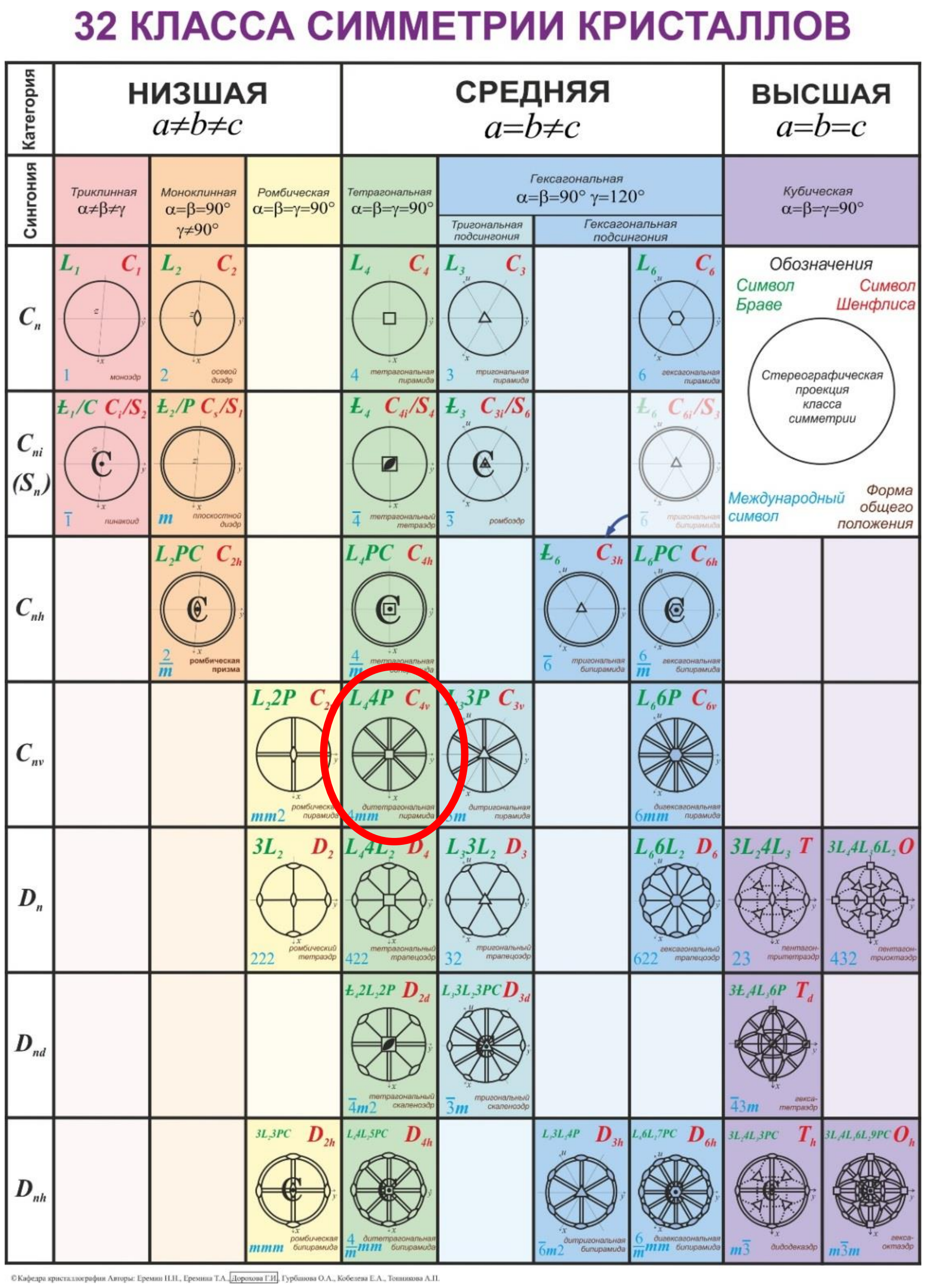
Семинар №3.
Тетрагональные группы симметрии. Вывод пространственных групп, подчиненных классам 4*mm*



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

И ещё…

1. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ 4*mm* КОМБИНАТОРНЫМ МЕТОДОМ

ПРИМИТИВНЫЕ ГРУППЫ *P*-ЯЧЕЙКА

0	I	II	III
P	4	*m*	*c*(*n*)
	4_2	*c*	*m*(*b*)
		b(*a*)	
		n	

- Характер осей 4-ого порядка (поворотная **4,** нейтральная винтовая $\mathbf{4_2}$) будет зависеть от характера порождающих ее плоскостей (координатных и диагональных).
- Вертикальной координатной плоскостью (позиция II) может быть любая плоскость ***m***, ***c***, ***b(a)***, ***n*** (кроме ***d***)
- На диагональной позиции (III) оригинальными будут 2 комплекса чередующихся плоскостей ***m*(*b*)** и ***c*(*n*)** за счет косо расположенной координатной трансляции.
- Энантиоморфные винтовые $\mathbf{4_1}$ и $\mathbf{4_3}$ не встречаются в *P*-ячейках, так как требуют плоскости ***d***, которая может проходить только параллельно центрированной грани

Сочетание возможных плоскостей на позициях II и III, диктующее характер результирующей оси 4-ого порядка на позиции I, приводит к 8 группам тетрагональной гемиэдрии **4*mm*** с ***P***-решеткой:

$P4mm$	$P4_2mc$	$P4_2cm$	$P4cc$	$P4_2bc$	$P4bm$	$P4nc$	$P4_2nm$

1. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ 4*mm* КОМБИНАТОРНЫМ МЕТОДОМ

Группы с *I*-ЯЧЕЙКОЙ

0	I	II	III
I	$4(4_2)$	*m(n)*	*m≡n (b≡c)*
	$4_1(4_3)$	*c(b)*	*d(d)*

Вектор ***I*** в тетрагональной решетке вызывает чередование осей 4_1 и 4_3, 4 и 4_2

