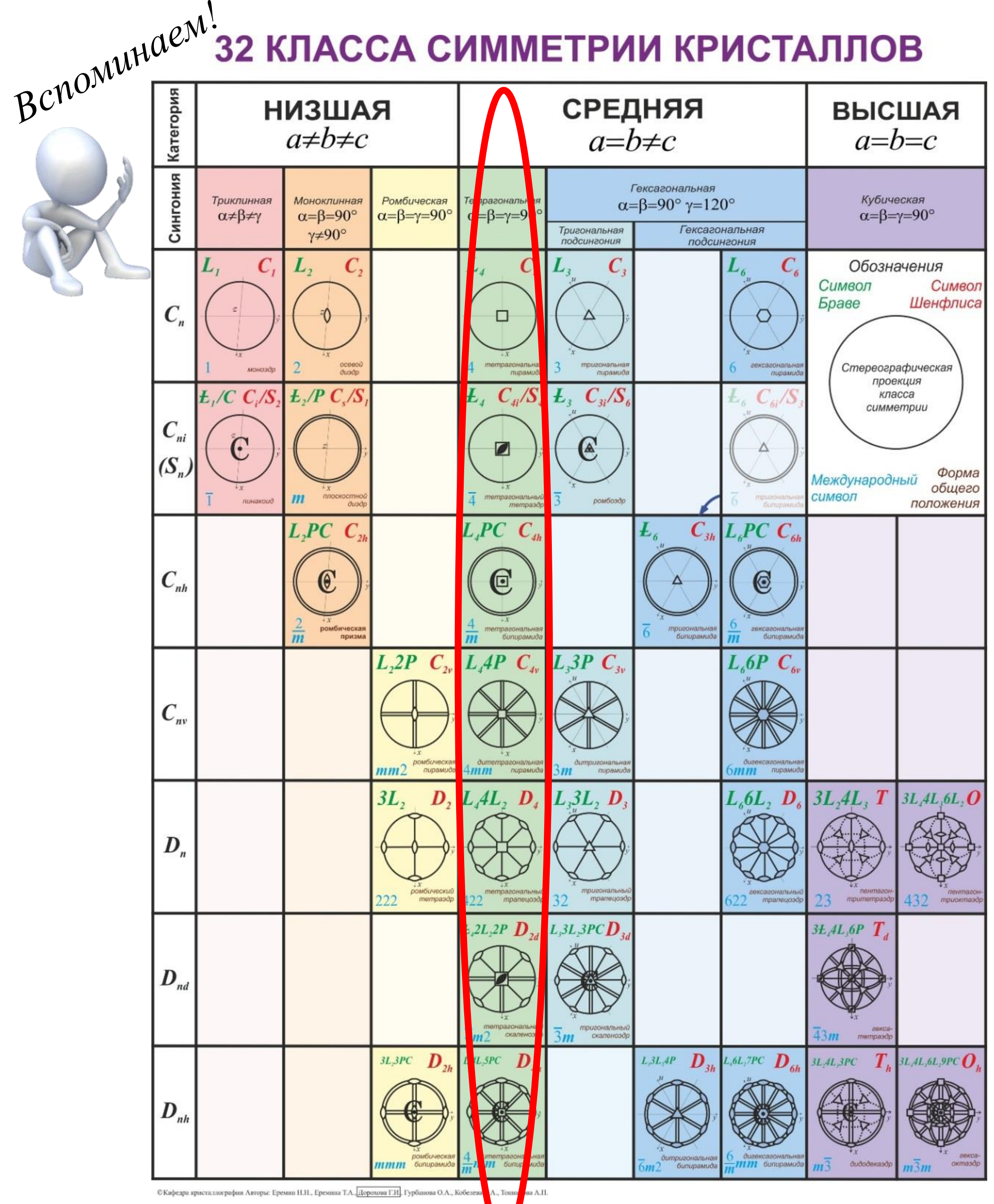
Семинар №1. Тетрагональные классы симметрии. Микроэлементы симметрии тетрагональной сингонии



Тетрагональная сингония относится к средней категории:

$a=b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90°$

В тетрагональной сингонии 7 точечных классов:

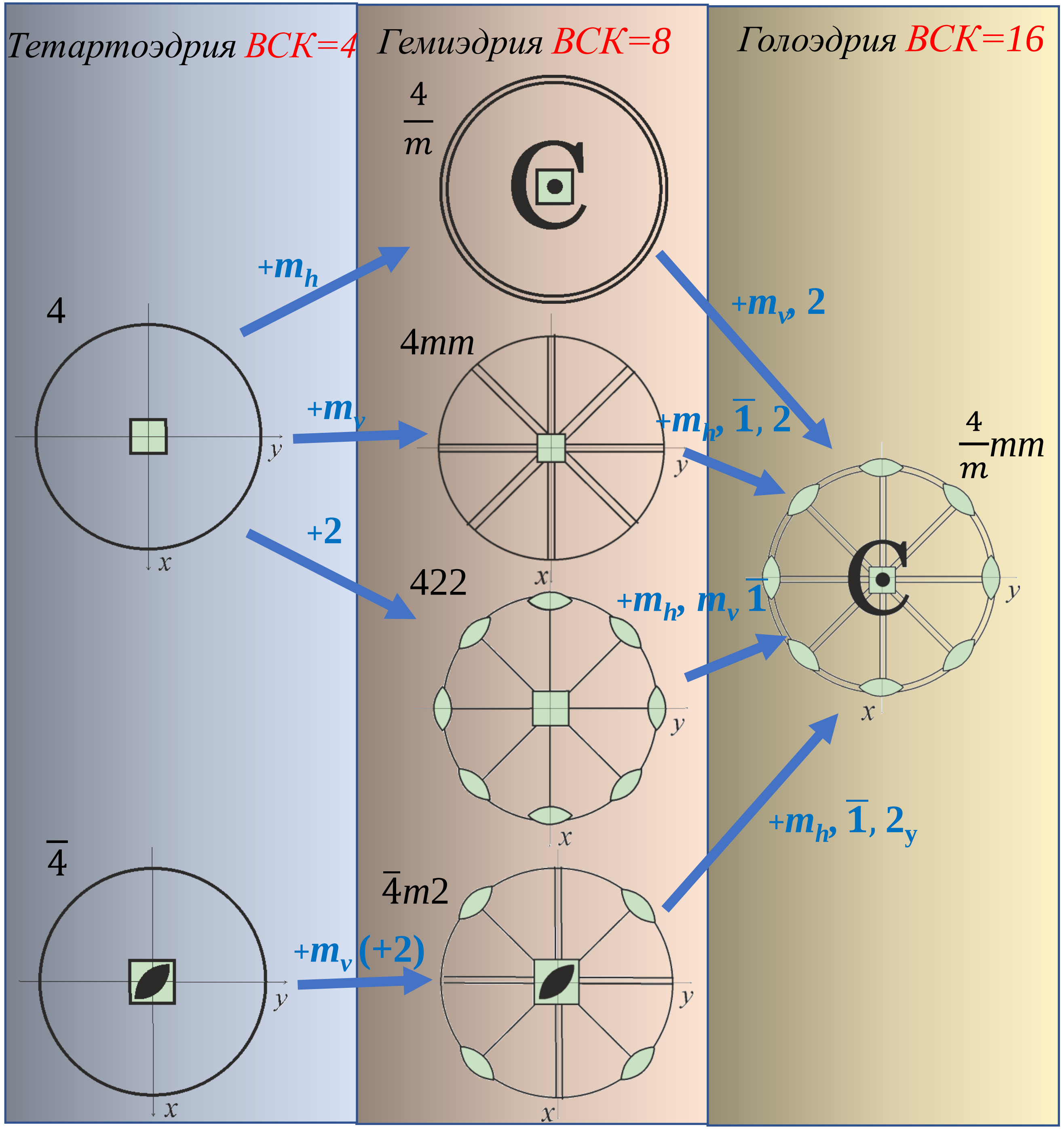
международная символика	4	$\bar{4}$	$4mm$	$\frac{4}{m}$	422	$\bar{4}m2$	$\frac{4}{m}mm$
символика Шенфлиса	C	$C_{4i}\,(S_4)$	C_{4v}	C_{4h}	D_4	D_{2d}	D_{4h}

По правилам записи международного символа средней категории на первом месте фиксируется единичное направление, всегда совмещенное с координатной осью Z. Вторая позиция отвечает эквивалентным горизонтальным координатным направлениям X и Y, а на третьей позиции (при наличии) обозначается элемент симметрии диагонального направления, равнонаклонного к эквивалентным координатным осям.

I	II	III
Z	$X=Y$	$\alpha/2$
4, $\frac{4}{m}$, или $\bar{4}$	2 или m	2 или m

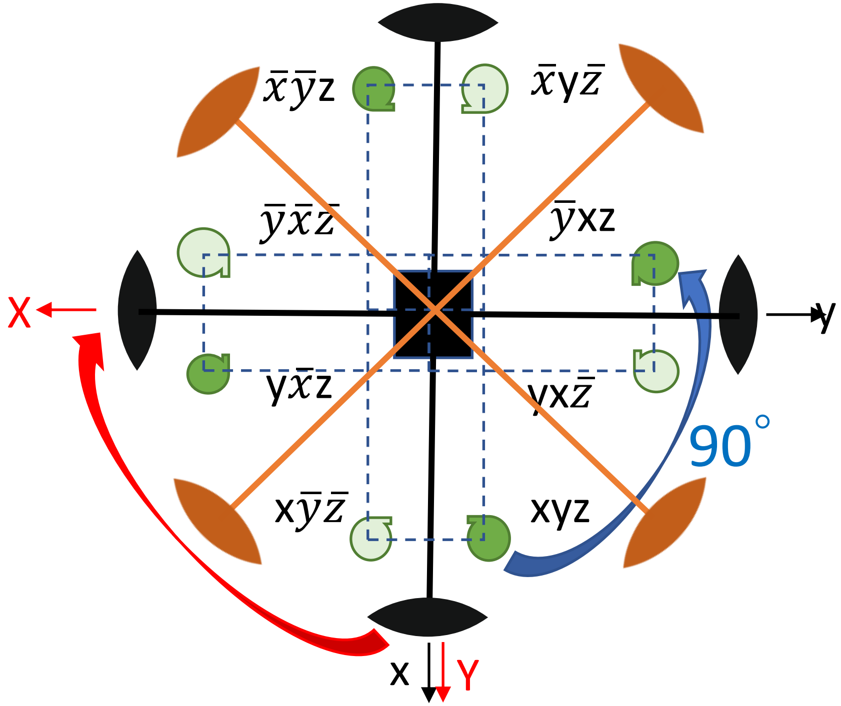
Вывод точечных групп тетрагональной сингонии

ВСК – величина симметрии класса или размножающая способность. Соответствует количеству точек общего положения (и не только!)



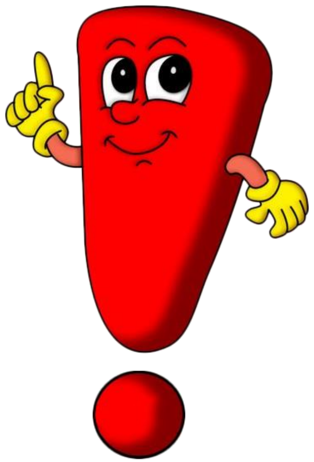
МАТРИЧНЫЙ И КООРДИНАТНЫЙ СПОСОБ ЗАДАНИЯ ОПЕРАЦИЙ СИММЕТРИИ

Вспоминаем!



