Семинар №4.
Тетрагональные группы симметрии. Вывод пространственных групп, подчиненных точечным классам $4/m$

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ 4/*m* КОМБИНАТОРНЫМ МЕТОДОМ

Вывод пространственных групп, соответствующих классу 4/m, осуществляется комбинаторным способом, т.е. простым перебором возможных вариантов

ПРИМИТИВНЫЕ ГРУППЫ *P*-ЯЧЕЙКА

0	I	
	ось	плоскость
P	4	*m*
	4_2	*n*

$P4/m$	$P4_2/m$	$P4/n$	$P4_2/n$

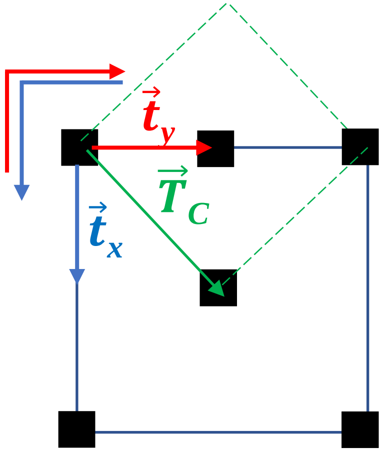
- Поворотная ось **4** и винтовая нейтральная **4_2** допускают перпендикулярные плоскости ***m*** и ***n***. Плоскость ***a_Z*** (тождественная ***b_Z***) при нейтральных осях создает дополнительную горизонтальную трансляцию в центр базиса ячейки, что сокращает ее горизонтальные параметры и не приводит к оригинальным группам.

- Энантиморфные оси **4_1** и **4_3**, не допускают плоскости ***m*** и ***n***, но могут сочетаться с плоскостями ***a_z***(***b_z***), но только в ***I***-ячейке.

- Инверсионная ось $\bar{4}$ не сохраняет свою индивидуальность при перпендикулярной плоскости, становясь частью более высокосимметричного комплекса.

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ 4/*m* ОБЪЕМНОЦЕНТРИРОВАННЫЕ ГРУППЫ *I*-ЯЧЕЙКА

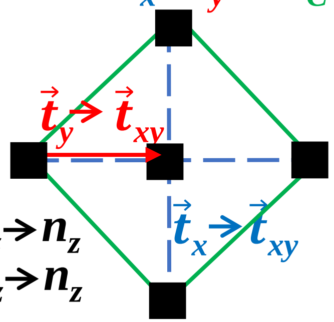
Взаимодействие осей **4** и **4$_2$**
с перпендикулярной плоскостью ***a***



$4 \circlearrowleft a_z = b_z$

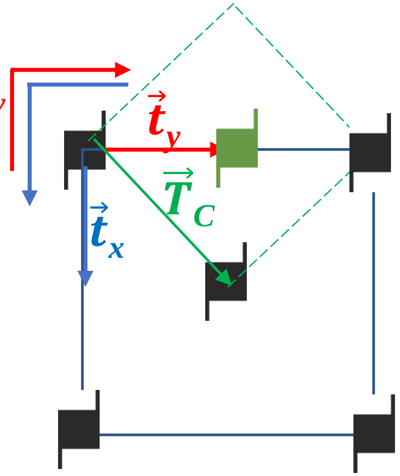
$a_z \times b_z = m_z\,\vec{t}_x \times m_z\,\vec{t}_y$

$= \vec{t}_x \times \vec{t}_y = \vec{T}_C$



$a_z \to n_z$

$b_z \to n_z$



Наличие на одном и том же месте двух плоскостей скольжения (плоскость ***e***) неминуемо влечет за собой появление реальной трансляции в центр параллельной грани, что приводит к уменьшению ячейки в связи с переходом ***C***-ячейки в ***P***-ячейку. При этом плоскости ***a*** и ***b*** превращаются в ***n***. Учитывая факт повторения любой плоскости через ½ трансляции, в случае оси 4_2 результат будет такой же.

