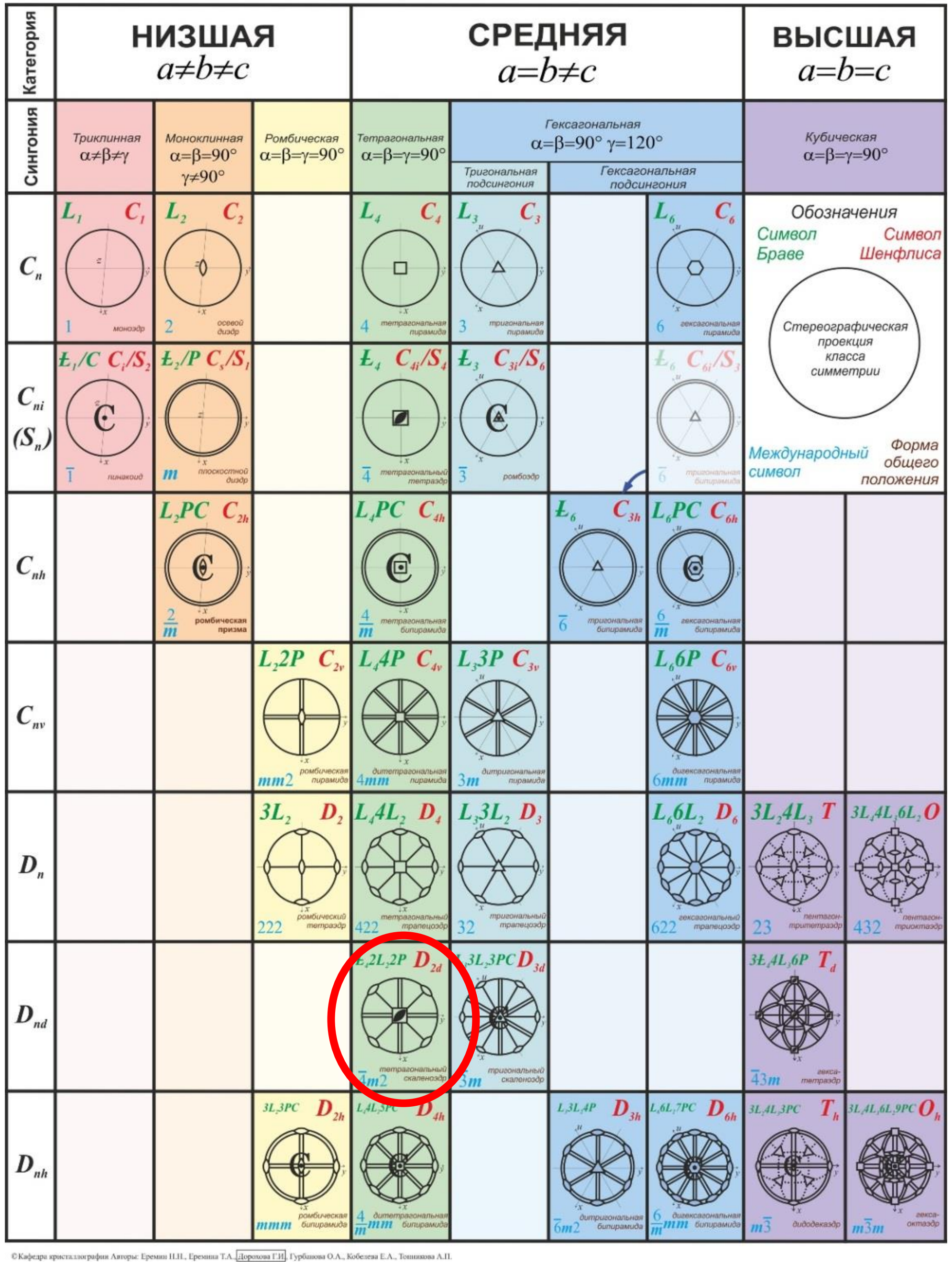
Семинар №5.
Тетрагональные группы симметрии.
Вывод пространственных групп с $\bar{4}m2$ и $\bar{4}2m$

32 КЛАССА СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ



Тетрагональная сингония относится к средней категории:

$\boldsymbol{a=b\neq c}$

$\boldsymbol{\alpha=\beta=\gamma=90°}$

В точечных приближении стандартная установка класса соответствует направлению горизонтальных координатных осей по перпендикулярам к плоскостям.

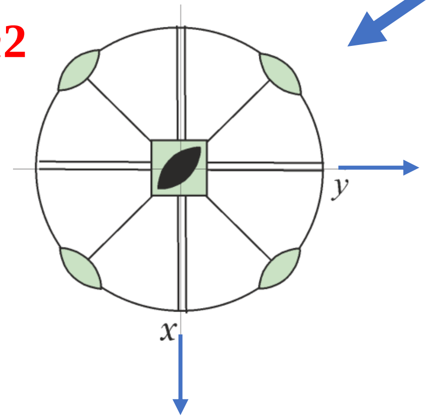
Сколько же получится пространственных групп?

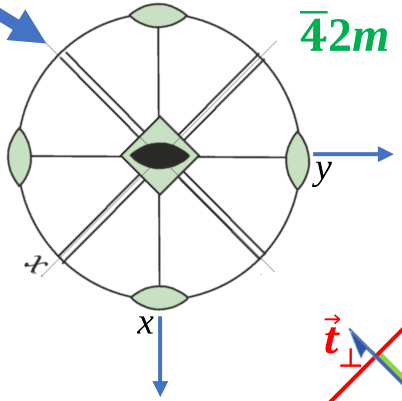
Если в точечном варианте классы $\bar{4}m2$ и $\bar{4}2m$ – разные установки одного и того же класса, то в трехмернопериодичном пространстве они порождают *разные пространственные группы*, так как элементы симметрии в них оказываются по разному ориентированы относительно координатных трансляций