Координаты точки после ее поворота против часовой стрелки можно получить умножив прямую матрицу преобразования координатных осей на одностолбцовую матрицу координат:

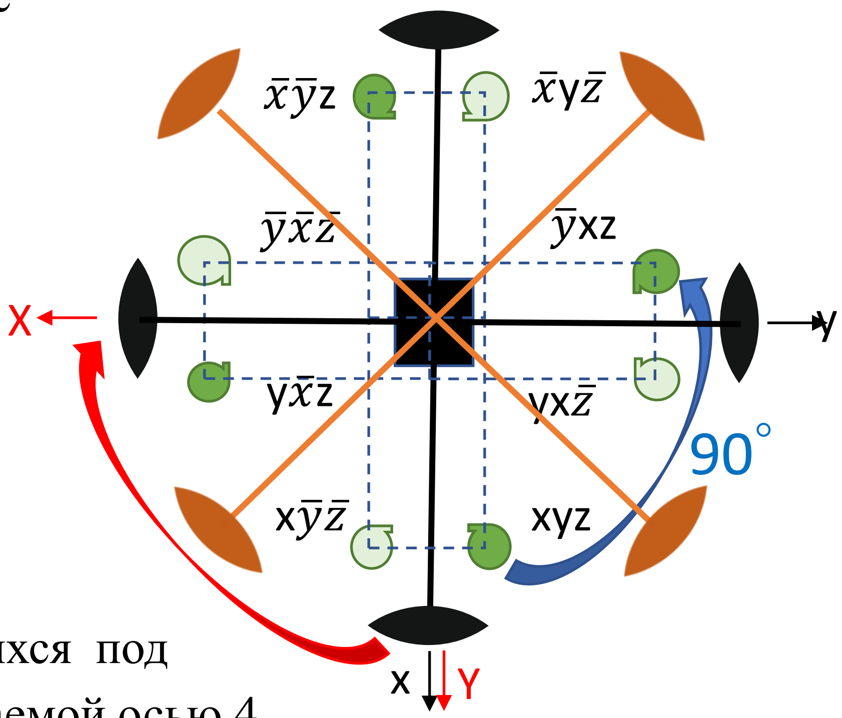
$$4^1_z = \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \times \begin{matrix} x \\ y \\ z \end{matrix} = \begin{matrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{matrix}$$



Важно помнить, что поворот координатной системы в одну сторону соответствует повороту точки в противоположную!

В матричном виде можно также записать взаимодействие операций симметрии:

$$4_z = \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \times 2_x = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = 2_{xy}$$



Как матричный, так и модельный способ наглядно показывают, что пересечение оси 4_z и 2_x вызывает появление дополнительной неэквивалентной оси 2-ого порядка 2_{xy} под углом 45° к исходной.

Верно и обратное: два последовательных поворота вокруг осей 2, пересекающихся под углом 45°, приводит к появлению результирующей операции симметрии, задаваемой осью 4_z

$$2_{xy} = \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} \times 2_x = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix} = \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} = 4^3_z$$

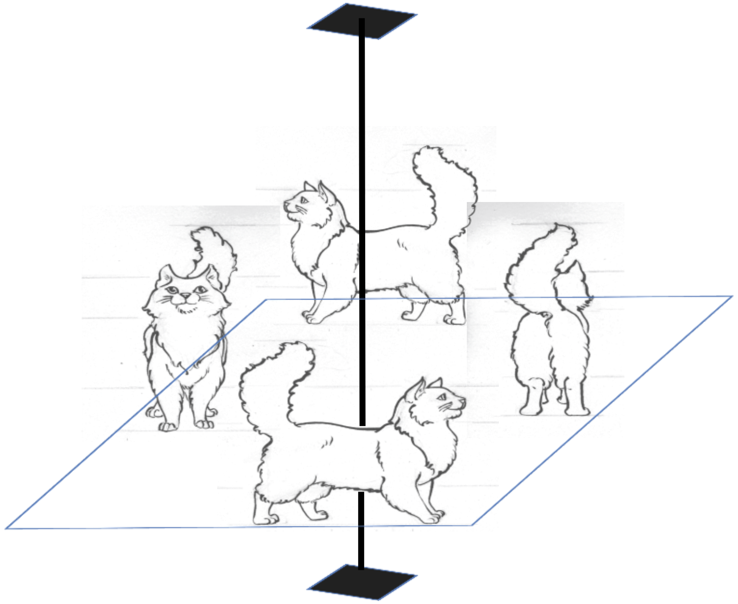
Операции симметрии данного класса *некоммутативны*. Последовательные повороты, проведенные в обратном порядке приведут к иной результирующей операции симметрии: $2_x \times 2_{xy} = 4^1_z$

Взаимодействие осей 2-ого порядка, поворотных или инверсионных приводит к появлению новой оси с элементарным углом поворота вдвое большим, чем угол пересечения порождающих элементов симметрии. Если исходные элементы однородны, то возникающая ось – поворотная, разнородны зеркально-поворотная или инверсионная.

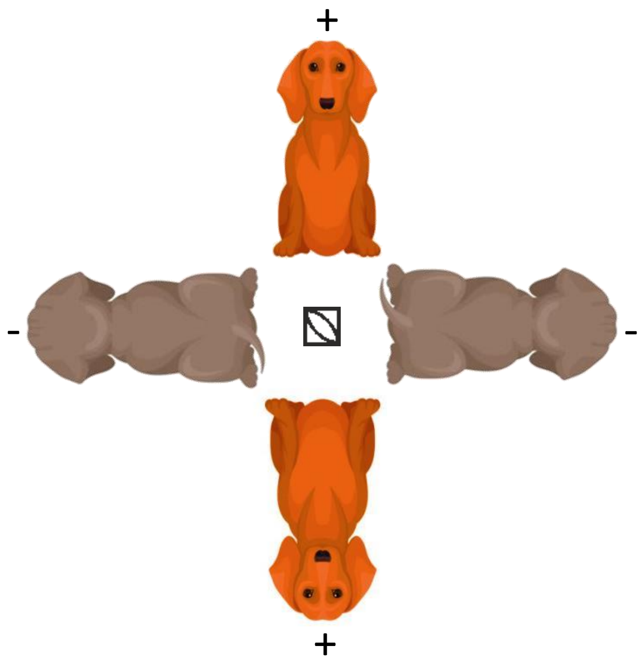
Элементы симметриии тетрагональных пространственных групп:

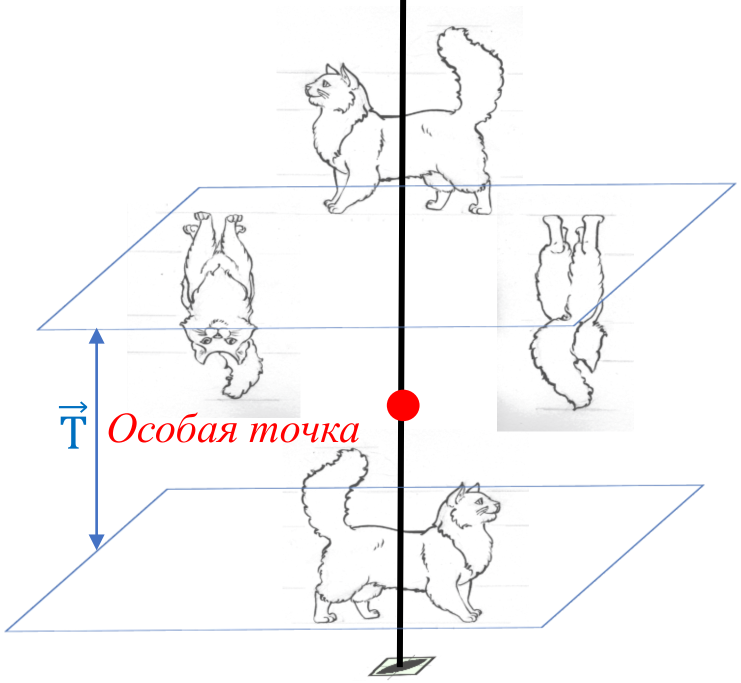
- Поворотная ось 4-ого порядка 4
- Инверсионная ось 4-ого порядка $\bar{4}$
- Винтовая нейтральная ось 4-ого порядка 4_2
- Винтовая энантиоморфная правая ось 4-ого порядка 4_1
- Винтовая энантиоморфная левая ось 4-ого порядка 4_3

- Плоскость зеркального отражения m
- Плоскость с горизонтальным скольжением, чаще всего обозначаемая в средней категории как b (иногда как g),
- Плоскость с вертикальным скольжением c
- Клиноплоскость n
- Клиноплоскость d

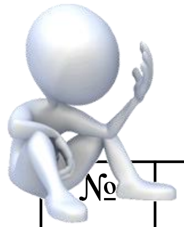


Поворотная ось **4**





Инверсионная ось $\bar{\mathbf{4}}$

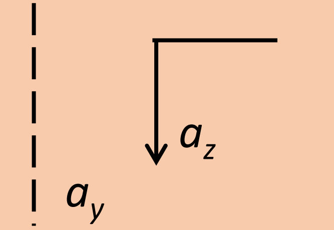
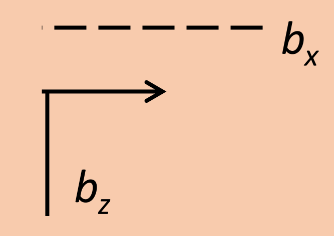
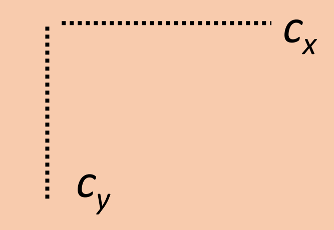
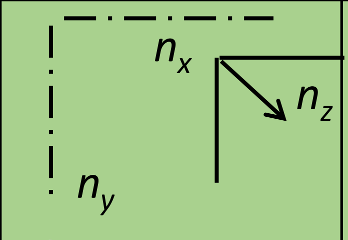
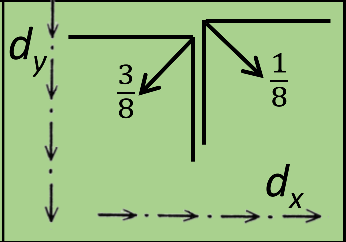


ХАРАКТЕРИСТИКИ ЗАКРЫТЫХ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ

№	Эл. симм	Гр. знак	n	α	I/II род	Низш/ высш	Величина симм.	Групповое представление (операции симм.)	Матрица преобразования координатных осей для операций симметрии
1	1	-	1	360°	I	Низш.	1	$\{e\}$	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
2	$\bar{1}$		1	360	II	Низш.	2	$\{1=e,\ \bar{1}\}$	$\begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$
3	$\bar{2}$ (m)		2	180/ 360	II	Низш.	2	$\{1=e,\ m\}$	$\bar{2}_z \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $\bar{2}_x \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $\bar{2}_{xy} \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
4	$\bar{4}$		4	90/ 180	II	Высш.	4	$\{1=e,\ \bar{4}^1,\ \bar{4}^2=2,\ \bar{4}^3\}$	$\bar{4}^1{}_z \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $\bar{4}^3{}_z \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$
5	2		2	180°	I	Низш.	2	$\{e,\ 2^1\}$	$2_z \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $2_x \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$ $2_y \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{matrix}$
6	4		4	90°	I	Высш.	4	$\{e,\ 4^1,\ 4^2=2,\ 4^3\}$	$4^3{}_z \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$ $4^1{}_z \begin{matrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$

Для инверсионной оси 4-ого порядка элементарный угол поворота вдвое больше минимальной поворотной составляющей (не 90°, а 180°), а величина симметрии соответствует порядку оси (4).

ОТКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ. ПЛОСКОСТИ

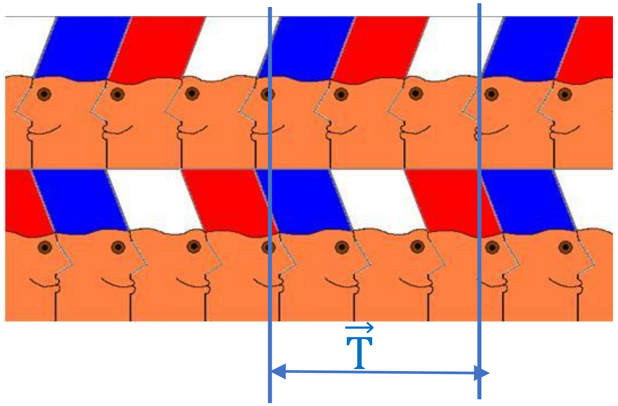
№	Эл. симм	Гр. знак	I/II род	Низш/ высш	Вел. симм.	Операции симметрии	Матрицы операций симметрии
1	*a*		II	Низш.	2	$\{e, a\}$	$a_y \begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
2	*b*		II	Низш.	2	$\{e, b\}$	$b_x \begin{matrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
3	*c*		II	Низш.	2	$\{e, c\}$	$c_y \begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
4	*n*		II	Низш.	2	$\{e, n\}$	$n_y \begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
5	*d*		II	Низш.	2	$\{e, d\}$	$d_y \begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 1/4 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$

Плоскости скользящего отражения

Клино-плоскости

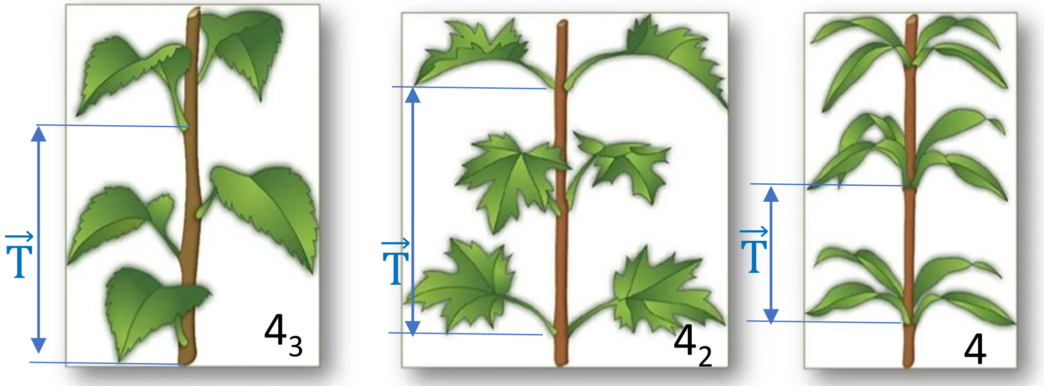
ОТКРЫТЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ.

Трансляция



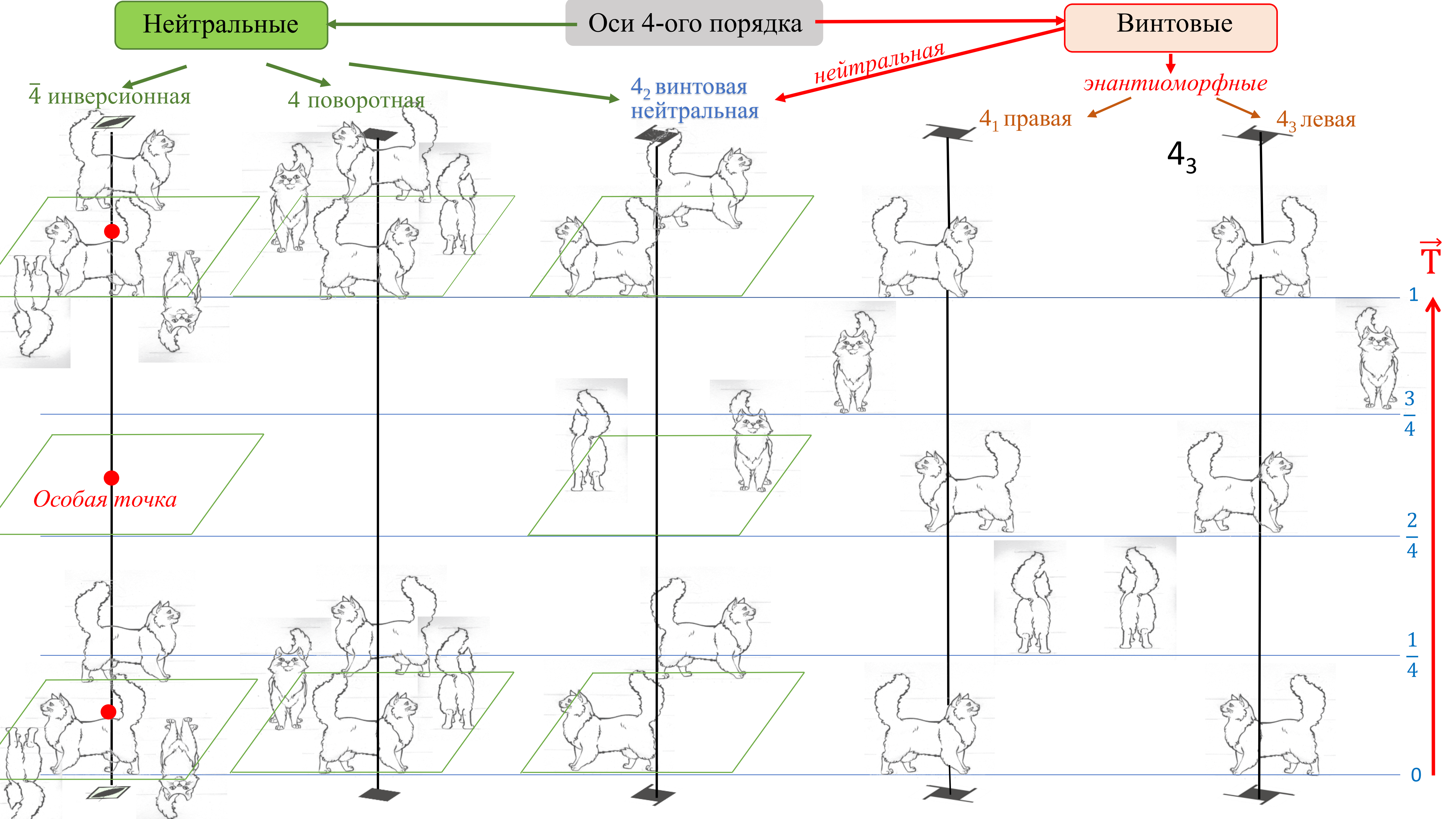
Плоскости скользящего отражения

Винтовые оси



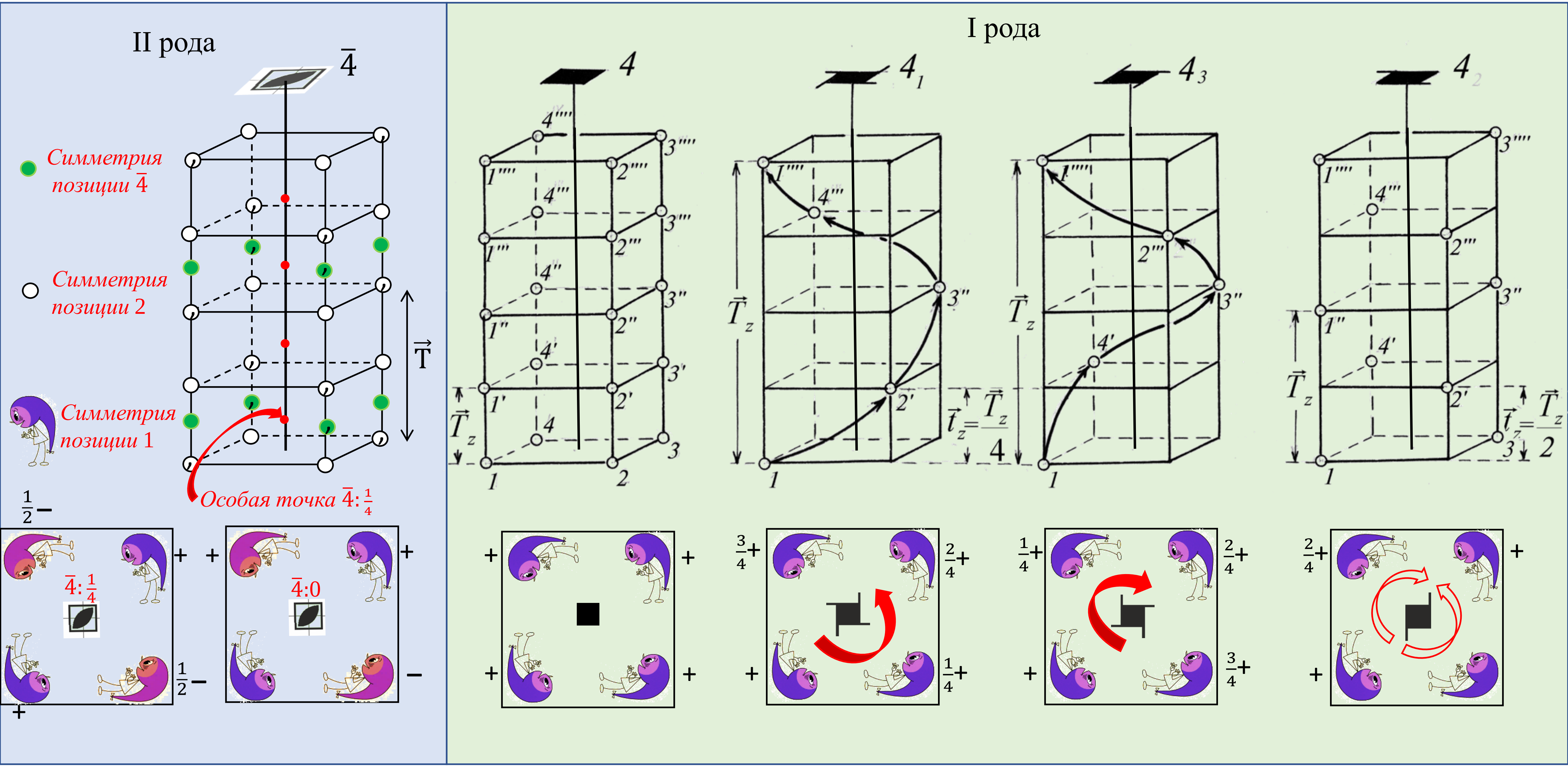
Очередное (спиральное)	Супротивное	Мутовчатое
Береза Липа Дуб	Сирень Клен Крапива	Вороний глаз Олеандр Элодея Барбарис

