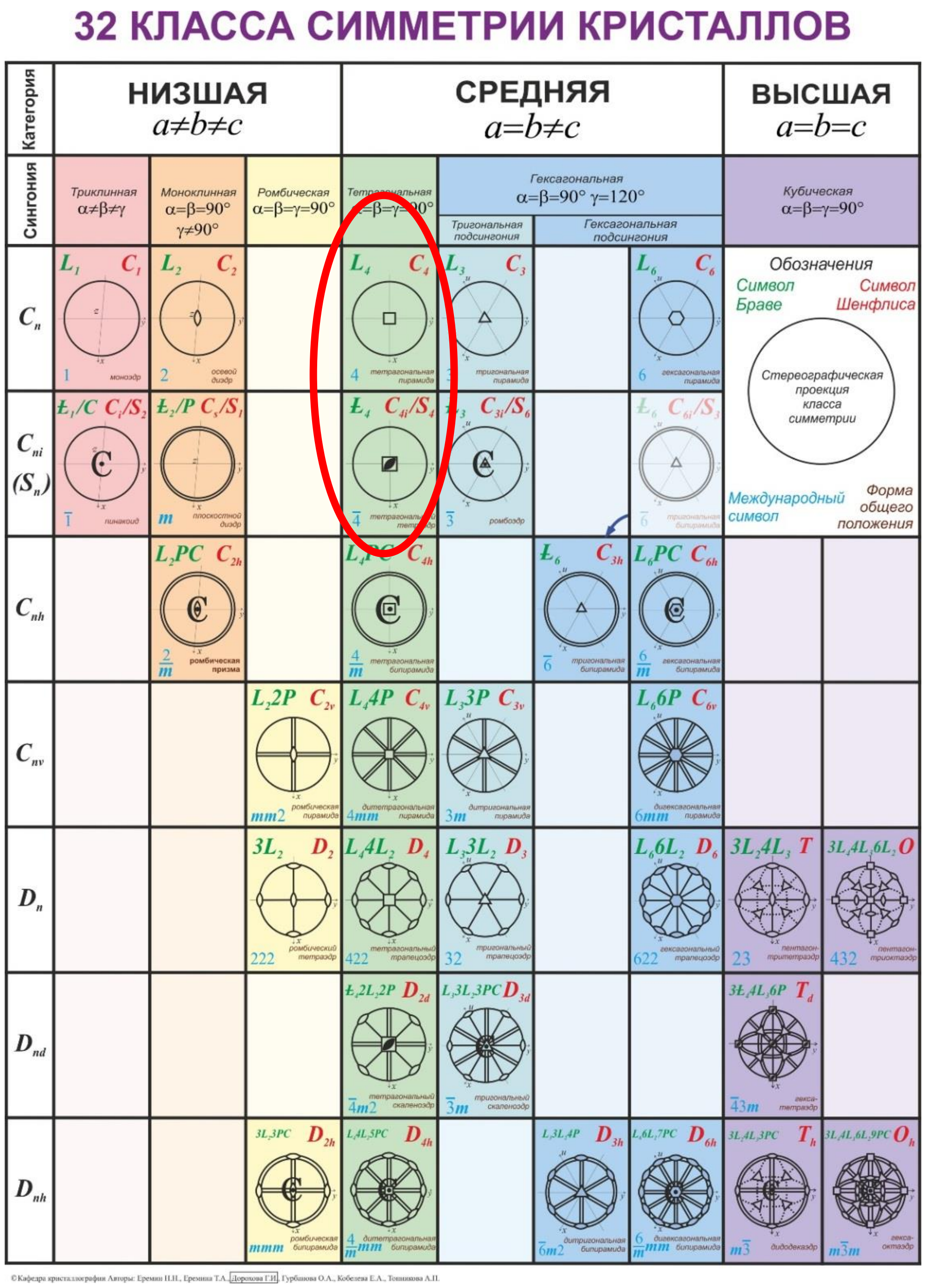
Семинар №2.
Тетрагональные группы симметрии. Вывод пространственных групп с единственной осью **4** ($\bar{4}$, 4_1, 4_2, 4_3)



Тетрагональная сингония относится к средней категории:

a=b≠c

α=β=γ=90°

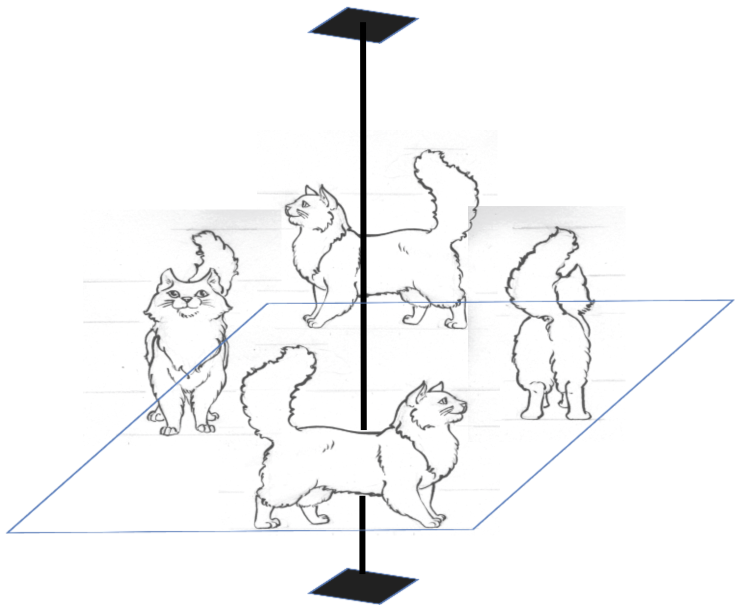
В точечных приближении существует 2 класса, в которых ось 4-ого порядка - единственный элемент симметрии:

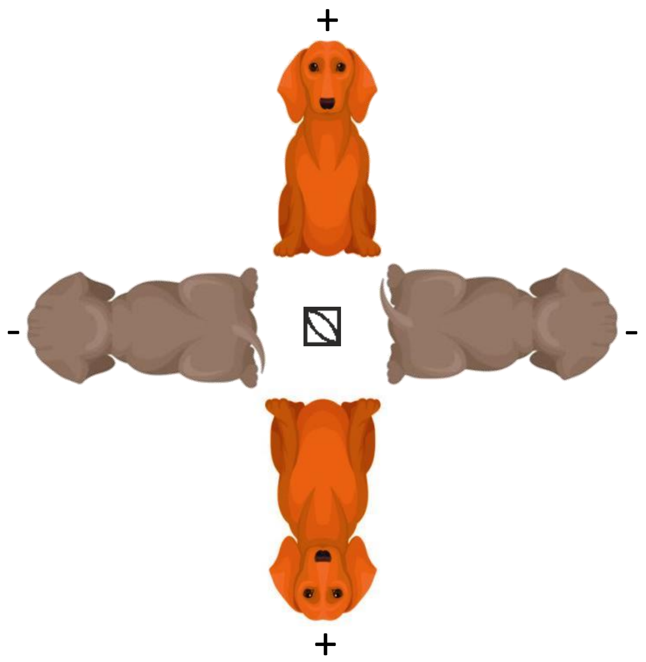
4 и $\bar{4}$

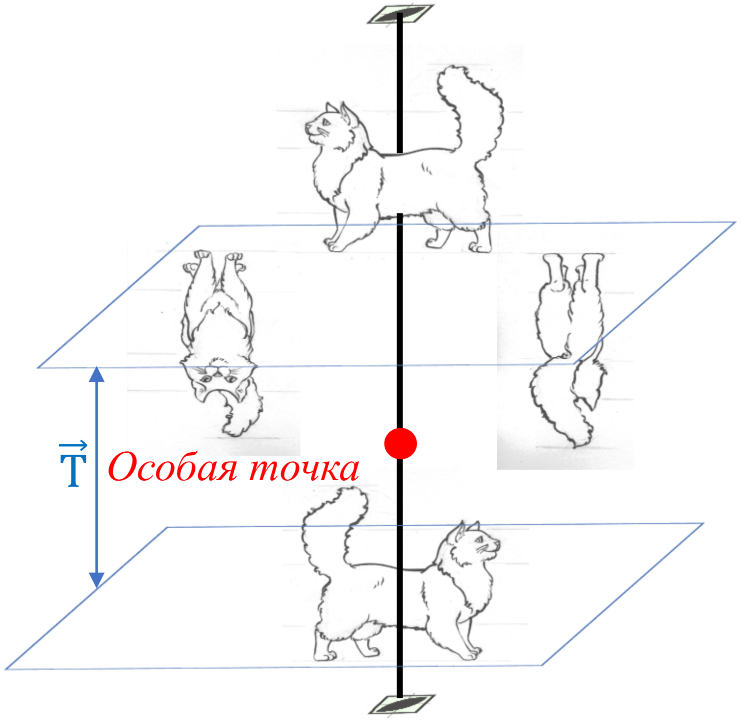
Сколько же получится пространственных групп?