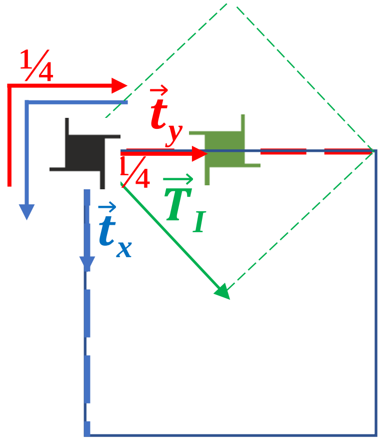
Взаимодействие осей **4$_1$(4$_3$)**
с перпендикулярной плоскостью ***a***

$4_1 \circlearrowleft a_z[xy0] = b_z\,[xy\tfrac{1}{4}]$

$a_z[xy0] \times b_z[xy\tfrac{1}{4}] =$

$= m_z\,\vec{t}_x[x00] \times m_z\,\vec{t}_y[0y\tfrac{1}{4}] =$

$= \vec{t}_x[x00] \times \vec{t}_y[0y\tfrac{1}{4}] = \vec{T}_I$



При повороте вокруг оси **4$_1$** плоскость ***a$_z$*** превращается в плоскость ***b$_z$***, при этом перемещаясь по высоте на ¼. Такое скрещивание векторов $\vec{t}_x$ и $\vec{t}_y$ приводит к возникновению трансляции $\vec{T}_I$. Таким образом, сочетание оси **4$_1$** и плоскости ***a*** *всегда приводит к появлению **I**-вектора*

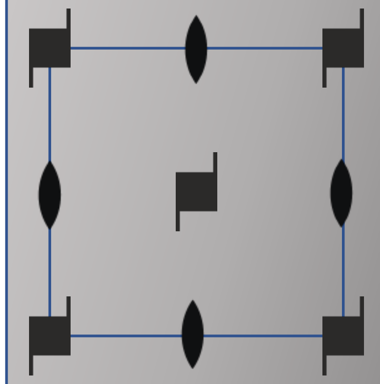
0	I	
	ось	плоскость
I	4(4$_2$) ⟺	*m(n)*
	4$_1$(4$_3$) ⟺	*a(b)*

I-вектор вызывает чередование осей **4** и **4$_2$**, **4$_1$** и **4$_3$**, а также ***m$_z$*** и ***n$_z$***, ***a$_z$*** и ***b$_z$***. Вариативность еще снижается по причине совместимости осей **4** и **4$_2$** толькои с ***m*** и ***n*** плоскостями, а оси **4$_1$** и **4$_3$** – только с плоскостями ***a$_z$(b$_z$)*** и только в ***I***-ячейках.
Получаем всего 2 класса.

$I4/m$	$I4_1/a$

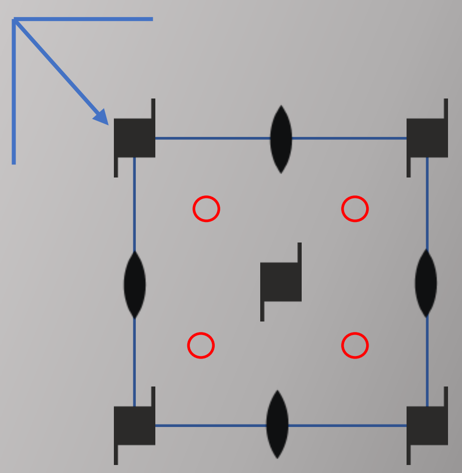
ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ $P4_2/n$

1



1. Вычерчиваем график группы $P4_2$

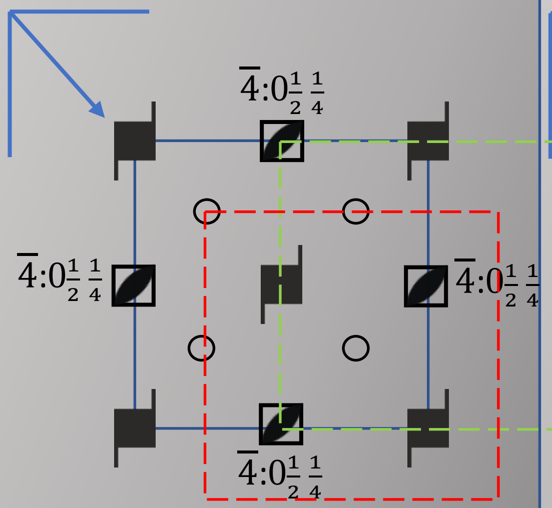
2



2. Вводим перпендикулярную плоскость n_z на $z=0$. В результате взаимодействия $2(4_2)$ возникают центры инверсии:

$$2(4_2) \times n_z = 2_z \times m_z \vec{t}_{xy} = \bar{1}[\tfrac{1}{4}\tfrac{1}{4}0]$$