Пространственные группы, подчиненные точечному классу $\bar{4}m2$ разбиваются на 2 группы

$\bar{4}m2$

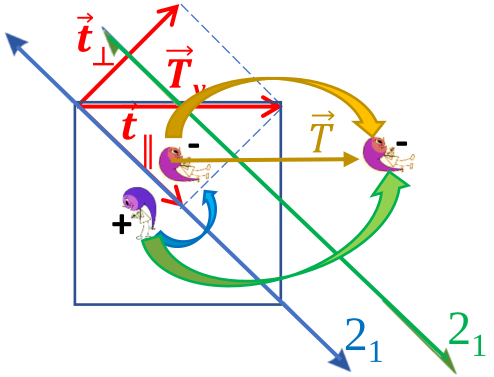
Координатные плоскости.
Диагональные плоскости

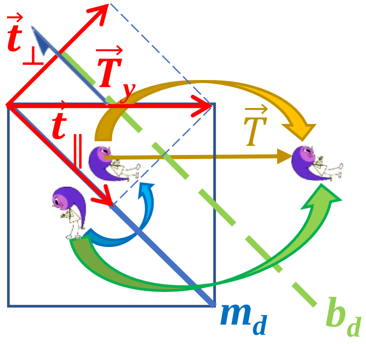


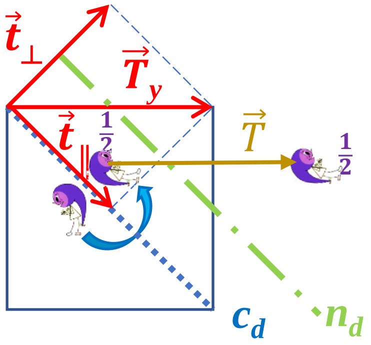


$\bar{4}2m$

Координатные оси
Диагональные плоскости







В диагональном направлении чередуются поворотные и винтовые оси 2-ого порядка: **2** и **2_1**. Плоскости не чередуются и все являются независимыми и оригинальными: ***m, b(a), c*** и ***n***.

В диагональном направлении чередуются плоскости: ***m(b)*** и ***c(n)***. Координатные оси не чередуются: **2** и **2_1** являются независимыми и оригинальными

1. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ $\bar{4}m2$ И $\bar{4}2m$ КОМБИНАТОРНЫМ МЕТОДОМ

ПРИМИТИВНЫЕ ГРУППЫ *P*-ЯЧЕЙКА

$\bar{4}m2$

0	I	II	III
P	$\bar{4}$	m	$2(2_1)$
		c	
		$b(a)$	
		n	

$\bar{4}2m$

0	I	II	III
P	$\bar{4}$	2	$c(n)$
		2_1	$m(b)$

Вертикальной *координатной плоскостью* (позиция II) может быть любая плоскость ***m***, ***c***, ***b(a)***, ***n.***
Горизонтальные *координатные оси* могут быть тоже любыми: **2 , 2_1**

На диагональной позиции (III) оригинальными будут 2 комплекса чередующихся плоскостей ***m(b)*** и ***c(n)*** за счет косо расположенной координатной трансляции или один осевой комплекс **$2(2_1)$**.

Сочетание возможных плоскостей на координатной позиции (II) с единственно возможным осевым комплексом на диагональном направлении (III) приводит к четырем пространственным группам, отвечающем классу $\bar{4}m2$

Сочетание независимых осей **2** и **2_1** на координатной позиции (II) с двумя вариантами плоскостных комплексов на диагональном направлении (III) приводит также к четырем пространственным группам, отвечающем классу $\bar{4}2m$

$P\bar{4}2m$	$P\bar{4}2c$	$P\bar{4}2_1m$	$P\bar{4}2_1c$	$P\bar{4}m2$	$P\bar{4}c2$	$P\bar{4}b2$	$P\bar{4}n2$

1. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ $\bar{4}m2$ И $\bar{4}2m$ КОМБИНАТОРНЫМ МЕТОДОМ

Группы с *I*-ЯЧЕЙКОЙ

$\bar{4}m2$

0	I	II	III
I	$\bar{4}$	$m(n)$	$2(2_1)$
		$c(b)$	

$\bar{4}2m$

0	I	II	III
I	$\bar{4}$	$2(2_1)$	$m{\equiv}n(c{\equiv}b)$
			d

Вектор $\vec{T}_I$ *на координатной позиции* обеспечивает чередование плоскостей ***m*** и ***n***, а плоскостей ***c*** с плоскостями ***b***. *На диагональной позиции* взаимозависимость всех плоскостей приводит к единственному варианту: ***m≡n(c≡b)***

Вектор ***I*** в тетрагональной решетке вызывает чередование осей 2 и 2_1 как на координатных, так и на диагональных позициях

