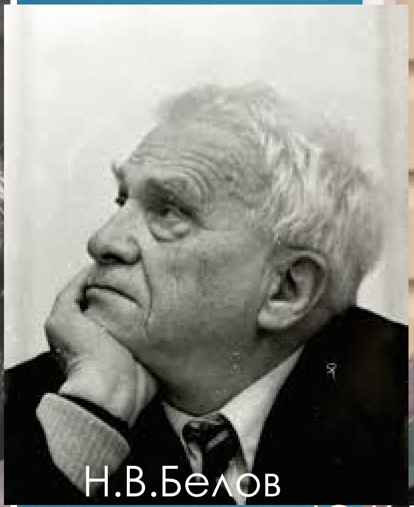
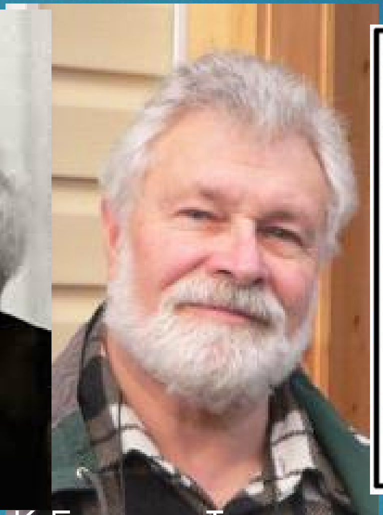
Вывод групп ромбической сингонии

Курс теории симметрии на кафедре кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета МГУ


Ю.Г.Загальская, Г.П.Литвинская


Н.В.Белов


Ю.К.Егоров-Тисменко

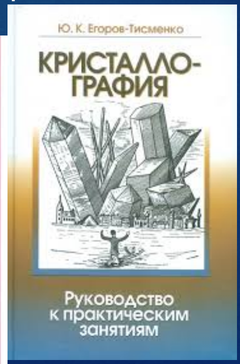
Г.И.Дорохова


Е..Л.Белоконева



О.А.Гурбанова

Т.А.Еремина



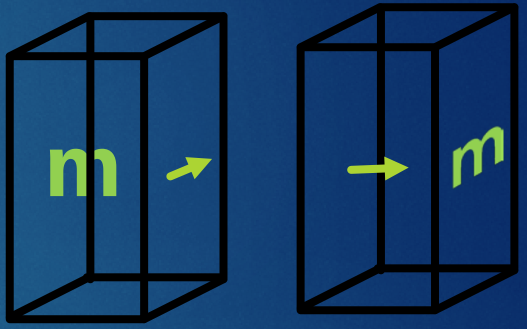
Вывод групп ромбической гемиэдрии $mm2$
Группы с P-решетками

- Плоскости в этих группах фиксируются на I и II позиции. Какие могут быть:
  - Плоскость зеркального отражения *m*
  - Плоскость с горизонтальным скольжением *g* (*a* или *b*) – топологически тождественны в *P*-группах ромбической гемиэдрии,
  - Плоскость с вертикальным скольжением *c* (*g*)
  - Клиноплоскость *n*
- С точки зрения комбинаторики количество пространственных групп равно числу перестановок по 2 из возможных 4 видов плоскостей с учетом возможности двух одинаковых плоскостей в символе.

$$c_n^k = \frac{n!}{(n-k)!*k!}$$

$$c_4^2 = \frac{4!}{(4-2)!*2!} = 10$$

*Pma*2 = P*bm*2



mm
mm nn
mg ng gg
mc nc gc cc

Вывод групп ромбической гемиэдрии $mm2$

Группы с *P*-решетками

0	I	II	III
P	m	m	2
	$g(b)$	$g(a)$	2_1
	c	c	
	n	n	

В начале символа пространственной группы (нулевая позиция символа) фиксируется трансляционная подгруппа – совокупность трех координатных трансляций

На первой (I) и второй (II) позиции символа фиксируются плоскости m, g, c или n.

На третьей (III) позиции символа фиксируются оси 2 или 2_1 в зависимости от порождающих их плоскостей.

Вывод групп ромбической гемиэдрии $mm2$

Группы с *P*-решетками

0	I	II	III
P	m	m	2
	$g(b)$	$g(a)$	2_1
	c	c	
	n	n	

Первая группа содержит только «удобные» плоскости: m или n:

$Pmm2$

$Pnn2$

$Pmn2_1$

Вторая группа содержит одну «удобную» (позициияI) и одну «неудобную» (на позиции II) плоскости:

$Pma2 = Pbm2$

$Pmc2_1 = Pcm2_1$

$Pna2_1 = Pbn2_1$

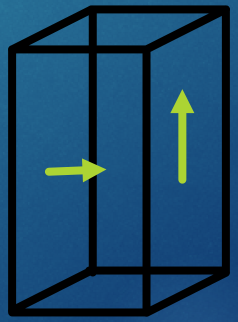
$Pnc2_1 = Pcn2_1$

Третья группа содержит только «неудобные» плоскости:

