

Семинар №8.
Тетрагональные группы симметрии.
Вывод пространственных групп $4/mmm$

32 КЛАССА СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

Категория	НИЗШАЯ $a \neq b \neq c$			СРЕДНЯЯ $a = b \neq c$			ВЫСШАЯ $a = b = c$	
	Сингония	Триклинная $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	Моноклиная $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma \neq 90^\circ$	Ромбическая $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Тетрагональная $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Гексагональная $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$		Кубическая $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
					Тригональная подсингония	Гексагональная подсингония		
C_n	$L_1 C_1$ 	$L_2 C_2$ 		$L_4 C_4$ 	$L_3 C_3$ 	$L_6 C_6$ 	Обозначения Символ Браве Символ Шенфлиса Стереографическая проекция класса симметрии	
C_{ni} (S_n)	$L_1/C C_1/S_2$ 	$L_2/P C_2/S_1$ 		$L_4 C_4/S_4$ 	$L_3 C_3/S_6$ 	$L_6 C_6/S_3$ 		Международный символ Форма общего положения
C_{nh}		$L_2PC C_{2h}$ 		$L_4PC C_{4h}$ 	$L_3PC C_{3h}$ 	$L_6PC C_{6h}$ 		
C_{nv}			$L_2P C_{2v}$ 	$L_4P C_{4v}$ 	$L_3P C_{3v}$ 	$L_6P C_{6v}$ 		
D_n			$3L_2 D_2$ 	$4L_4 D_4$ 	$3L_3 D_3$ 	$6L_6 D_6$ 	$3L_4 L_3 T$ 	$3L_4 L_6 L_3 O$
D_{nd}				$L_2 L_2 P D_{2d}$ 	$L_3 L_3 P D_{3d}$ 		$3L_4 L_6 P T_d$ 	
D_{nh}			$3L_3 P C D_3$ 	$4L_4 S P C D_{4h}$ 	$L_3 L_4 P D_{3h}$ 	$L_6 L_7 P C D_{6h}$ 	$3L_4 L_3 P C T_h$ 	$3L_4 L_6 L_3 P C O_h$

Тетрагональная сингония относится к средней категории:

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Голоэдрическая тетрагональная группа в точечных приближении:

$$4/m\bar{m}2$$

Сколько же получится пространственных групп?



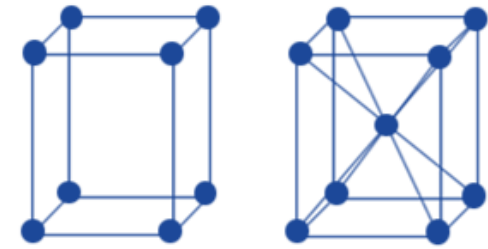
ОТКРЫТЫЕ СЛОЖНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ. ПЛОСКОСТИ

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

Типы решёток Браве для тетрагональной сингонии



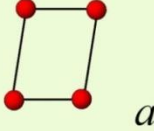
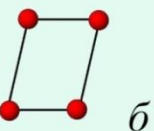
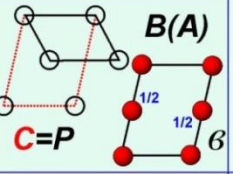
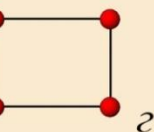
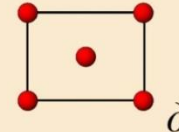
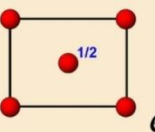
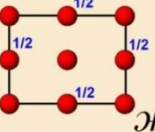
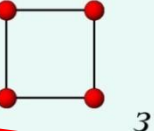
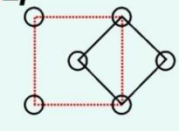
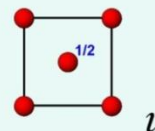
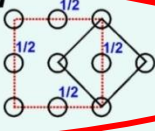
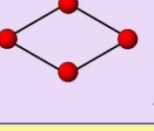

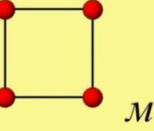
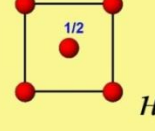
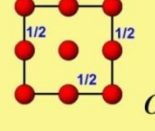
Оригинальных ячеек Браве в тетрагональной сингонии две: P и I

Симметрия тетрагональной ячейки Браве соответствует голоэдри 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 $F\bar{4}m2$

	Примитивная P -ячейка	Базо (боко-центрированная) C -ячейка (A, B)	Объемно-центрированная I -ячейка	Гране-центрированная F -ячейка
Триклинная сингония				
Моноклиная сингония				
Ромбическая сингония				
Тетрагональная сингония				
Гексагональная сингония				
				
Кубическая сингония				

1. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГОЛОЭДРИИ $4/mmm$ КОМБИНАТОРНЫМ МЕТОДОМ

ГРУППЫ С ПРИМИТИВНОЙ P -ЯЧЕЙКОЙ

0	I		II	III
	ось	ПЛОСКОСТЬ		
P	4	m	m	$c(n)$
	4_2	n	c	$m(b)$
			$b(a)$	
			n	



Характер осей 4-ого порядка (поворотная 4 , нейтральная винтовая 4_2) будет зависеть от характера порождающих ее вертикальных плоскостей (координатной и диагональной).



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 4_1 и 4_3 не встречаются в P -ячейках, так как требуют плоскости d , которая может проходить только параллельно центрированной грани

В качестве горизонтальной плоскости могут выступать только n и m

Сочетание возможных плоскостей и осей приводит к 16 группам тетрагональной голоэдри $4/mmm$ с P -решеткой:

$P4/mmm$	$P4_2/mmc$	$P4_2/mct$	$P4/mcc$	$P4_2/mbc$	$P4/mbm$	$P4/mnc$	$P4_2/mnm$
$P4/nmm$	$P4_2/nmc$	$P4_2/nct$	$P4/ncc$	$P4_2/nbc$	$P4/nbm$	$P4/nnc$	$P4_2/nnm$

1. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГОЛОЭДРИИ $4/mmm$ КОМБИНАТОРНЫМ МЕТОДОМ

ГРУППЫ С ЦЕНТРИРОВАННОЙ I-ЯЧЕЙКОЙ

$4(4_2)$ только с диагональными $m \equiv n$ ($b \equiv c$)

0	I		II	III
	ось	плоскость		
I	$4(4_2)$	$m(n)$	$m(n)$	$m \equiv n$ ($b \equiv c$)
	$4_1(4_3)$	a	$c(b)$	$d(d)$

$4_1(4_3)$ только с диагональной d

Сочетание возможных плоскостей на позициях II и III, диктующее характер результирующей оси 4-ого порядка на позиции I, приводит к 4 группам тетрагональной голоэдри $4/mmm$ с I-решеткой:

$I4/mmm$

$I4/mcm$

$I4_1/amd$

$I4_1/acd$



В I- тетрагональной решетке допустимы энантиоморфные оси 4_1 и 4_3 которые тоже могут допускать перпендикулярную плоскость. Но ей может быть только плоскость a , которая будучи размноженной энантиоморфными осями 4_1 и 4_3 , будет чередоваться с плоскостью b через $1/4$ трансляции что равносильно I-ячейке.



Вектор I вызывает чередование осей 4_1 и 4_3 , 4 и 4_2 , а также плоскостей c и b , m и n на координатных позициях



В I- тетрагональной решетке каждая из чередующихся диагональных плоскостей тождественна плоскости иного наименования:

$$m \equiv n \text{ и } b \equiv c$$

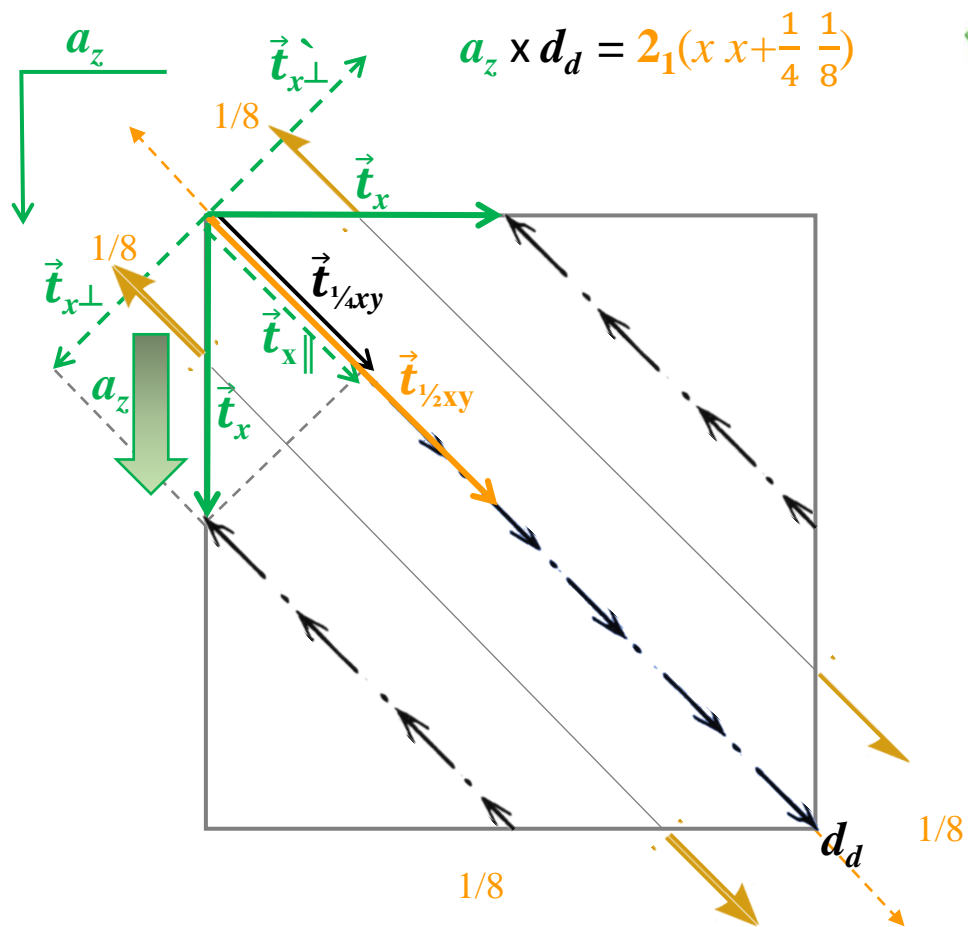


Горизонтальная плоскость сочетается только с чередующимися при I-ячейки поворотной и нейтральной осью 4-ого порядка 4 и 4_2



Горизонтальная плоскость a (b), напротив, чередуется только с чередующимися осями 4_1 и 4_3

Комбинаторный вывод пространственных ромбических групп



Наличие вектора, центрирующего диагональную (110) плоскость ячейки, делает возможным присутствие на третьей позиции символа *клиноплощности* d .



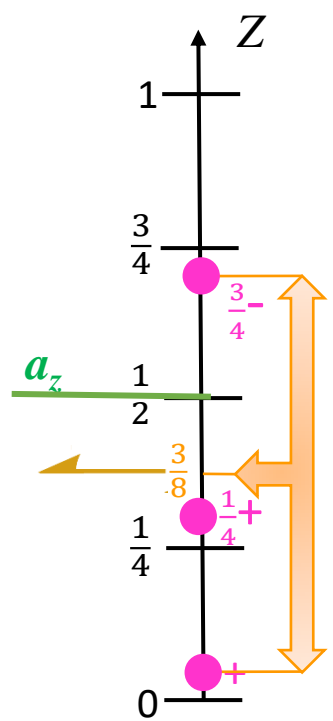
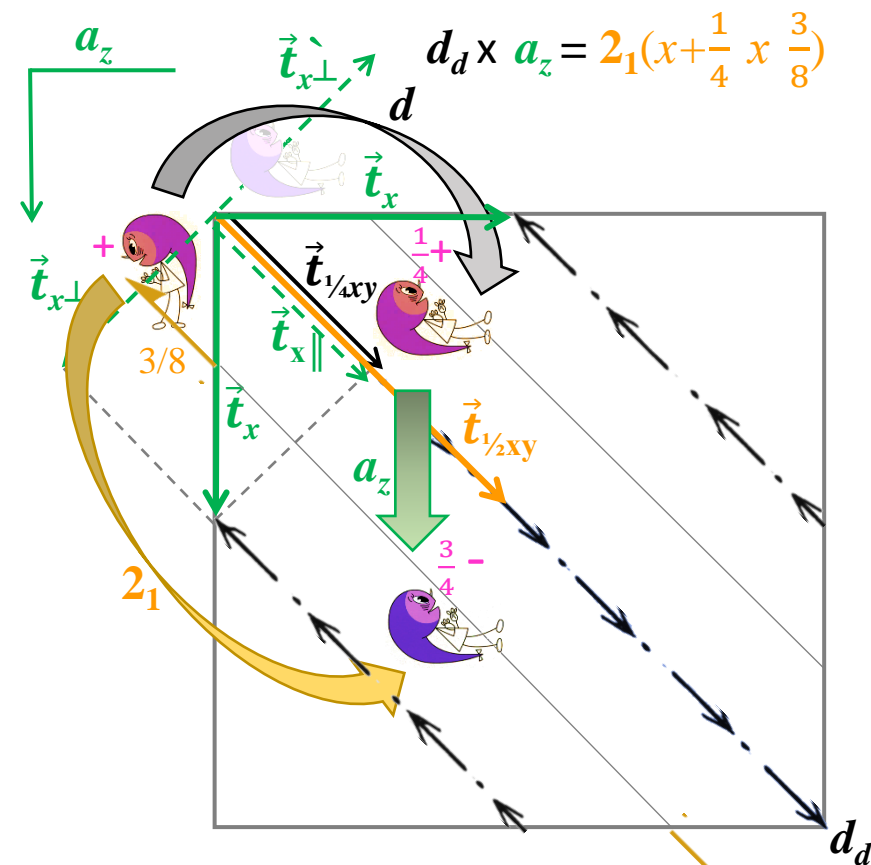
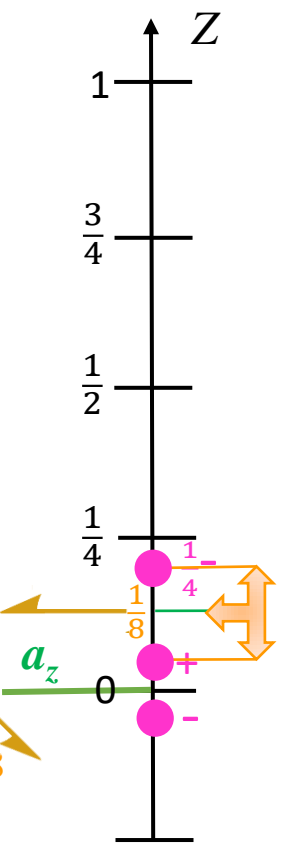
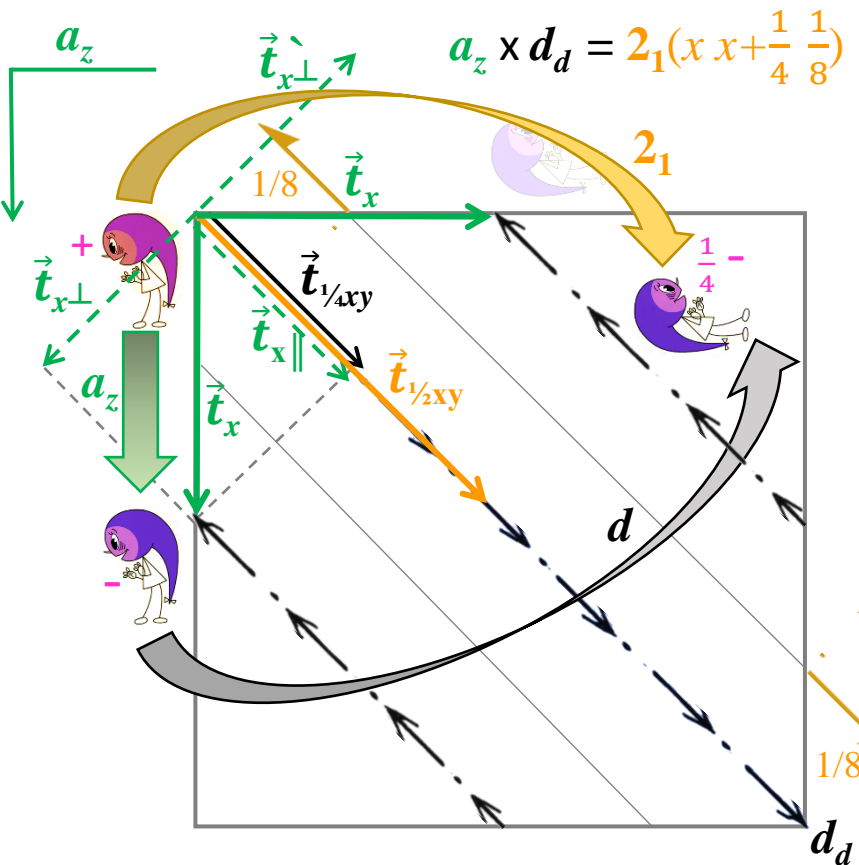
Диагональная клиноплощности d_d допускает в качестве горизонтальной плоскости только плоскость с горизонтальным скольжением $a_z(b_z)$, в результате взаимодействия которых возникают поворотные оси 2 или винтовые 2_1 . Иные горизонтальные плоскости приводят к некристаллографическим осям 2 (с недопустимым скольжением)