Оси пространственных групп тетрагональной сингонии:

- 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

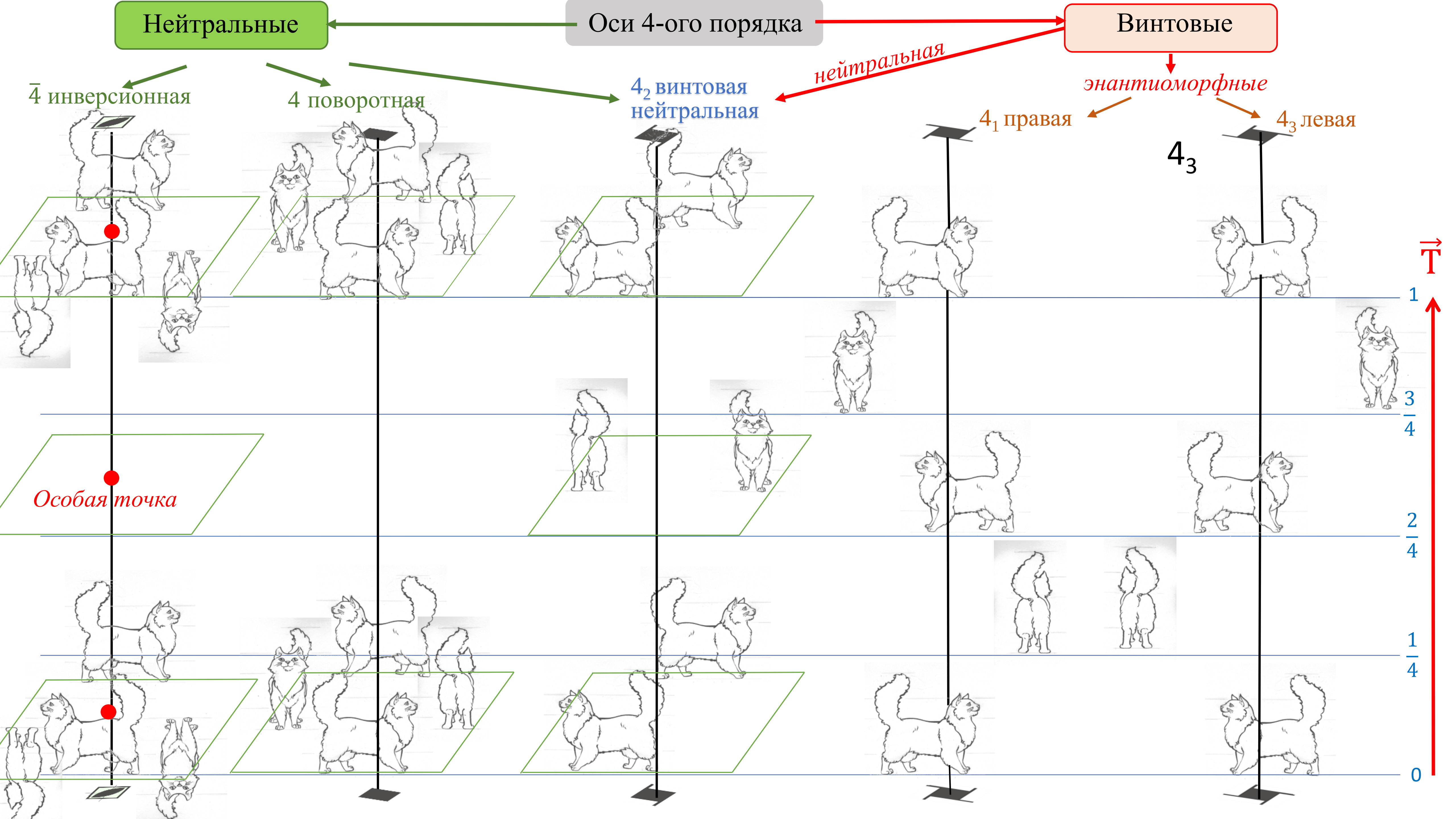




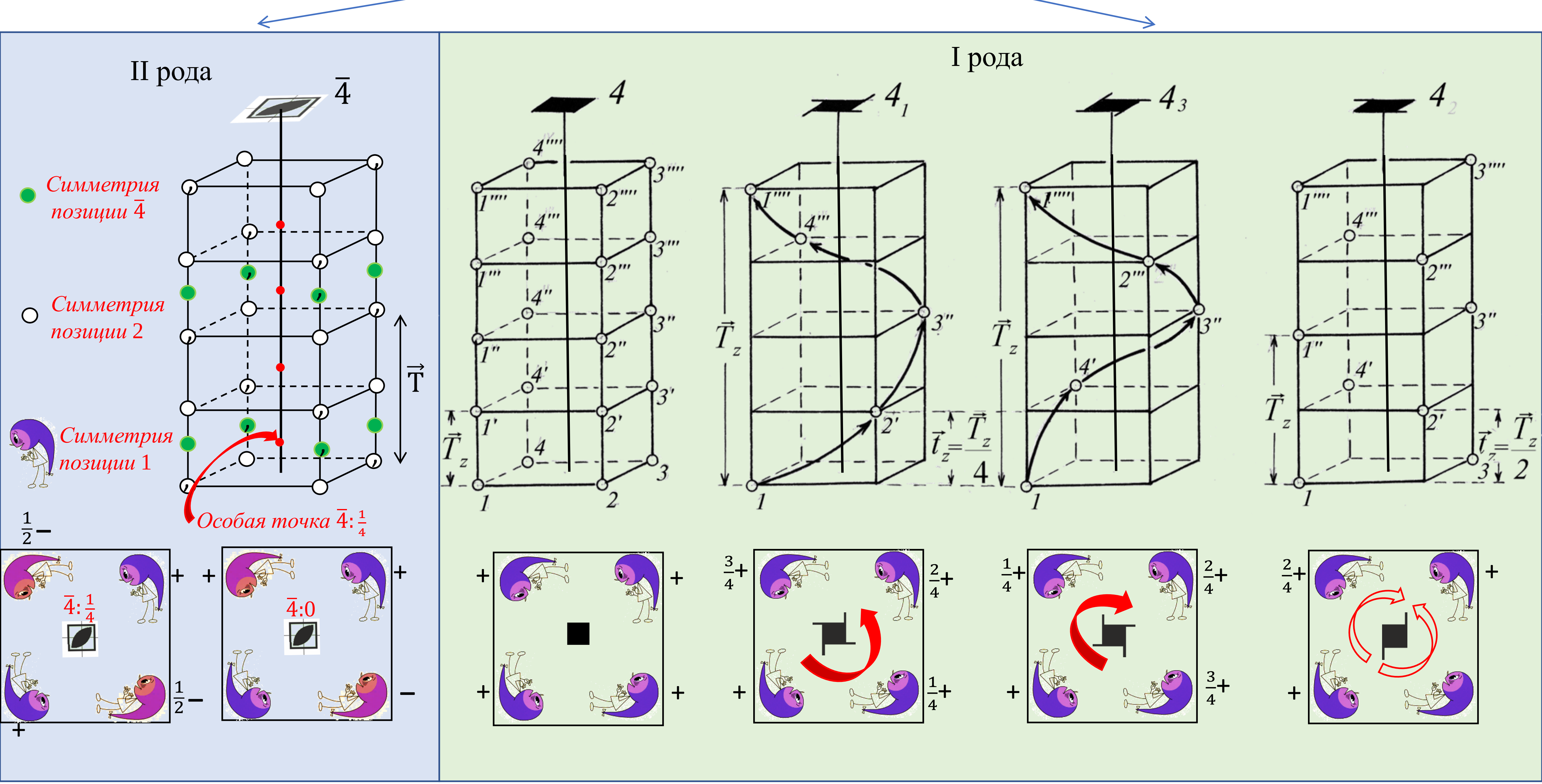


Поворотная ось ***4***

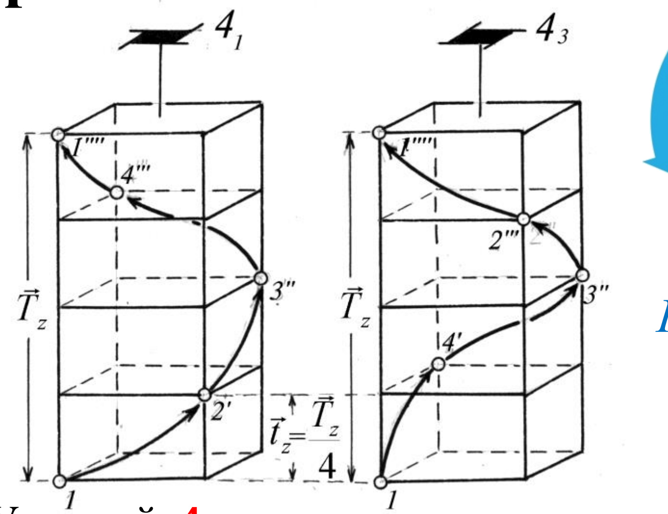
Инверсионная ось $\bar{\mathbf{4}}$


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
Особая точка
$\vec{T}$
1
$\frac{3}{4}$
$\frac{2}{4}$
$\frac{1}{4}$
0