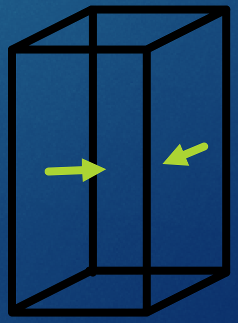
$Pca2_1 = Pbc2_1$

$Pba2$

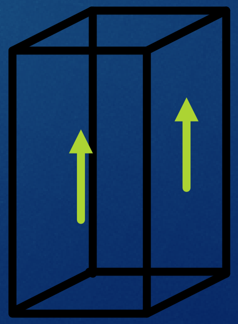
$Pcc2$



$bc2_1$



$ba2$

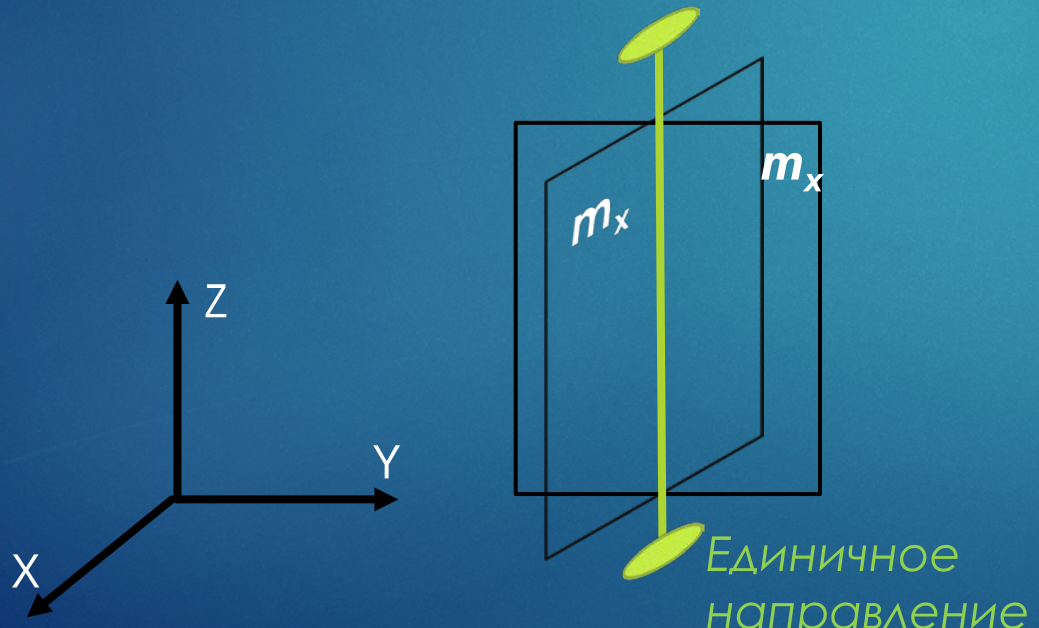


$cc2$

Вывод групп ромбической гемиэдрии *mm*2
Центрированные решетки

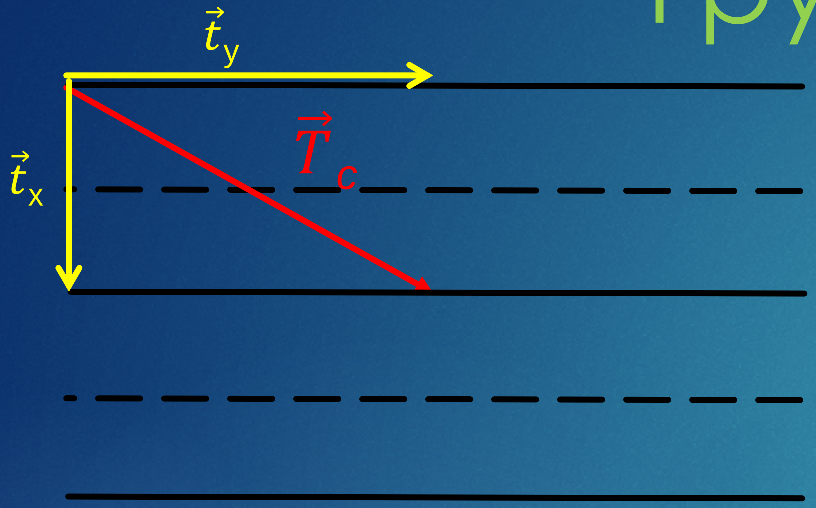
В ромбической сингонии возможны следующие центрировки:
- *A (B)* бокоцентрированная
- *C* базецентрированная
- *I* объемноцентрированная
- *F* гранецентрированная

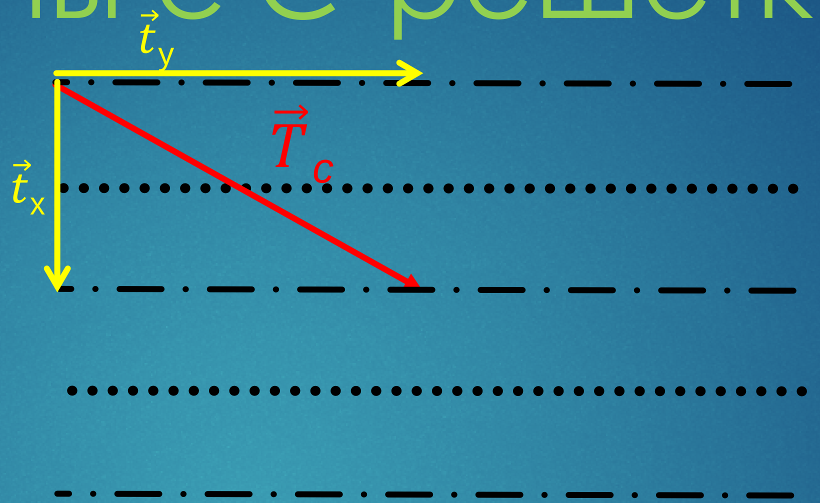
Для класса *mm*2, в силу существования в нем особого направления, центрировки С и А (В) неэквивалентны. Центрировки А и В не отличаются друг от друга, так как координатные направления X и Y топологически тождественны (совпадают с перпендикулярами к плоскостям).

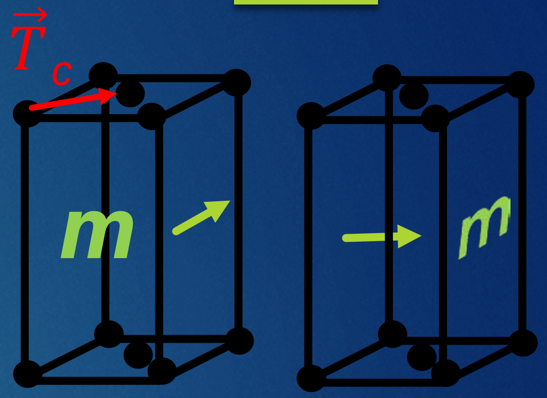


Вывод групп ромбической гемиэдрии $mm2$

Группы с С-решеткой







$Cma2 = Cbm2$

0	I	II	III
C	$m(g)$	$m(g)$	2
	$n(c)$	$n(c)$	2_1

$\boldsymbol{Cmm2}$ = Cm(b)m(a)2(2)

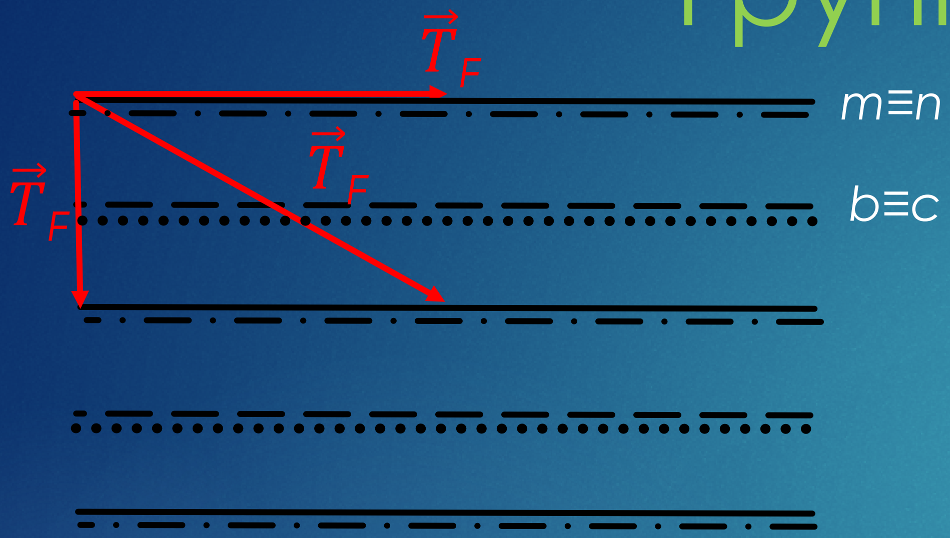
$\boldsymbol{Cmc2_1}$= Cm(b)c(n)$2_1(2_1)$