Появление кристаллографически допустимых горизонтальных осей 2 в случае пересечения плоскости a_z и плоскости d_d определяется соразмерностью трансляционного вектора \vec{t}_x плоскости a_z с горизонтальной составляющей трансляционного вектора \vec{t} диагональной плоскости d_d

$$a_z \times d_d = m_z \vec{t}_x (\vec{t}_{x\parallel} + \vec{t}_{x\perp}) \quad m_d \vec{t}_d (\vec{t}_{1/4xy} + \vec{t}_{1/4z}) = 2(xx0) \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{x\perp} \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{1/4z} = 2(xx0) \vec{t}_{1/2xy} \vec{t}_{x\perp} \vec{t}_{1/4z} = 2_{1xy}(xx0) \vec{t}_{x\perp} \vec{t}_{1/4z} = 2_1(x \ x + \frac{1}{4} \ \frac{1}{8})$$

$\vec{t}_{1/4xy} \quad \vec{t}_{1/4xy}$

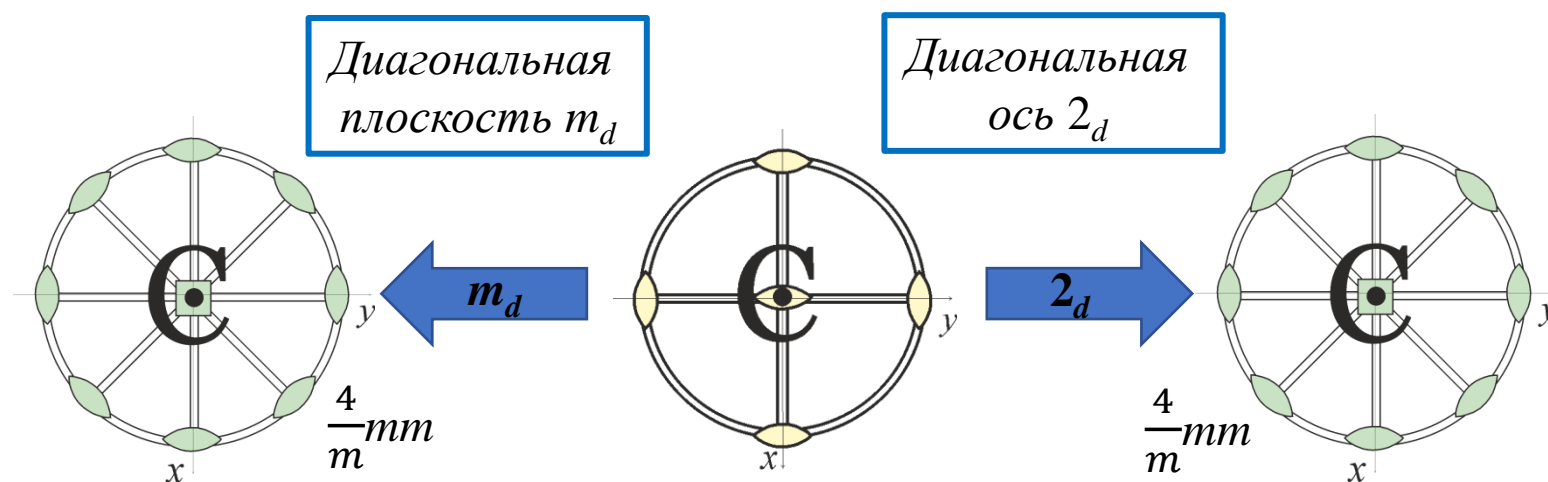


$$a_z \times d_d = m_z \vec{t}_x (\vec{t}_{x\parallel} + \vec{t}_{x\perp}) m_d \vec{t}_d (\vec{t}_{1/4xy} + \vec{t}_{1/4z}) = 2(xx0) \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{x\perp} \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{1/4z} = 2(xx0) \vec{t}_{1/2xy} \vec{t}_{x\perp} \vec{t}_{1/4z} = 2_{1xy}(xx0) \vec{t}_{x\perp} \vec{t}_{1/4z} = 2_1(x x + \frac{1}{4} \frac{1}{8})$$

$$d_d \times a_z = m_d \vec{t}_d (\vec{t}_{1/4xy} + \vec{t}_{1/4z}) m_z \vec{t}_x (\vec{t}_{x\parallel} + \vec{t}_{x\perp}) = 2(xx0) \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{x\perp} \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{1/4z} = 2(xx0) \vec{t}_{1/2xy} \vec{t}_{x\perp} \vec{t}_{1/4z} = 2_1(xx0) \vec{t}_{x\perp} - \vec{t}_{1/4z} = 2_1(x + \frac{1}{4} x \frac{3}{8})$$

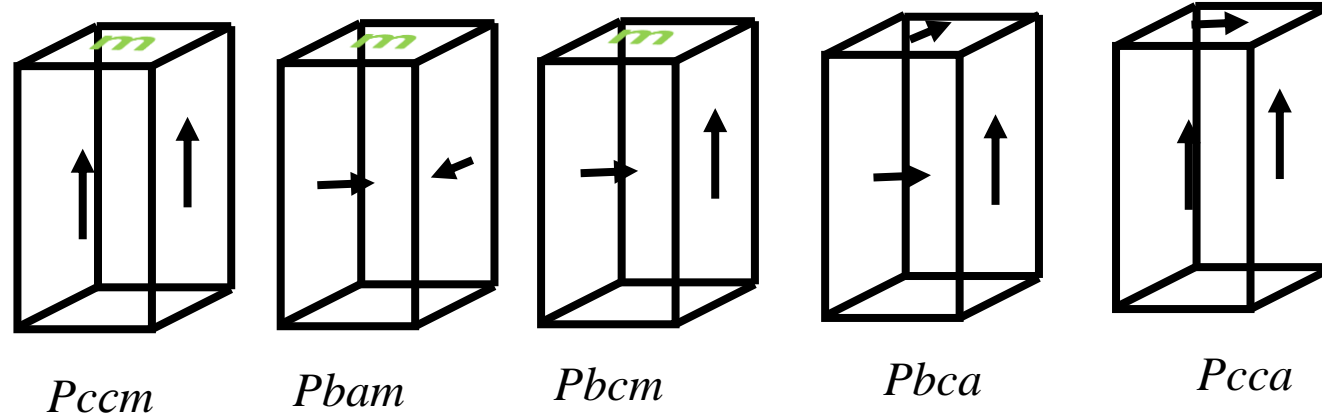
2. ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГОЛОЭДРИИ $4/mmm$ МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

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)



Для тетрагонализации подходят только пространственные группы ромбической сингонии с двумя однотипными плоскостями (в первой и второй позиции символа). Всего голоэдрических пространственных групп – 16, из них подходят 1:

Pmmm, Pccm, Pnmm, Pbam, Pmmn, Pccn, Pnnn, Pban, Pmma, Pcca, Pnna



Только «удобные» плоскости	Одна «неудобная» плоскость	Две «неудобные» плоскости	Три «неудобные» плоскости
<i>Pmmm Pmmn Pnnn Pnmm</i>	<i>Pmma Pnna Pnma Pmna</i>	<i>Pccm Pccn Pbam Pban</i>	<i>Pbcm Pbcn Pcca Pbca</i>
😊😊😊😞	😱😱😞😞	😊😊😊😊	😞😞😱😞



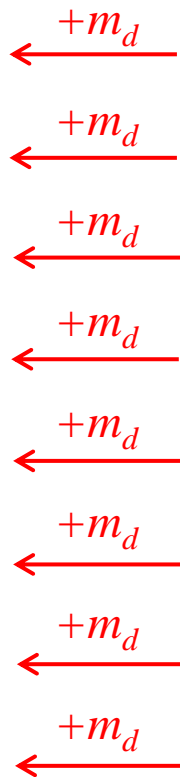
Тетрагонализации пространственных ромбических групп *Pmma, Pcca, Pnna* оригинальных классов не дает, поскольку горизонтальная плоскость *a* приводит к появлению базецетрированной ячейки *C*, которая в тетрагональной сингонии сводится к *P*-ячейке меньшего объема.



ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГОЛОЭДРИИ P_m^4mm МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

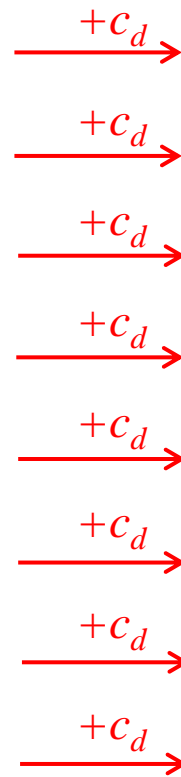
Выведенная тетрагональная группа

P_m^4mm
$P_n^{4_2}nm$
$P_m^{4_2}cm$
P_n^4bm
P_n^4mm
$P_m^{4_2}nm$
$P_n^{4_2}cm$
P_m^4bm



Исходная ромбическая группа

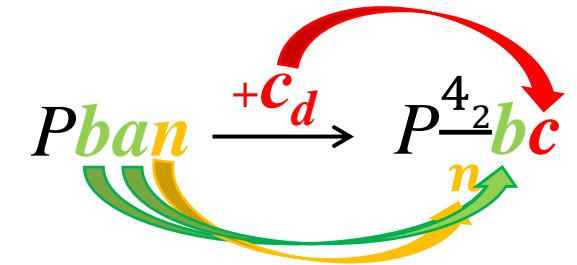
$Pmmm$
$Pnnn$
$Pccm$
$Pban$
$Pmmn$
$Pnnt$
$Pccn$
$Pbat$



Выведенная тетрагональная группа

$P_m^{4_2}mc$
P_n^4nc
P_m^4cc
$P_n^{4_2}bc$
$P_n^{4_2}mc$
P_m^4nc
P_n^4cc
$P_m^{4_2}bc$

Категория	Позиция символа		
	I	II	III
	Особые не эквивалентные направления		
Низшая ($a \neq b \neq c$)	X	Y	Z
Средняя ($a = b \neq c$)	Z	X = Y (=U)	$\alpha/2$
Высшая ($a = b = c$)	X = Y = Z	3(или $\bar{3}$)	$\alpha/2$



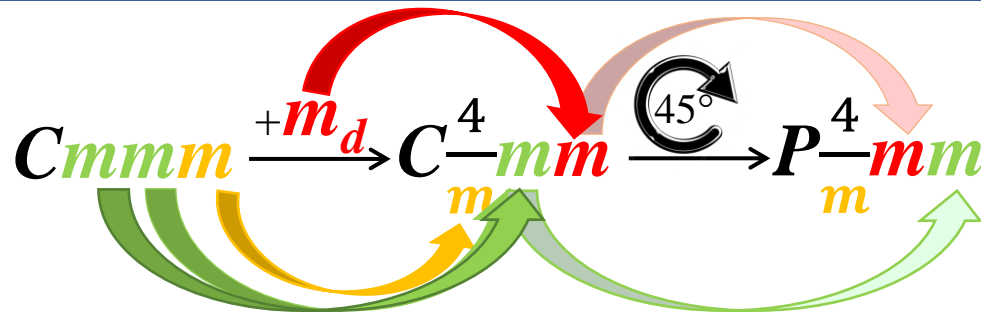
Переход от ромбического к тетрагональному аспекту меняет порядок записи международного символа

Характер осей 4-ого порядка (4 или 4_2), зависит от порождающих вертикальных плоскостей (под 45°) (II и III позиция):

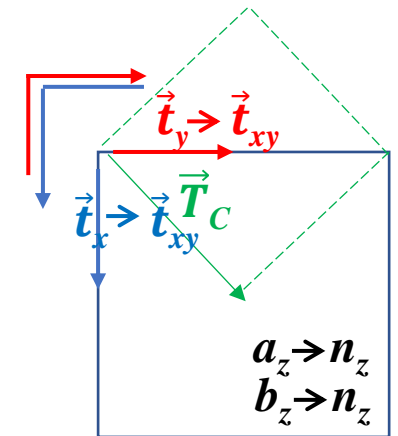
$$m \times m = 4; m \times c = 4_2$$

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГОЛОЭДРИИ МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