Оси 4-ого порядка

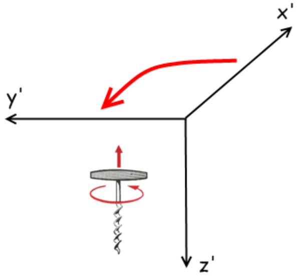


Правые и левые винты

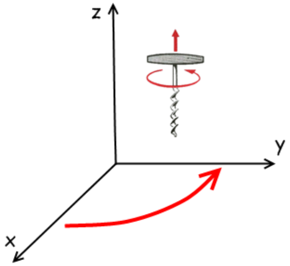


Правый поворот

Левый поворот



Левая



Правая

Практически во всем естествознании используется правая система координат

У правой **4_1** оси подъем высоты – против часовой стрелки, у левой **4_3** – по часовой стрелки

Правый шуруп всегда закручивается
по часовой стрелке

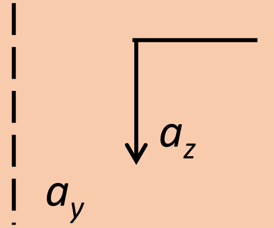
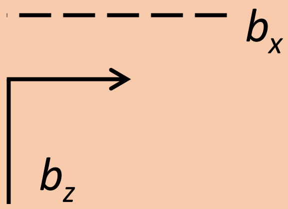
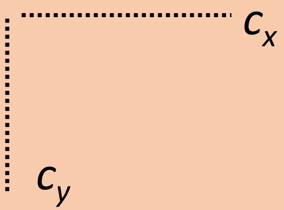
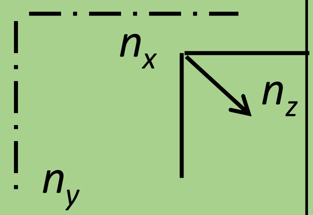
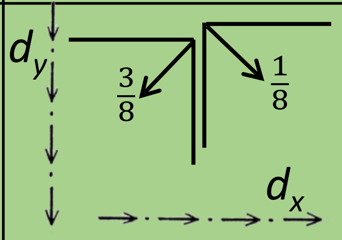
Винтовые лестницы древних замков чаще всего закручены по левой спирали

[Лестница Джузеппе](#) Момо (1932) в Ватикане – двойная правая спираль

ДНК – двойная
правая спираль

Какая дверь левая, какая правая?

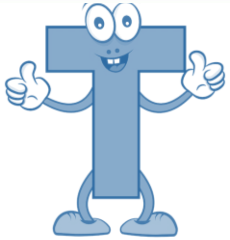
ОТКРЫТЫЕ СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. ПЛОСКОСТИ

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

Плоскости скользящего отражения

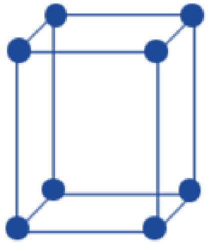
Клино-плоскости

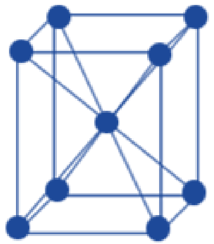
Типы решёток Браве для тетрагональной сингонии

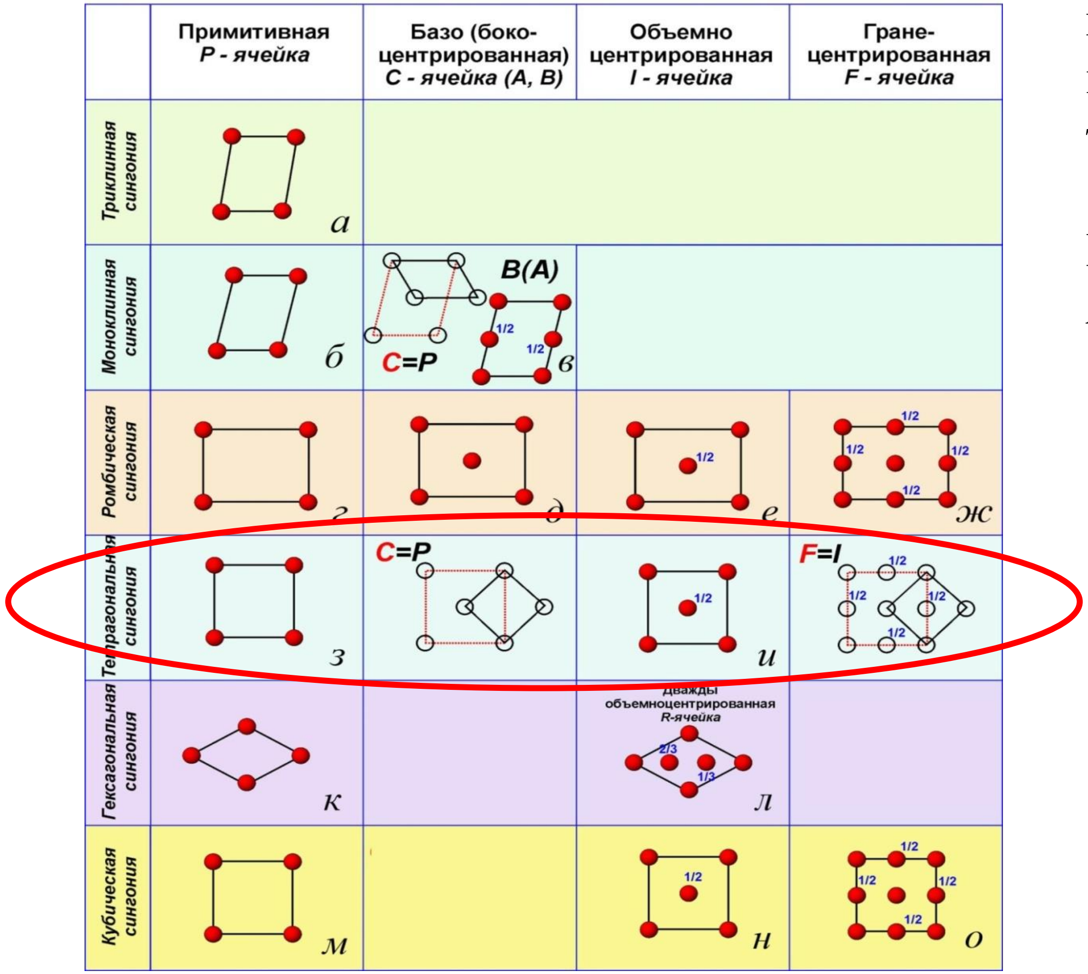


Я – трансляция самый главный элемент симметрии пространственных групп!

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 $F\bar{4}m2$

Особенности взаимодействия элементов симметрии в пространственных группах тетрагональной сингонии

1. Взаимодействие осей с перпендикулярной трансляцией

2. Взаимодействие плоскостей под углом 45°

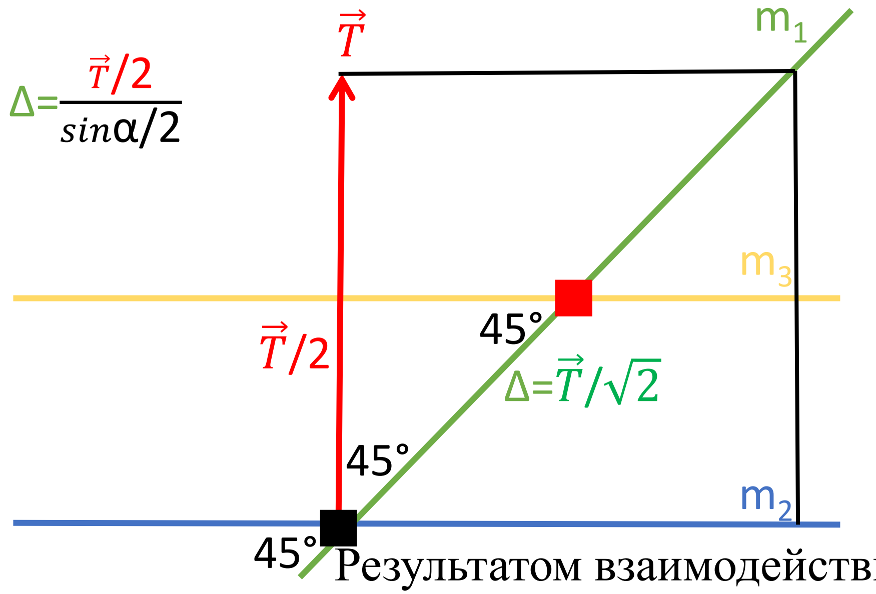
3. Взаимодействие координатных и диагональных плоскостей с координатными трансляциями