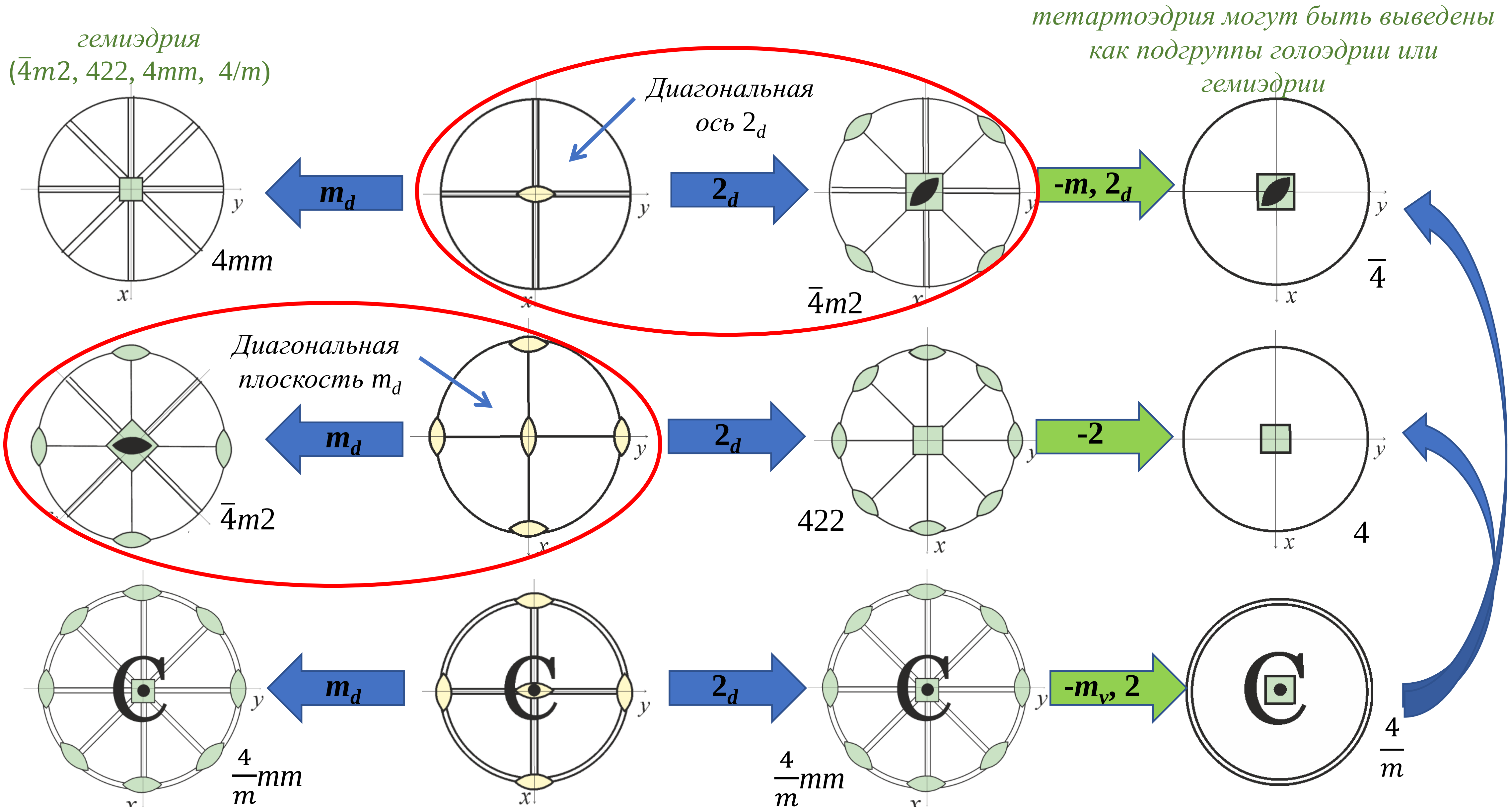
На диагональной позиции возможна плоскость ***d.***

Взаимозависимость возможных элементов симметрии приводит к четырем пространственным группам тетрагональной гемиэдрии $\mathbf{\bar{4}m2}$ $\mathbf{(\bar{4}2m)}$ с ***I***-решеткой:

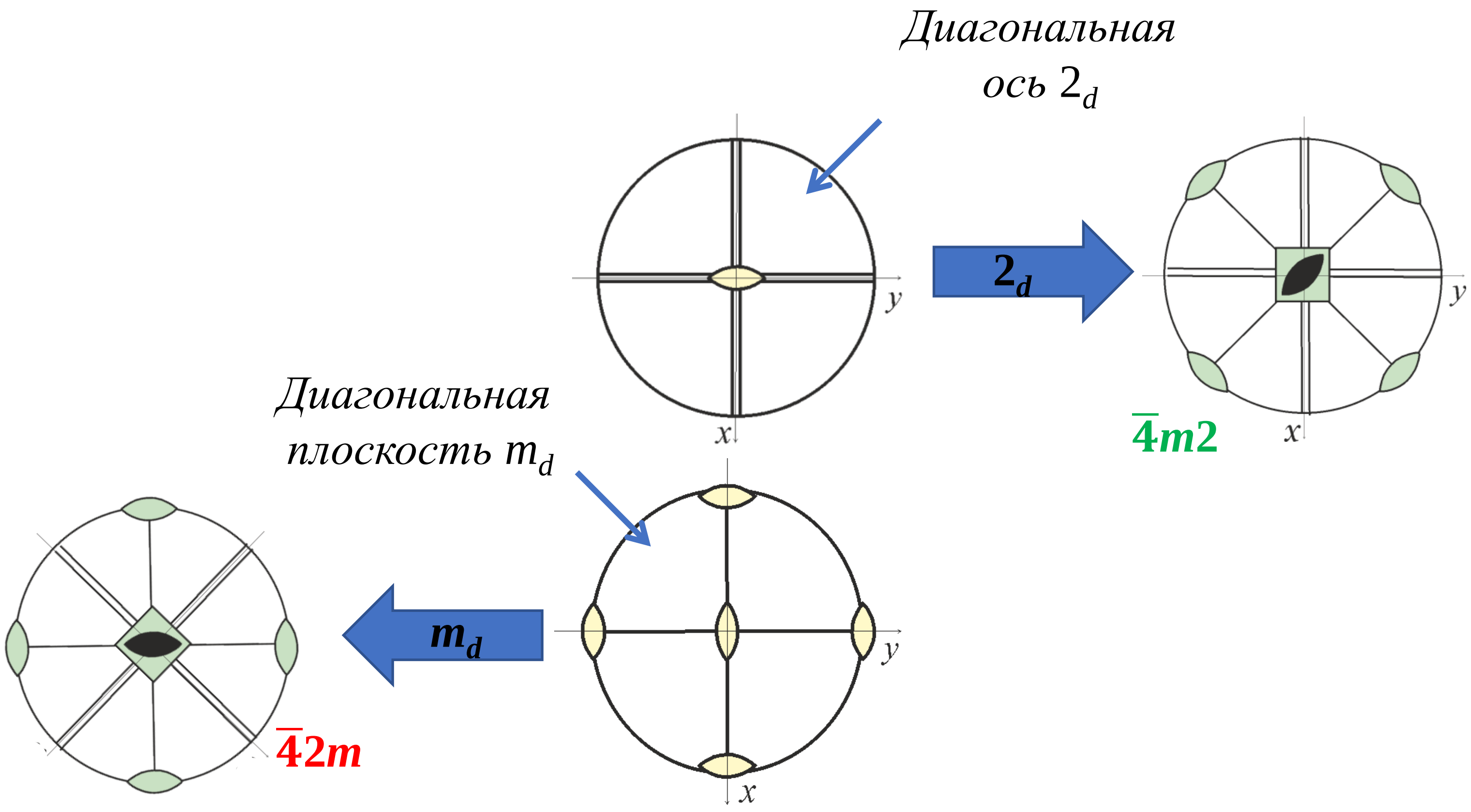
$I\bar{4}m2$	$I\bar{4}c2$	$I\bar{4}2m$	$I\bar{4}2d$

2. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ $\bar{4}m2$ И $\bar{4}2m$ 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 повышает ось **2** до оси **4**



2. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ $\bar{4}m2$ И $\bar{4}2m$ МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ



Классы $\bar{4}m2$ и $\bar{4}2m$ можно получить из ромбических классов $mm2$ и 222 методом тетрагонализации, вводя в диагональное положение либо ось 2 (2_1), либо плоскости m или c соответственно.

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ $\bar{4}2m$ $\bar{4}m2$ МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

$Pmm2$	$Imm2$
$Pnn2$	$Ima2$
$Pmn2_1$	$Iba2$
$Pma2$	$Cmm2$
$Pmc2_1$	$Cmc2_1$
$Pna2_1$	$Ccc2$
$Pnc2_1$	$Fmm2$
$Pca2_1$	$Fdd2$
$Pba2$	$Amm2$
$Pcc2$	$Abm2$
	$Ama2$
	$Aba2$

$\mathbf{Pmm2} + 2_d \rightarrow \mathbf{P\bar{4}m2}$

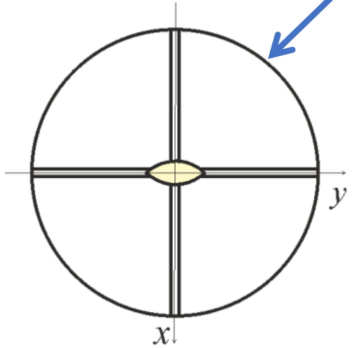
Для тетрагонализации пригодны только ромбические группы с однотипными вертикальными плоскостями, а также с топологически эквивалентными для горизонтальных координатных осей центрировками:

$+2_d\,(2_1)$

Выведенные тетрагональные группы		Исходные ромбические группы
$P\bar{4}m2$ ←		$Pmm2$
$P\bar{4}n2$ ←		$Pnn2$
$P\bar{4}b2$ ←		$Pba2$
$P\bar{4}c2$ ←		$Pcc2$
$I\bar{4}m2$ ←		$Imm2$
$I\bar{4}b2$ ←		$Iba2$
$P\bar{4}2m$ ←	$C4m2$ ←	$Cmm2$
$P\bar{4}2c$ ←	$C4c2$ ←	$Ccc2$
$I\bar{4}2m$ ←	$F4m2$ ←	$Fmm2$
$I\bar{4}2d$ ←	$F4_1d2$ ←	$Fdd2$

относятся к классу $\bar{4}2m$

Диагональная ось $\mathbf{2_d}$ $(\mathbf{2_{1d}})$



Получается 6 пространственных групп тетрагональной гемиэдрии **4m2**

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГЕМИЭДРИИ $\bar{4}2m$ $\bar{4}m2$ МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

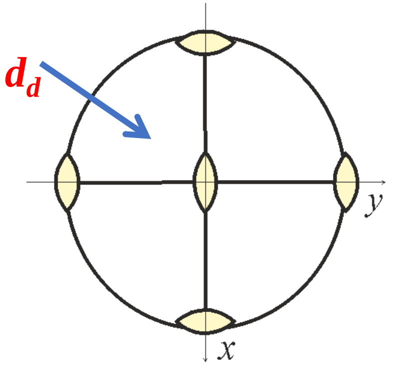
$P222 + m_d \rightarrow P\bar{4}2m_d$

Для тетрагонализации пригодны все осевые ромбические группы.

Для получения групп $\bar{4}2m$ в диагональное положение можно вводить плоскости m_d, c_d, или d_d (только при I-ячейке)

Выведенные тетрагональные группы	$+m_d\,(b_d)$	Исходные ромбические группы	$+c_d\,(n_d)$	Выведенные тетрагональные группы	
$P\bar{4}2m$	←	$P222$	→	$P\bar{4}2c$	
$P\bar{4}2_1m$	←	$P2_12_12$	→	$P\bar{4}2_1c$	
$P\bar{4}2m$	←	$P222_1$	→	$P\bar{4}2c$	
$P\bar{4}2_1m$	←	$P2_12_12_1$	→	$P\bar{4}2_1c$	
$I\bar{4}2m$	←	$I222$	→	$I\bar{4}2m$	$m\equiv n$
$I\bar{4}2m$	←	$I222_1$	→	$I\bar{4}2m$	$(c\equiv b)$
$P\bar{4}m2$ ← $C\bar{4}2m$	←	$C222$	→	$C\bar{4}2c$ → $P\bar{4}c2$	относятся к
$P\bar{4}m2$ ← $C\bar{4}2_1m$	←	$C2_12_12$	→	$C\bar{4}2_1c$ → $P\bar{4}c2$	классу $\bar{4}m2$
$I\bar{4}m2$ ← $F\bar{4}2m$	←	$F222$	→	$F\bar{4}2c$ → $I\bar{4}m2$	$m\equiv n$ $(c\equiv b)$