Клиноплоскости

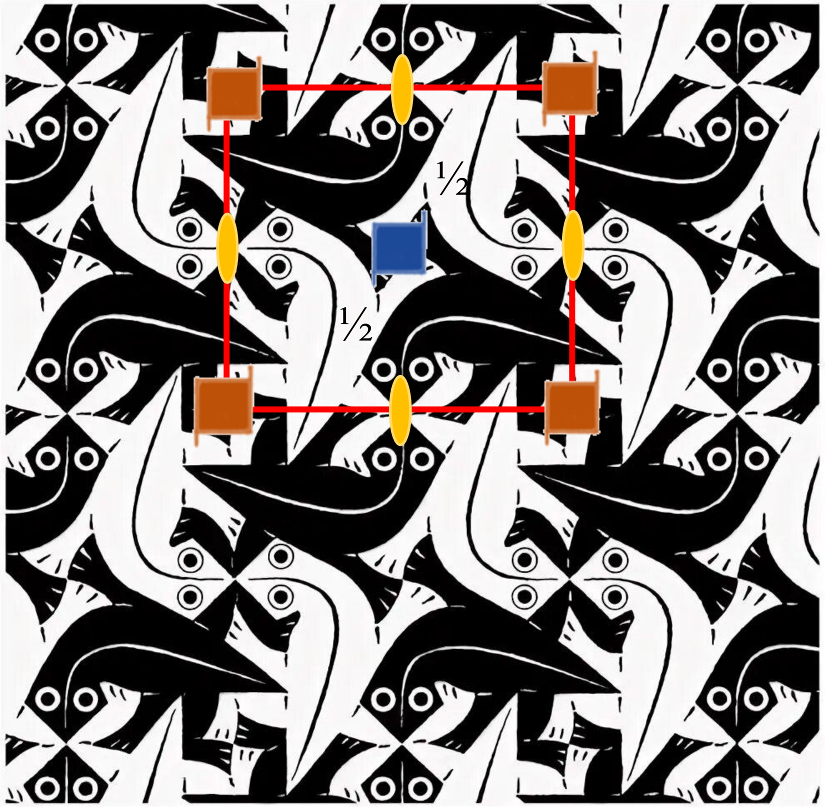


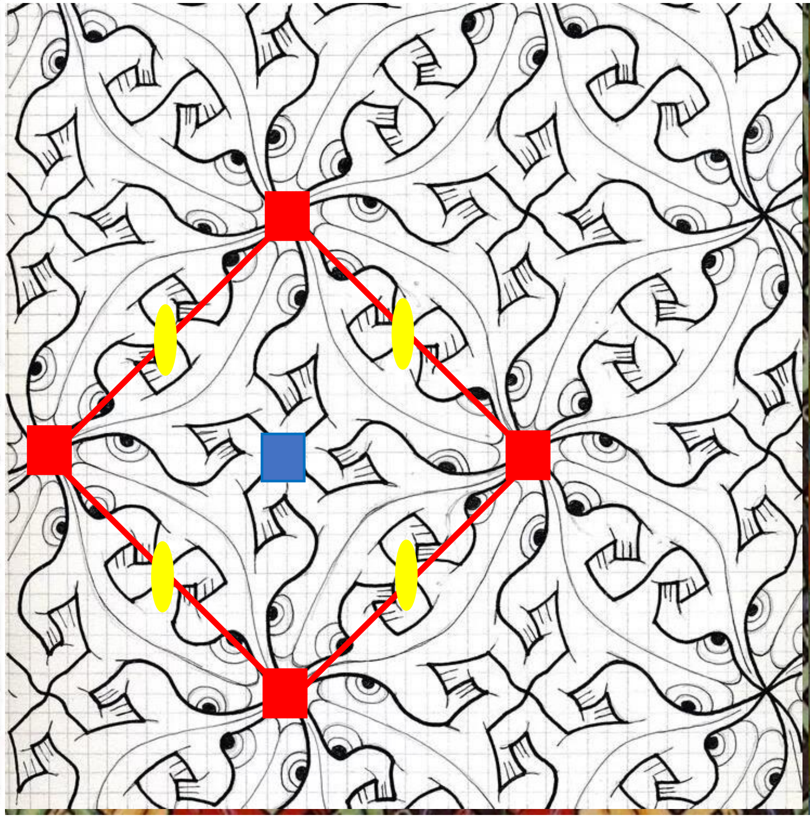
Нейтральные
Оси 4-ого порядка
Винтовые
нейтральная
энантиоморфные
$\bar{4}$ инверсионная
4 поворотная
4_2 винтовая нейтральная
4_1 правая
4_3 левая
4_3
$\vec{T}$
1
$\frac{3}{4}$
$\frac{2}{4}$
$\frac{1}{4}$
0
Особая точка

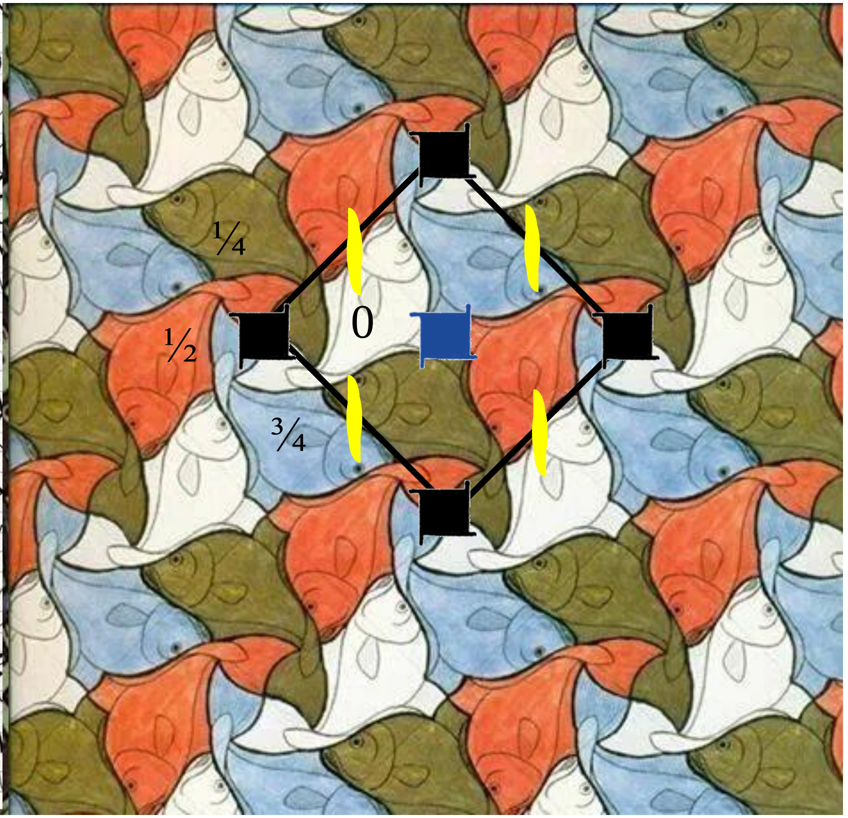
Оси 4-ого порядка



Паркеты художника М.Эшера могут иллюстрировать поворотные и винтовые оси 4-ого порядка, если цвету объектов придать значение координаты высоты *Z*.







Ось 4_2: представим, что черная ящерица находится на высоте 0, а белая - на высоте ½. В центре ребер выбранной ячейки - оси 2.

Ось 4: Все ящерицы одного цвета, следовательно, располагаются на одной высоте. В центре ребер выбранной ячейки - оси 2

Ось 4_1 (или 4_3): представим, что рыбки разных цветов находятся на разных высотах: 0, ¼, ½, ¾. Тогда в центрах ребер ячейки – винтовые оси 2_1

Иллюстрация действия плоскостей, перпендикулярных оси *y*

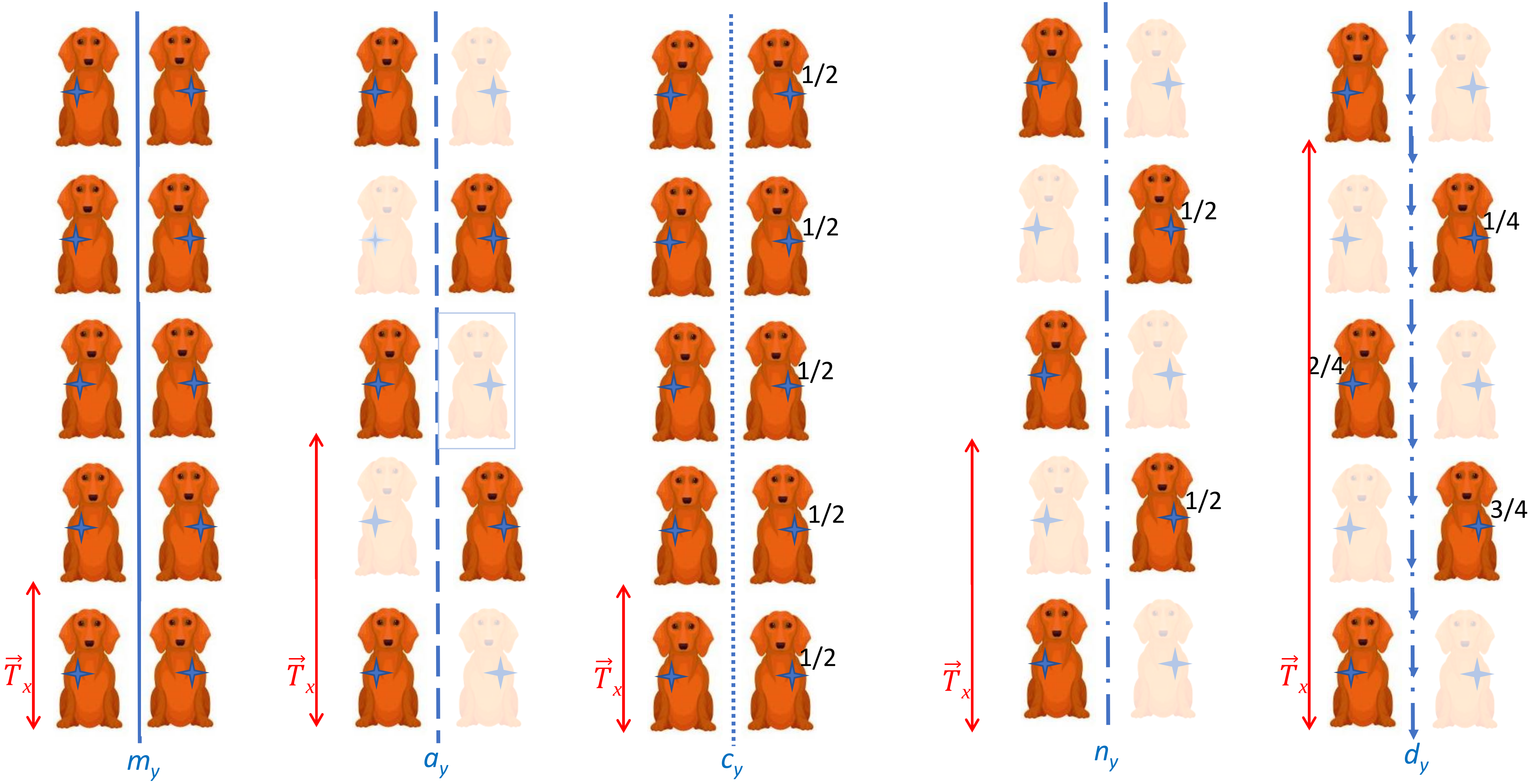
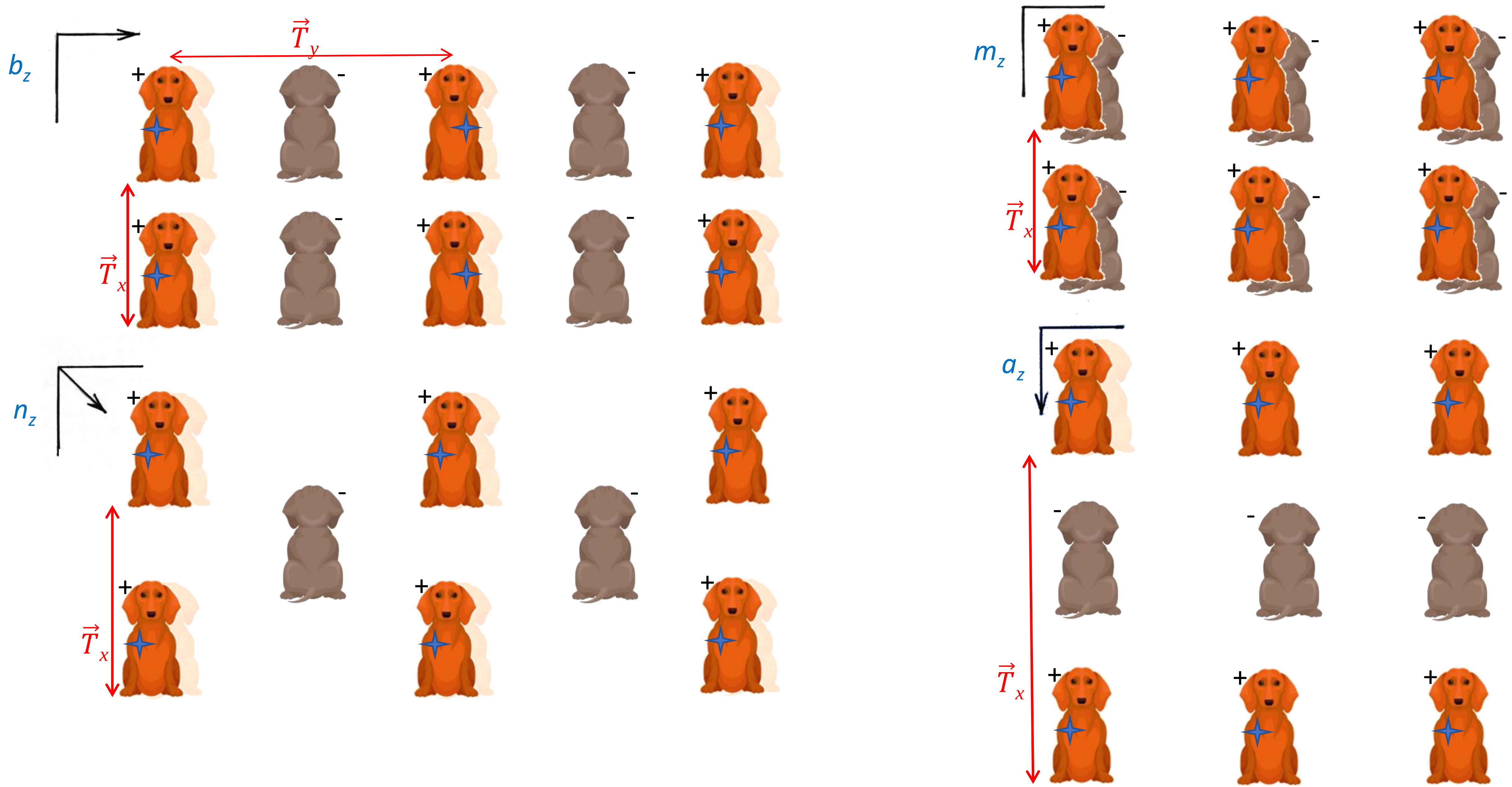