$Cmmm$	$Ccct$	$Cmct$	$Cmte$	$Cmce$	$Ccce$
					



Выведенная тетрагональная группа	←	Тетрагональная группа в C-установке	←	Исходная ромбическая группа	→	Тетрагональная группа в C-установке	→	Выведенная тетрагональная группа
P^4_{m2}	←	C^4_{mm}	←	$Cmmm$	→	C^4_{2m}	→	P^4_{m2}
P^4_n	←	C^4_{em}	←	$Cmte$	→	C^4_{2e}	→	P^4_n
P^4_{2m}	←	C^4_{2m}	←	$Ccct$	→	C^4_{m}	→	P^4_{2m}
P^4_{2n}	←	C^4_{2e}	←	$Ccce$	→	C^4_e	→	P^4_{2n}



Плоскость e_z ($b_z \equiv a_z$) при переходе от C к P -ячейке превращается в плоскость n_z

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГОЛОЭДРИИ МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

*I*mmm



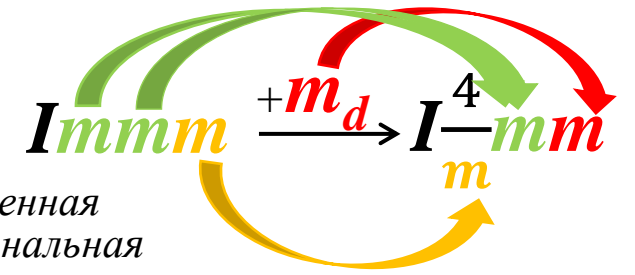
*I*mma



*I*bam



*I*bca



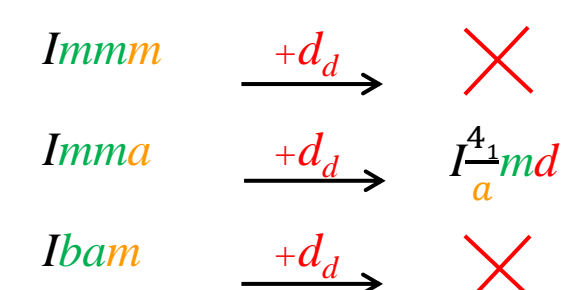
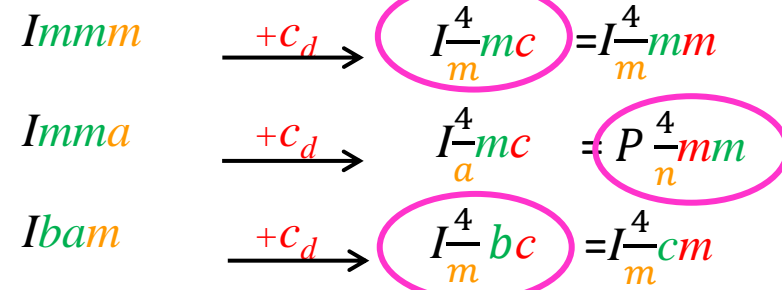
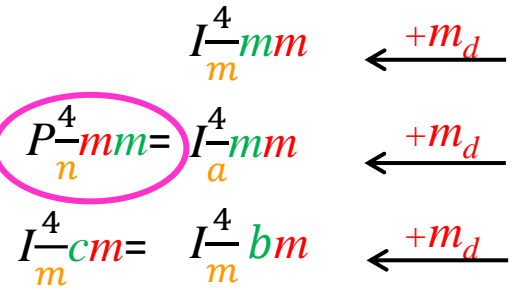
Выведенная
тетрагональная
группа

Исходная
ромбическая
группа

Выведенная
тетрагональная
группа

Исходная
ромбическая
группа

Выведенная
тетрагональная
группа

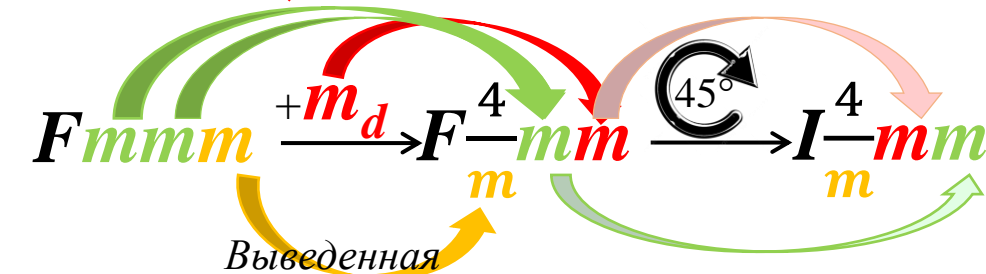


повтор

*F*ddd



*F*mmm



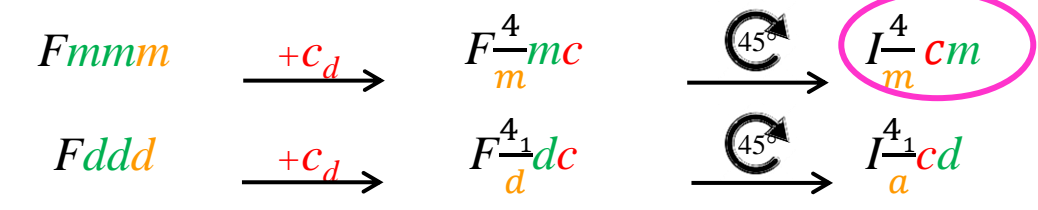
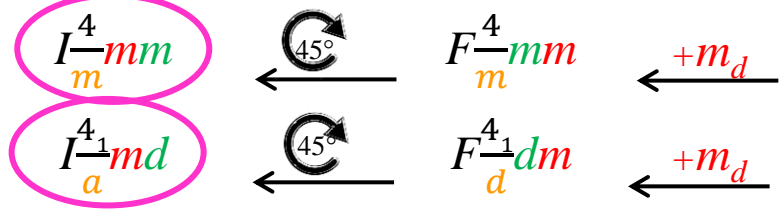
Выведенная
тетрагональная
группа

Тетрагональная
группа в
C-установке

Исходная
ромбическая
группа

Тетрагональная
группа в
C-установке

Выведенная
тетрагональная
группа



кристаллографически
недопустимо

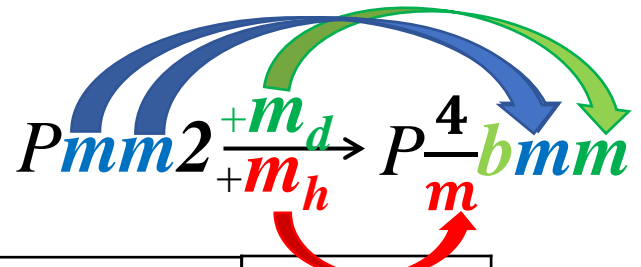
При переходе от *F*-ячейки к *I*-ячейке плоскость *d_z* превращается в плоскость *a_z*

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГОЛОЭДРИИ МЕТОДОМ ТЕТРАГОНАЛИЗАЦИИ

- ✓ Тетрагонализация групп C_{4ttt} , C_{4tta} , C_{4sst} , C_{4sse} не приводит к оригинальным тетрагональным группам
- ✓ Группы C_{4stt} , C_{4tsa} и I_{4bca} нельзя тетрагонализировать из-за неоднотипности плоскостей
- ✓ Из трех возможных для тетрагонализации I -ромбических групп получаются только 2 оригинальные тетрагональные группы..
- ✓ Тетрагонализация F -ромбических групп дает еще 2 оригинальные тетрагональные группы

ВЫВОД ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ГОЛОЭДРИИ ИЗ ГЕМИЭДРИИ $4mm$

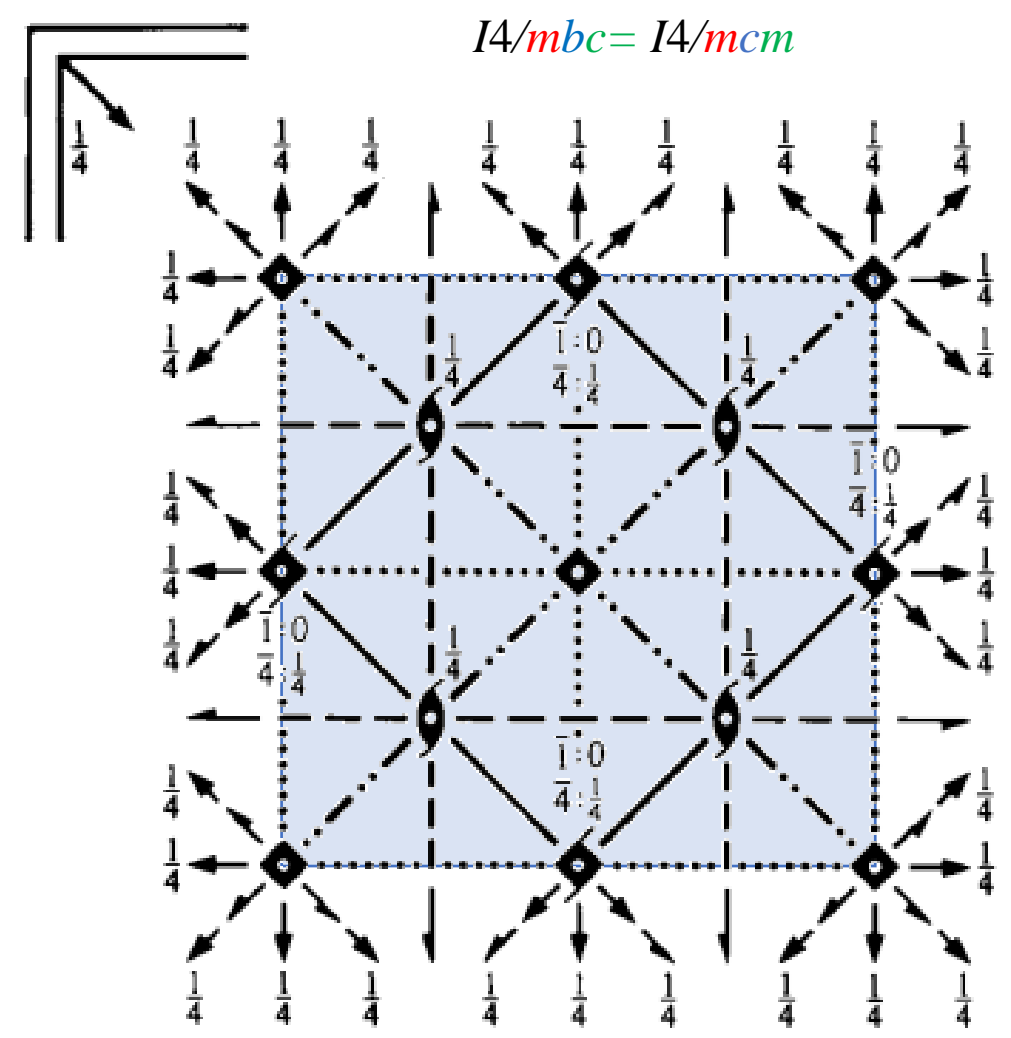
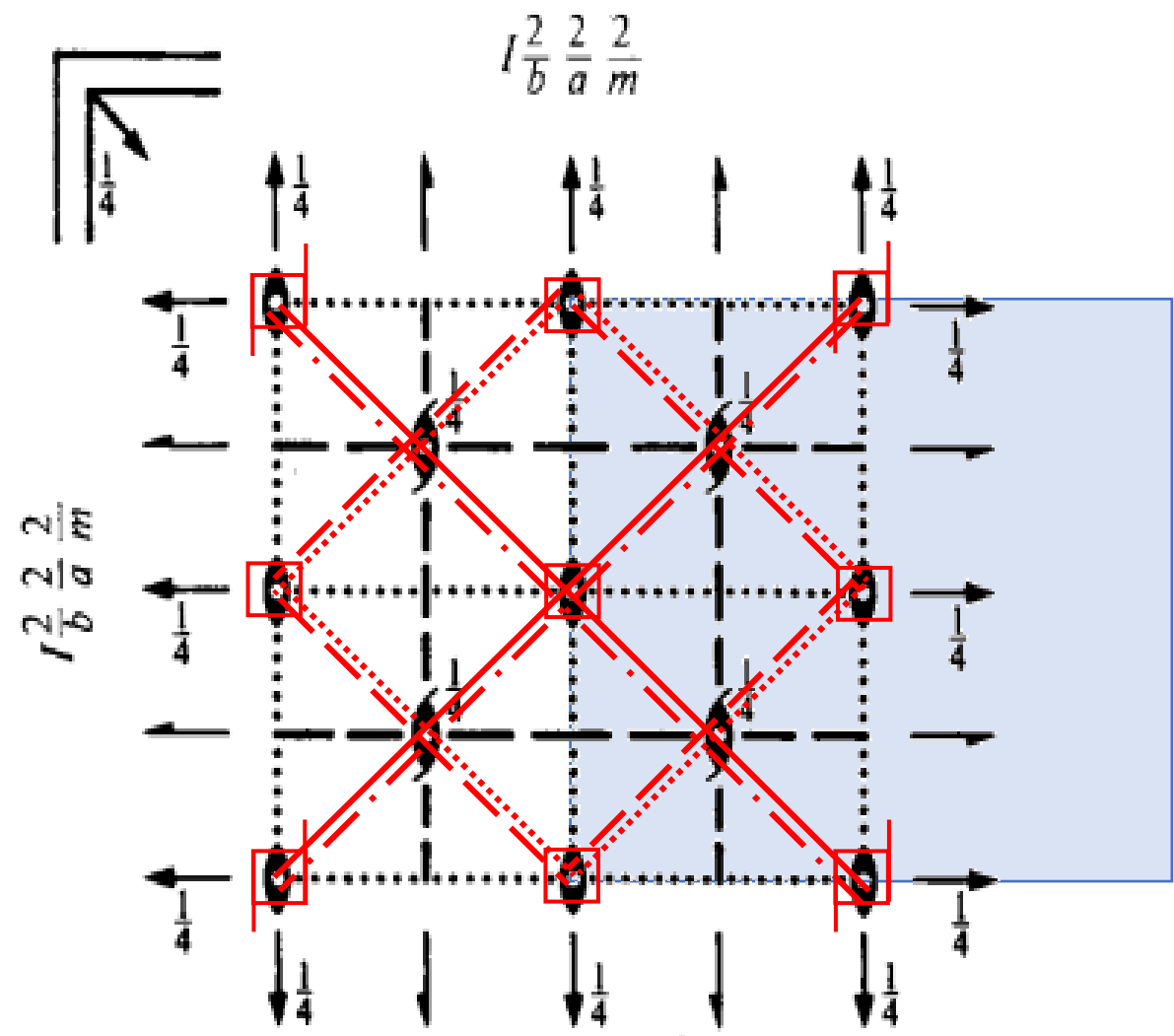
Все голоэдрические группы можно получить одновременно добавляя к ромбическим группам $mm2$, пригодным для тетрагонализации, горизонтальную плоскость m_h или n_h , а также диагональные плоскости m_d или c_d