Диагональная плоскость m_d, c_d, или d_d



$+d_d$

$I222 \rightarrow I\bar{4}2d$

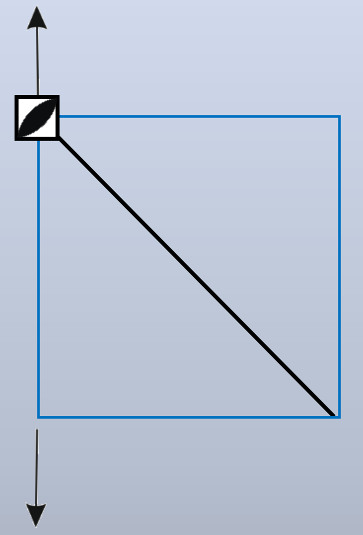
$I222_1 \rightarrow I\bar{4}2d$

$F222 \rightarrow F\bar{4}2d \rightarrow$

За вычетом повторов повтор получаем 6 пространственных групп тетрагональной гемиэдрии $\bar{4}2m$

Этапы построения графика пространственной группы $P\bar{4}2m$

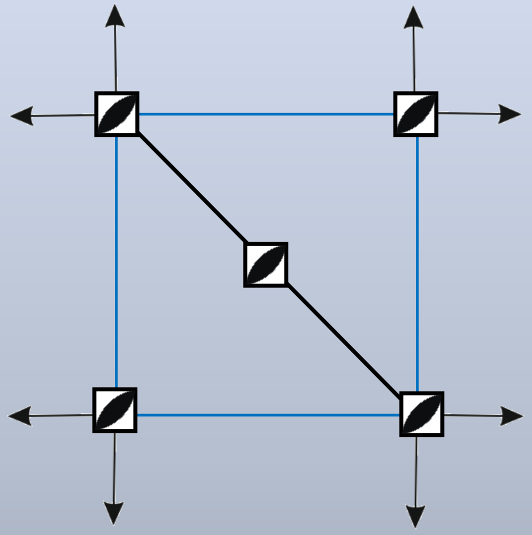
1



Координатная ось **2** и диагональная плоскость ***m***., пересекающиеся под углом 45° порождают инверсионную ось $\bar{4}$:

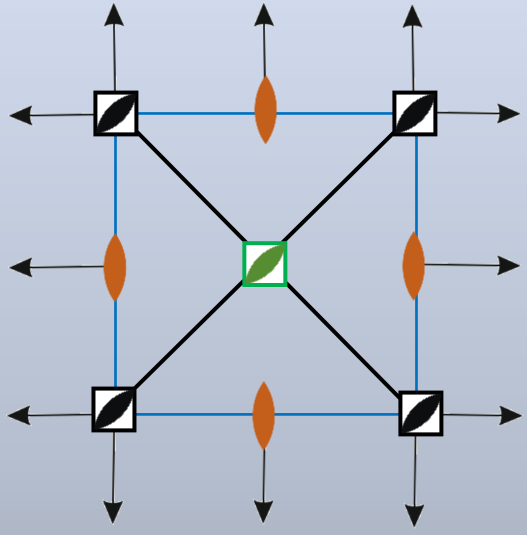
$2 \times m = \bar{4}$ [000]

2



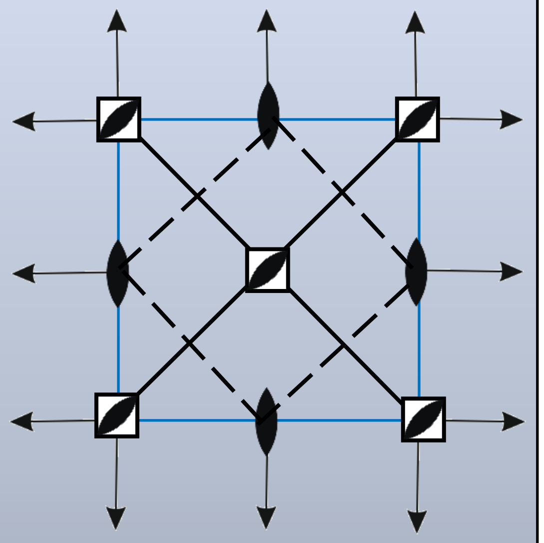
Трансляции размножают исходные оси **2** и $\bar{4}$.

3



В результате взаимодействия трансляций с осями **2** и $\bar{4}$ возникают неэквивалентные оси **2** и $\bar{4}$

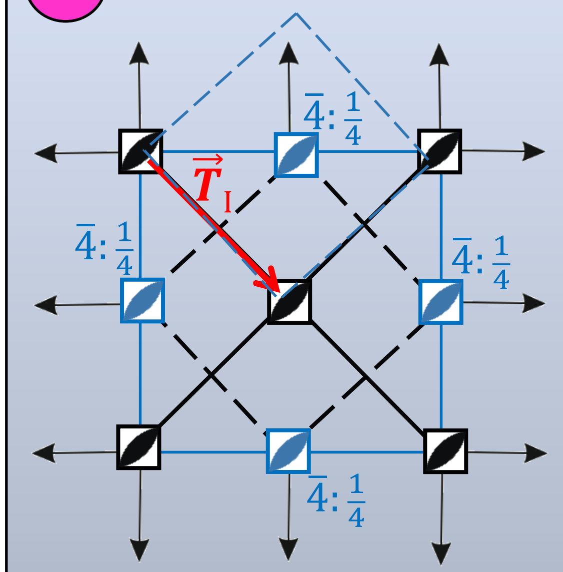
4



В результате взаимодействия трансляций с плоскостями ***m*** возникают вложенные плоскости ***b***.