Иллюстрация действия плоскостей, перпендикулярных оси *z*

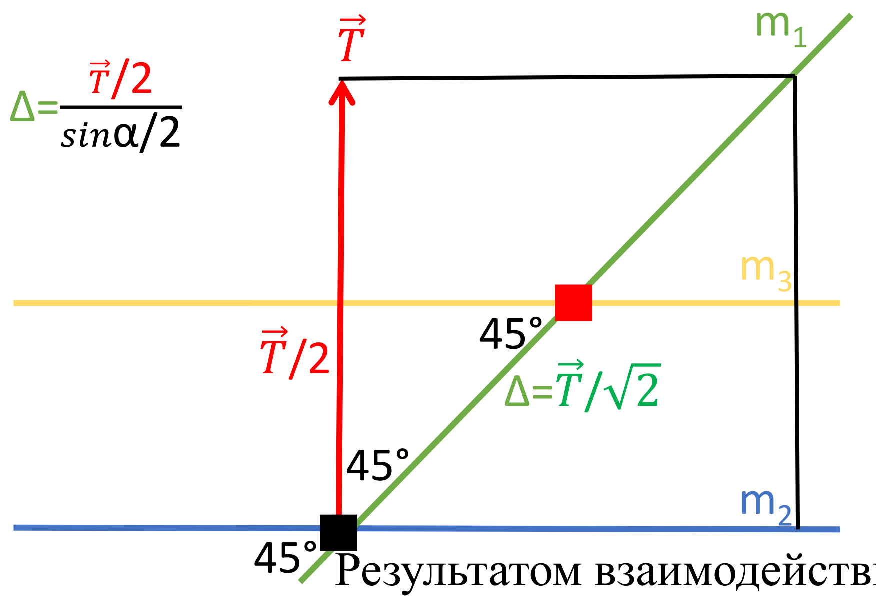


Особенности взаимодействия элементов симметрии в пространственных группах тетрагональной сингонии

1. Взаимодействие осей с перпендикулярной трансляцией
2. Взаимодействие плоскостей под углом 45°
3. Взаимодействие координатных и диагональных плоскостей с координатными трансляциями
4. Взаимодействие осей 2-ого порядка под углом 45°
5. Взаимодействие осей 4, 4_1, 4_2, 4_3 с перпендикулярной плоскостью. Особенности оси $\bar{4}$

1. Особенности взаимодействия элементов симметрии в пространственных группах тетрагональной сингонии: взаимодействие оси 4 и перпендикулярной трансляции

Результат взаимодействия поворота вокруг оси 4 и перпендикулярной трансляции можно представить в свете предложенной Вульфом идеи, разложив каждую из взаимодействующих операций симметрии (трансляцию и поворот вокруг оси 4) последовательными отражениями в параллельных или пересекающихся плоскостях: $4 \times \vec{T} = (m_1 \times m_2) \times (m_2 \times m_3) = m_1 \times m_3 = 4`$

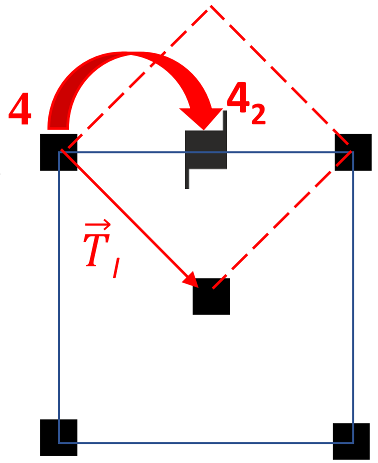


Элементарный угол поворота оси α	Смещение оси Δ	Угол между направлением смещения оси и приложенной трансляцией 90-α/2
90°	$\frac{\vec{T}/2}{\sin 45^\circ} = \vec{T}/\sqrt{2}$	45°

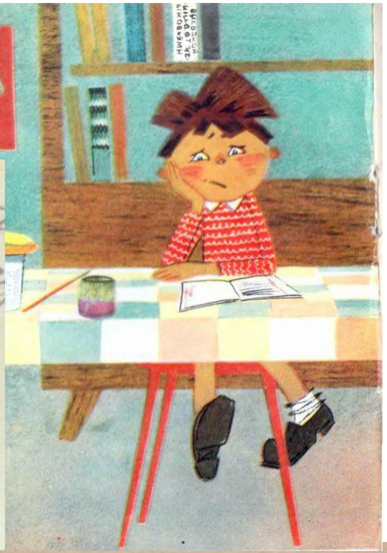
Результатом взаимодействия оси 4 и перпендикулярной трансляции является еще одна ось 4, смещенная относительно исходного положения на величину Δ в направлении под 45 ° к приложенной трансляции. Δ легко определить из геометрических соображений: в центре квадрата, построенного на этой трансляции.

Трансляция, параллельная оси 4, меняет ее характер.

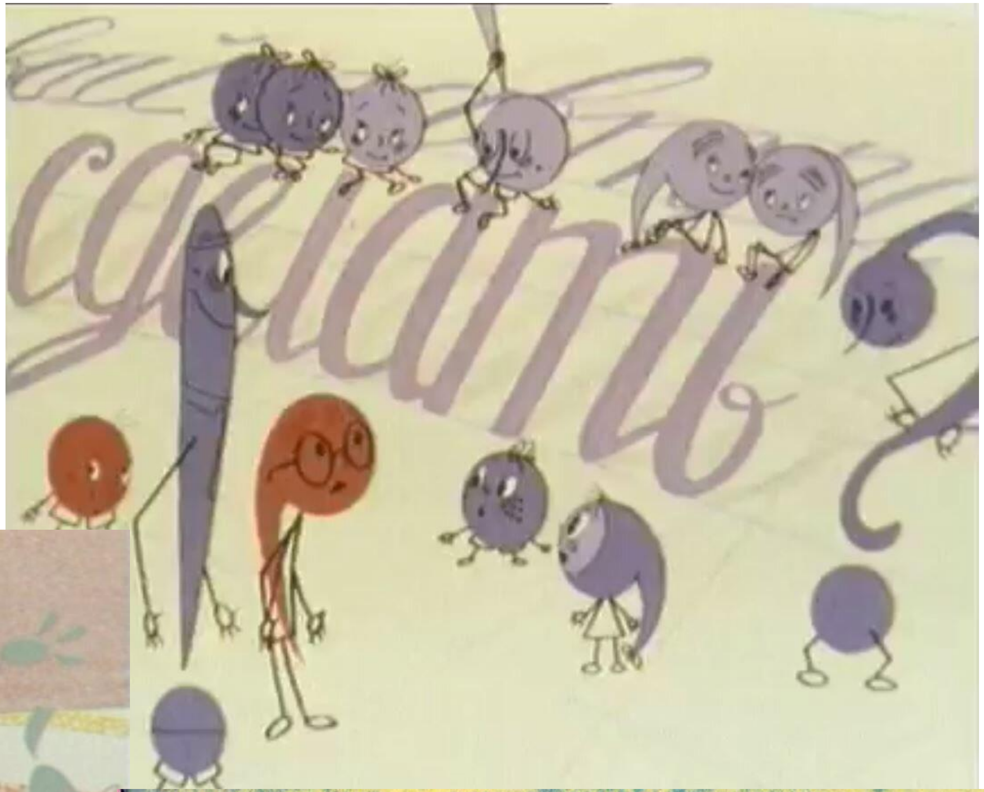
Трансляция, косо ориентированная к оси 4 – одновременно смещает и меняет ее характер: $4 \times \vec{T}_I = 4_2[0\frac{1}{2}z]$

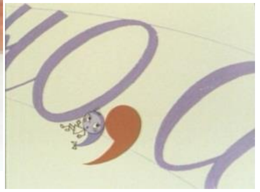


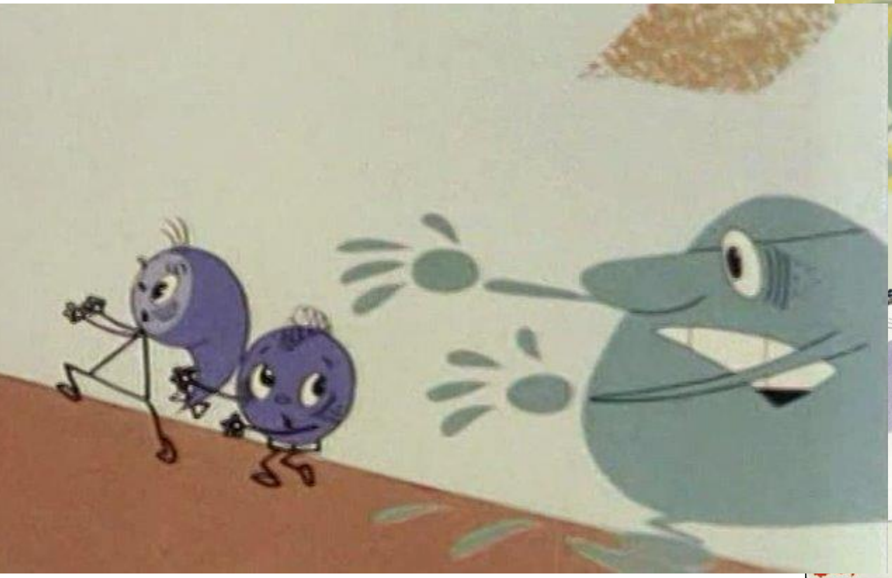

Приключения запятой и точки
в микромире


Жил-был лентяй Борис.
Однажды сидел он за столом, пил молоко и разглядывал диктант.


Не откладывай
то, что можно с
сегодня.

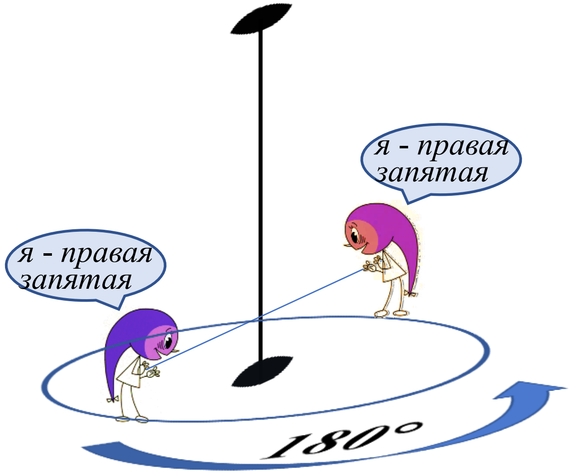

сделать

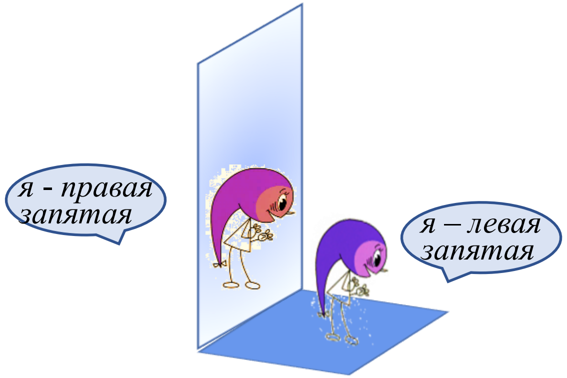





А а Б б
В в Г г
На другой день Борис пришел в класс и сказал учительнице, что она не заметила его знаков препинания, и стал просить исправить в диктанте двойку...
Переверни эту
Хорошо, что Точка догадалась зайти с другой стороны. Там они увидели ручку. Быстро пробежали по ней и... оказались дома среди тысячи своих братьев и сестер.