4. Взаимодействие осей 2-ого порядка под углом 45°

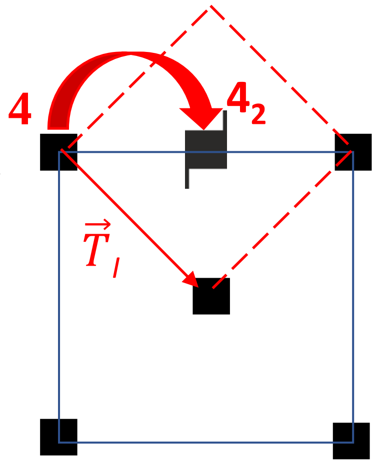
5. Взаимодействие осей 4, 4_1, 4_2, 4_3 с перпендикулярной плоскостью. Особенности оси $\bar{4}$

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°	$\dfrac{\vec{T}/2}{\sin 45^\circ} = \vec{T}/\sqrt{2}$	45°



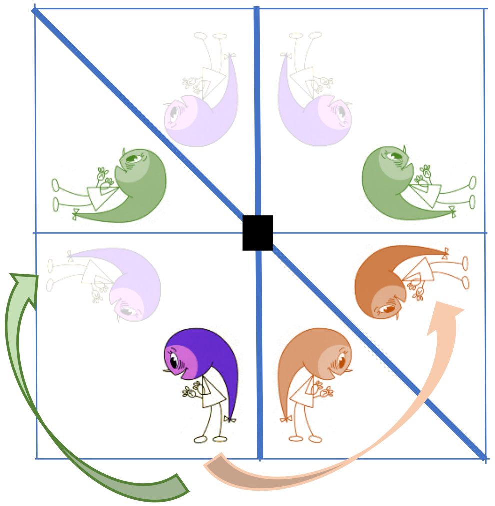
Результатом взаимодействия оси 4 и перпендикулярной трансляции является еще одна ось 4, смещенная относительно исходного положения на величину Δ в направлении под 45 ° к приложенной трансляции. Δ легко определить из геометрических соображений: в центре квадрата, построенного на этой трансляции.

Трансляция, параллельная оси 4, меняет ее характер.

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

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

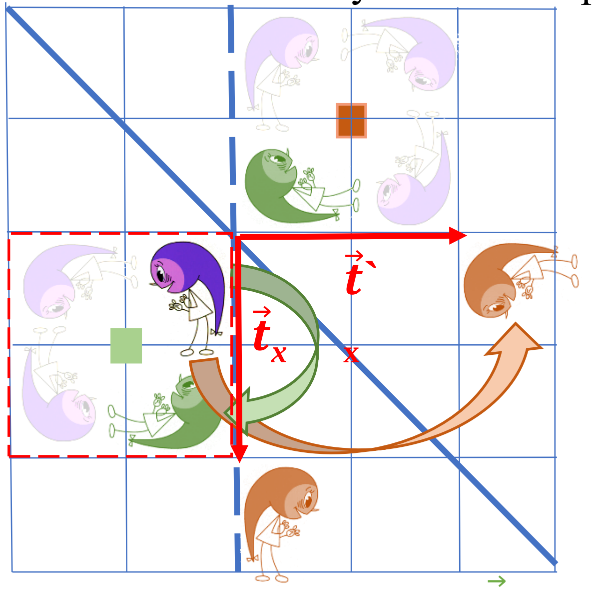
Пересечение любых плоскостей под углом 45° (в тетрагональной сингонии это пересечение координатных и диагональных плоскостей) вызывает появление оси 4-ого порядка, поворотной или винтовой (энантиоморфной или нейтральной). Характер результирующей оси определяется совокупностью параллельных ей трансляций,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



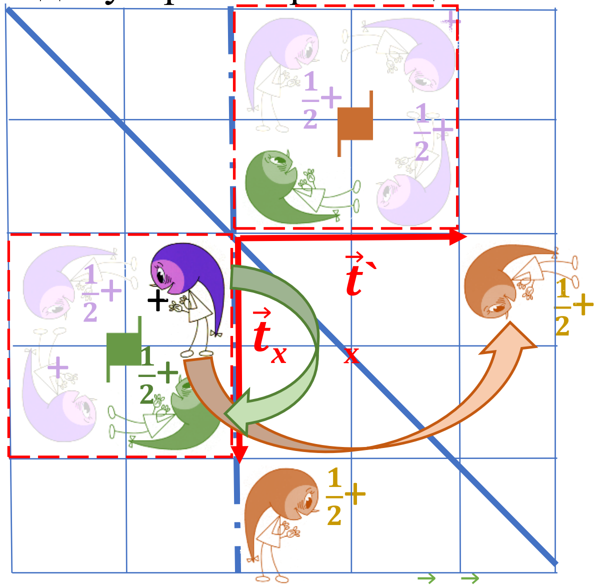
$m_{xy} \times a_y = m_{xy} \times m_y \times \vec{t}_x =$

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

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

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

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



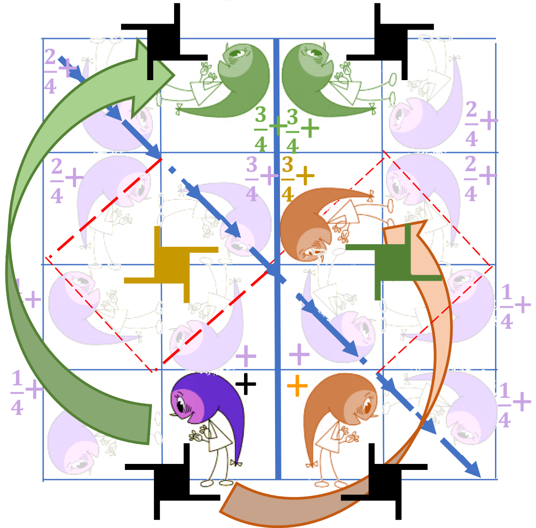
$m_{xy} \times n_y = m_{xy} \times m_y \times \vec{t}_x \vec{t}_z =$

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

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

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

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



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

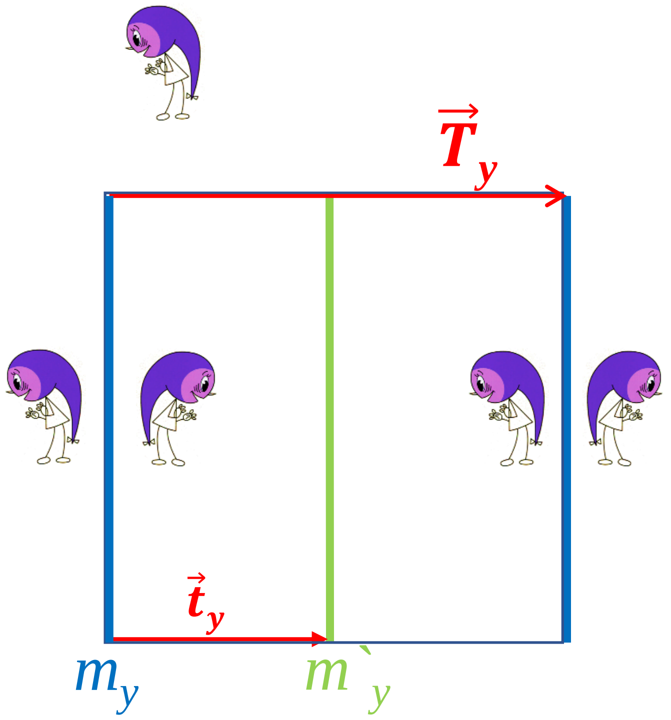
$4_1{}^1{}_z \times \vec{t}_{1/4xy} = 4^1{}_z\ [0\frac{1}{4}\ z]$

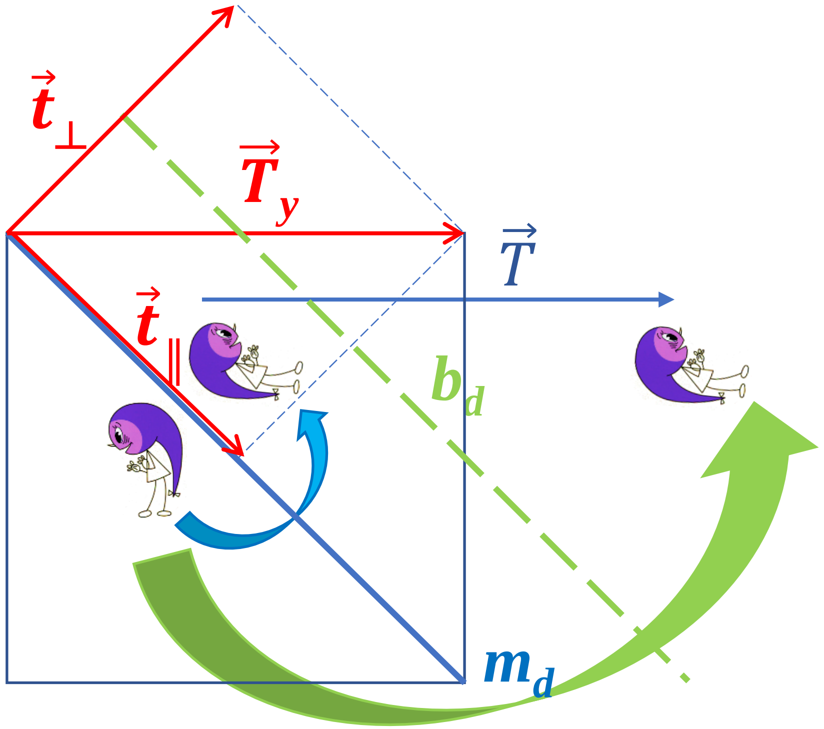
$d_{xy} \times m_y = m_{xy} \times \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{1/4z} \times m_y =$