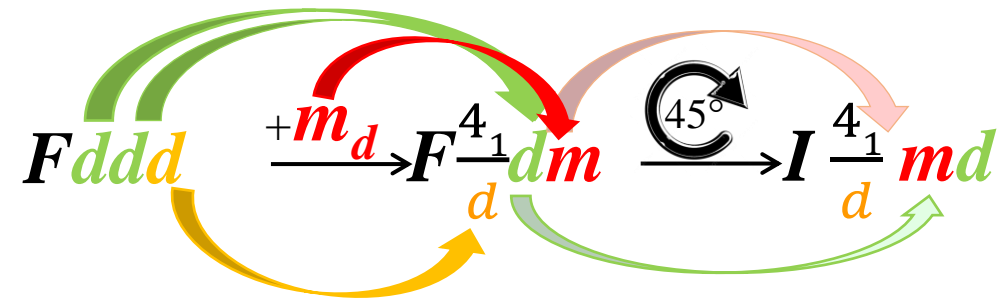
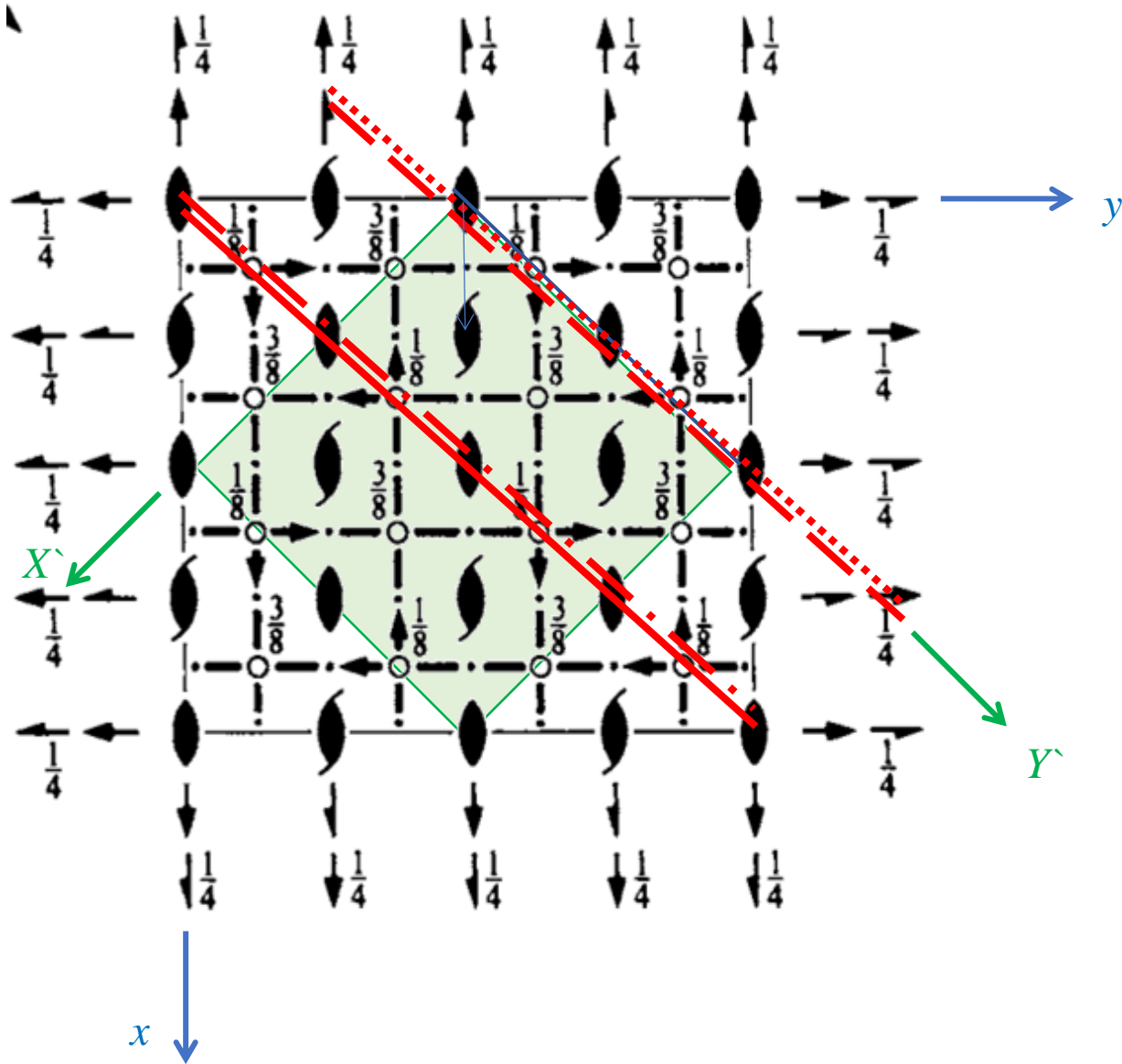
- $Pmm2$ 😊
 - $Imm2$ 😊
 - $Pnn2$ 😊
 - $Ima2$ 😞
 - $Pmn2_1$ 😞
 - $Iba2$ 😊
 - $Pma2$ 😞
 - $Cmm2$ 😊
 - $Pmc2_1$ 😞
 - $Cmc2_1$ 😞
 - $Pna2_1$ 😞
 - $Ccc2$ 😊
 - $Pnc2_1$ 😞
 - $Fmm2$ 😊
 - $Pca2_1$ 😞
 - $Fdd2$ 😊
 - $Pba2$ 😊
 - $Pcc2$ 😊
- Ромбические гемиедрические группы $mm2$, пригодные для тетрагонализации.

	$+m_h$		$+n_h$		$+a_h$
	$+m_d$	$+c_d$	$+m_d$	$+c_d$	$+d_d$
$Pmm2$	$P4/mmm$	$P4/mmc$	$P4/nmm$	$P4/nmc$	✗
$Pnn2$	$P4_2/mnm$	$P4/mnc$	$P4_2/nnm$	$P4_2/nnc$	✗
$Pba2$	$P4/mbm$	$P4_2/mbc$	$P4_2/mbm$	$P4_2/nbc$	✗
$Pcc2$	$P4/mcm$	$P4/mcc$	$P4/ncm$	$P4/ncc$	✗
$Imm2$	$I4/mmm$	$I4/mmc$	$I4/nmm$	$I4/nmc$	$I4_1/amd$
$Iba2$	$I4/mbm$	$I4/mbc$	$I4/mmm$	$I4/nbc$	$I4_1/abd = I4_1/acd$
$Cmm2$	$P4/mmm$ ($C4/mmm$)	P/mcm ($C4/mmc$)	P/nmm ($C4/nmm$)	P/ncm ($C4/nmc$)	✗
$Ccc2$	$P4/mmc$ ($C4/mcm$)	$P4/mcc$ ($C4/mcc$)	$P4/nmc$ ($C4/ncm$)	$P4/ncc$ ($C4/ncc$)	✗
$Fmm2$	$I4/mmm$ ($F4/mmm$)	$I4/mcm$ ($F4/mmc$)	$I4/mmm$ ($F4/mmm$)	$I4/mcm$ ($F4/mmc$)	✗
$Fdd2$	✗	✗	✗	✗	✗

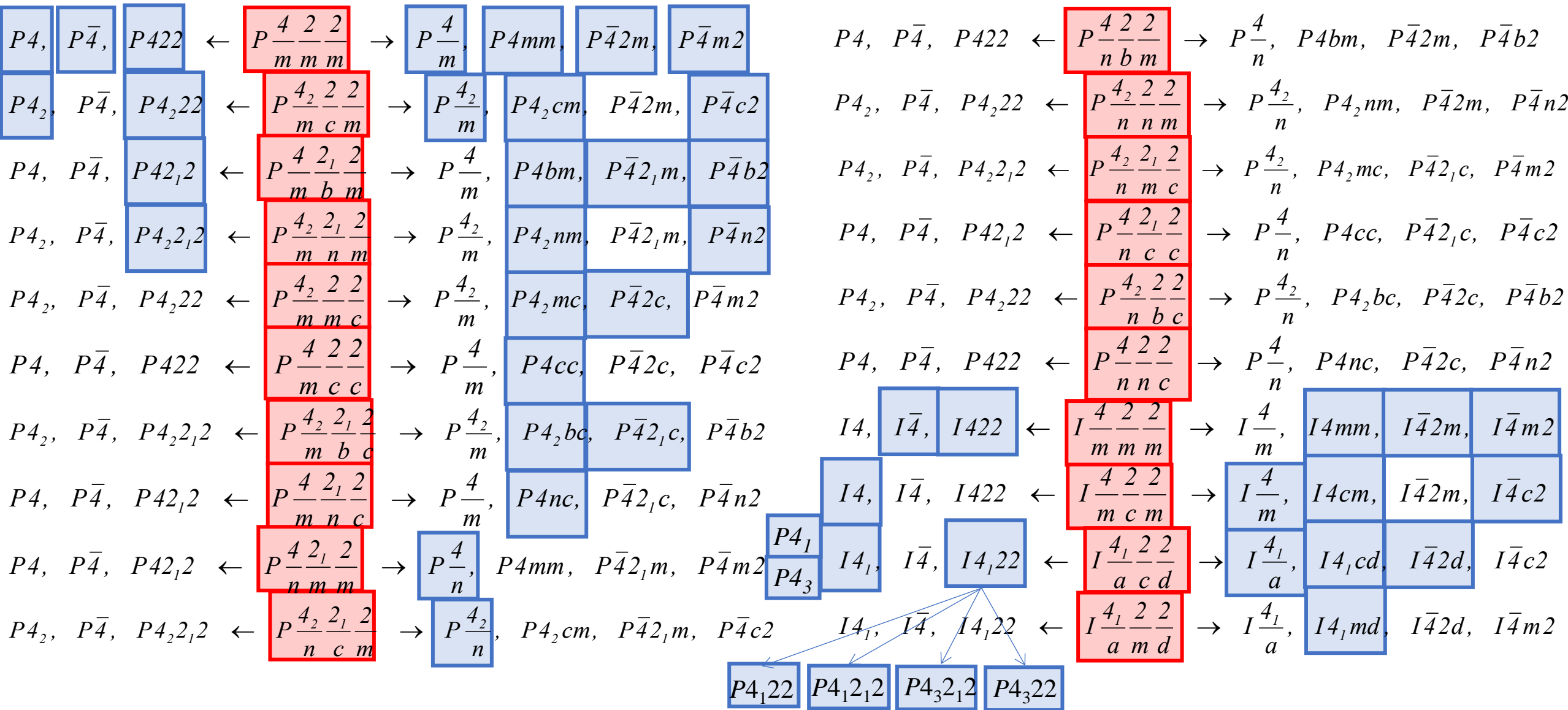
Тетрагонализация ромбической группы $Ibam$



Переход $Fddd \longrightarrow F\frac{4_1}{d}dm \longrightarrow I\frac{4_1}{a}md$



ВЗАИМОСВЯЗЬ ГРУПП ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ



Получить все гемиедрические и тетардоэдрические группы тетрагональной сингонии можно как подгруппы 20 полученных голоэдрических групп, отбрасывая удваивающие элементы симметрии. Без учета повторов - 68 оригинальных групп

No. of space group	Schoenflies symbol	Hermann–Mauguin symbols for standard cell <i>P</i> or <i>I</i>	
		Short	Extended
75	C_4^1	<i>P4</i>	
76	C_4^2	<i>P4</i> ₁	
77	C_4^3	<i>P4</i> ₂	
78	C_4^4	<i>P4</i> ₃	
79	C_4^5	<i>I4</i>	<i>I4</i> 4 ₂
80	C_4^6	<i>I4</i> ₁	<i>I4</i> ₁ 4 ₃
81	S_4^1	<i>P4</i>	
82	S_4^2	<i>I4</i>	

No. of space group	Schoenflies symbol	Hermann–Mauguin symbols for standard cell <i>P</i> or <i>I</i>	
		Short	Extended
83	C_{4h}^1	<i>P4/m</i>	
84	C_{4h}^2	<i>P4</i> ₂ / <i>m</i>	
85	C_{4h}^3	<i>P4/n</i>	
86	C_{4h}^4	<i>P4</i> ₂ / <i>n</i>	
87	C_{4h}^5	<i>I4/m</i>	<i>I4/m</i> 4 ₂ / <i>n</i>
88	C_{4h}^6	<i>I4</i> ₁ / <i>a</i>	<i>I4</i> ₁ / <i>a</i> 4 ₃ / <i>b</i>



No. of space group	Schoenflies symbol	Hermann–Mauguin symbols for standard cell <i>P</i> or <i>I</i>	
		Short	Extended
89	D_4^1	<i>P4</i> ₂ ₂	<i>P4</i> ₂ ₂ 2 ₁
90	D_4^2	<i>P4</i> ₂ ₁ ₂	<i>P4</i> ₂ ₁ ₂ 2 ₁
91	D_4^3	<i>P4</i> ₁ ₂ ₂	<i>P4</i> ₁ ₂ ₂ 2 ₁
92	D_4^4	<i>P4</i> ₁ ₂ ₁ ₂	<i>P4</i> ₁ ₂ ₁ ₂ 2 ₁
93	D_4^5	<i>P4</i> ₂ ₂ ₂	<i>P4</i> ₂ ₂ ₂ 2 ₁
94	D_4^6	<i>P4</i> ₂ ₂ ₁ ₂	<i>P4</i> ₂ ₂ ₁ ₂ 2 ₁
95	D_4^7	<i>P4</i> ₃ ₂ ₂	<i>P4</i> ₃ ₂ ₂ 2 ₁
96	D_4^8	<i>P4</i> ₃ ₂ ₁ ₂	<i>P4</i> ₃ ₂ ₁ ₂ 2 ₁
97	D_4^9	<i>I4</i> ₂ ₂ ₂	<i>I4</i> ₂ ₂ ₂ 4 ₂ 2 ₁ 2 ₁
98	D_4^{10}	<i>I4</i> ₁ ₂ ₂	<i>I4</i> ₁ ₂ ₂ 4 ₃ 2 ₁ 2 ₁
99	C_{4v}^1	<i>P4mm</i>	<i>P4mm</i> g
100	C_{4v}^2	<i>P4bm</i>	<i>P4bm</i> g
101	C_{4v}^3	<i>P4</i> ₂ <i>cm</i>	<i>P4</i> ₂ <i>cm</i> g
102	C_{4v}^4	<i>P4</i> ₂ <i>nm</i>	<i>P4</i> ₂ <i>nm</i> g
103	C_{4v}^5	<i>P4cc</i>	<i>P4cc</i> n
104	C_{4v}^6	<i>P4nc</i>	<i>P4nc</i> n
105	C_{4v}^7	<i>P4</i> ₂ <i>mc</i>	<i>P4</i> ₂ <i>mc</i> n
106	C_{4v}^8	<i>P4</i> ₂ <i>bc</i>	<i>P4</i> ₂ <i>bc</i> n
107	C_{4v}^9	<i>I4mm</i>	<i>I4mm</i> 4 ₂ <i>ne</i>
108	C_{4v}^{10}	<i>I4cm</i>	<i>I4cm</i> 4 ₂ <i>bm</i>
109	C_{4v}^{11}	<i>I4</i> ₁ <i>md</i>	<i>I4</i> ₁ <i>md</i> 4 ₁ <i>nd</i>
110	C_{4v}^{12}	<i>I4</i> ₁ <i>cd</i>	<i>I4</i> ₁ <i>cd</i> 4 ₃ <i>bd</i>