В качестве модельной фигурки для демонстрации операций симметрии будем использовать вот такую запятую из мультфильма

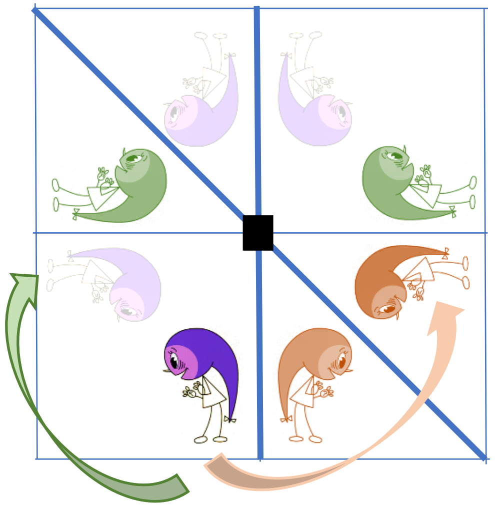




Что бы такая запятая не обладала никакими нетривиальными элементами симметрии, две ее стороны выкрашены в разные цвета

2. Особенности взаимодействия элементов симметрии в пространственных группах тетрагональной сингонии: взаимодействие плоскостей под углом 45°

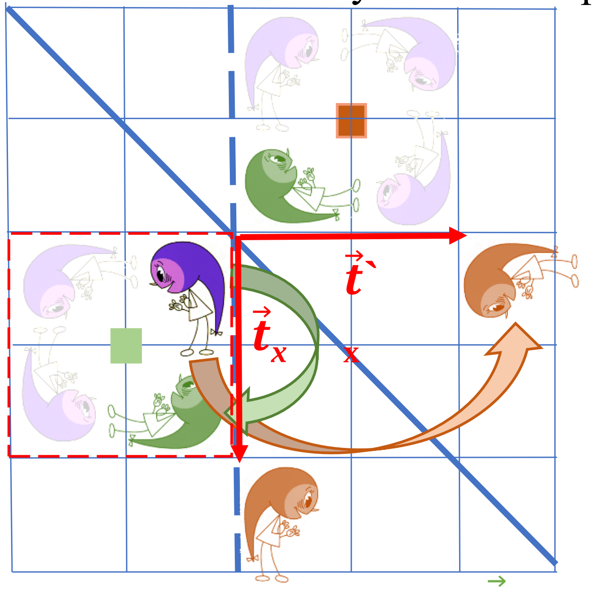
Пересечение любых плоскостей под углом 45° (в тетрагональной сингонии это пересечение координатных и диагональных плоскостей) вызывает появление оси 4-ого порядка, поворотной или винтовой (энантиоморфной или нейтральной). Характер результирующей оси определяется совокупностью параллельных ей трансляций, содержащихся в плоскостях, а положение – совокупностью перпендикулярных трансляций.



$m_y \times m_{xy} = 4^1_z$ [00z]

$m_{xy} \times m_y = 4^3_z$ [00z]

Взаимодействие двух плоскостей симметрии ***m*** приводит к возникновению оси **4**, проходящей по линии их пересечения



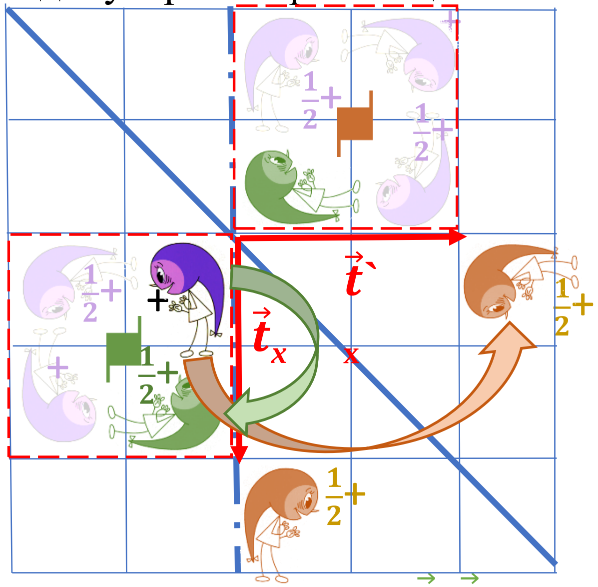
$m_{xy} \times a_y = m_{xy} \times m_y \times \vec{t}_x =$

$4^3_z \times \vec{t}_x = 4^3_z\ [\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\ z]$

$a_y \times m_{xy} = m_y \times \vec{t}_x \times m_{xy} =$

$4^1_z \times \vec{t}`_x = 4^1_z\ [-\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\ z]$

Взаимодействие плоскости $\boldsymbol{m_d}$ и плоскости $\boldsymbol{a_y}$ приводит к возникновению оси **4** в центре квадрата, построенного на трансляции $\boldsymbol{\vec{t}_a}$, но не на ***m***!



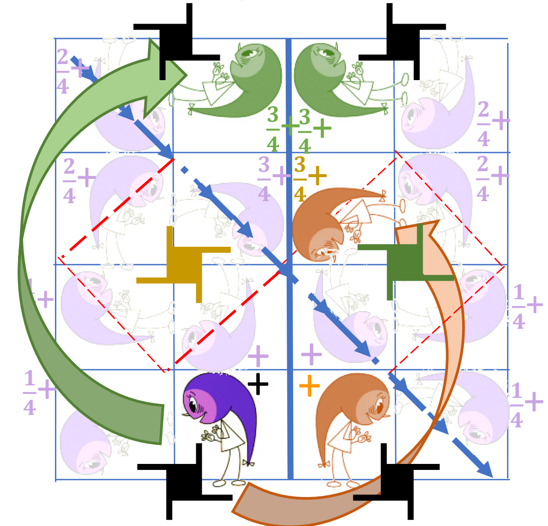
$m_{xy} \times n_y = m_{xy} \times m_y \times \vec{t}_x \vec{t}_z =$

$4_2{}^3_z \times \vec{t}_x = 4_2{}^3_z\ [\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\ z]$

$n_y \times m_{xy} = m_y \times \vec{t}_x \vec{t}_z \times m_{xy} =$

$4_2{}^1_z \times \vec{t}`_x = 4_2{}^1_z\ [-\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\ z]$

Взаимодействие плоскости $\boldsymbol{m_d}$ и плоскости $\boldsymbol{a_y}$ приводит к возникновению оси $\boldsymbol{4_2}$ в центре квадрата, построенного на трансляции $\boldsymbol{\vec{t}_a}$, но не на ***m***!



$m_y \times d_{xy} = m_y \times m_{xy} \times \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{1/4z} =$

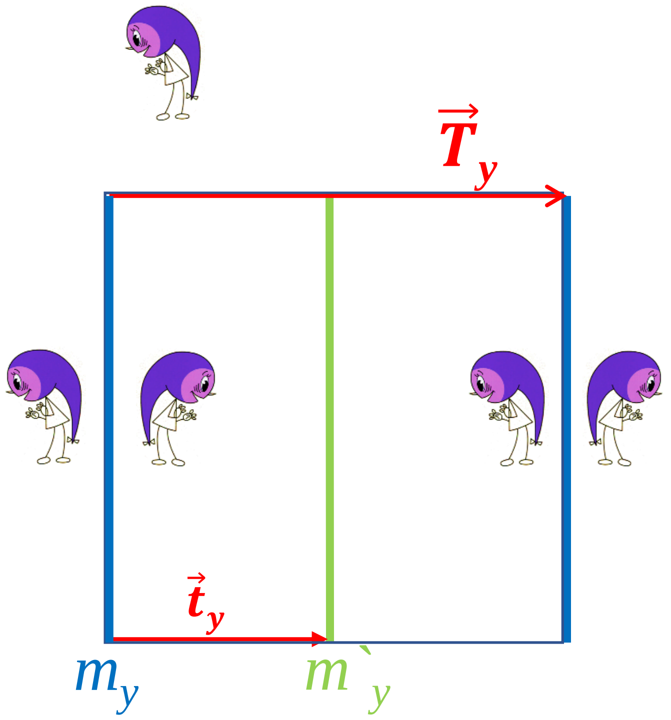
$4_1{}^1_z \times \vec{t}_{1/4xy} = 4^1_z\ [0 \frac{1}{4}\ z]$

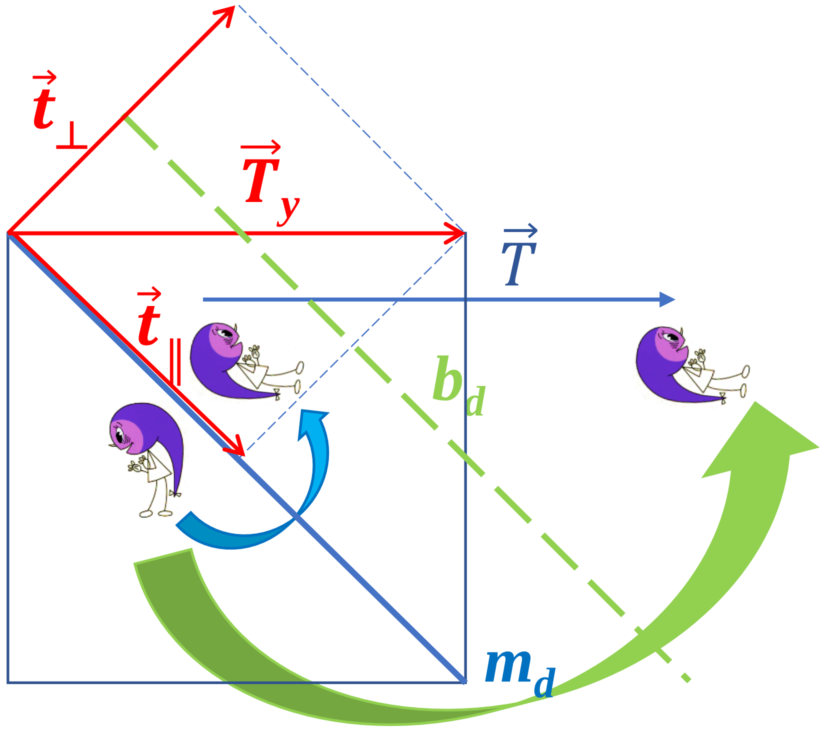
$d_{xy} \times m_y = m_{xy} \times \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{1/4z} \times m_y =$

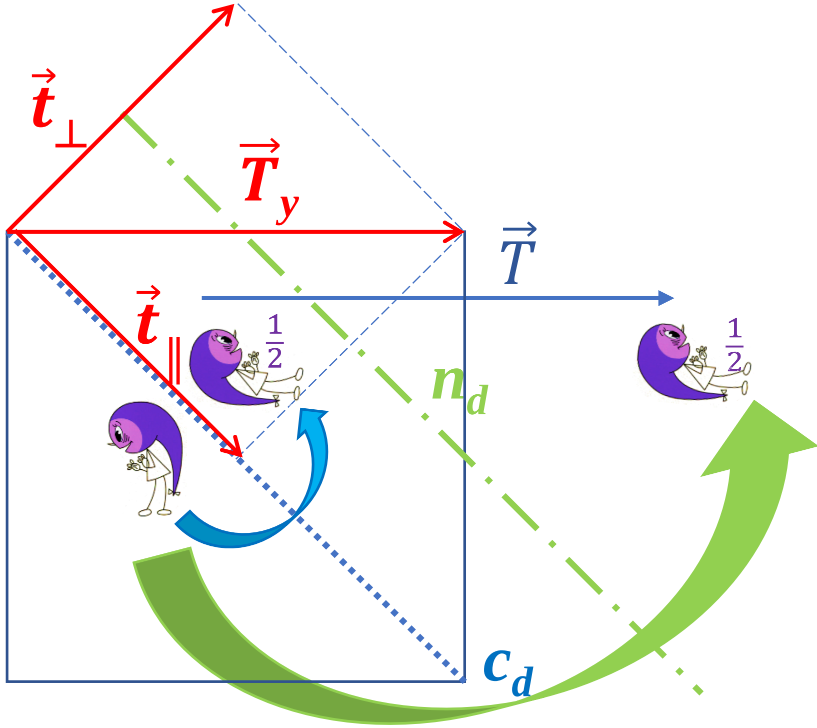
$4_1{}^3_z \times \vec{t}_{xy} = 4^3_z\ [0 - \frac{1}{4}\ z]$

Взаимодействие плоскости $\boldsymbol{m_y}$ и плоскости $\boldsymbol{d_{xy}}$ приводит к возникновению осей $\boldsymbol{4_1}$ и $\boldsymbol{4_3}$ в центре квадрата, построенного на трансляции $\boldsymbol{\vec{t}_{1/4xy}}$, но не на ***m***!