$\boldsymbol{Ccc2}$ = Cc(n)c(n)2(2)

Появление «вложенных» плоскостей и топологическая тождественность плоскостей с горизонтальным скольжением (g) приводит к трем группам ромбической гемиэдрии с С-решеткой

Вывод групп ромбической гемиэдрии $mm2$

Группы с F-решеткой



$Fmm2 = Fm{\equiv}n(b \equiv c)m{\equiv}n(a{\equiv}c)2(2_1)$

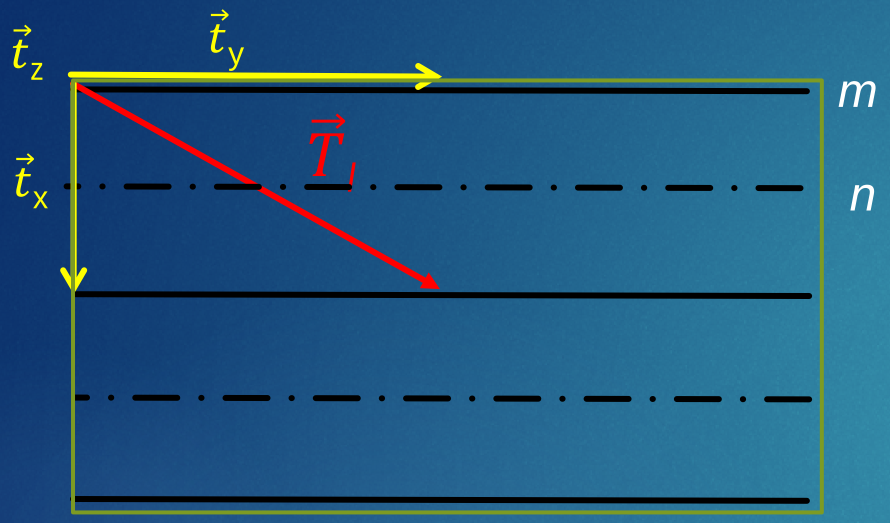
$Fdd2(2_1) = Fd(d)d(d)2(2_1)$

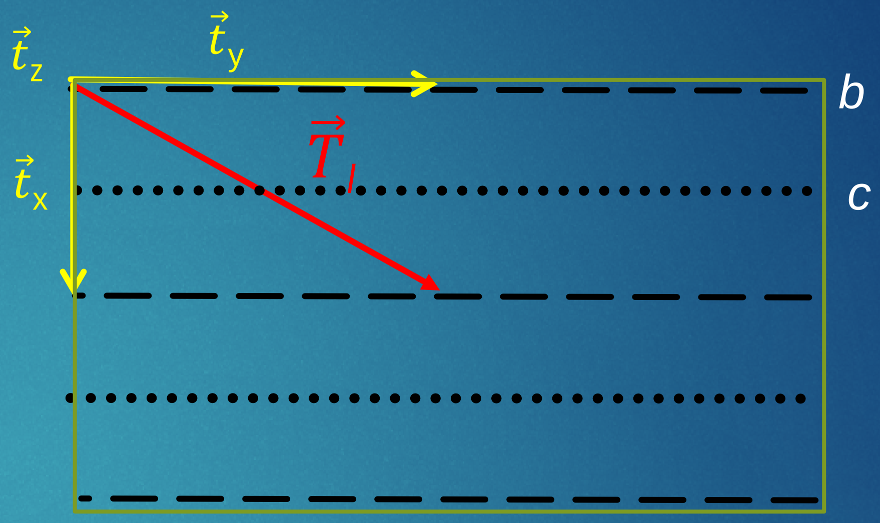
0	I	II	III
F	m≡n (b≡c)	m≡n (a≡c)	$2(2_1)$

F-вектора, обуславливающие взаимозависимость плоскостей ***m, n, c*** *и* ***g****, приводят к единственной симморфной группе с F-решеткой. Помимо нее существует несиморфная (гемисиморфная) группа* ***Fdd2****.*