Вектор ***I*** в тетрагональной решетке вызывает чередование плоскостей ***c** и **b***, ***m*** и ***n*** на координатных позициях

Вектор ***I***- тетрагональной решетки приводит к тому, что каждая из чередующихся диагональных плоскостей тождественна плоскости иного наименования:

m ≡ n и ***b ≡ c***,

которые в свою очередь чередуются друг с другом

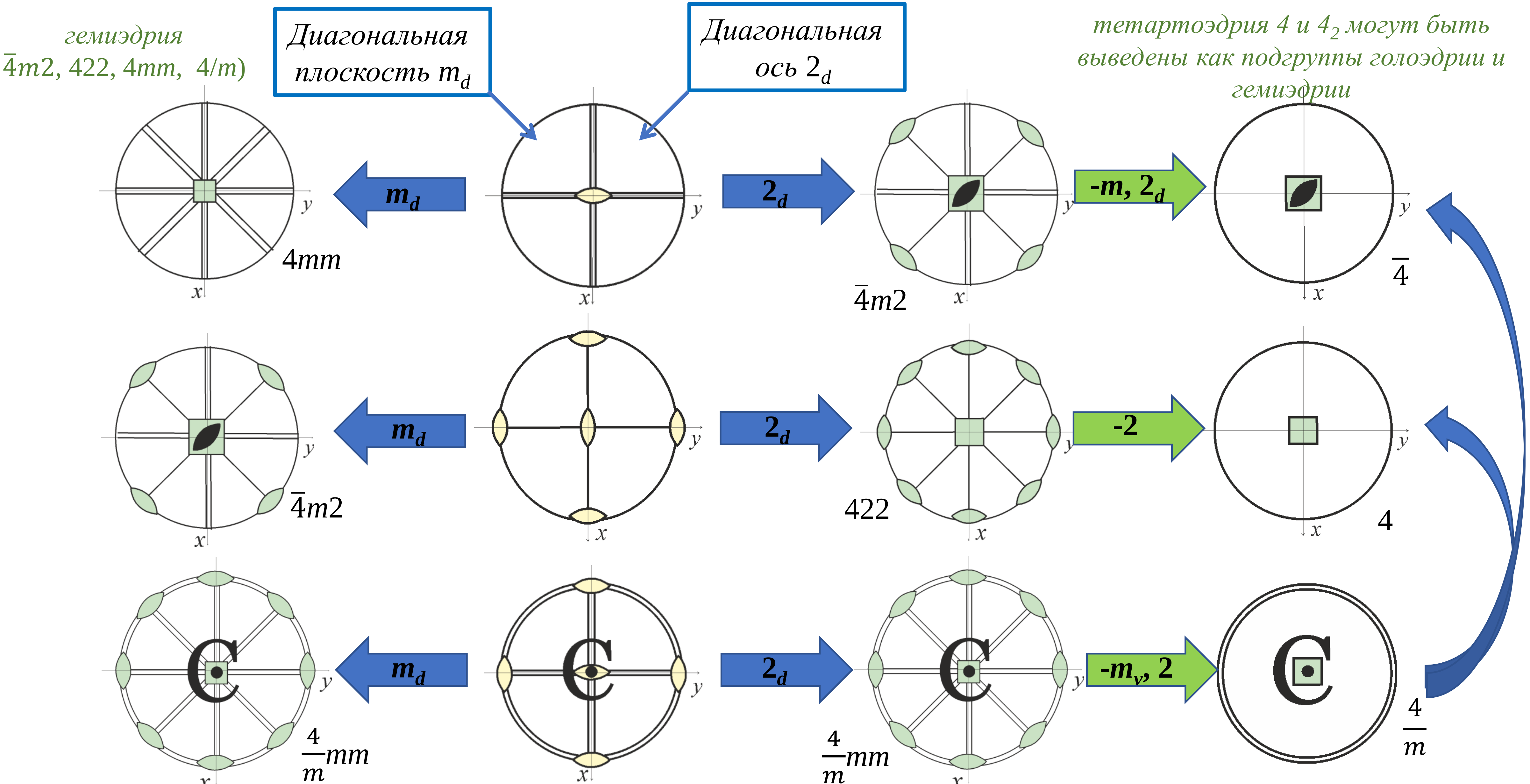
Вектор ***I*** в тетрагональной решетке делает допустимой плоскость ***d*** на *диагональной* позиции

Сочетание возможных плоскостей на позициях II и III, диктующее характер результирующей оси 4-ого порядка на позиции I, приводит к 4 группам тетрагональной гемиэдрии **4*mm*** с ***I***-решеткой:

*I*4*mm*	*I*4*cm*	$I4_1md$	$I4_1cd$

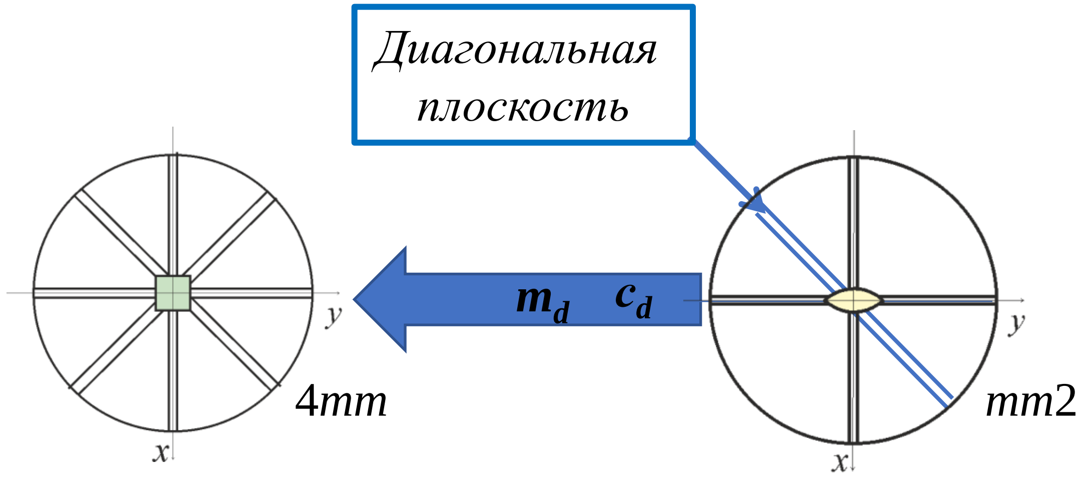
2. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ 4*mm* МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИЕЙ

Тетрагонализация – это введение в ромбический класс плоскости ***m*** или оси **2** в диагональное положение, что делает эквивалентными горизонтальные координатные направления (X и Y) и приводит к возникновению оси **4** (вместо **2**)



2. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ 4*mm* МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

Гемиэдрические пространственные группы, подчиненных точечному классу 4*mm*, можно получить *тетрагонализацией* пространственных групп, соответствующих классу *mm*2, вводя в диагональное положение плоскость. В пространственном варианте это может быть плоскость зеркального отражения $\boldsymbol{m_d}$, чередующаяся с $\boldsymbol{b_d}$, либо $\boldsymbol{c_d}$, чередующаяся с $\boldsymbol{n_d}$.



Вывод пространственных групп ромбической гемиэдрии *mm*2

0	*I*	*II*	*III*
P	***m***	***m***	***2***
	g(b)	*g(a)*	2_1
	c	*c*	
	n	*n*	
C	*m(g)*	*m(g)*	2
	n(c)	*n(c)*	2_1
F	*m≡n* *(b≡c)*	*m≡n* *(a≡c)*	$2(2_1)$
I	*m(n)*	*m(n)*	$2(2_1)$
	c(b)	*c(a)*	
A	*m≡n*	*m(c)*	2
	b≡c	*a(n)*	2_1

P:

Первая группа содержит только «удобные» плоскости: *m* или *n*: *Pmm*2, *Pnn*2, *Pmn*2_1

Вторая группа содержит одну «удобную» и одну «неудобную» плоскости: *Pma*2 = *Pbm*2, *Pmc*2_1 = *Pcm*2_1, *Pna*2_1 = *Pbn*2_1, *Pnc*2_1 = *Pcn*2_1

Третья группа содержит только «неудобные» плоскости: *Pbc*2_1, *Pba*2, *Pcc*2

C:

*Cmm*2 = *Cm(b)m(a)*2(2)
Cmc2_1 = *Cm(b)c(n)*$2_1(2_1)$
*Ccc*2 = *Cc(n)c(n)*2(2)

Взаимозависимость плоскостей ***m*** и ***g***, а также ***n*** и ***c***, обеспеченная вектором $\vec{T}_c$, сокращает количество групп до трех

F:

*Fmm*2 = *Fm≡n*(b ≡ *c)m≡n(a≡c)*$2(2_1)$
Fdd$2(2_1)$ = *Fd*(*d*)*d*(*d*)$2(2_1)$

Взаимозависимость всех плоскостей приводит к одной пространственной группе + возможная только в этой решетке плоскость ***d*** формирует еще одну группу

I:

*Imm*2 = Im(n)m(n)$2(2_1)$
*Ima*2 = *Im(n)a*(c)$2(2_1)$
*Iba*2 = Ib(c)a(c)$2(2_1)$

Взаимозависимость плоскостей ***m*** и ***n***, а также ***c(a*** или ***b)***, обеспеченная вектором $\vec{T}_I$, сокращает количество групп до трех

A:

*A mm*2 = *A m≡nm(c)*$2(2_1)$
*A bm*2 = *A b≡cm*(c)$2(2_1)$
*A ma*2 = *A m≡na(n)*$2(2_1)$
*A ba*2 = *A b*≡ca(n)$2(2_1)$

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ 4*mm* МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

$Pmm2$, $Pnn2$, $Pmn2_1$, $Pma2$, $Pmc2_1$, $Pna2_1$, $Pnc2_1$, $Pca2_1$, $Pba2$, $Pcc2$

$Imm2$, $Ima2$, $Iba2$, $Cmm2$, $Cmc2_1$, $Ccc2$, $Fmm2$, $Fdd2$, $Amm2$, $Abm2$, $Ama2$, $Aba2$

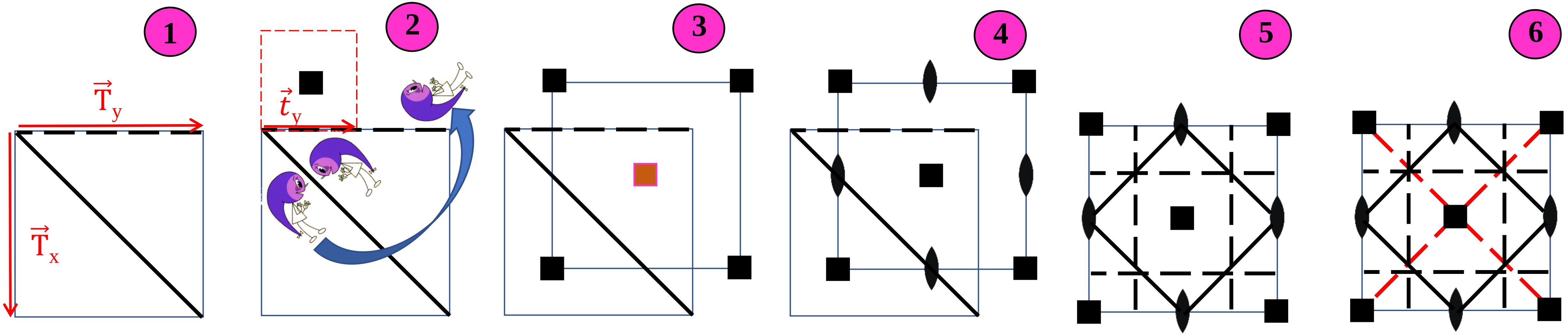
$Pmm2 + m_d \rightarrow P4mm$

Для тетрагонализации пригодны только ромбические группы с однотипными вертикальными плоскостями, а также с такими центрировками, которые топологически эквивалентны для горизонтальных координатных осей:

Выведенные тетрагональные группы ($+m_d$)		*Исходные ромбические группы*		*Выведенные тетрагональные группы* ($+c_d$)
$P4mm$		$Pmm2$		$P4_2mc$
$P4_2nm$		$Pnn2$		$P4nc$
$P4bm$		$Pba2$		$P4_2bc$
$P4_2cm$		$Pcc2$		$P4cc$
$I4mm$		$Imm2$		$I4cm$
$I4cm = I4bm$		$Iba2$		$Ibc2 = I4cm$
$P4mm$	$C4mm$	$Cmm2$	$C4mc$	$P4cm$
$P4cm$	$C4mc$	$Ccc2$	$C4cc$	$P4cc$
$I4mm$	$F4mm$	$Fmm2$	$F4mm$	$I4mm$
$I4_1md$	$F4_1dm$	$Fdd2$	$F4_1dc$	$I4_1cd$

За вычетом повторов получаем те же 12 пространственных групп тетрагональной гемиэдрии **4*mm***

ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ P4bm



1.Задаем координатные трансляции $\vec{T}_x$ и $\vec{T}_y$, а также порождающие плоскости: координатную b_x и диагональную m_{xy}.

2. Результатом взаимодействия плоскостей b_x и m_{xy} будет поворотная ось **4**, смещенная в центр квадрата, построенного на трансляции $\vec{t}_y$ в сторону осуществляемых последовательных отражений:

$m_{xy} \times b_x = 4[-\frac{1}{4}\frac{1}{4}z]$ или $4[\frac{1}{4}-\frac{1}{4}z]$

3. Размножаем получившуюся ось координатными трансляциями. Ось **4**, взаимодействуя с трансляцией $\vec{T}_y(\vec{T}_x)$, смещается в центр квадрата, построенного на этой трансляции:

$\vec{T}_y \times 4 = 4`[\frac{1}{2}\frac{1}{2}z]$

4. Ось **2(4)**, взаимодействуя с трансляциями $\vec{T}_y$ и $\vec{T}_x$, смещается в центр этих :

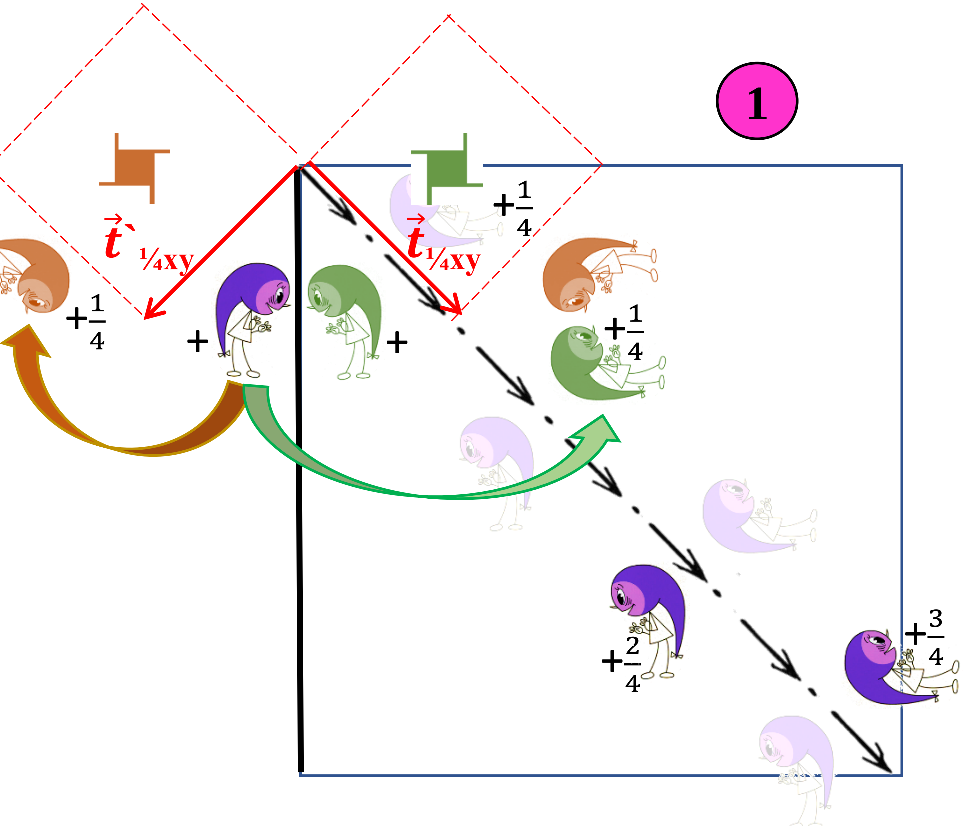
$\vec{T}_y \times 2(4) = 2[0\frac{1}{2}z]$