3. Особенности взаимодействия элементов симметрии в пространственных группах тетрагональной сингонии: взаимодействие координатных и диагональных плоскостей с координатными трансляциями







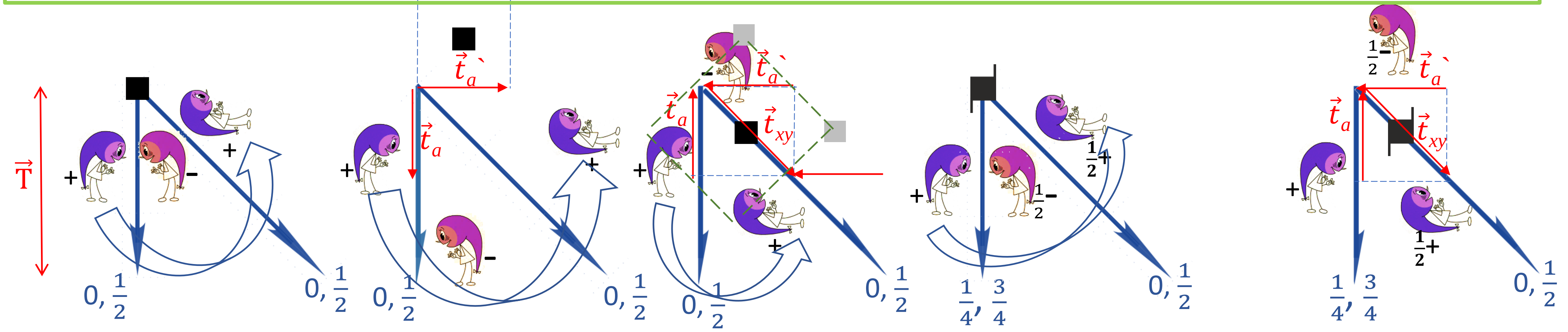
Взаимодействие координатной плоскости m_y с перпендикулярной координатной трансляцией $\vec{T}_y$ приводит к появлению неэквивалентной плоскости $m`_y$, смещенной на половину этой трансляции $\vec{t}_y$. Аналогично будут себя вести и другие плоскости: ***n***, ***c***, ***a(b).***

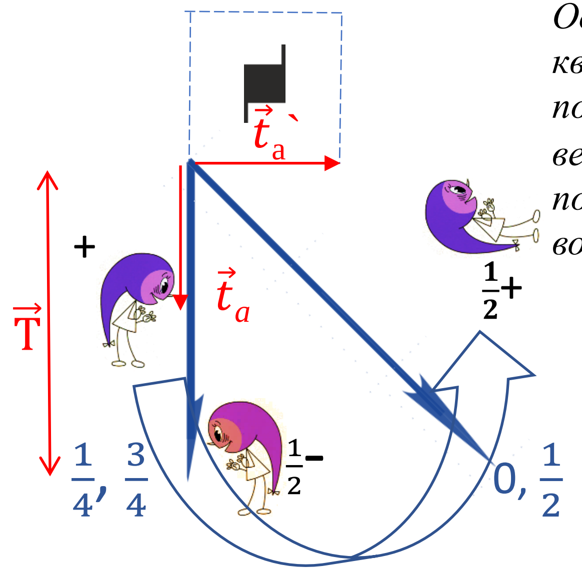
Взаимодействие диагональной плоскости m_d с косо расположенными координатными трансляциями приводит к ее чередованию с плоскостью b_d (g_d)

Взаимодействие диагональной плоскости c_d с косо расположенными координатными трансляциями приводит к ее чередованию плоскости с плоскостью n_d

4. Особенности взаимодействия элементов симметрии в пространственных группах тетрагональной сингонии: взаимодействие осей второго порядка под углом 45°

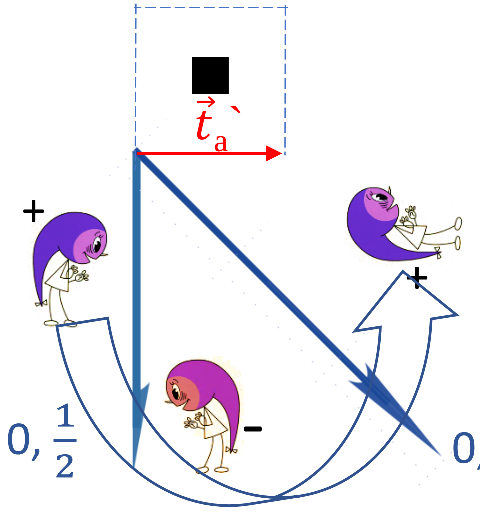
Взаимодействие осей **2**, расположенных под 45° друг к другу, приводит к возникновению оси **4**, характер которой зависит только от соотношения высот взаимодействующих осей 2, а положение – от характера осей 2





Ось 4 смещается в центр квадрата, построенного на повернутом вокруг оси 2_{xy} векторе $\vec{t}_a$\` в сторону последовательных поворотов вокруг оси 2_1 и 2

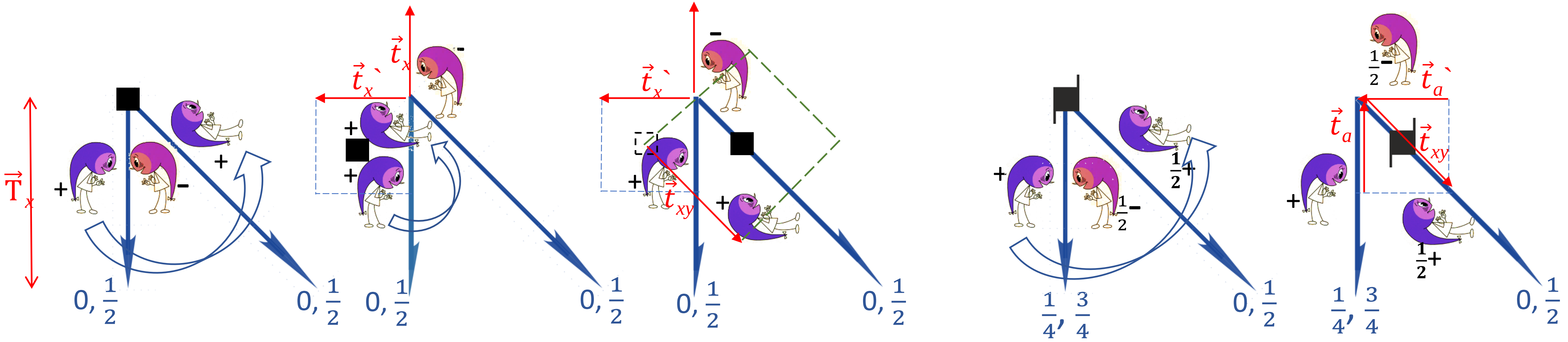
Ось 4 смещается последовательно в центры квадратов, построенных на $\vec{t}_a$\` и $\vec{t}_{xy}$ в сторону последовательных поворотов вокруг осей 2_1

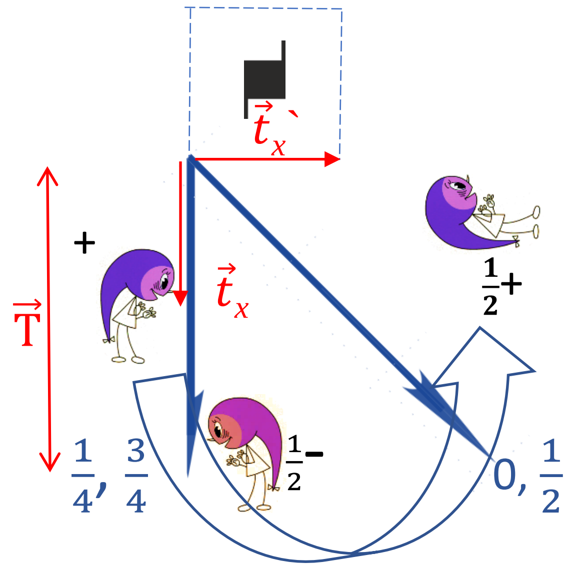


Когда же возникают оси 4_1 и 4_3?

4. Особенности взаимодействия элементов симметрии в пространственных группах тетрагональной сингонии: взаимодействие осей второго порядка под углом 45°

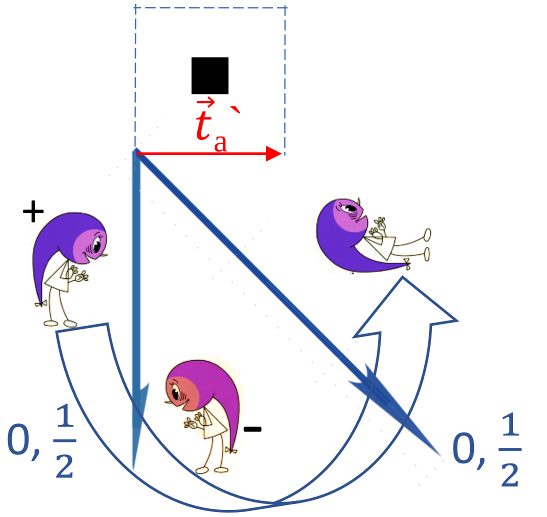
Взаимодействие осей 2, расположенных под 45° друг к другу, приводит к возникновению оси 4, характер которой зависит только от соотношения высот взаимодействующих осей 2, а положение – от характера осей 2





Ось 4 смещается в центр квадрата, построенного на повернутом вокруг оси 2_{xy} векторе $\vec{t}_x$` в сторону последовательных поворотов вокруг оси 2_1 и 2

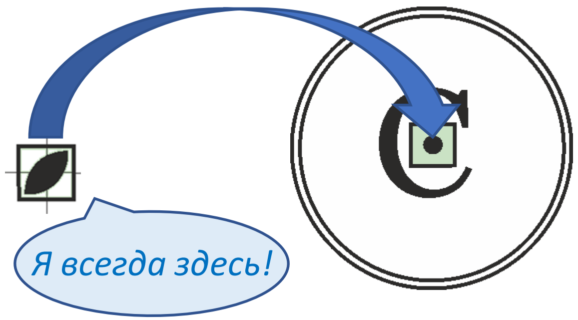
Ось 4 смещается последовательно в центры квадратов, построенных на $\vec{t}_x$` и $\vec{t}_{xy}$ в сторону последовательных поворотов вокруг осей 2_1



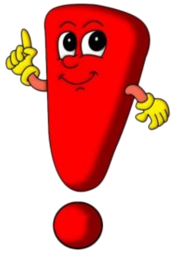
Когда же возникают оси 4_1 и 4_3?