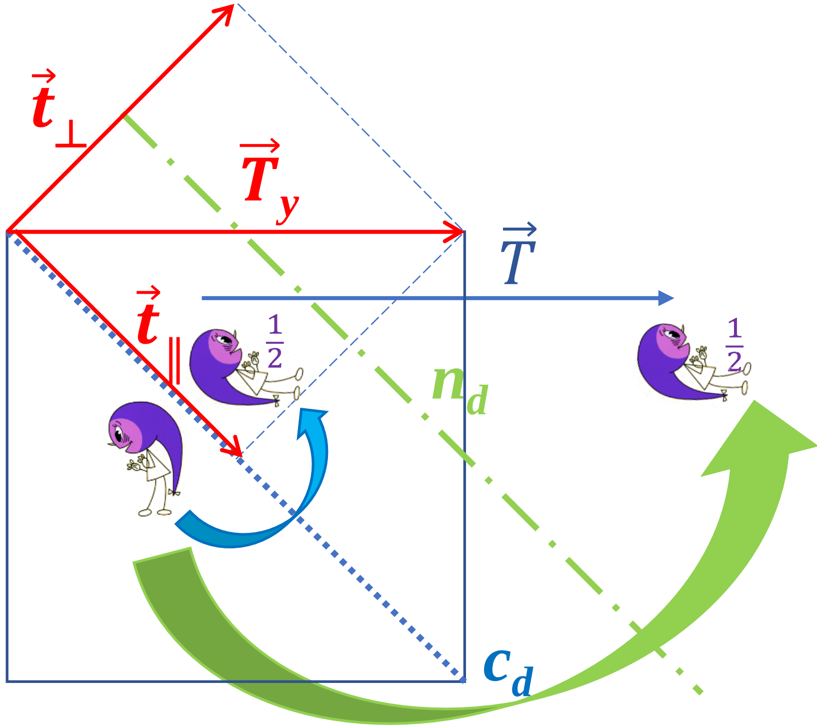
$4_1{}^3{}_z \times \vec{t}_{xy} = 4^3{}_z\ [0 - \frac{1}{4}\ z]$

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 $\vec{t}_{1/4xy}$, но не на **m**!

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







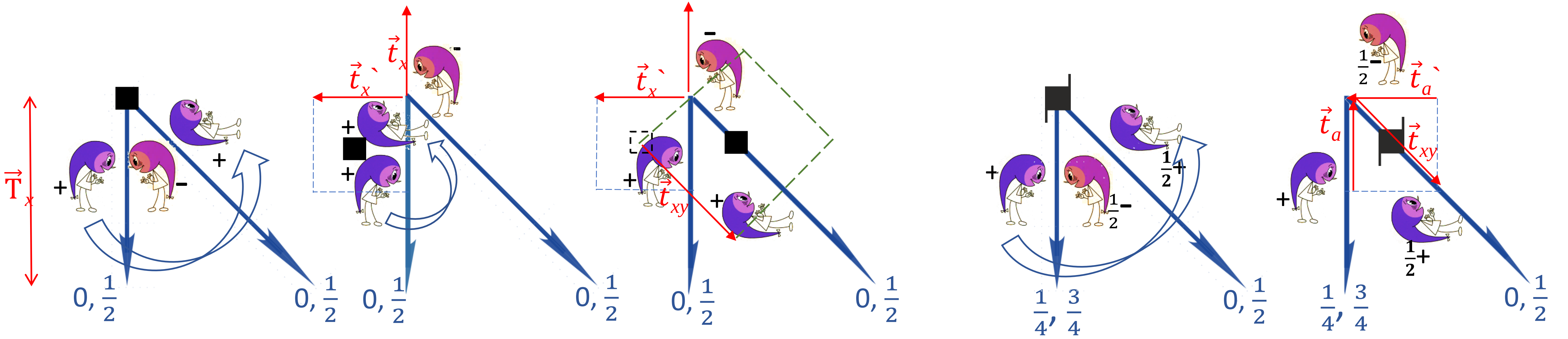
Взаимодействие координатной плоскости m_y с перпендикулярной координатной трансляцией $\mathrm{\vec{T}_y}$ приводит к появлению неэквивалентной плоскости $m`_y$, смещенной на половину этой трансляции $\vec{t}_y$. Аналогично будут себя вести и другие плоскости: ***n*, *c*, *a*(*b*)**.

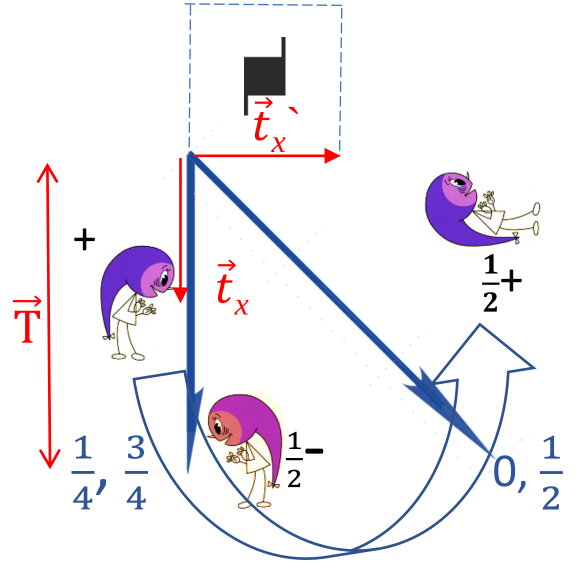
Взаимодействие диагональной плоскости m_d с косо расположенными координатными трансляциями приводит к ее чередованию с плоскостью b_d (g_d)

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°

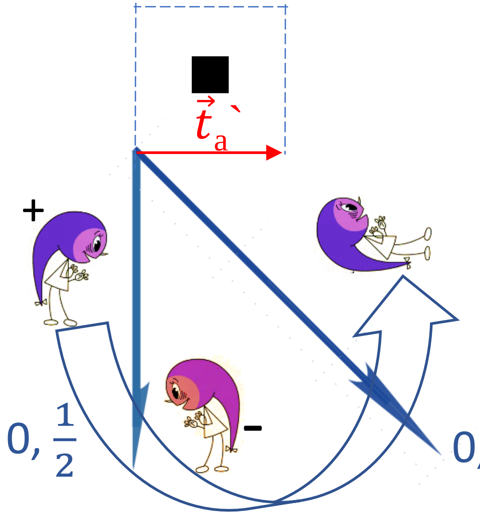
Взаимодействие осей **2**, расположенных под 45° друг к другу, приводит к возникновению оси **4**, характер которой зависит только от соотношения высот взаимодействующих осей 2, а положение – от характера осей 2





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

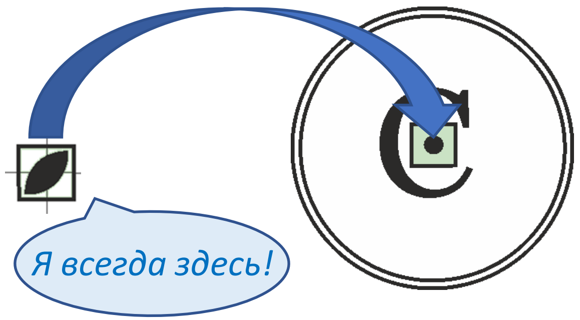
Ось 4 смещается последовательно в центры квадратов, построенных на $\vec{t}_x$` и $\vec{t}_{xy}$ в сторону последовательных поворотов вокруг осей 2_1



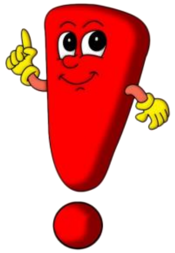
Когда же возникают оси 4_1 и 4_3?