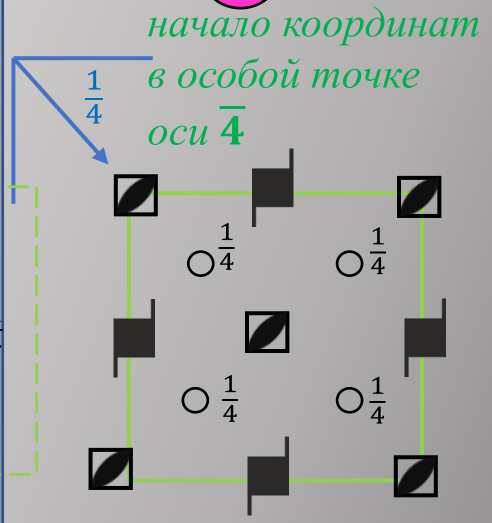
3



3. В результате взаимодействия 4_2 и плоскости n_z возникают инверсионные оси $\bar{4}$ с особой точкой в позиции $[0\frac{1}{2}\frac{1}{4}]$:

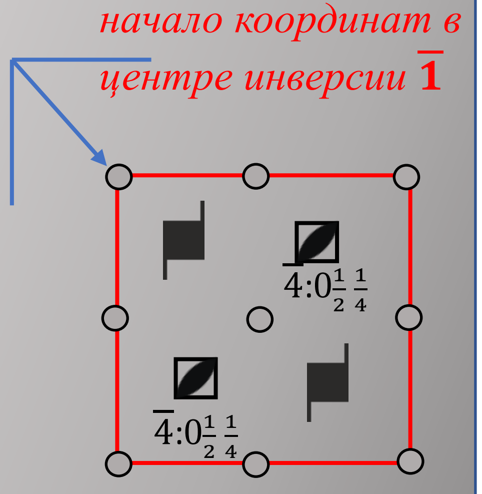
$$4_2 \times n_z = \bar{4}:[0\tfrac{1}{2}z]$$

4



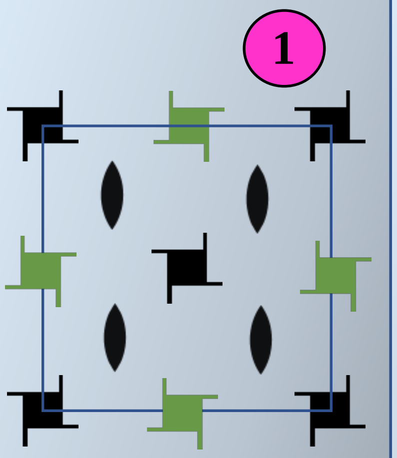
4. В этой группе две абсолютно неподвижные точки (ЧСС=0): особая точка $\bar{4}$ (ВСП=4) и $\bar{1}$ (ВСП=2). Начало координат следует выбирать в особой точке, как более симметричной.

3

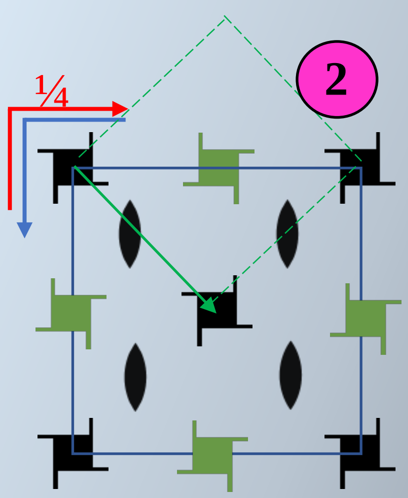


5. Но считается вполне допустимым в качестве стандартной установки выбирать начало координат и в центре инверсии. В интернациональных таблицах приведены оба варианта.

ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ $I4_1/a$



1. Вычерчиваем график группы $I4_1$

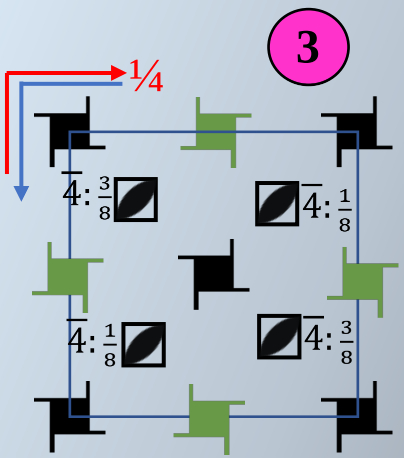


2. Вводим перпендикулярную плоскость a_z на z=0. В результате поворота вокруг оси 4_1 она становится b_z и смещается на ¼ по :

$4 \circlearrowleft\ a_z[xy0] = b_z\ [xy\frac{1}{4}]$.