5. Особенности взаимодействия элементов симметрии в пространственных группах тетрагональной сингонии: ось $\bar{4}$

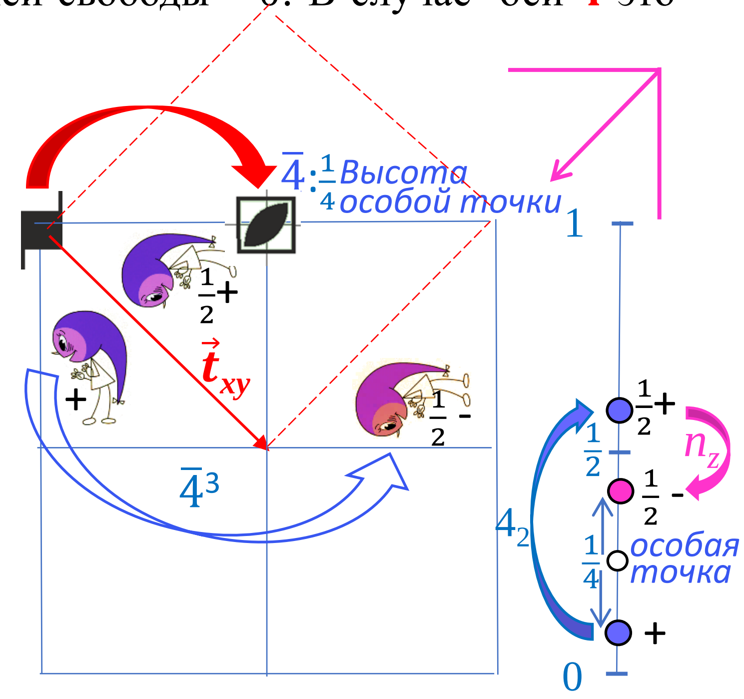
Ось $\bar{4}$ (как и все инверсионные оси, кроме $\bar{2}$) имеет особую точку. В этой точке число степеней свободы – 0! В случае оси $\bar{4}$ это место ее пересечения с мнимой плоскостью или мнимым центром инверсии.



Ось $\bar{4}$ может существовать как самостоятельно, так и быть результатом взаимодействия оси 4 и перпендикулярной плоскости (а также взаимодействия поворотной и инверсионной оси 2-ого порядка под углом 45°)



Только особая точка оси $\bar{4}$ обладает симметрией позиции $\bar{4}$ с величиной симметрии 4! Все остальные точки, находящиеся на оси, имеют симметрию позиции **2** с величиной симметрии 2



В комплексе $\frac{4}{m}$ всегда содержится $\bar{4}$, особая точка которой совпадает с центром инверсии комплекса

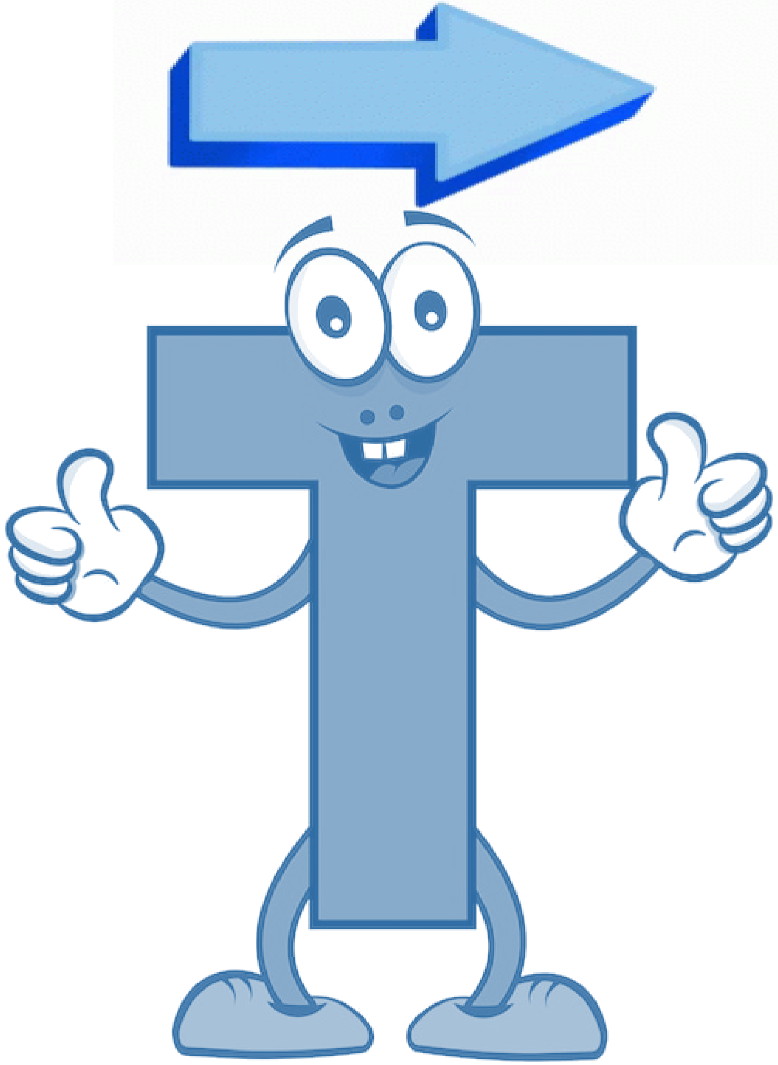
$$4_z \times m_z = \bar{4}$$

Но особое значение это приобретает только в пространственных группах, в которых ось $\bar{4}$ «выезжает» из центра комплекса под действием скользящих компонентов перпендикулярной плоскости. В этом случае ось $\bar{4}$ смещается в центр квадрата, построенного на горизонтальной трансляции перпендикулярной плоскости, а ее особая точка, смещаясь вместе с осью, может поменять высоту в соответствии с вертикальной трансляцией оси 4_z, если таковая существует.

Взаимодействие оси 4_{2z} и перпендикулярной плоскости n_z порождает ось $\bar{4}_z$, которая взаимодействуя с вектором скольжения плоскости n_z ($\vec{t}_n = \vec{t}_{xy}$) перемещается в центр квадрата, построенного на этой трансляции, а ее особая точка меняет свою высоту, смещаясь на половину вектора $\vec{t}_z$, содержащегося в 4_2:

$$4_{2z} \times n_z = \bar{4}:[0\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{4}]$$

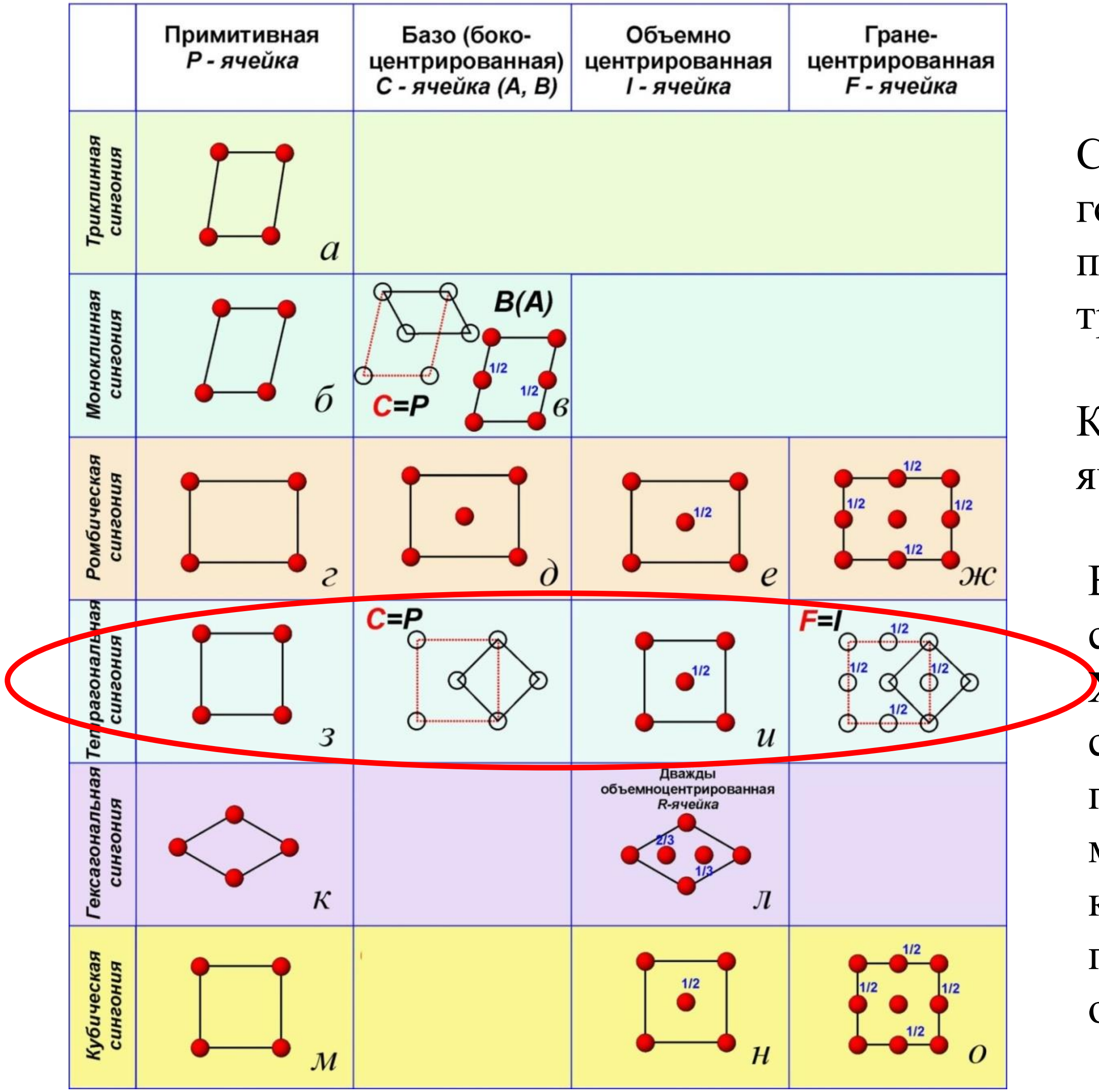
Я – трансляция
самый главный элемент симметрии пространственных групп!

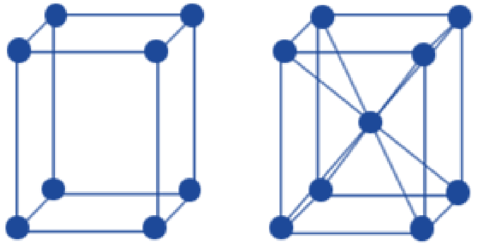


Совокупность трансляций визуализируется ячейкой Браве – минимальным параллелипипедом повторяемости, отражающем симметрийные особенности сингонии.
Ячейки Браве бывают примитивными (P) и центрированными (A, B, C, I, F, R) и фиксируются на первом месте международного символа пространственной группы (0-вая позиция)

Иногда меня называют *решеткой*. Поэтому все мои друзья - другие элементы симметрии пространственных групп - называются *подрешеточными*

Типы решёток Браве для тетрагональной сингонии





Оригинальных ячеек Браве в тетрагональной сингонии две: ***P* и *I***

Симметрия тетрагональной ячейки Браве соответствует голоэдрии тетрагональной сингонии: **4/*mmm***, что позволяет передать симметрию любого тетрагонального класса трехмерной периодической среде.

Комплекс **4/*mmm*** присутствует во всех вершинных позициях ячейки, а также в центре базисной грани и центре объема.

В случае тетрагональной сингонии ячейки F и C могут быть сведены к меньшим по объему ячейкам I и P соответственно. Хотя, например, для пространственных групп, соответствующие точечным классам $\bar{4}m2$, иногда представление в F- или C-аспекте актуально, так как по старой минералогической традиции кристаллографические оси в этом классе принято направлять по поворотным осям, а не по перпендикулярам к плоскостям. Так, например, группу $P\bar{4}m2$ описывают как $C\bar{4}m2$, а $I\bar{4}m2$ как $F\bar{4}m2$