Этапы построения графика пространственной группы $I\bar{4}2m$

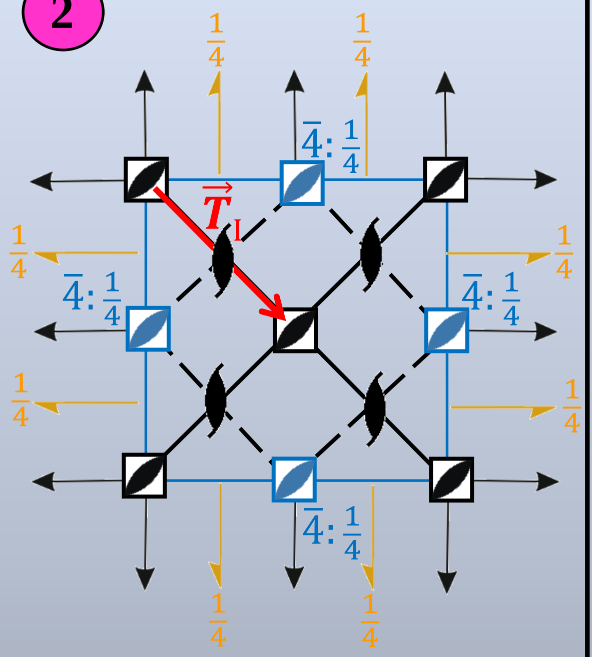
1



Вычерчиваем график пространственной группы $P\bar{4}2m$. Вводим вектор $\vec{T}_I$. Взаимодействие $\bar{4}$ с вектором $\vec{T}_I$ приводит к возникновению еще одной оси $\bar{4}$:

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

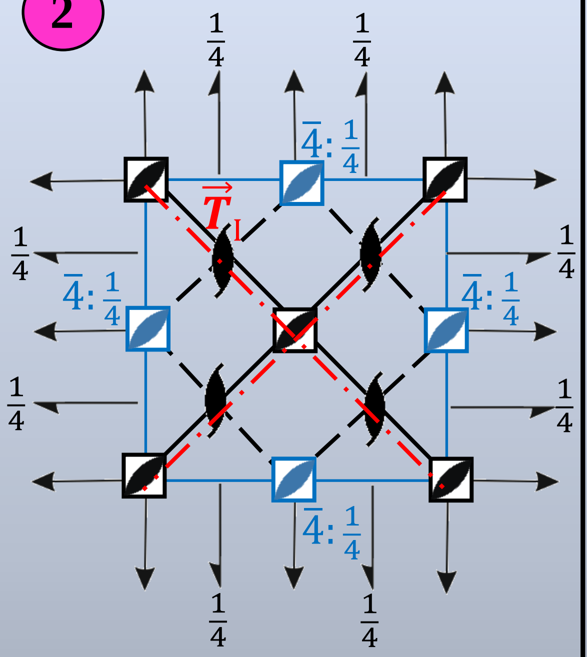
2



Взаимодействие осей 2 с вектором $\vec{T}_I$ приводит к их чередованию с осями 2_1 по всем координатным направлениям:

$$2 \times \vec{T}_I = 2_1$$

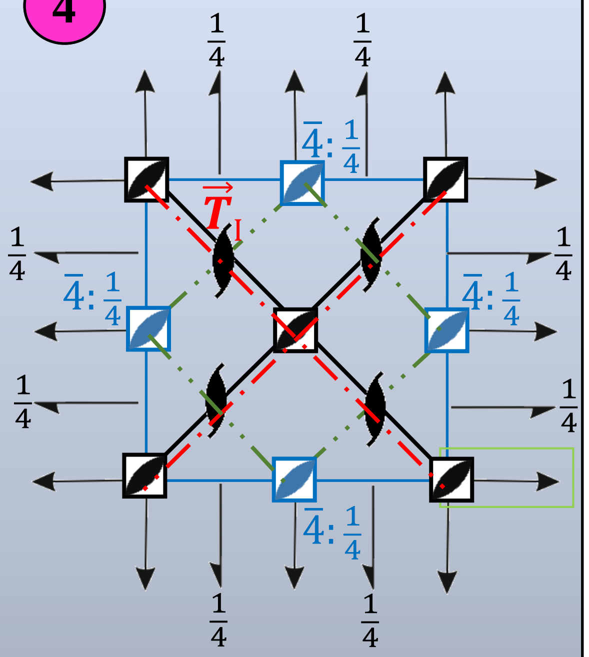
2



В результате взаимодействия трансляции $\vec{T}_I$ с плоскостью *m* возникает тождественная плоскость *n*:

$$\vec{T}_I \times m = n$$

4

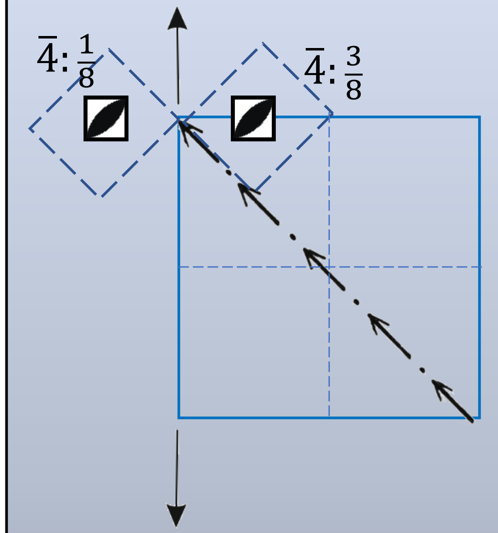


В результате взаимодействия трансляции $\vec{T}_I$ с плоскостью *b* возникает плоскость *e*:

$$\vec{T}_I \times m = e$$

Этапы построения графика пространственной группы $I\bar{4}2d$

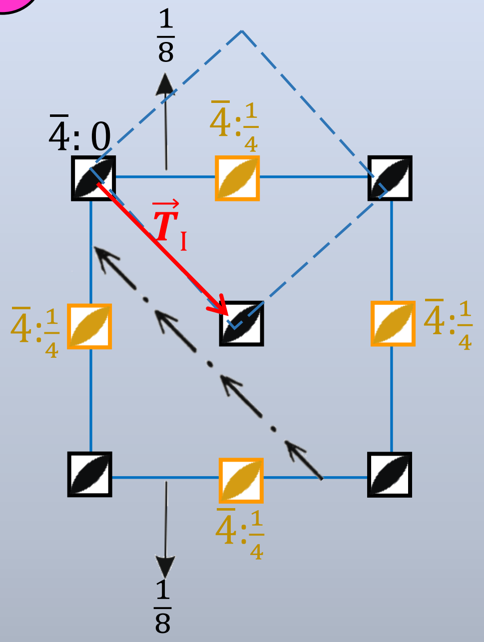
1



Координатная ось **2** и диагональная плоскость ***d***, пересекающиеся под углом 45° порождают инверсионную ось $\bar{4}$:

$$2 \times m = \bar{4}\ [0\tfrac{1}{2}\tfrac{3}{8}]$$

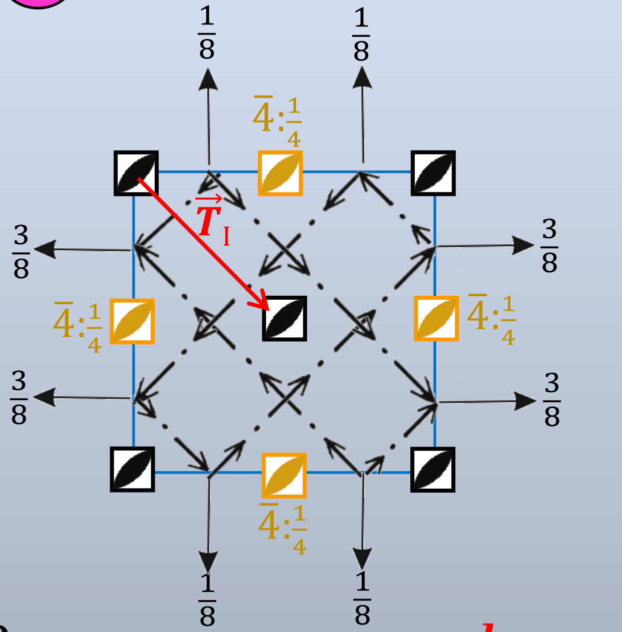
2



Смещаем начало координат в особую точку инверсионной оси $\bar{4}$. В результате взаимодействия трансляции $\vec{T}_\mathrm{I}$ и оси $\bar{4}$ возникает еще одна система осей $\bar{4}$:

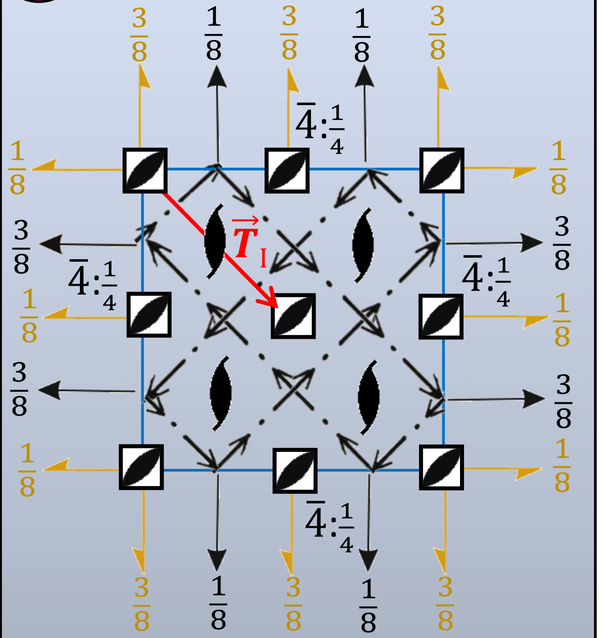
$$\bar{4} \times \vec{T}_\mathrm{I} = \bar{4}\ [0\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{4}]$$

3



Размножаем плоскости ***d***: вокруг оси $\bar{4}$ стрелочки «встречаются» и «расходятся». Ось 2_x $[\frac{1}{4}\, y\, \frac{1}{8}]$ поворачиваясь на 90°, превращается в ось 2_y $[\frac{1}{4}\, y\, \frac{3}{8}]$. Тот же эффект можно получить отражая ось 2_x $[\frac{1}{4}\, y\, \frac{1}{8}]$ в плоскости ***d***.