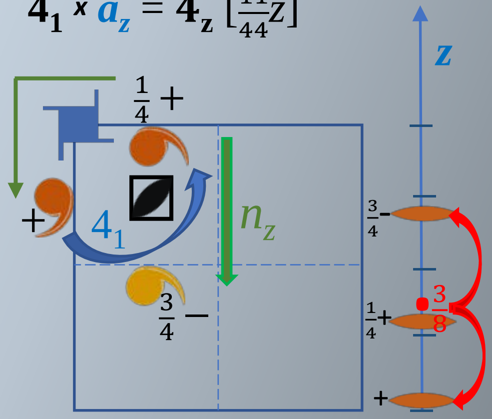
Тот же результат можно получить взаимодействием a_z и $\vec{T}_I$:

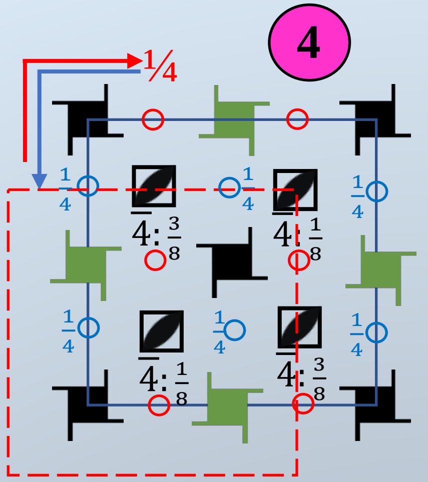
$a_z[xy0] \times \vec{T}_I = b_z\ [xy\frac{1}{4}]$



3. В результате взаимодействия 4_1 и плоскость $a_z(b_z)$ возникают инверсионные оси $\bar{4}$: с особой точкой в позиции $[\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{8}]$ и $[\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{8}]$:

$4_1 \times a_z = \bar{4}_z\ [\frac{1}{4}\frac{1}{4}z]$





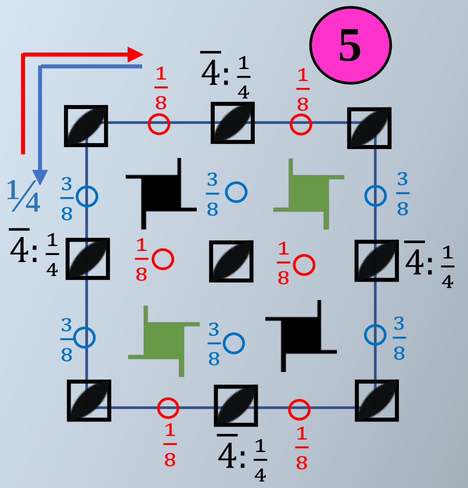
4. В результате взаимодействия осей $2_1(4_1)$, $2_1(4_3)$, возникают центры инверсии:

$2_1(4_1) \times a_z = \bar{1}[\frac{1}{4}0\frac{1}{4}]$,

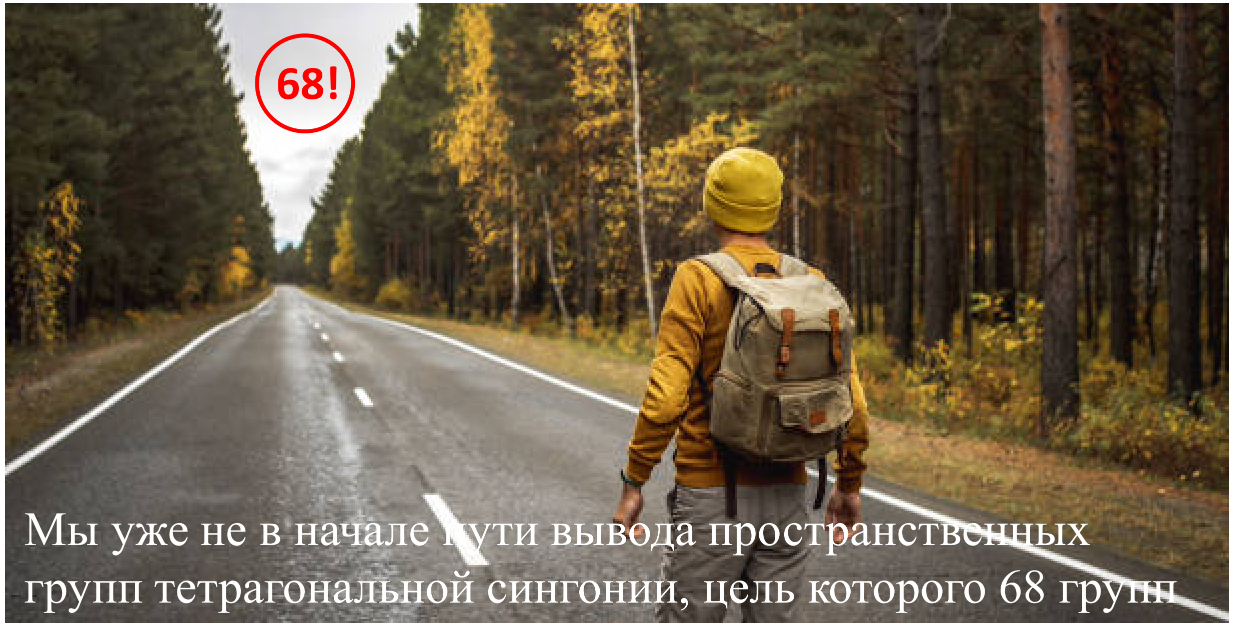
$2_1(4_3) \times a_z = \bar{1}[\frac{1}{4}\frac{1}{2}\frac{1}{4}]$

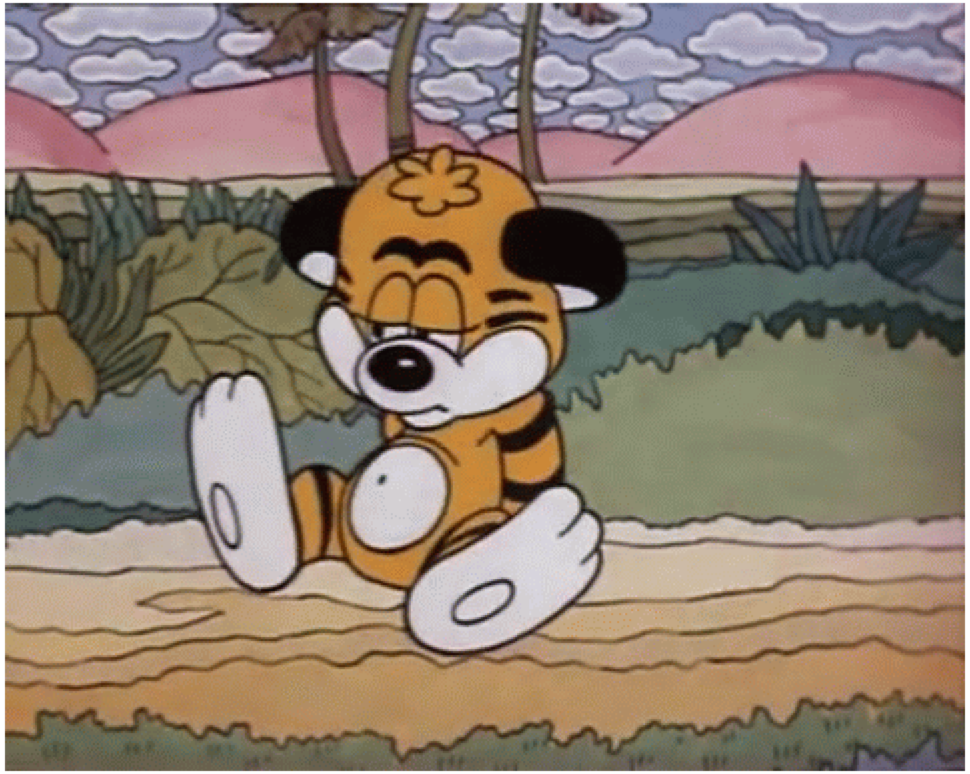
$2_1(4_1) \times b_z[xy\frac{1}{4}] = \bar{1}[0\frac{1}{4}0]$

$2_1(4_3) \times b_z[xy\frac{1}{4}] = \bar{1}[0\frac{3}{4}\frac{1}{4}]$



5. В этой группе две абсолютно неподвижные точки (ЧСС=0): особая точка $\bar{4}$ (ВСП=4) и $\bar{1}$ (ВСП=2). Начало координат следует выбирать в особой точке. Но вполне допустимо выбрать начало координат и в центре инверсии. В интернациональных таблицах приведены оба варианта.