Вывод групп ромбической гемиэдрии *mm*2

Группы с *I*-решеткой





$Imm2 = Im(n)m(n)2(2_1)$

$Ima2 = Im(n)a(c)2(2_1)$

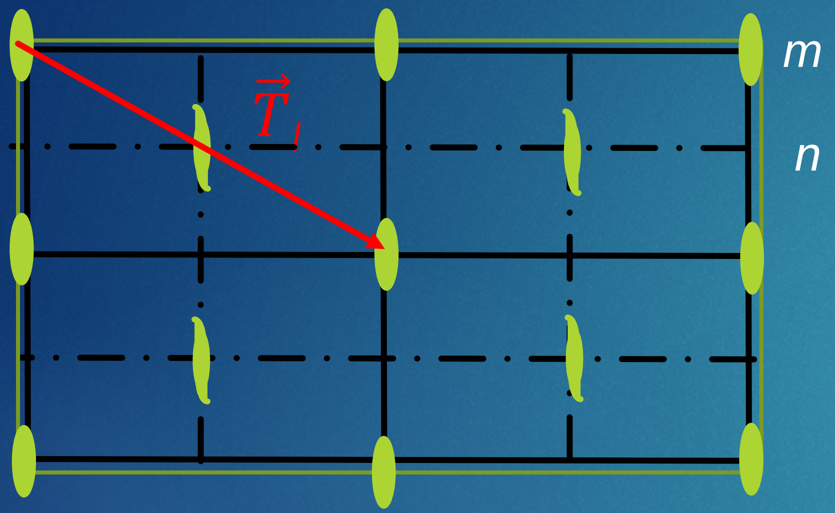
$Iba2 = Ib(c)a(c)2(2_1)$

0	I	II	III
I	*m*(*n*)	*m*(*n*)	$2(2_1)$
	c(*b*)	*c*(*a*)	

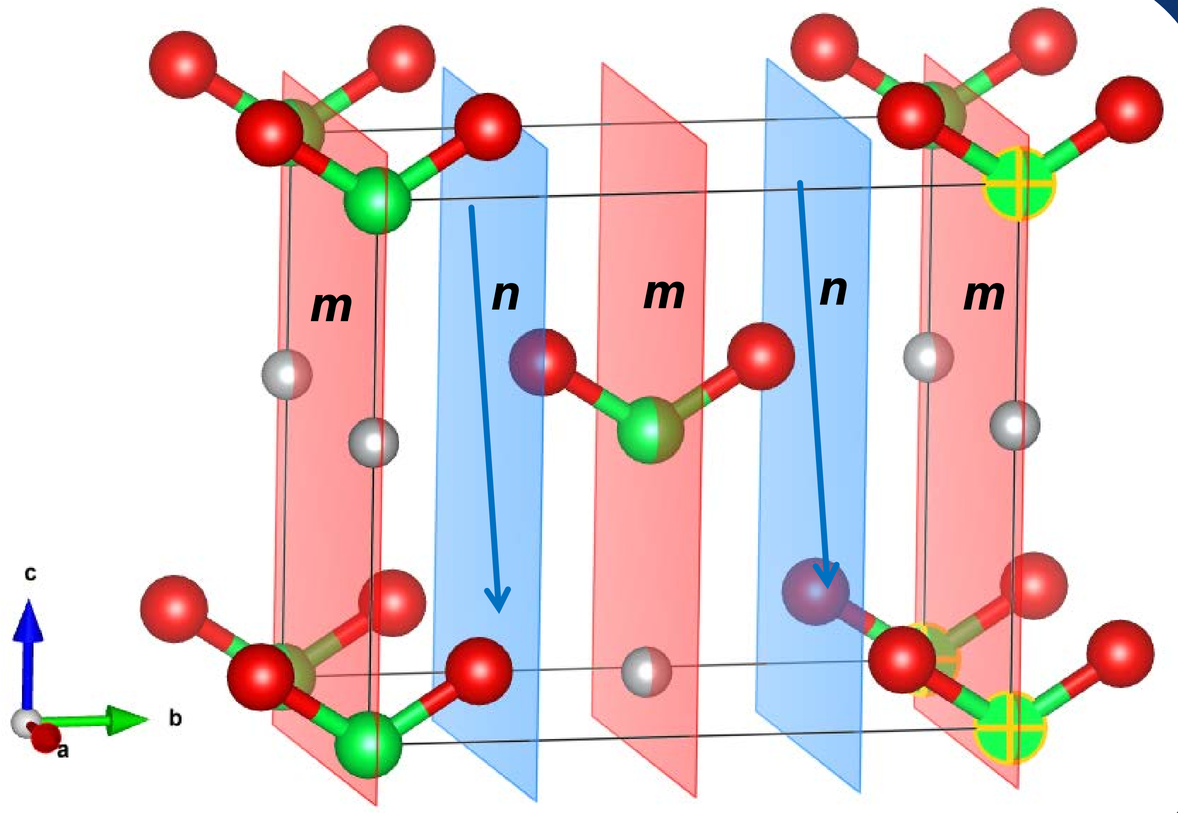
I-вектор обуславливает взаимозависимость плоскостей m и n, а также c и g соответственно, что с учетом топологической эквивалентности горизонтальных координатных направлений приводит к существованию трех групп ромбической гемиэдрии (*mm*2 с I-ячейкой): одной симорфной и 2 гемисиморфным.