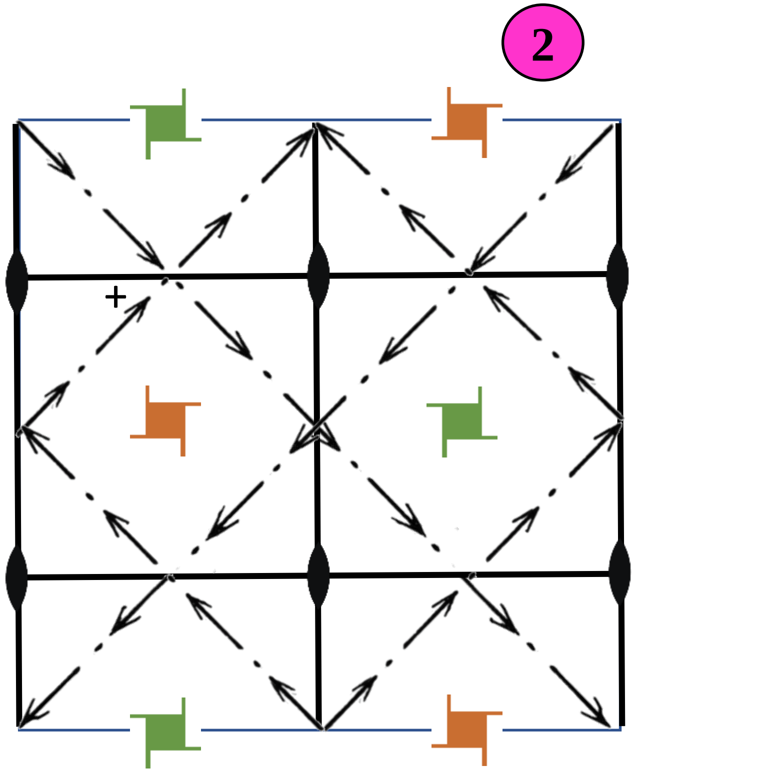
$\vec{T}_x \times 2(4) = 2[\frac{1}{2}0z]$

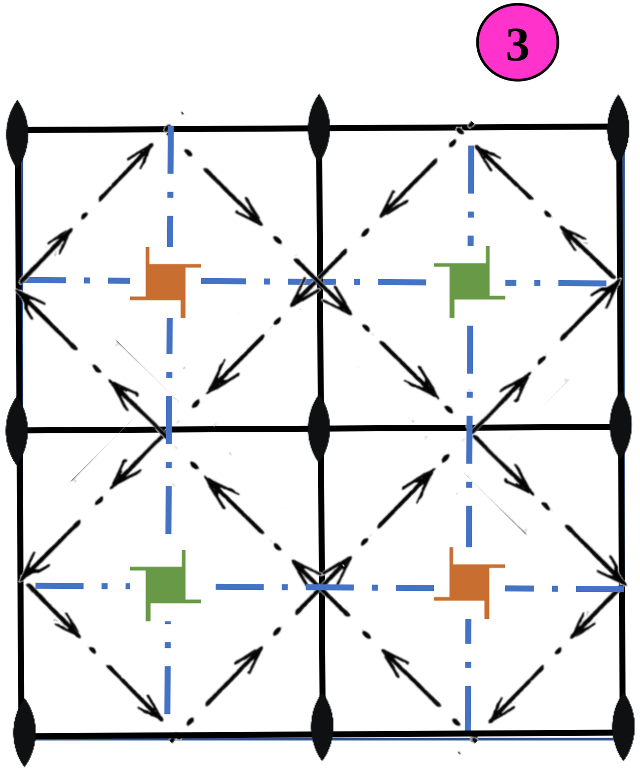
5. Размножаем плоскости поворотными осями **2** и **4** и переносим начало координат в самую высокосимметричную и неподвижную точку пространственной группы – в ось **4**

6. В результате взаимодействия диагональных плоскостей m_{xy} и координатных трансляций $\vec{T}_y$ и $\vec{T}_x$ возникают вложенные плоскости b_d.

ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ $I4_1md$







1.Задаем координатные трансляции $\vec{T}_b$ и $\vec{T}_a$, а также порождающие плоскости: координатную m_y и диагональную d_{xy}. Результирующая ось 4_1 возникает в центре квадрата, построенного на трансляции $\vec{t}_{\frac14xy}$:

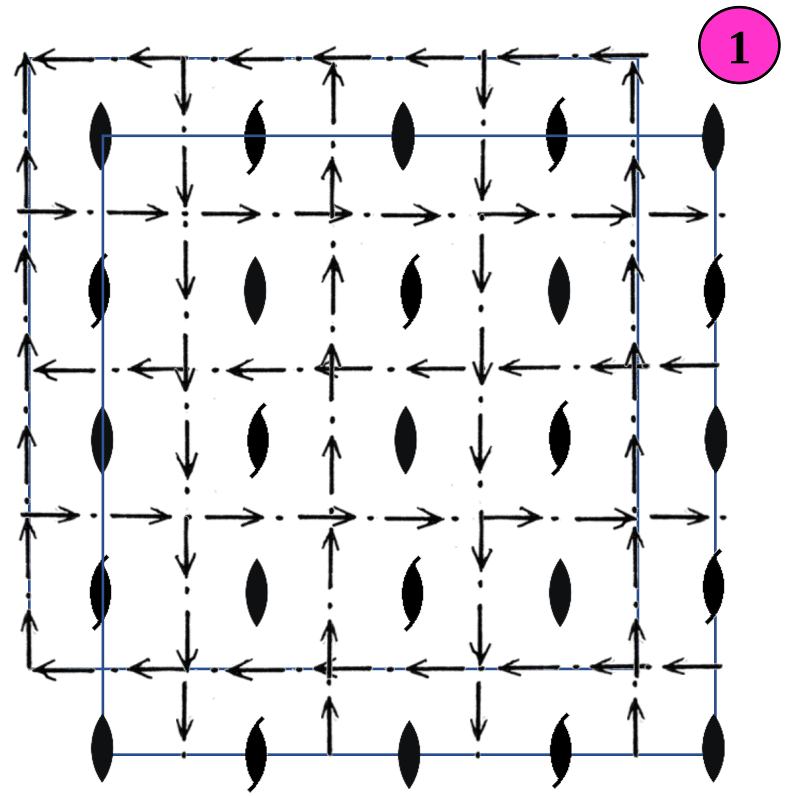
$$m_y \times d_{xy} = m_y \times m_{xy}\, \vec{t}_{\frac14xy}\, \vec{t}_{\frac14z} = 4_1\, \vec{t}_{\frac14xy} = 4_1[0\tfrac{1}{4}z]$$