No. of space group	Schoenflies symbol	Hermann–Mauguin symbols for standard cell <i>P</i> or <i>I</i>	
		Short	Extended
111	D_{2d}^1	<i>P4</i> ₂ <i>m</i>	<i>P4</i> ₂ <i>m</i> g
112	D_{2d}^2	<i>P4</i> ₂ <i>c</i>	<i>P4</i> ₂ <i>c</i> n
113	D_{2d}^3	<i>P4</i> ₂ <i>1m</i>	<i>P4</i> ₂ <i>1m</i> g
114	D_{2d}^4	<i>P4</i> ₂ <i>1c</i>	<i>P4</i> ₂ <i>1c</i> n
115	D_{2d}^5	<i>P4</i> ₂ <i>m</i> ₂	<i>P4</i> ₂ <i>m</i> ₂ 2 ₁
116	D_{2d}^6	<i>P4</i> ₂ <i>c</i> ₂	<i>P4</i> ₂ <i>c</i> ₂ 2 ₁
117	D_{2d}^7	<i>P4</i> ₂ <i>b</i> ₂	<i>P4</i> ₂ <i>b</i> ₂ 2 ₁
118	D_{2d}^8	<i>P4</i> ₂ <i>n</i> ₂	<i>P4</i> ₂ <i>n</i> ₂ 2 ₁
119	D_{2d}^9	<i>I4</i> ₂ <i>m</i> ₂	<i>I4</i> ₂ <i>m</i> ₂ n2 ₁
120	D_{2d}^{10}	<i>I4</i> ₂ <i>c</i> ₂	<i>I4</i> ₂ <i>c</i> ₂ b ₂
121	D_{2d}^{11}	<i>I4</i> ₂ <i>m</i>	<i>I4</i> ₂ <i>m</i> 2 ₁ <i>e</i>
122	D_{2d}^{12}	<i>I4</i> ₂ <i>d</i>	<i>I4</i> ₂ <i>d</i> 2 ₁ <i>d</i>

INTERNATIONAL TABLES
for CRYSTALLOGRAPHY

Volume

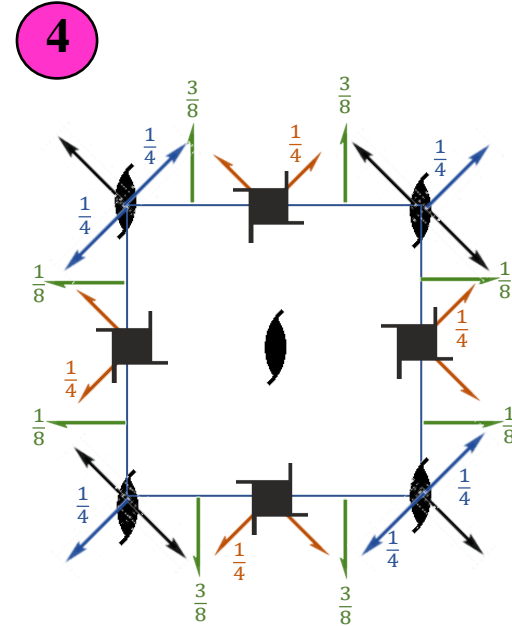
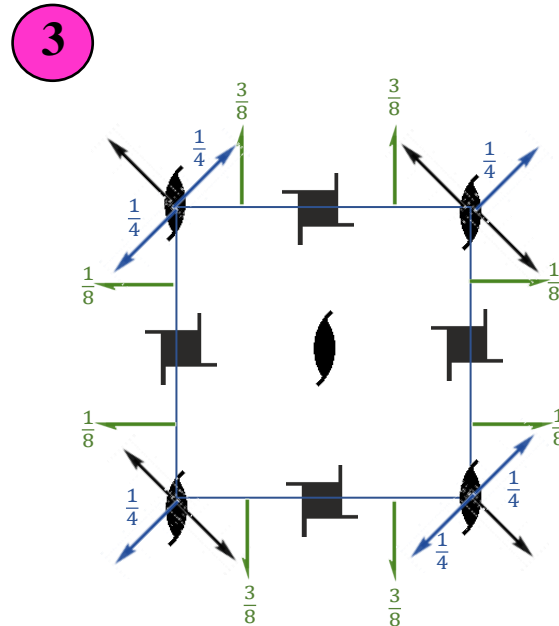
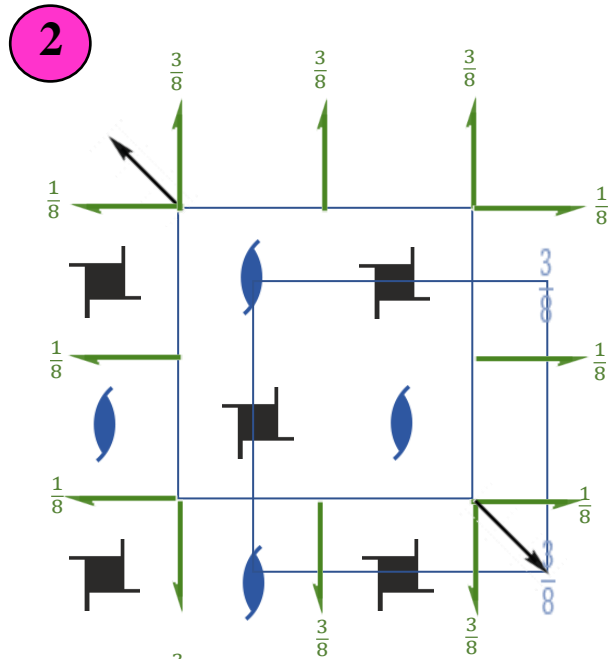
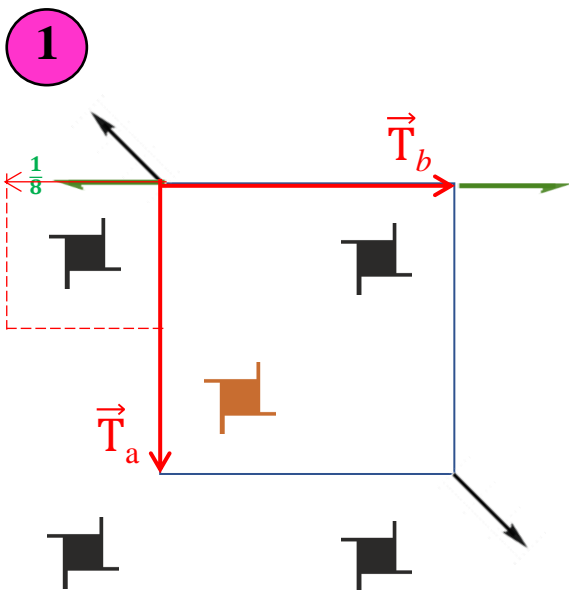
A

Space-group symmetry
Edited by Th. Hahn
Fifth edition

No. of space group	Schoenflies symbol	Hermann–Mauguin symbols for standard cell <i>P</i> or <i>I</i>	
		Short	Extended
123	D_{4h}^1	<i>P4/mmm</i>	<i>P4/m</i> 2/ <i>m</i> 2/ <i>m</i> 2 ₁ / <i>g</i>
124	D_{4h}^2	<i>P4/mcc</i>	<i>P4/m</i> 2/ <i>c</i> 2/ <i>c</i> 2 ₁ / <i>n</i>
125	D_{4h}^3	<i>P4/nbm</i>	<i>P4/n</i> 2/ <i>b</i> 2/ <i>m</i> 2 ₁ / <i>g</i>
126	D_{4h}^4	<i>P4/nnc</i>	<i>P4/n</i> 2/ <i>n</i> 2/ <i>c</i> 2 ₁ / <i>n</i>
127	D_{4h}^5	<i>P4/mbm</i>	<i>P4/m</i> 2 ₁ / <i>b</i> 2/ <i>m</i> 2 ₁ / <i>g</i>
128	D_{4h}^6	<i>P4/mnc</i>	<i>P4/m</i> 2 ₁ / <i>n</i> 2/ <i>c</i> 2 ₁ / <i>n</i>
129	D_{4h}^7	<i>P4/nmm</i>	<i>P4/n</i> 2 ₁ / <i>m</i> 2/ <i>m</i> 2 ₁ / <i>g</i>
130	D_{4h}^8	<i>P4/ncc</i>	<i>P4/n</i> 2 ₁ / <i>c</i> 2/ <i>c</i> 2 ₁ / <i>n</i>
131	D_{4h}^9	<i>P4</i> ₂ / <i>nnc</i>	<i>P4</i> ₂ / <i>m</i> 2/ <i>m</i> 2/ <i>c</i> 2 ₁ / <i>n</i>
132	D_{4h}^{10}	<i>P4</i> ₂ / <i>mcm</i>	<i>P4</i> ₂ / <i>m</i> 2/ <i>c</i> 2/ <i>m</i> 2 ₁ / <i>g</i>
133	D_{4h}^{11}	<i>P4</i> ₂ / <i>nbc</i>	<i>P4</i> ₂ / <i>n</i> 2/ <i>b</i> 2/ <i>c</i> 2 ₁ / <i>n</i>
134	D_{4h}^{12}	<i>P4</i> ₂ / <i>nnm</i>	<i>P4</i> ₂ / <i>n</i> 2/ <i>n</i> 2/ <i>m</i> 2 ₁ / <i>g</i>
135	D_{4h}^{13}	<i>P4</i> ₂ / <i>nbc</i>	<i>P4</i> ₂ / <i>m</i> 2 ₁ / <i>b</i> 2/ <i>c</i> 2 ₁ / <i>n</i>
136	D_{4h}^{14}	<i>P4</i> ₂ / <i>nnm</i>	<i>P4</i> ₂ / <i>m</i> 2 ₁ / <i>n</i> 2/ <i>m</i> 2 ₁ / <i>g</i>
137	D_{4h}^{15}	<i>P4</i> ₂ / <i>nmc</i>	<i>P4</i> ₂ / <i>n</i> 2 ₁ / <i>m</i> 2/ <i>c</i> 2 ₁ / <i>n</i>
138	D_{4h}^{16}	<i>P4</i> ₂ / <i>ncm</i>	<i>P4</i> ₂ / <i>n</i> 2 ₁ / <i>c</i> 2/ <i>m</i> 2 ₁ / <i>g</i>
139	D_{4h}^{17}	<i>I4/mmm</i>	<i>I4/m</i> 2/ <i>m</i> 2/ <i>m</i> 4 ₂ / <i>n</i> 2 ₁ / <i>n</i> 2 ₁ / <i>e</i>
140	D_{4h}^{18}	<i>I4/mcm</i>	<i>I4/m</i> 2/ <i>c</i> 2/ <i>e</i> 4 ₂ / <i>n</i> 2 ₁ / <i>b</i> 2 ₁ / <i>m</i>
141	D_{4h}^{19}	<i>I4</i> ₁ / <i>amd</i>	<i>I4</i> ₁ / <i>a</i> 2/ <i>m</i> 2/ <i>d</i> 4 ₃ / <i>b</i> 2 ₁ / <i>n</i> 2 ₁ / <i>d</i>
142	D_{4h}^{20}	<i>I4</i> ₁ / <i>acd</i>	<i>I4</i> ₁ / <i>a</i> 2/ <i>c</i> 2/ <i>d</i> 4 ₃ / <i>b</i> 2 ₁ / <i>b</i> 2 ₁ / <i>d</i>

ИТОГО 68 пространственных групп тетрагональной сингонии

ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ $P 4_12_12$



1. В качестве порождающих берем координатную ось 2_1 и диагональную ось 2 . Что бы задать ось 4_1 необходимо задать такие высоты этих осей, чтобы их разница была $1/8$, причем подъем высоты должен осуществляться против часовой стрелки. Размножаем ось 4_1 горизонтальными трансляциями, а взаимодействием с ними получаем дополнительную ось 4_1

2. Поворачиваем ось 2_{1y} вокруг оси 2_d . При этом высота полученной оси 2_x становится $7/8$ (или $3/8$). В результате взаимодействия $2_1(4_1)$ горизонтальных трансляций получаем дополнительные оси 2_1 . Размножаем горизонтальными трансляциями полученные координатные оси $2_{1x} 2_{1y}$, А также наносим оси $2_{1x} 2_{1y}$, являющиеся результатом их взаимодействия с этими трансляциями

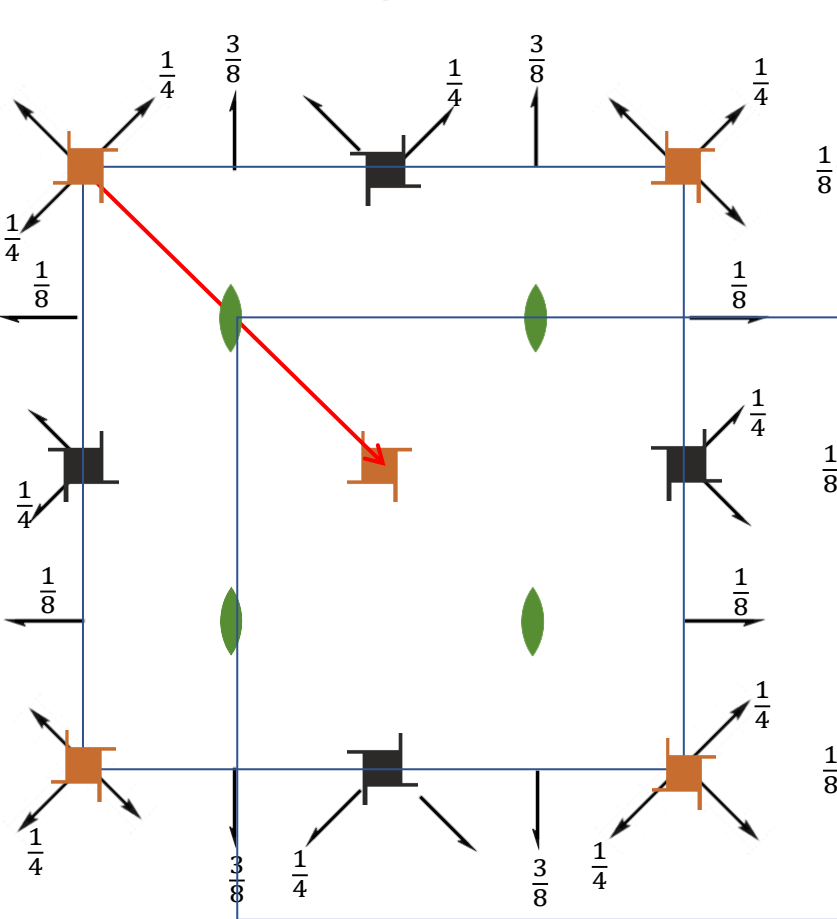
3. Размножаем ось 2 горизонтальными трансляциями. Взаимодействием вертикальной оси 2_{1z} и 2_{xy} получаем еще одну диагональную ось 2_{xy} под углом 90° к порождающим осям на высоте $1/4$. Размножаем ее горизонтальными трансляциями. Выбираем начало координат на диагональной оси 2 в точке «скрещивания» с другой диагональной осью 2 .