Вывод групп ромбической гемиэдрии *mm*2

Группы с *I*-решеткой



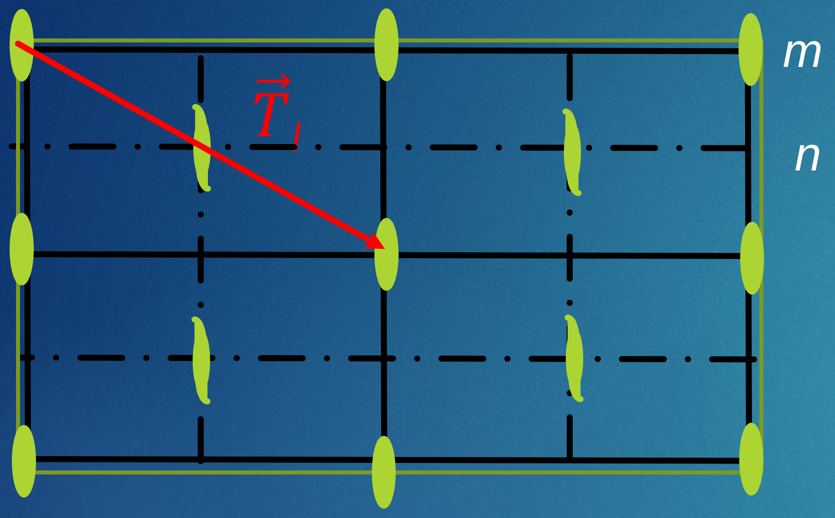
$Imm2 = Im(n)m(n)2(2_1)$



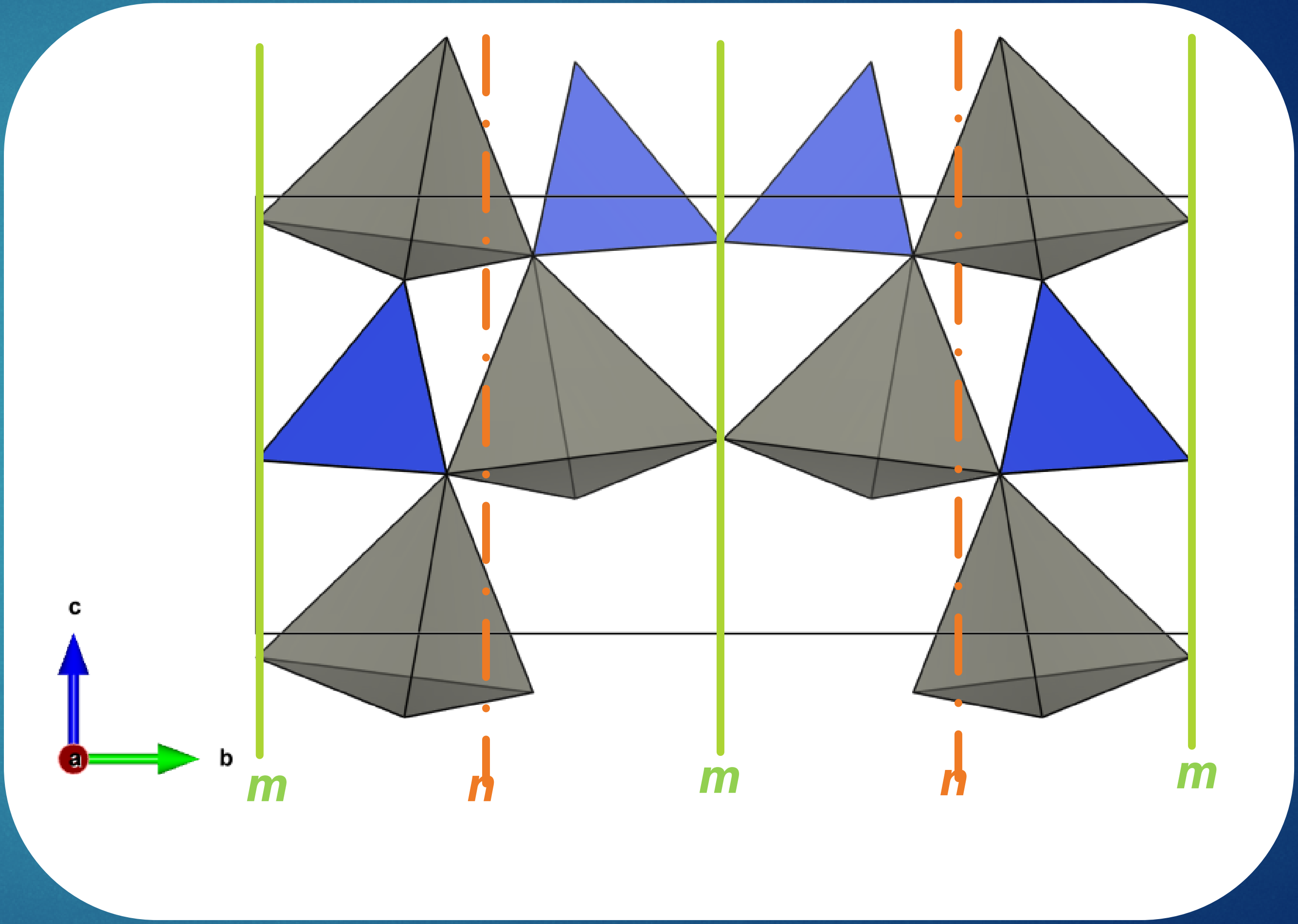
Структура $AgNO_2$

Вывод групп ромбической гемиэдрии $mm2$

Группы с I-решеткой



$Imm2 = Im(n)m(n)2(2_1)$



Структура гемиморфита $Zn_4[Si_2O_7](OH)_2$

Вывод групп ромбической гемиэдрии $mm2$

Группы с А-решеткой

0	I	II	III
A	$m\equiv n$	$m(c)$	2
	$b\equiv c$	$a(n)$	2_1

$A\ mm2 = A\ m\equiv n\,m(c)2(2_1)$

$A\ bm2 = A\ b\equiv c\,m(c)2(2_1)$

$A\ ma2 = A\ m\equiv n\,a(n)2(2_1)$

$A\ ba2 = A\ b\equiv c\,a(n)2(2_1)$

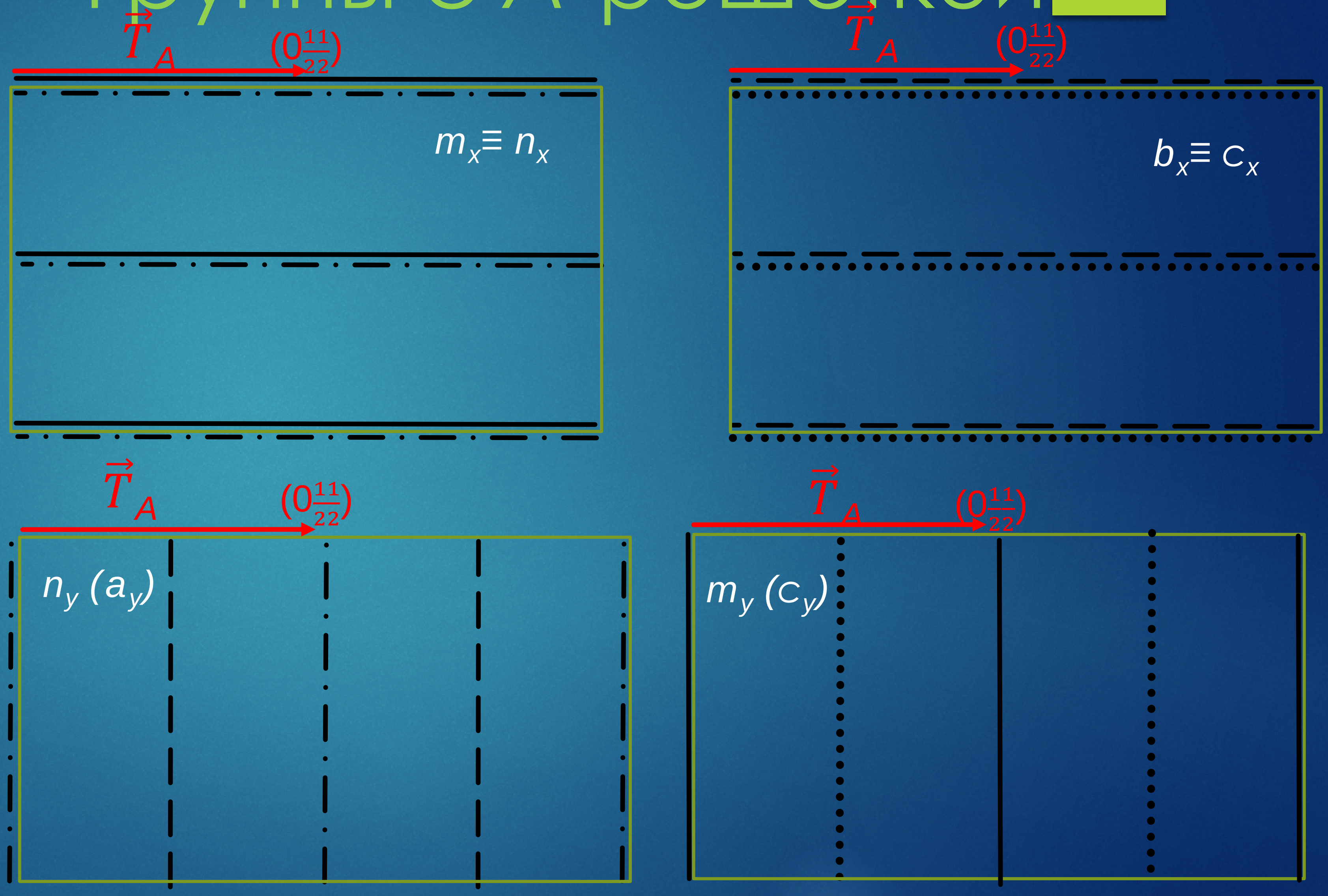
Группы с А-решеткой можно представить в В-аспекте

$A\ mm2 = B\ m(c)m\equiv n2(2_1)$

$A\ bm2 = B\ m(c)a\equiv c2(2_1)$

$A\ ma2 = B\ b(n)m\equiv n2(2_1)$

$A\ ba2 = B\ b(n)a\equiv c2(2_1)$



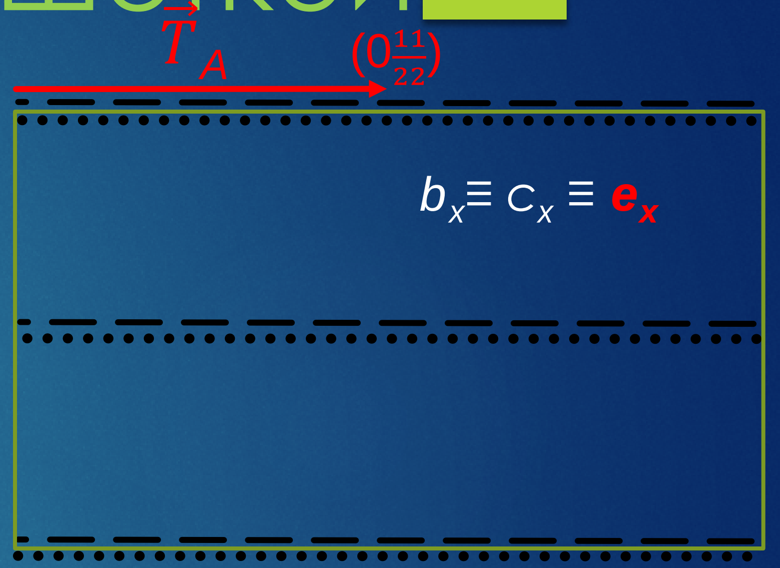
В А-решетке плоскости m_x и m_y топологически нетождественны