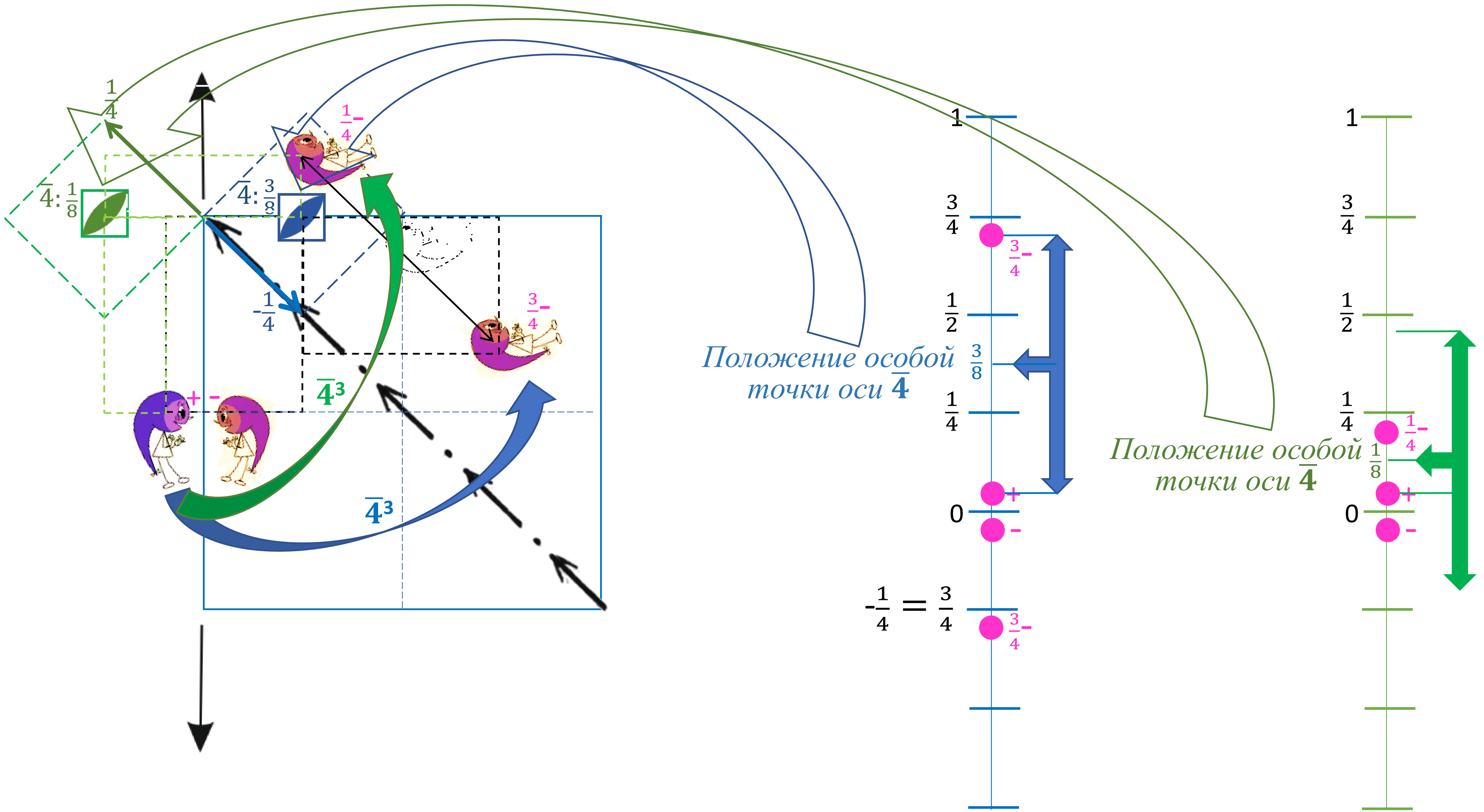
4

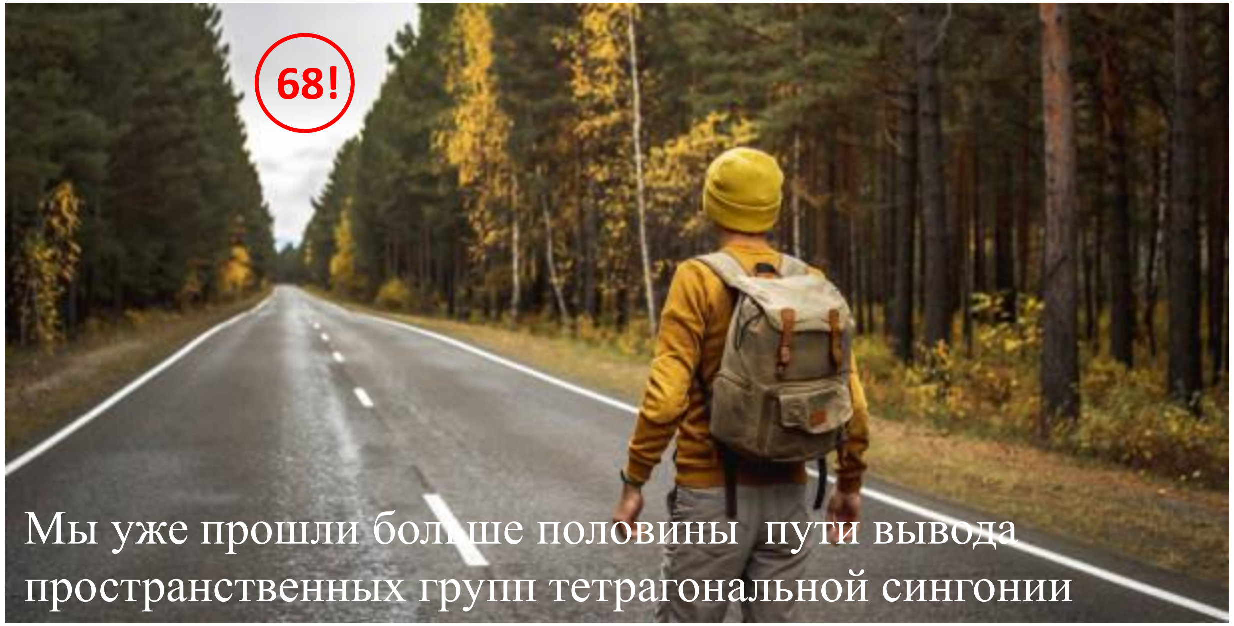


Взаимодействие осей **2** с вектором $\vec{T}_\mathrm{I}$ приводит к их чередованию с осями 2_1 по всем координатным и диагональным направлениям:

$$2 \times \vec{T}_\mathrm{I} = 2_1$$

К определению положения особой точки оси $\bar{4}$





Фактор -группа	4	$\bar{4}$	$4mm$	$4/m$	$\bar{4}m2$	ИТОГО
P	4	1	8	4	8	25
C	-	-	-	-	-	0
A(B)	-	-	-	-	-	0
F	-	-	-	-	-	0
I	2	1	4	2	4	13
ИТОГО	6	2	12	6	12	38

Еще 12 групп

Уже 38! Это больше половины:!

«Ах, боже мой, боже мой! Как я опаздываю!»

Спешите описывать структуры:

BPO_4	
$CaWO_4^*$	**Шеелит**
PdS	
CuN_3^*	
PCl5	
$CuFeS_2$	**Халькопирит**
Cu_2FeSnS_4	**Станнин**
Ag_2HgI_4	