4. Взаимодействуя с координатными трансляциями \vec{T} диагональные оси $2_{xy} 2_{\bar{x}y}$ будут чередоваться с 2_1 на тех же высотах:

$$\vec{T}_a (\vec{T}_b) \times 2_d = 2_{1d}$$

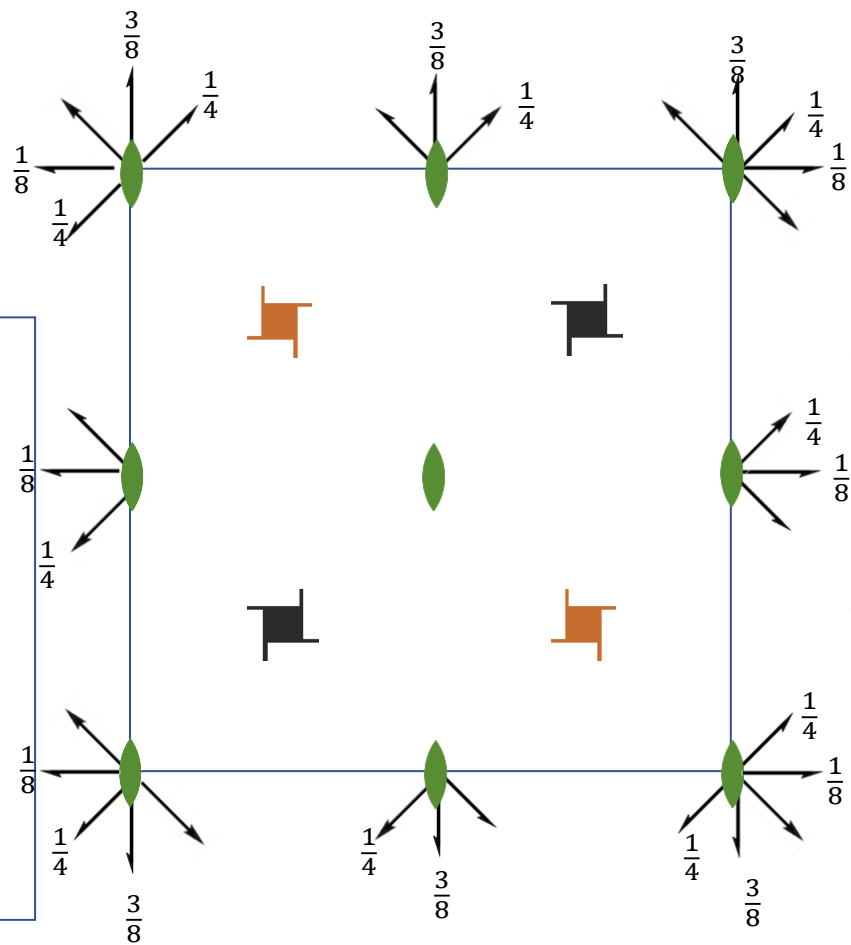
1

$P 4_1 2_1 2$



В группу вводим трансляцию $\vec{T}_I P 4_1 2_1 2$.

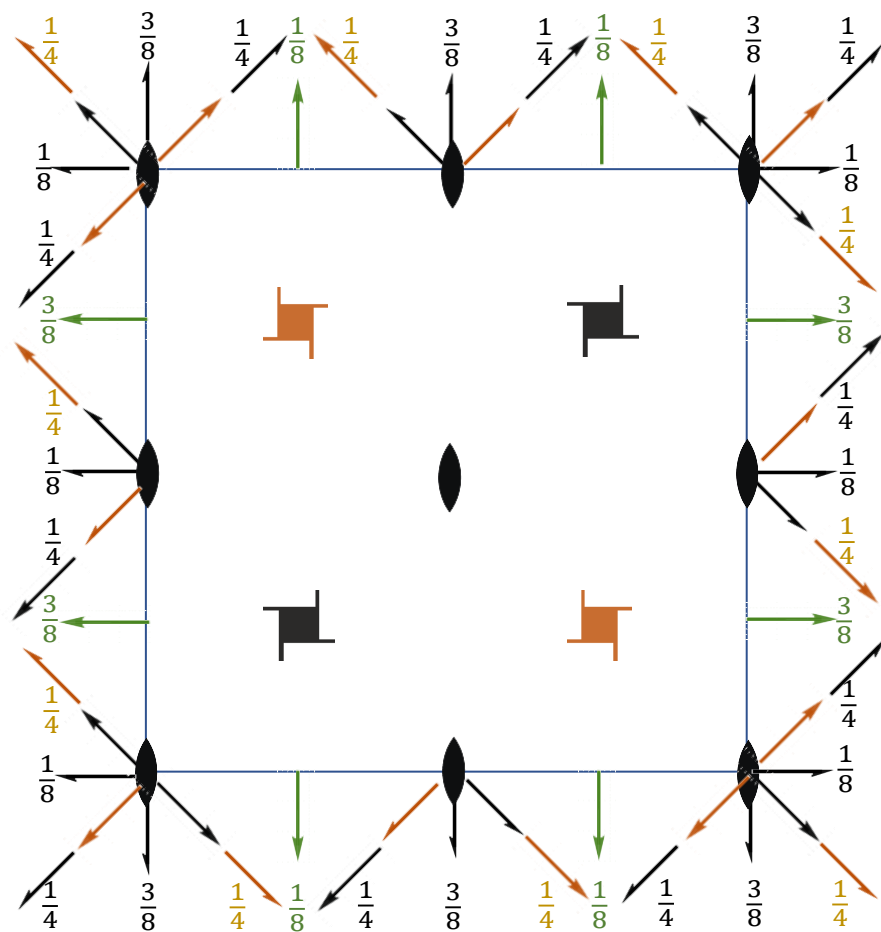
2



В группу вводим трансляцию $\vec{T}_I P 4_1 2_1 2$.
Переносим начало координат

3

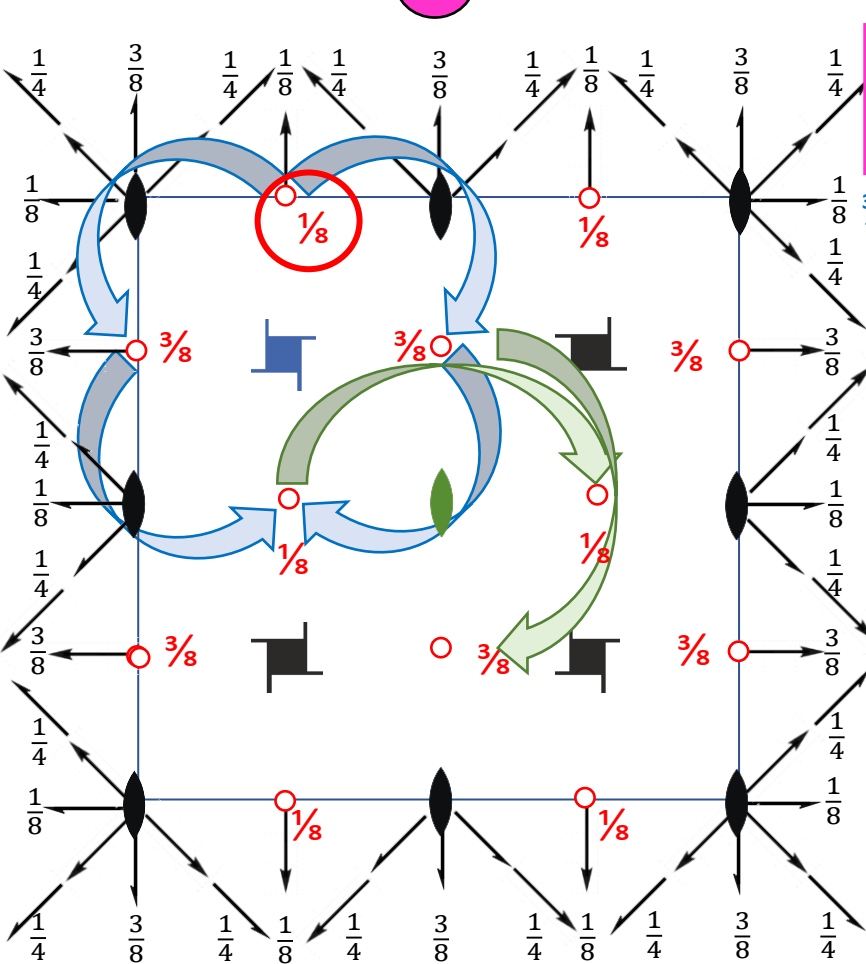
$I 4_1 2_1 2$



В группу вводим трансляцию $\vec{T}_I P 4_1 2_1 2$.
Переносим начало координат

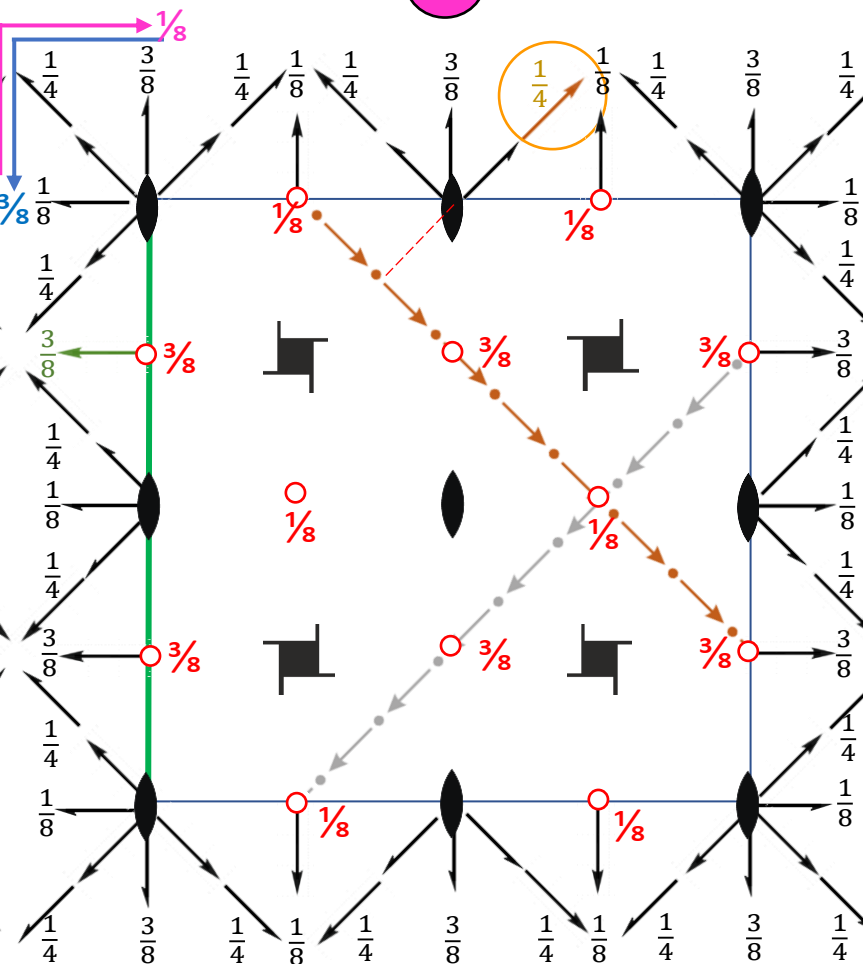
$I 4_1 2 2 + \bar{1}$

4



В группу $I 4_1 2 2$ вводим центр инверсии в положение $\bar{1}(0\frac{1}{4}\frac{1}{8})$, чтобы обеспечить появление плоскостей a_z и d_d . Размножаем его элементами симметрии группы, например, вертикальными осями 4_1 и 2_z