Вывод групп ромбической гемиэдрии *mm*2

Группы с А-решеткой

0	I	II	III
A	*m*≡*n*	*m*(*c*)	2
	b≡*c* ≡ $\boldsymbol{e_x}$	*a*(*n*)	2_1

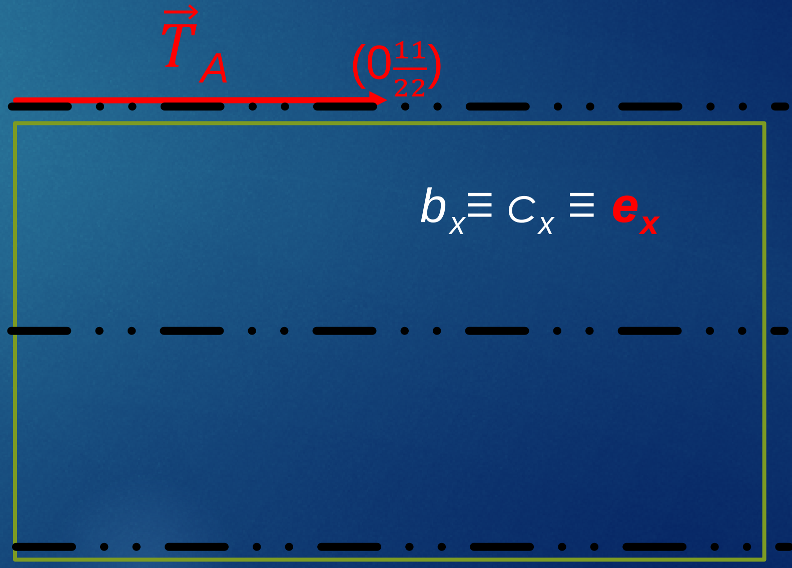
Оправданность такого символа в том, что плоскость **e** - «удобная», то есть не меняет своего названия в зависимости от ориентации относительно координатных осей.



Если на одном месте фиксируются две различные плоскости *g*, для такого случая вводится новое обозначение плоскости: **e**

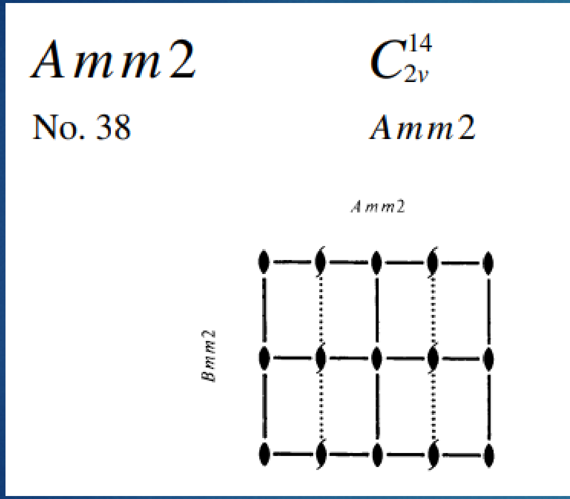
A mm2 = *A mm*2
*A bm*2 = **A em2**
A ma2 = *A ma*2
*A ba*2 = **A ea2**

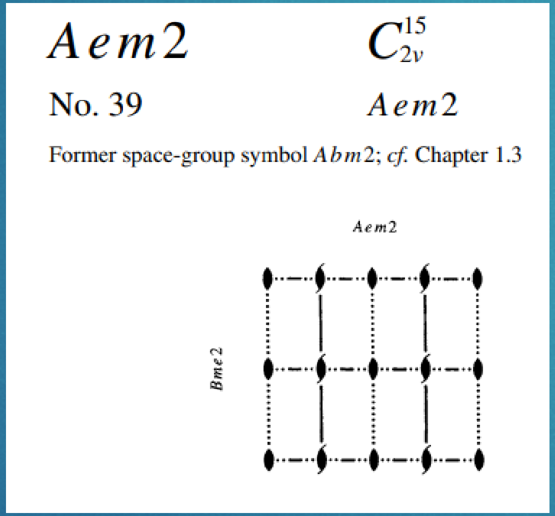
!

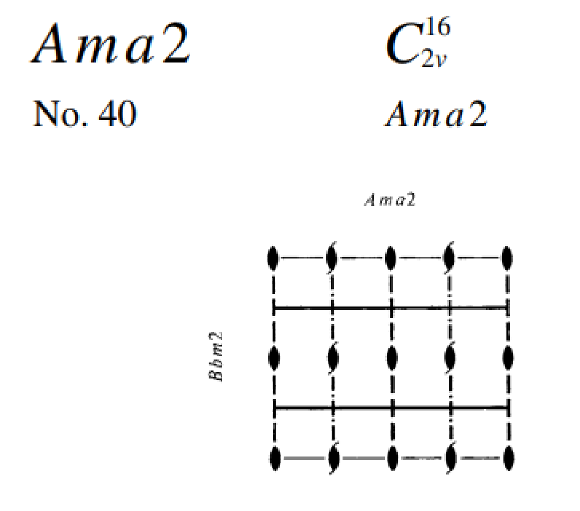


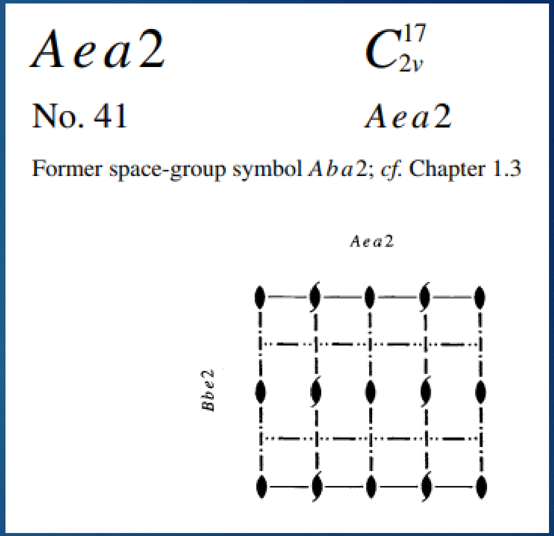
Графическое обозначение плоскости **e**:

Графики ромбических групп с A-решеткой

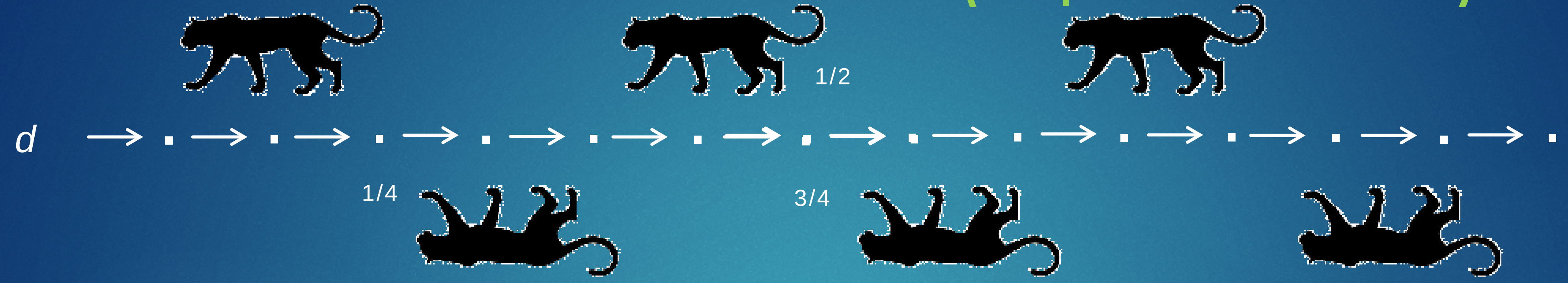






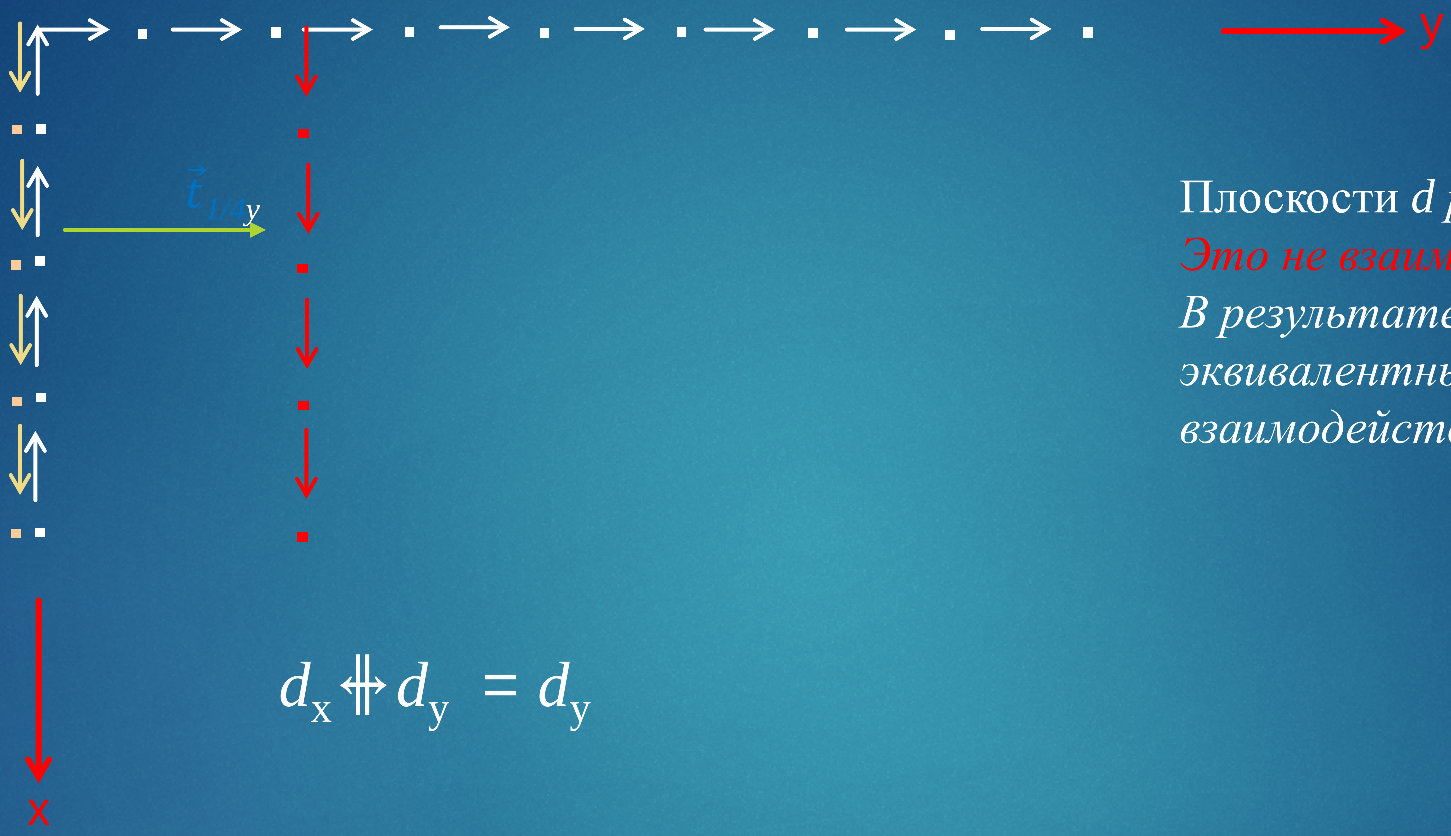


Группы гемиэдрии с d-плоскостями (*F*-решетка)



d-плоскости – клиноплоскости (скольжение осуществляется одновременно по 2 координатным направлениям, то есть по диагонали координатной грани