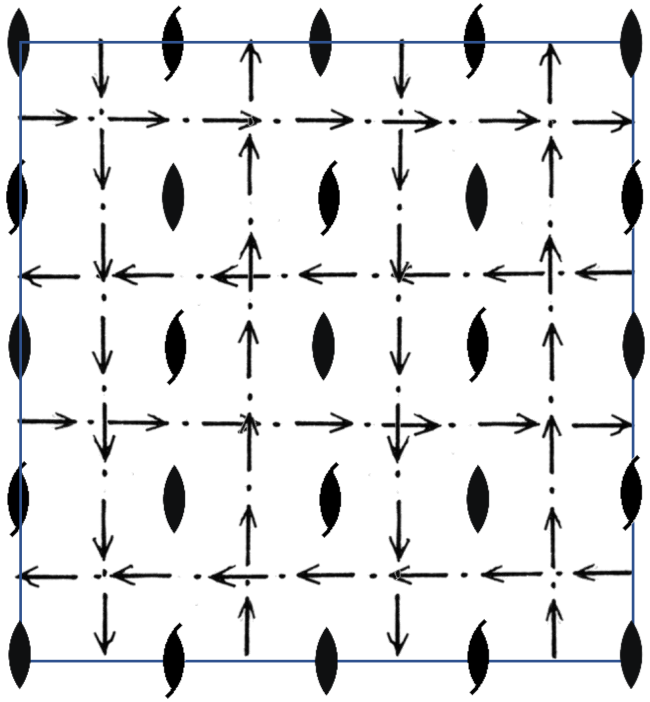
$$d_{xy} \times m_y = m_{xy}\, \vec{t}_{\frac14xy}\, \vec{t}_{\frac14z} \times m_y = 4_3\, \vec{t}`_{\frac14xy} = 4_3[0\text{-}\tfrac{1}{4}z]$$

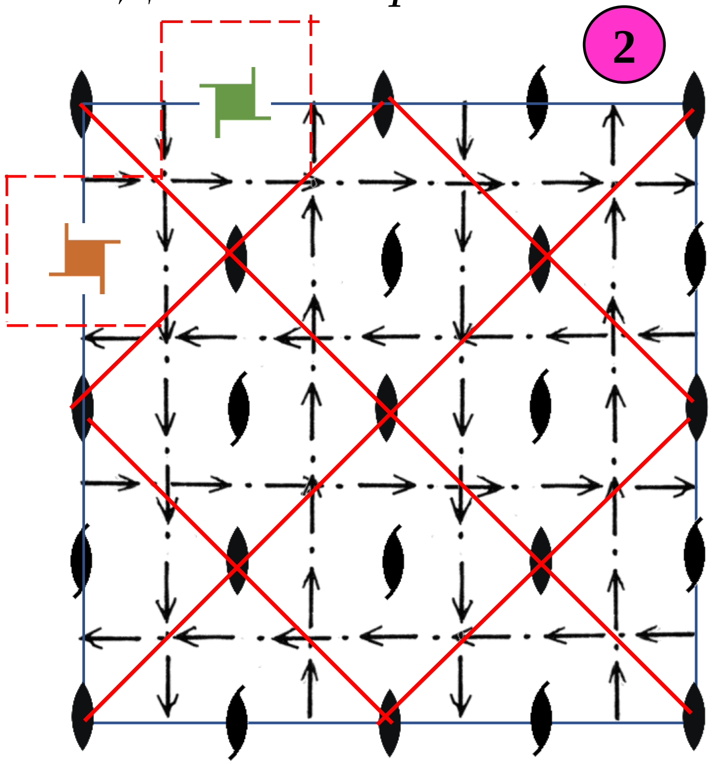
2. Ось 4_1 поворачивает плоскость d_{xy} *и* m_y. Плоскость m_y размножается координатной трансляцией $\vec{T}_y$ и взаимодействует с $\vec{T}_y$ и $\vec{T}_x$ На пересечении плоскостей m_y и m_x возникают оси 2
Оси 4_1 и 4_3 размножают плоскости, а плоскости d_{xy} *и* m_y размножают оси 4_1 и 4_3

3. В результате взаимодействия координатных плоскостей и вектора появляются «вложенные плоскости n.
Начало координат в этой группе однозначно выбирается в позиции *mm2*

ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ Fdd2. ПЕРЕХОД Fdd2 → $I4_1md$





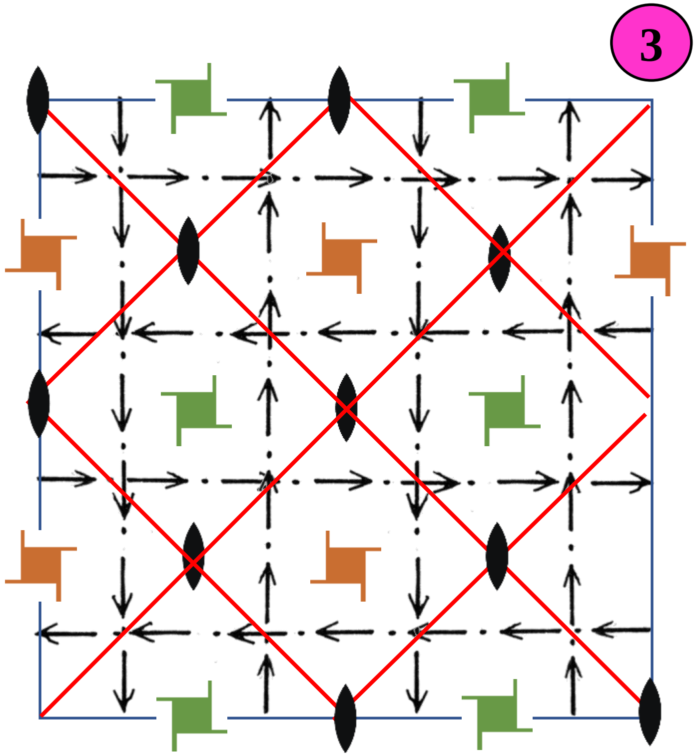


1. Вычерчивание графика ромбической группы ***Fdd2*** **.** Учитывая последующую тетрагонализацию, задаем горизонтальные координатные трансляции равными друг другу $\vec{T}_x = \vec{T}_y$. Задав в качестве порождающих пересекающиеся под углом 90° плоскости ***d***, получаем серию чередующихся осей **2** и $\mathbf{2_1}$: вокруг винтовых осей стрелочки плоскостей «закручиваются», а вокруг поворотных «встречаются» и «расходятся». Начало координат однозначно выбирается в оси **2**.