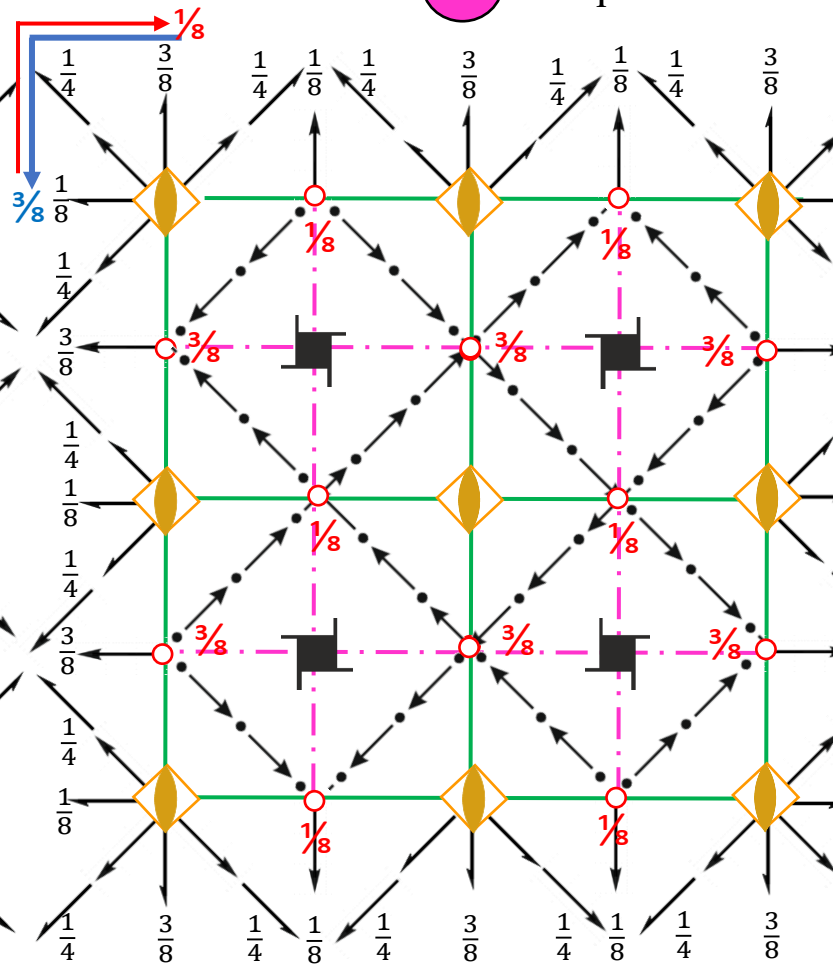
5



Взаимодействием введенных центров инверсии и осей 2-ого порядка получаем

$$\begin{aligned} \bar{1} \times 2_d \left(\frac{1}{4}\right) &= d_d & \bar{1} \times 2_y \left(\frac{3}{8}\right) &= m_y \\ \bar{1} \left(\frac{1}{4} 0 \frac{3}{8}\right) \times 2_z &= a_z \left(xy \frac{3}{8}\right) \\ \bar{1} \left(0 \frac{1}{4} \frac{1}{8}\right) \times 2_z &= b_z \left(xy \frac{1}{8}\right) \end{aligned}$$

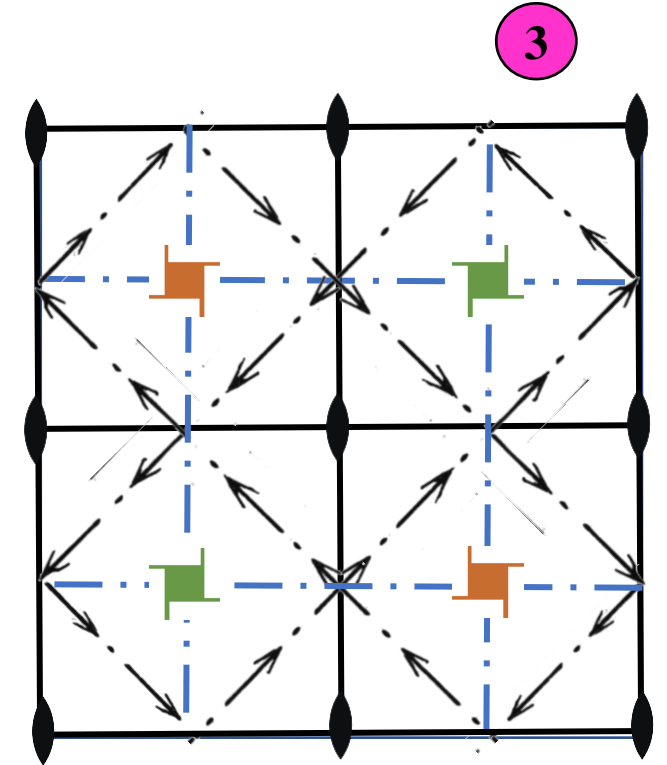
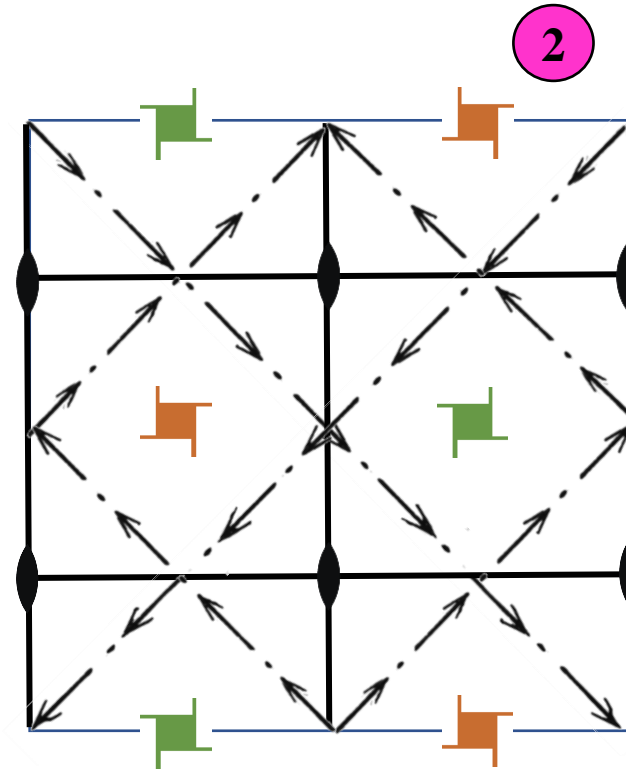
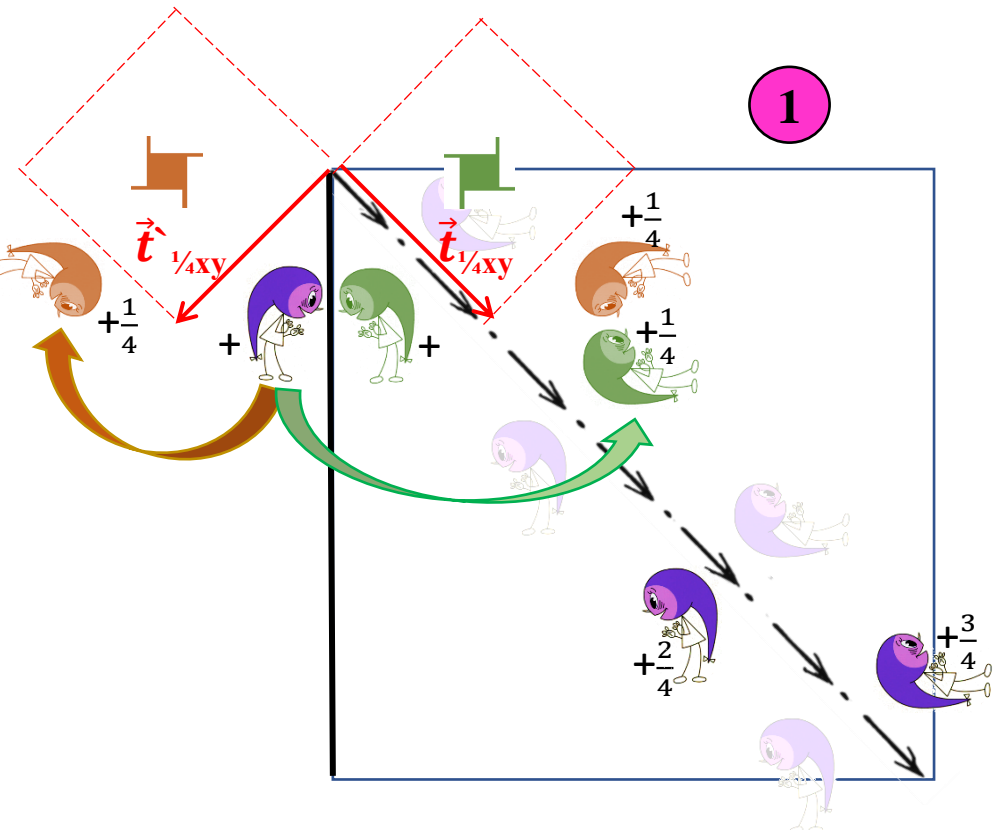
6

 $I 4_1 amd$ 

Взаимодействием введенных центров инверсии и осей 2-ого порядка получаем

$$\begin{aligned} m_y \times 2_d &= \bar{4} \\ m_y \times \bar{1}_I &= n_y \end{aligned}$$

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 $\vec{t}_{1/4xy}$:

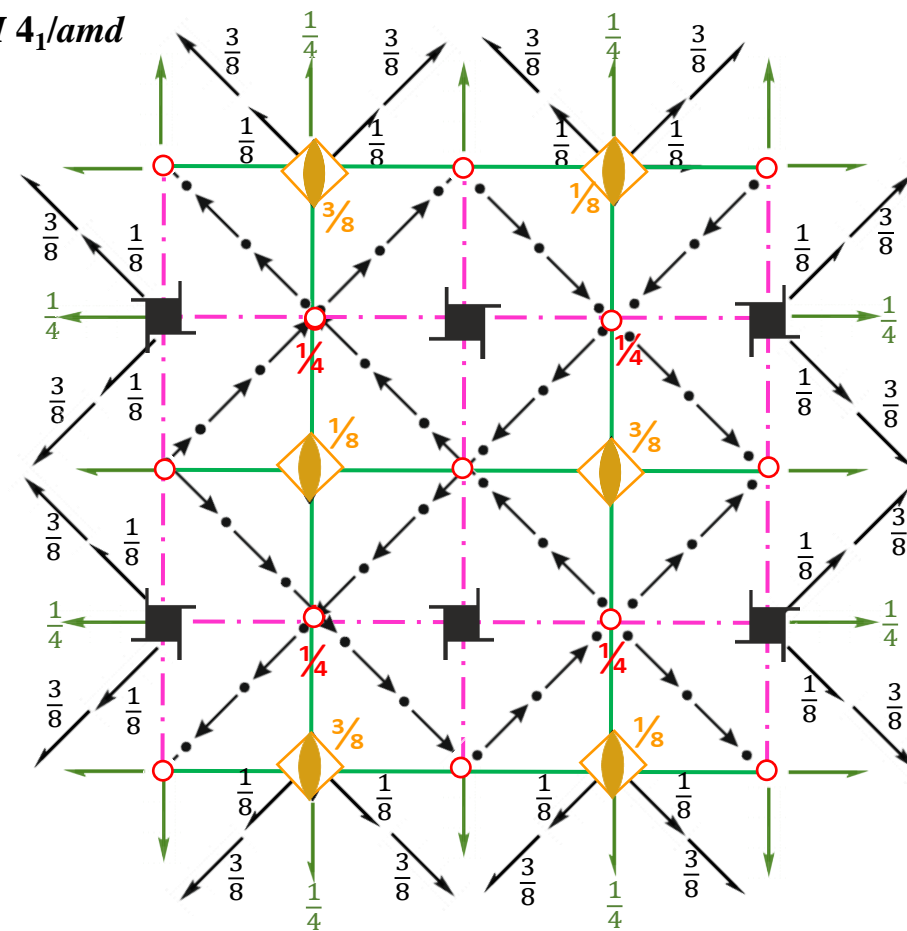
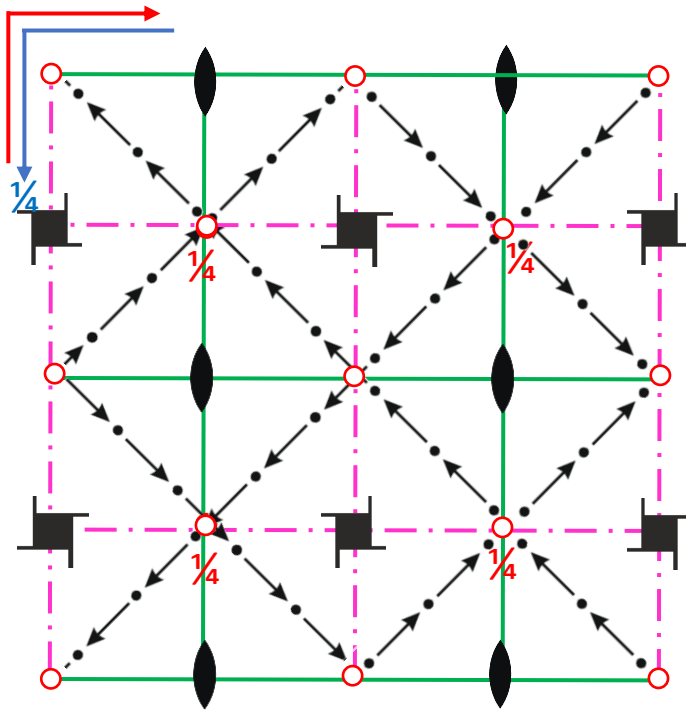
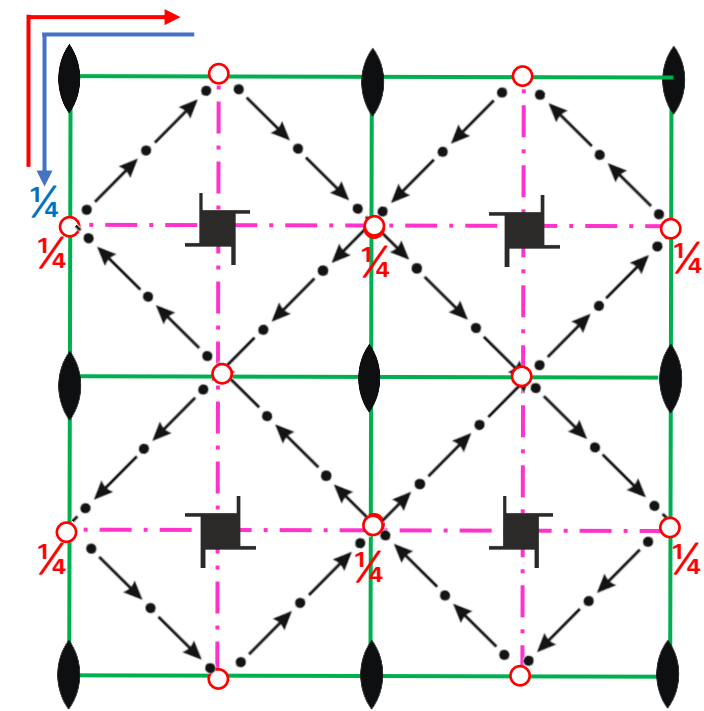
$$m_y \times d_{xy} = m_y \times m_{xy} \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{1/4z} = 4_1 \vec{t}_{1/4xy} = 4_1 [0 \frac{1}{4} z]$$

$$d_{xy} \times m_y = m_{xy} \vec{t}_{1/4xy} \vec{t}_{1/4z} \times m_y = 4_3 \vec{t}_{1/4xy} = 4_3 [0 -\frac{1}{4} z]$$

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 $mm2$.