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

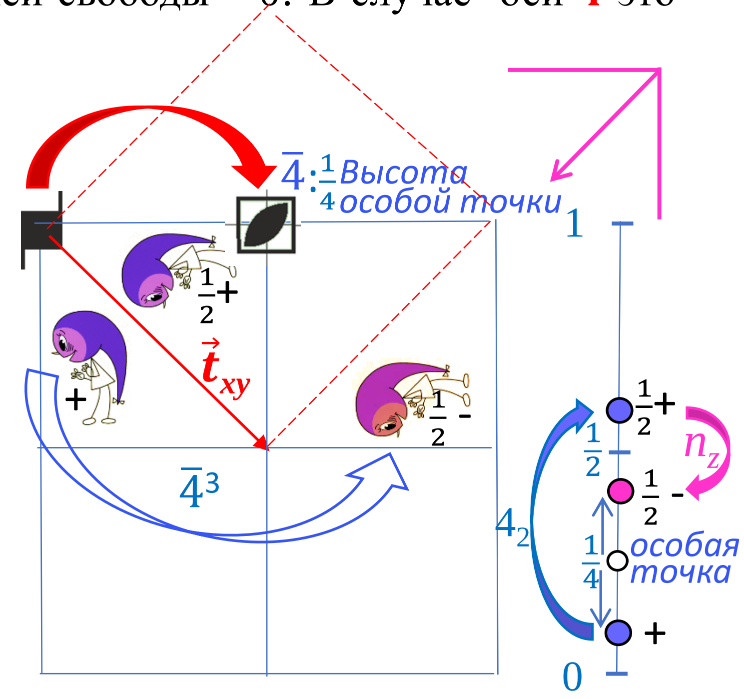
Ось $\bar{4}$ (как и все инверсионные оси, кроме $\bar{2}$) имеет особую точку. В этой точке число степеней свободы – 0! В случае оси $\bar{4}$ это место ее пересечения с мнимой плоскостью или мнимым центром инверсии.



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.

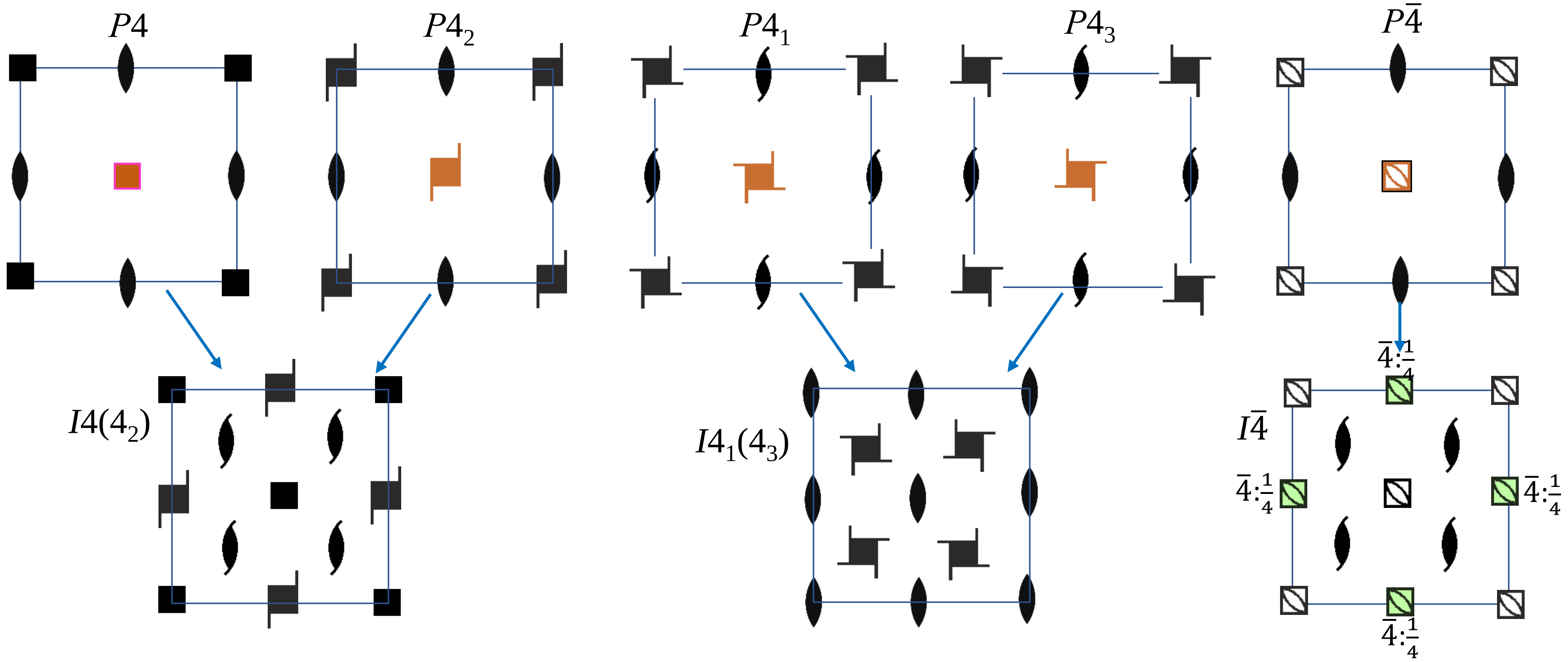
Взаимодействие оси 4_{2z} и перпендикулярной плоскости n_z порождает ось $\bar{4}_z$, которая взаимодействуя с вектором скольжения плоскости n_z ($\vec{t}_n = \vec{t}_{xy}$) перемещается в центр квадрата, построенного на этой трансляции, а ее особая точка меняет свою высоту, смещаясь на половину вектора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

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

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ТЕТАРТОЭДРИИ

В примитивной ячейки возможны следующие классы:

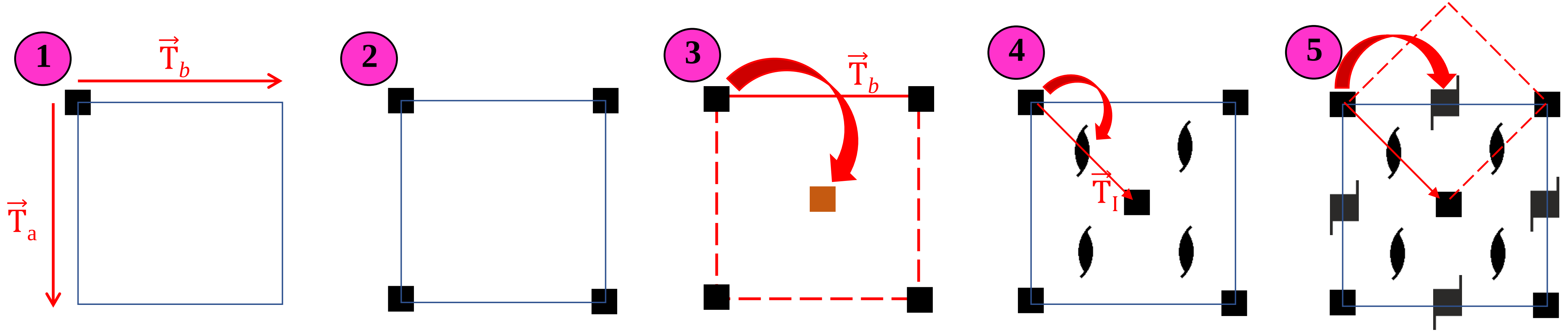
$P4$, $P4_1$, $P4_2$, $P4_3$, $P\bar{4}$



Чередование осей 4_1 и 4_3 , а также 4 и 4_2 в объемноцентрированной ячейке приведет к 3 пространственным группам:

$I4(4_2)$, $I4_1(4_3)$ и $I\bar{4}$

ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ I4(4_2)



1.Задаем координатные трансляции $\vec{T}_b$ и $\vec{T}_a$ и помещаем ось 4 в начало координат

2. Размножаем ось 4 координатными трансляциями $\vec{T}_b$ и $\vec{T}_a$

3. Взаимодействуя с координатной трансляцией $\vec{T}_b$ или $\vec{T}_a$ ось 4 смещается в центр квадрата, построенного на этой трансляции:

$$\vec{T}_b \times 4 = 4[\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}z]$$