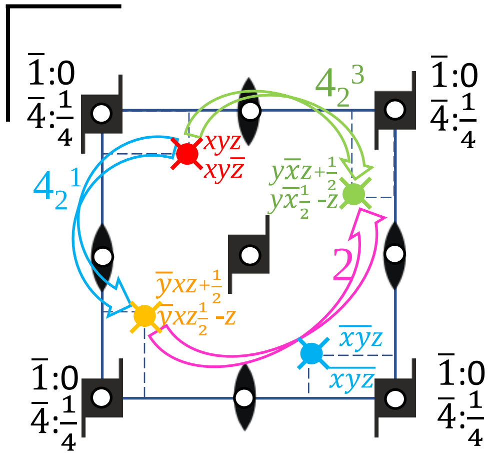


Фактор-группа	4	$\bar{4}$	4*mm*	4/*m*	ИТОГО
P	4	1	8	4	**17**
C	-	-	-		**0**
***A*(*B*)**	-	-	-		**0**
F	-	-	-		**0**
I	2	1	4	2	**9**
ИТОГО	**6**	**2**	**12**	**6**	**26**

Еще 6 групп

Уже 26! Это больше трети!

ПОСТРОЕНИЕ КВАДРАТА КЕЙЛИ ДЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ $P4_2/m$



$$\begin{array}{ccccc} 4_2^{\,1} & & 2_z & & 4_2^{\,3} \\ \begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \tfrac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} & \times & \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} & = & \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccc} 2_z & & 4_2^{\,1} & & 4_2^{\,3} \\ \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} & \times & \begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \tfrac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} & = & \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \end{array}$$

1	$4_2^{\,1}$	$4_2^{\,2}=2$	$4_2^{\,3}$	$\bar{4}^1$	$\bar{4}^3$	*m*	$\bar{1}$
$4_2^{\,3}$	1	$4_2^{\,1}$	2	$\bar{1}$	*m*	$\bar{4}^1$	$\bar{4}^3$
$4_2^{\,2}=2$	$4_2^{\,3}$	1	$4_2^{\,1}$	$\bar{4}^3$	$\bar{4}^1$	$\bar{1}$	*m*
$4_2^{\,1}$	2	$4_2^{\,3}$	1	*m*	$\bar{1}$	$\bar{4}^3$	$\bar{4}^1$
$\bar{4}^3$	$\bar{1}$	$\bar{4}^1$	*m*	1	2	$4_2^{\,1}$	$4_2^{\,3}$
$\bar{4}^1$	*m*	$\bar{4}^3$	$\bar{1}$	2	1	$4_2^{\,3}$	$4_2^{\,1}$
m	$\bar{4}^3$	$\bar{1}$	$\bar{4}^1$	$4_2^{\,3}$	$4_2^{\,1}$	1	2
$\bar{1}$	$\bar{4}^1$	*m*	$\bar{4}^3$	$4_2^{\,1}$	$4_2^{\,3}$	2	1

Задачу можно решить графически или аналитически (представив каждую операции симметрии в матричном виде)

ДОМАШНЯЯ РАБОТА №2

1. Нарисовать график пространственной группы
2. Обоснованно выбрать начало координат
3. Размножить и записать все координаты общей правильной системы точек.
4. Составить квадрат Кейли для данной группы

ГАНИ ТАТЬЯНА	ГЕНШПРИНГ АРСЕНИЙ	ТИМАШОВ ДАНИИЛ	ТЮТИНА СОФИЯ	ПИРНАЗАРОВА ЗУМРАТ	ПИРНАЗАРОВА КОМИЛА
$P4_2/n$	$P4_2/n$	$P4/m$	$P4/n$	$P4/m$	$P4/n$

Начинаем описывать структуры:

1	***BPO***$_4$	
2	***CaWO***$_4^*$	**Шеелит**
3	**PdS**	
4	**CuN**$_3^*$	
5	**PCl5**	

Все структуры принадлежат уже изученным классам: $\bar{4}$ и $4/m$

* Сложные структуры