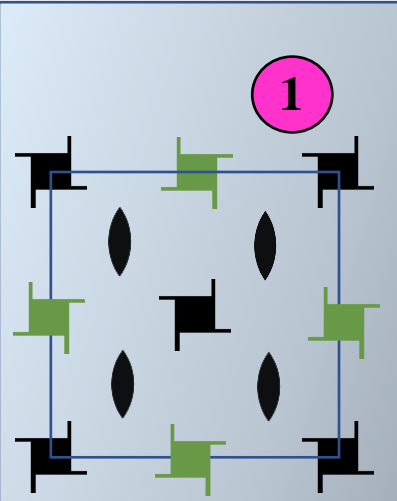
$I 4_1md + \bar{1}$  $I 4_1/amd$ 

В пространственную группу вводим горизонтальную плоскость $a_z (b_z)$, в результате чего появляются центры инверсии $\bar{1}$. Переносим начало координат в центр инверсии

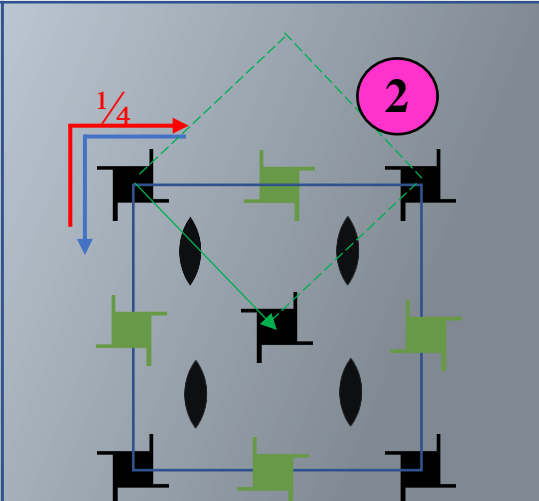
В результате взаимодействия вертикальных плоскостей m_x, m_y, d_d и горизонтальных плоскостей $a_z b_z$ появляются горизонтальные оси 2-ого порядка 2 и 2_1

В результате взаимодействия осей 4_1 и 4_3 с перпендикулярными плоскостями $a_z b_z$ получаем оси $\bar{4}$.

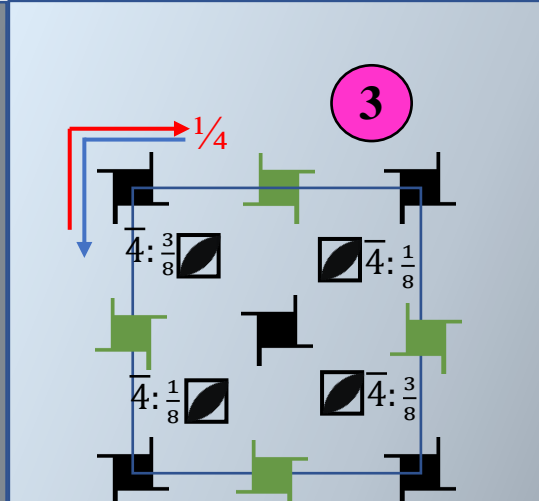
ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ $I4_1/a$



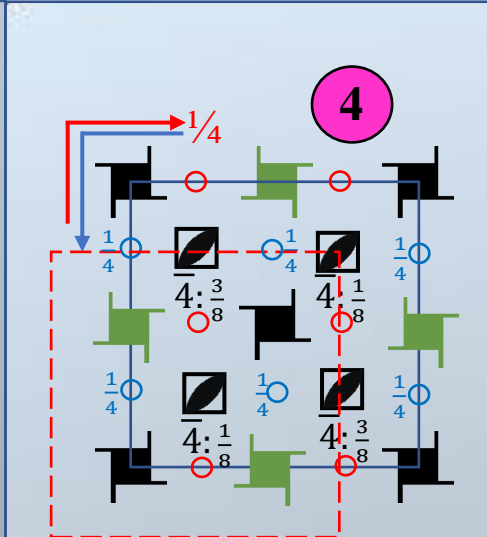
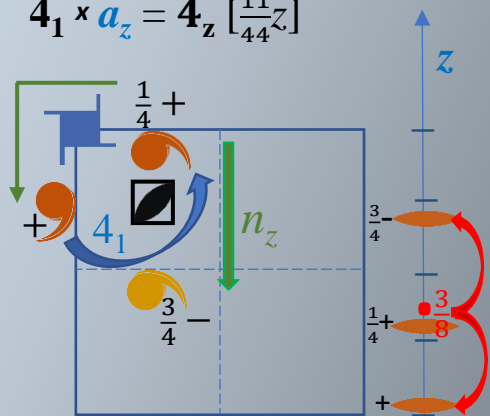
1. Вычерчиваем график группы $I4_1$



2. Вводим перпендикулярную плоскость a_z на $z=0$. В результате поворота вокруг оси 4_1 она становится b_z и смещается на $1/4$ по :
 $4_1 \circlearrowleft a_z[xy0] = b_z[xy\frac{1}{4}]$.
 Тот же результат можно получить взаимодействием a_z и \vec{T}_I :
 $a_z[xy0] \times \vec{T}_I = b_z[xy\frac{1}{4}]$

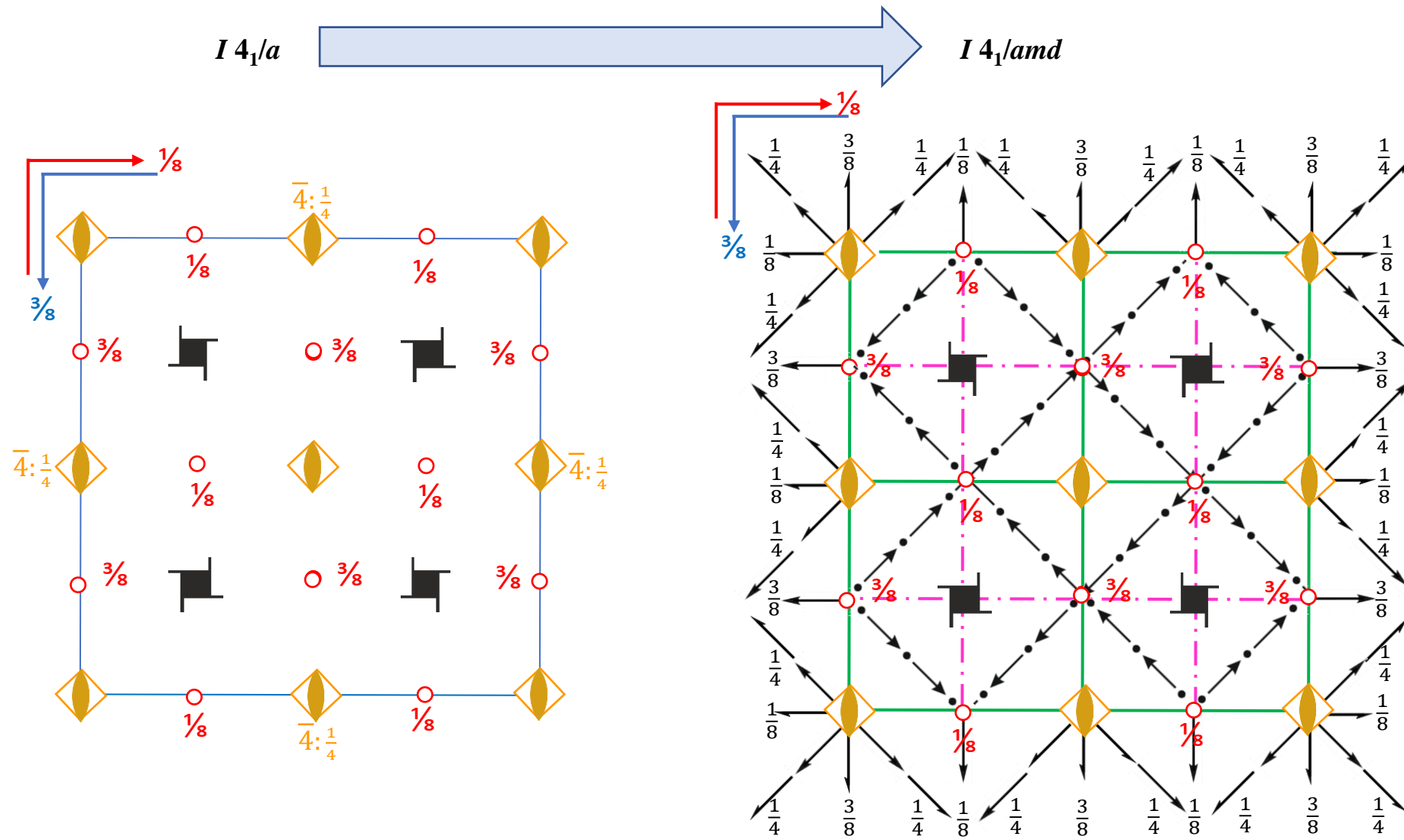


3. В результате взаимодействия 4_1 и плоскости $a_z(b_z)$ возникают инверсионные оси $\bar{4}$: с особой точкой в позиции $[\frac{113}{448}]$ и $[\frac{131}{448}]$:
 $4_1 \times a_z = \bar{4}_z[\frac{11}{44}z]$



4. В результате взаимодействия осей $2_1(4_1)$, $2_1(4_3)$, возникают центры инверсии:
 $2_1(4_1) \times a_z = \bar{1}[\frac{1}{4}0\frac{1}{4}]$,
 $2_1(4_3) \times a_z = \bar{1}[\frac{111}{424}]$
 $2_1(4_1) \times b_z[xy\frac{1}{4}] = \bar{1}[0\frac{1}{4}0]$
 $2_1(4_3) \times b_z[xy\frac{1}{4}] = \bar{1}[0\frac{31}{44}]$

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.



Введение в группу $I4_1/a$ вертикальных плоскостей m_x , m_y и d_d также приведет к голоэдрической группе $I4_1/amd$



Фактор-группа	4	$\bar{4}$	$\frac{4}{m}$	422	4mm	$\bar{4}m2$	$\frac{4}{m}mm$	ИТОГО
<i>P</i>	4	1	4	8	8	8	16	49
<i>C</i>	-	-	-	-	-	-	-	0
<i>A(B)</i>	-	-	-	-	-	-	-	0
<i>F</i>	-	-	-	-	-	-	-	0
<i>I</i>	2	1	2	2	4	4	4	19
ИТОГО	6	2	6	10	12	12	20	68

ИНТЕРВЬЮ С ЧЕМПИОНОМ

Как Вам удалось добиться такого потрясающего успеха?

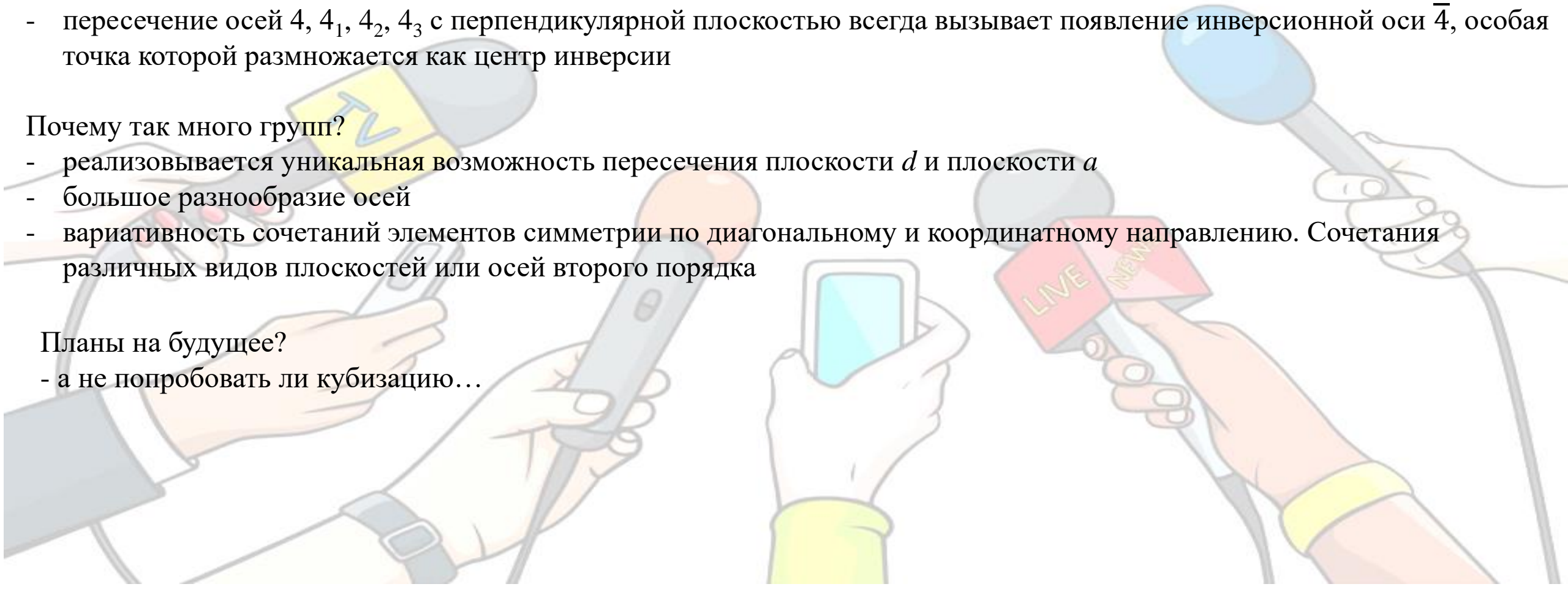
- вертикальные диагональные и координатные плоскости принципиально отличаются, так как по разному ориентированы относительно координатных трансляций;
- в диагональном направлении всегда имеет место чередование плоскостей (с чередуется с n , m чередуется с g)
- пересечение осей $4, 4_1, 4_2, 4_3$ с перпендикулярной плоскостью всегда вызывает появление инверсионной оси $\bar{4}$, особая точка которой размножается как центр инверсии

Почему так много групп?

- реализуется уникальная возможность пересечения плоскости d и плоскости a
- большое разнообразие осей
- вариативность сочетаний элементов симметрии по диагональному и координатному направлению. Сочетания различных видов плоскостей или осей второго порядка

Планы на будущее?

- а не попробовать ли кубизацию...



68!

Мы прошли долгий путь вывода пространственных групп тетрагональной сингонии



Еще 20 групп

ИТОГО 68! Это все!!!

Фактор-группа	4	$\bar{4}$	$4mm$	$4/m$	422	$\bar{4}m2$	$4/mmm$	ИТОГО
P	4	1	8	4	8	8	16	49
C	-	-	-	-	-	-	-	0
$A(B)$	-	-	-	-	-	-	-	0
F	-	-	-	-	-	-	-	0
I	2	1	4	2	2	4	4	19
ИТОГО	6	2	12	6	10	12	20	68