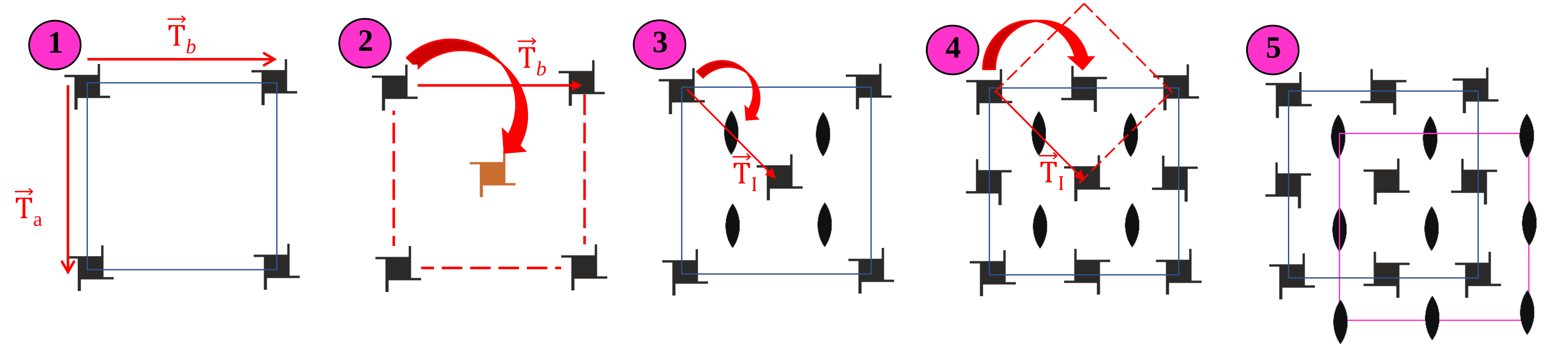
4. Взаимодействуя с трансляцией $\vec{T}_I$ ось 2(4) смещается в центр этой трансляции и меняет свой характер:

$$\vec{T}_I \times 2(4) = 2_1[\tfrac{1}{4}\tfrac{1}{4}z]$$

5. Взаимодействуя с трансляцией $\vec{T}_I$ ось 4 смещается в центр квадрата, построенного на этой трансляции и меняет свой характер:

$$\vec{T}_I \times 4 = 4_2[0\tfrac{1}{4}z]$$

ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ $I4_1(4_3)$



1.Задаем координатные трансляции $\vec{T}_b$ и $\vec{T}_a$, помещаем ось 4_1 в начало координат и размножаем ее этими трансляциями

2. Взаимодействуя с координатной трансляцией $\vec{T}_b$ или $\vec{T}_a$ ось 4_1 смещается в центр квадрата, построенного на этой трансляции:

$$\vec{T}_b \times 4_1 = 4_1[\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}z]$$

3. Взаимодействуя с трансляцией $\vec{T}_I$ ось $2_1(4_1)$ смещается в центр этой трансляции и меняет свой характер:

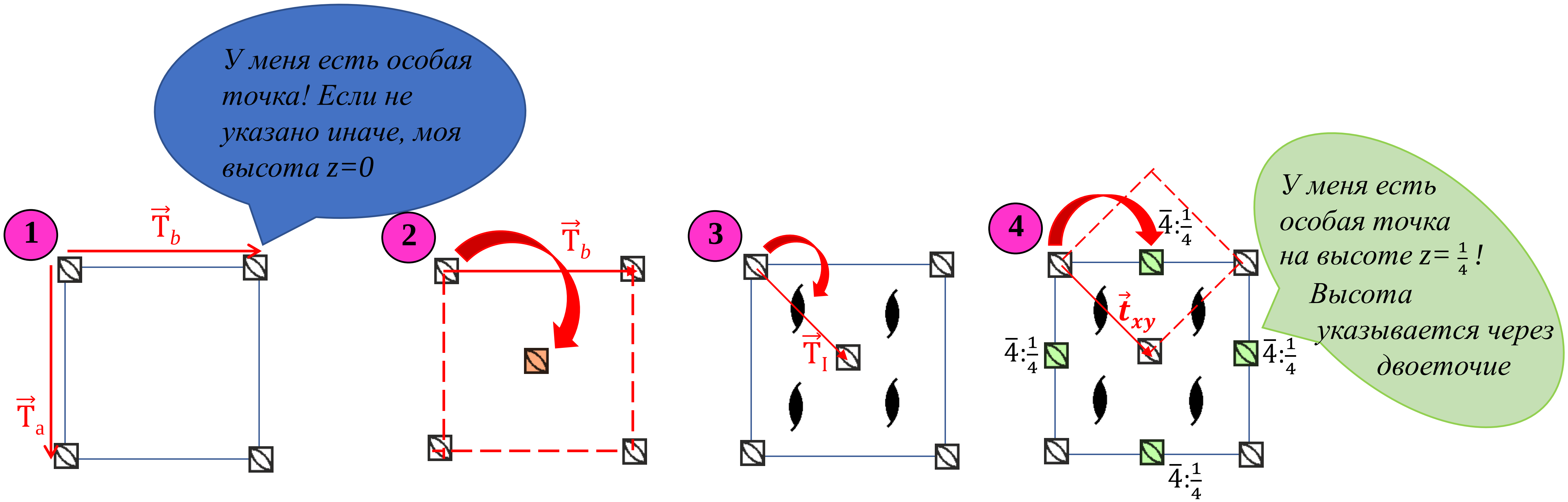
$$\vec{T}_I \times 2_1(4_1) = 2[\tfrac{1}{4}\tfrac{1}{4}z]$$

5. Взаимодействуя с трансляцией $\vec{T}_I$ ось 4_1 смещается в центр квадрата, построенного на этой трансляции и меняет свой характер:

$$\vec{T}_I \times 4_1 = 4_3[0\tfrac{1}{4}z]$$

6. Переносим начало координат в самую высокосимметричную и неподвижную точку этой пространственной группы – в ось 2

ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ $I\bar{4}$



1.Задаем координатные трансляции $\vec{T}_b$ и $\vec{T}_a$, помещаем ось $\bar{4}$ в начало координат и размножаем ее этими трансляциями

2. Взаимодействуя с координатной трансляцией $\vec{T}_b$ или $\vec{T}_a$, ось $\bar{4}$ смещается в центр квадрата, построенного на этой трансляции:

$$\vec{T}_b \times \bar{4} = \bar{4}\,[\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}z]$$

Высота особой точки у всех $\bar{4}$ одинакова и равна 0.

3. Взаимодействуя с трансляцией $\vec{T}_I$ ось $2(\bar{4})$ смещается в центр этой трансляции и меняет свой характер:

$$\vec{T}_I \times 2(\bar{4}) = 2_1[\tfrac{1}{4}\tfrac{1}{4}z]$$

5. Взаимодействуя с трансляцией $\vec{T}_I$ ось $\bar{4}$ смещается в центр квадрата, построенного на горизонтальной составляющей этой трансляции $\vec{t}_{xy}$ и меняет положение (высоту) своей особой точки, подчиняясь вертикальной составляющей трансляции $\vec{T}_I$:

$$\vec{T}_I \times \bar{4} = \bar{4}{:}\tfrac{1}{4}[0\tfrac{1}{2}z]$$

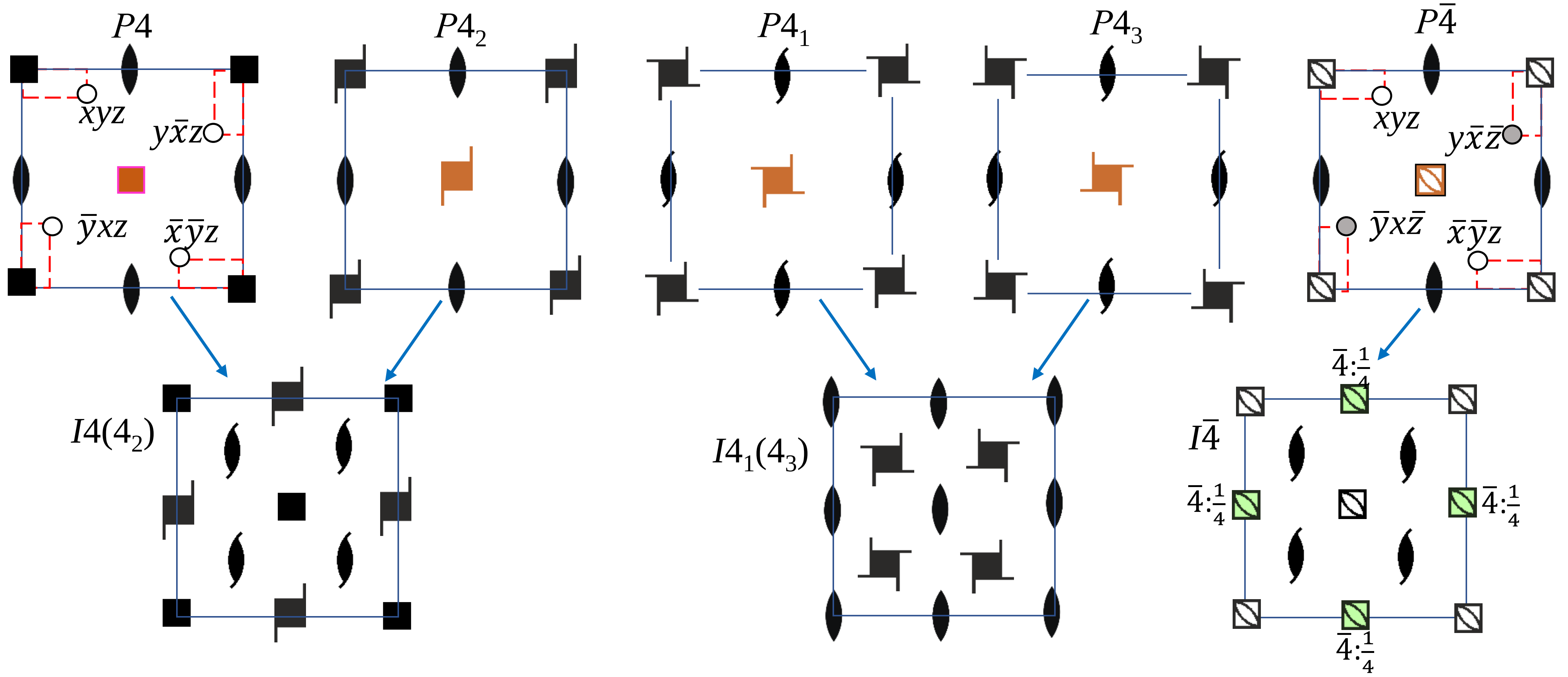
Начало координат в этой группе однозначно выбирается в особой точке инверсионной оси

ПРАВИЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ ТОЧЕК В ГРУППАХ ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ТЕТАРТОЭДРИИ

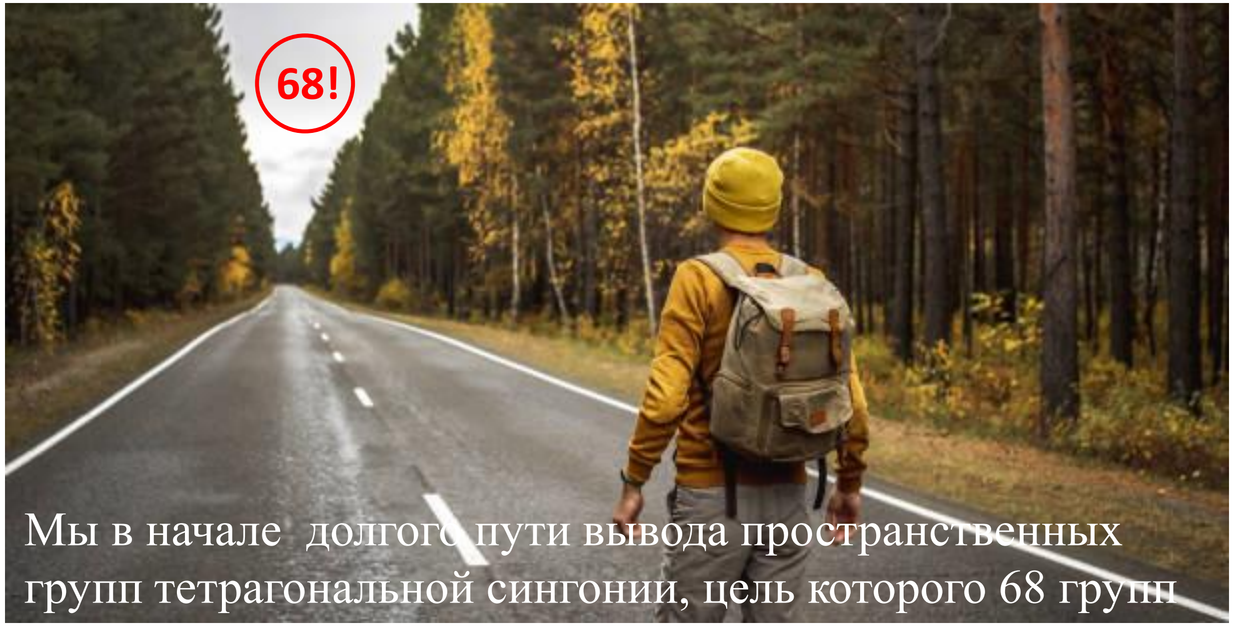
Пр. гр.	Число ПСТ	ПСТ
P4	3	**4** **2** **1**
$P4_2$	2	**2** **1**
$P4_1$	1	**1**
$P4_1$	1	**1**
$P\bar{4}$	3	$\bar{\mathbf{4}}$ **2** **1**
I4	2	**4** **1**
$I4_1$	2	**2** **1**
$I\bar{4}$	2	$\bar{\mathbf{4}}$ **1**

Правильная система точек – совокупность всех эквивалентных точек или точек, связанных между собой элементами симметрии группы

В тетрагональной тетартоэдрии существует 4 вида симметрийно различных правильных систем точек.

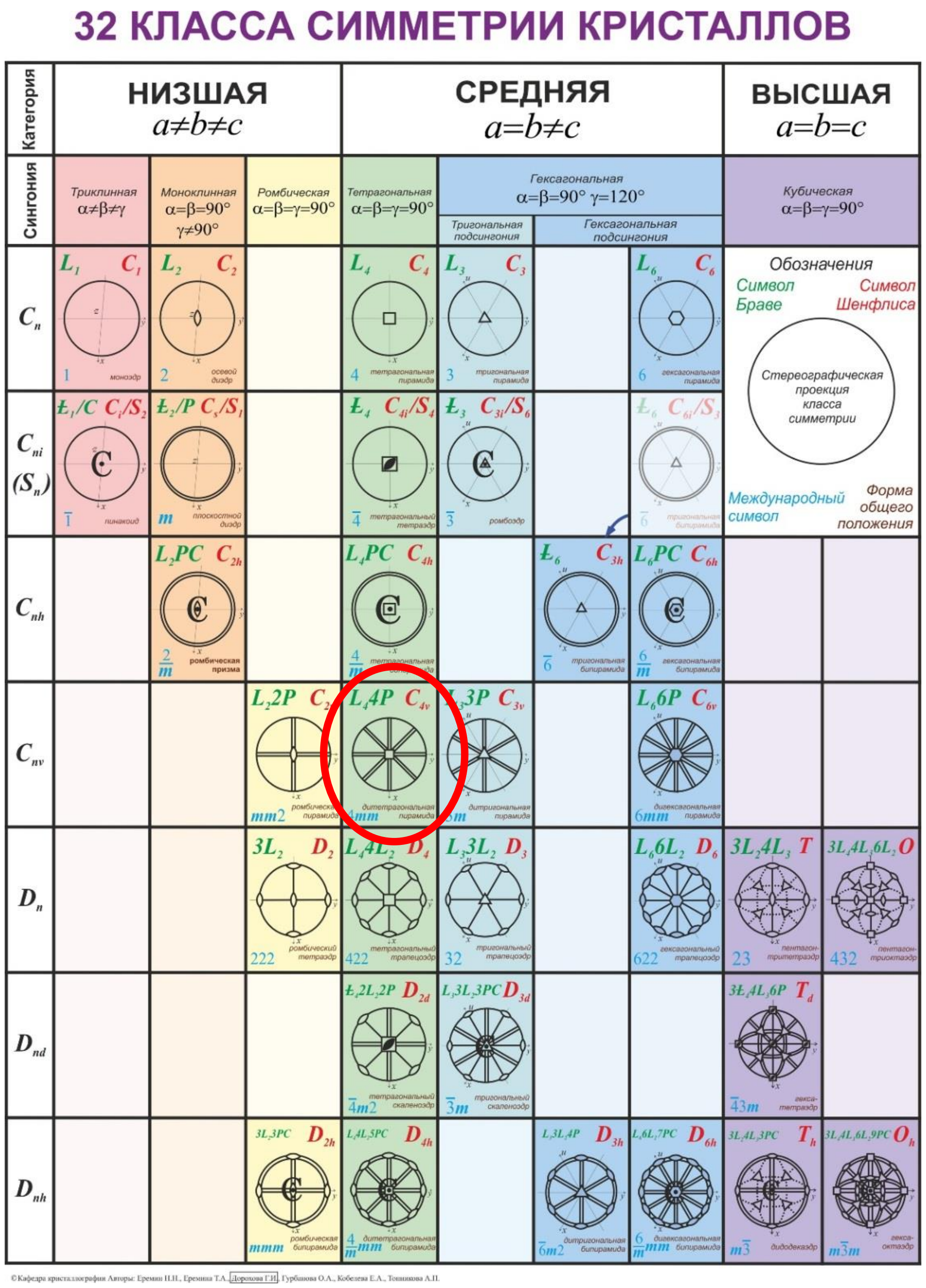


В качестве примера точка общего положения размножена для групп $P4$ и $P\bar{4}$.



Фактор -группа	*4*	$\bar{4}$	ИТОГО
P	4	1	5
C	-	-	0
A(B)	-	-	0
F	-	-	0
I	2	1	3
ИТОГО	6	2	8

Пока только 8



ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ 4*mm*

Вывести все пространственные группы, соответствующие точечному классу 4*mm* (C_{4v}) можно двумя способами:

1. Комбинаторным (классным) методом Н.В. Белова

2. *Тетрагонализацией* ромбических групп, соответствующих точечному классу *mm*2

А можно ещё и по-другому…