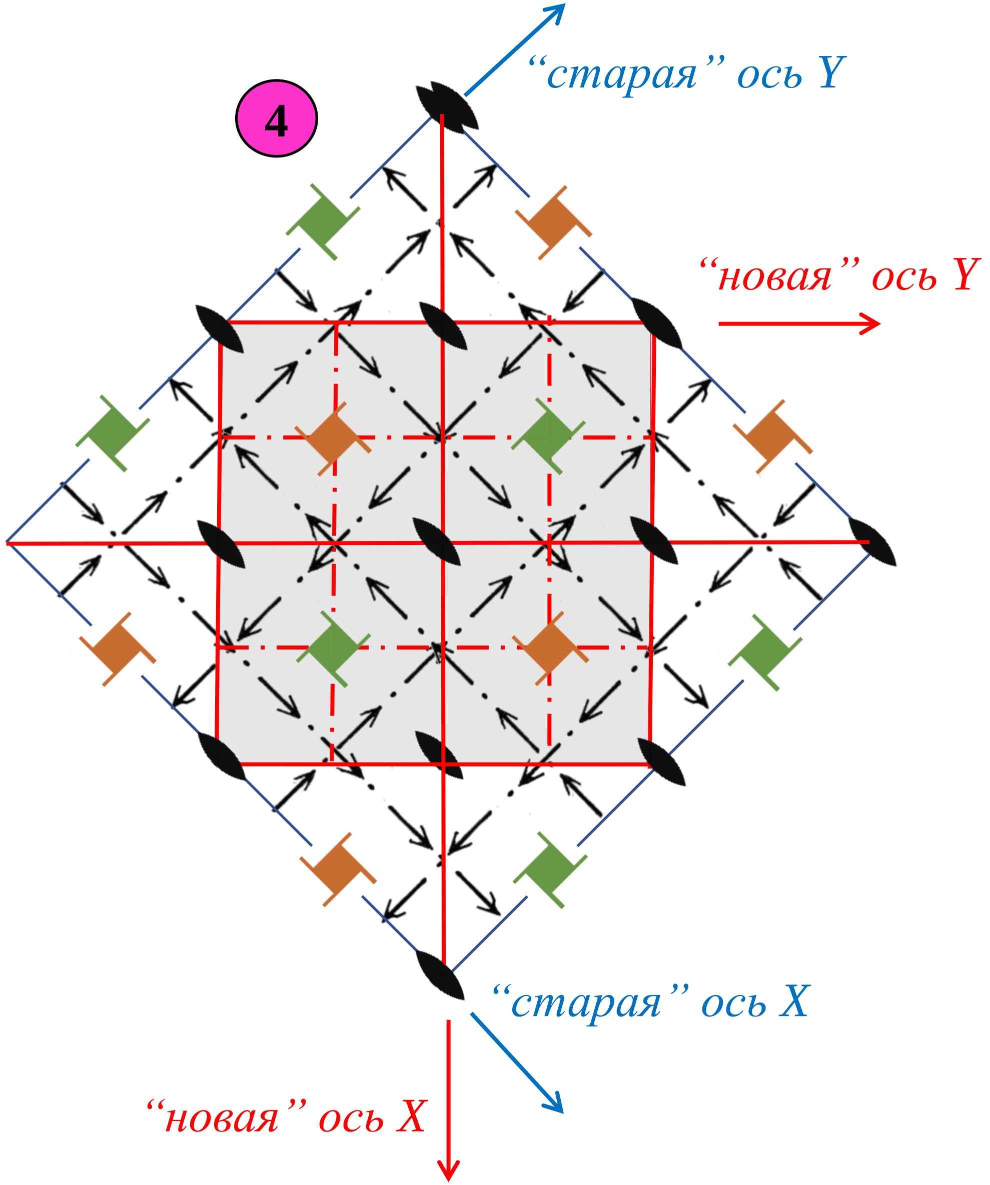
2. Вводим тетрагонализирующую плоскость m_d в диагональное положение и размножаем ее осями 2-ого порядка. Взаимодействие координатной плоскости ***d*** и введенной m_d приводит к появлению осей $\mathbf{4_1}$ и $\mathbf{4_3}$:

$d_y \times m_d = 4_1$

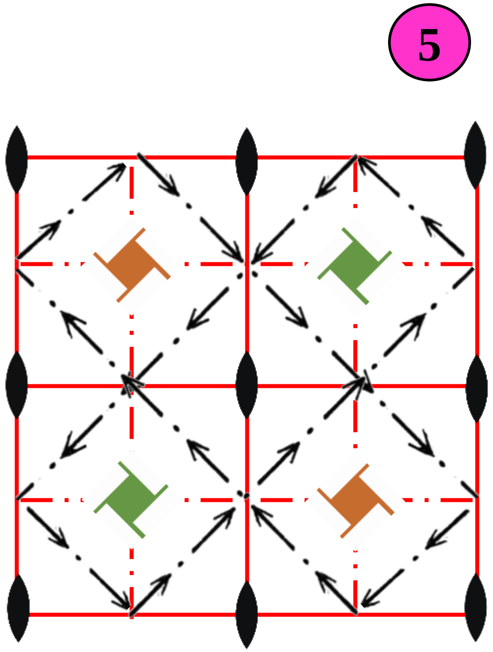
$m_d \times d_y = 4_3$



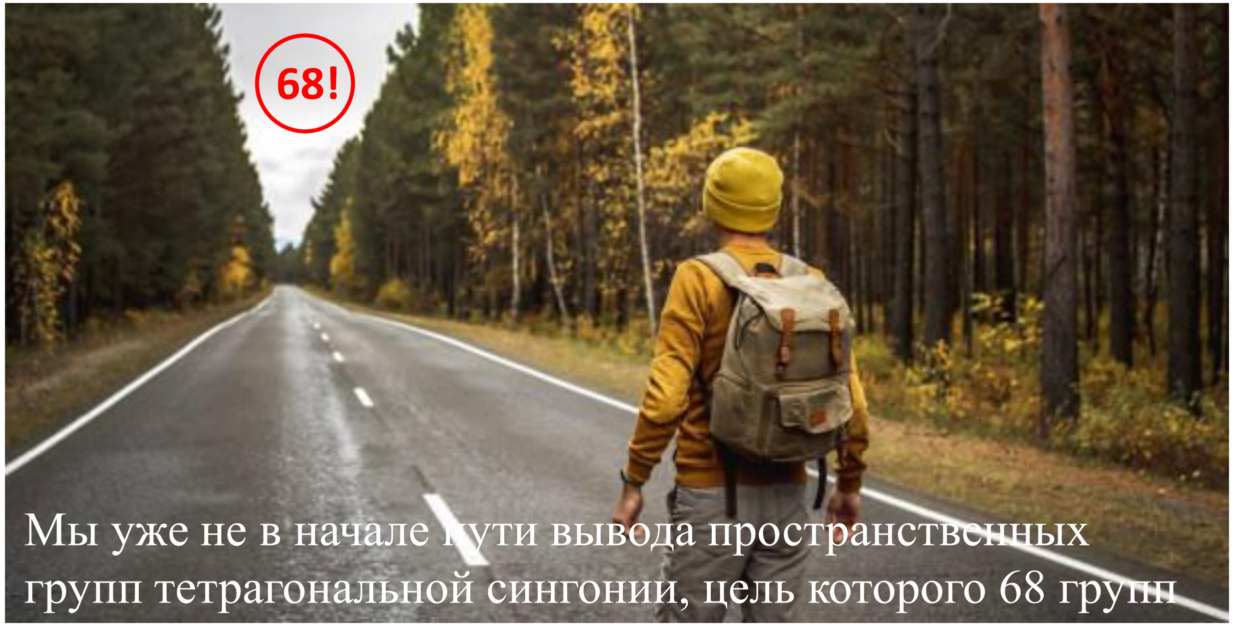
3. Возникшие оси 4_1 и 4_3 «поглощают» все оси 2_1. Получаем группу $F4_1dm$



4. Переход от ***F***-ячейки к ***I***-ячейки сопровождается сменой диагональных и координатных направлений: диагональные плоскости m_d становятся координатными, а координатные плоскости – диагональными: $F4_1dm \rightarrow I4_1md$.



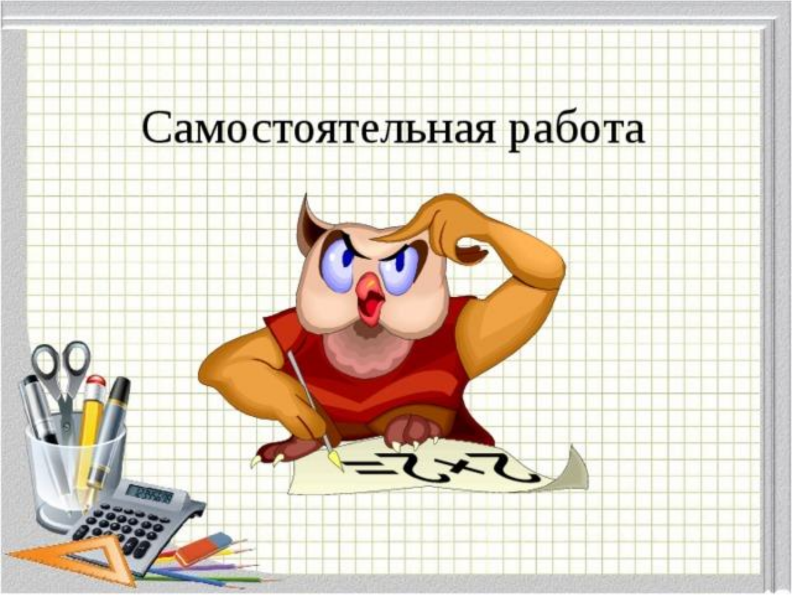
5. График группы $I4_1md$



Фактор -группа	*4*	$\bar{4}$	*4mm*	ИТОГО
P	4	1	8	13
C	-	-	-	0
A(B)	-	-	-	0
F	-	-	-	0
I	2	1	4	7
ИТОГО	6	2	12	20

Еще 12 групп

Уже 20!



САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

1. Нарисовать график пространственной группы, взяв за порождающие координатные и диагональные плоскости
2. Обоснованно выбрать начало координат
3. Размножить и записать все координаты общей правильной системы точек. Привести ее характеристики

БУРЫЧКИНА МАРИЯ	ГАНИ ТАТЬЯНА	ГЕНШПРИНГ АРСЕНИЙ	ТИМАШОВ ДАНИИЛ	ТЮТИНА СОФИЯ	ПИРНАЗАРОВА ЗУМРАТ	ПИРНАЗАРОВА КОМИЛА
$P4_2bc$	$P4nc$	$P4_2bc$	$P4cc$	$P4_2nm$	$P4_2cm$	$P4_2mc$

Характеристики общей правильной системы точек пространственной группы ________________

№	Симметрия позиции	Величина симметрии позиции	Число степеней свободы	Кратность позиции	Координаты всех точек правильной системы
1