Особенности взаимодействия и размножения плоскостей *d*

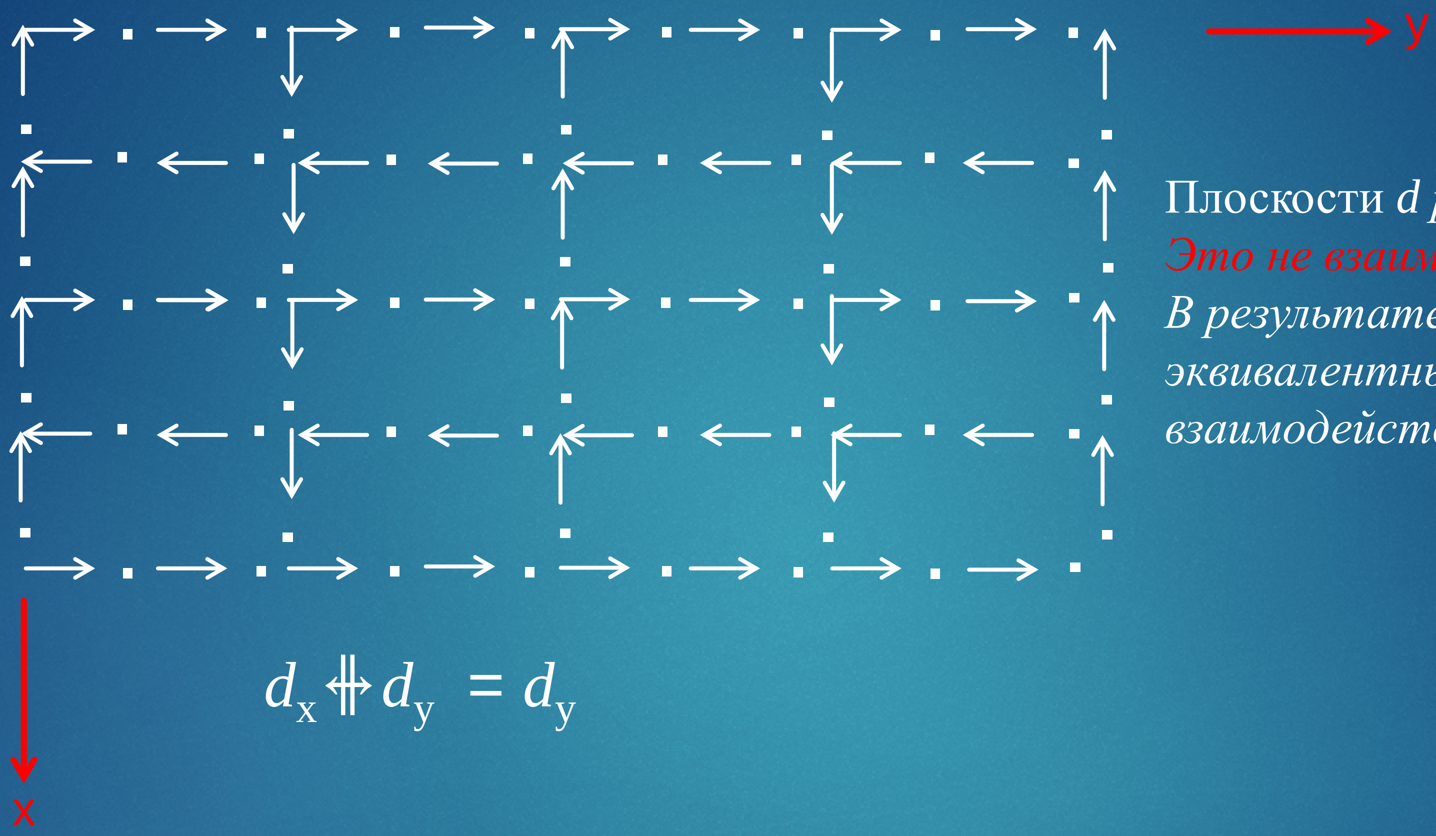


$$d_x \,\#\, d_y = d_y$$

Плоскости d *размножают друг друга.*
Это не взаимодействие!
В результате размножения получаются эквивалентные плоскости d, а в результате взаимодействия – оси второго порядка

Плоскость d_x *отражает плоскость* d_y *и переносит на величину своей трансляции* $\vec{t}_{1/4y}$

Особенности взаимодействия и размножения плоскостей *d*



$$d_x \mathrel{\leftrightarrow\!\!\!\!\!\!\parallel} d_y \;=\; d_y$$

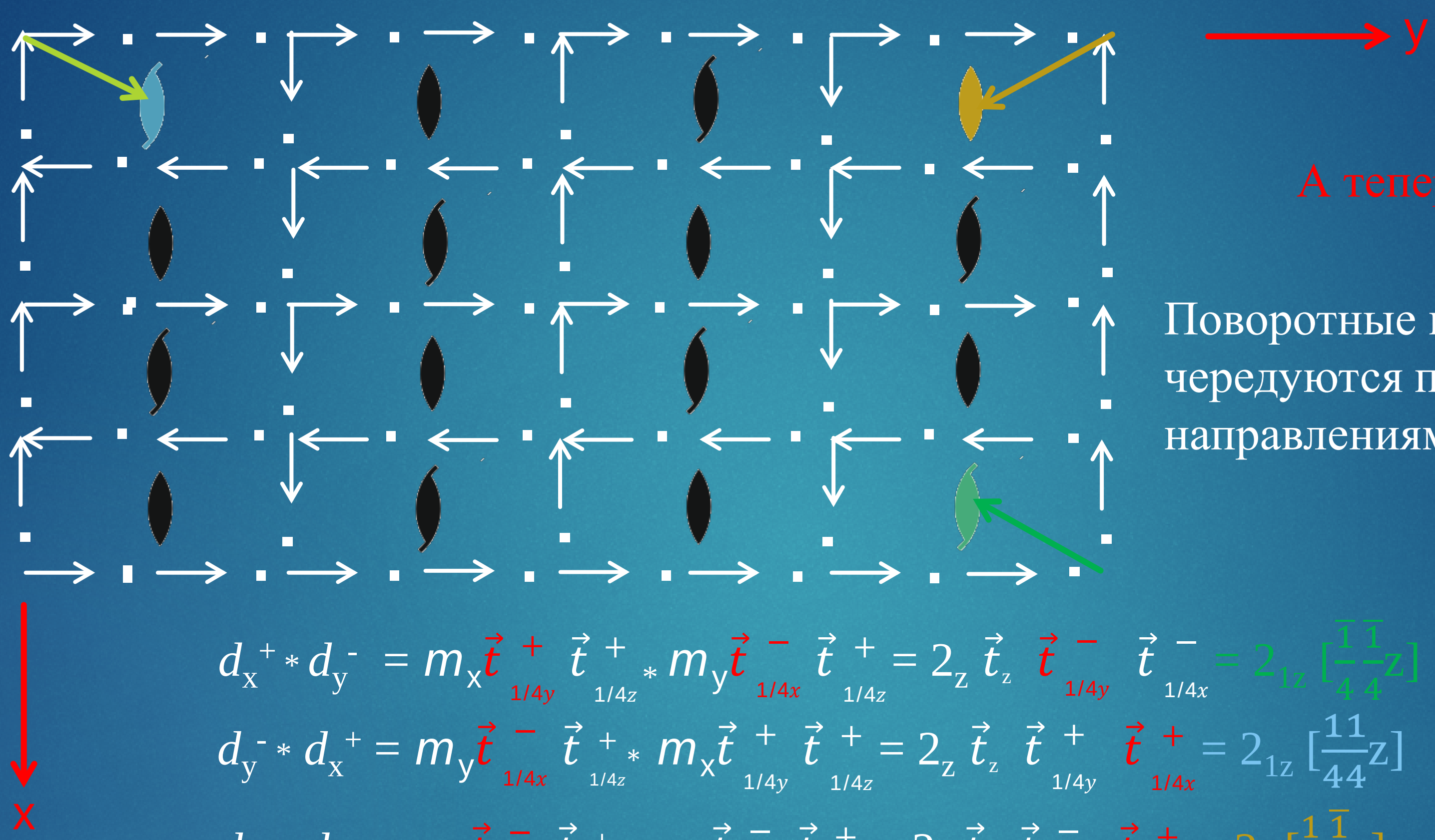
Плоскости d *размножают друг друга.*

Это не взаимодействие!

В результате размножения получаются эквивалентные плоскости d, а в результате взаимодействия – оси второго порядка

На графике плоскости d с противоположным направлением скольжения чередуются вдоль горизонтальных координатных осей

Особенности взаимодействия плоскостей *d*



А теперь взаимодействие плоскостей:

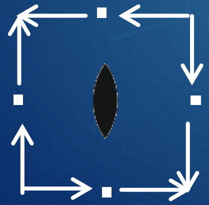
Поворотные и инверсионные оси (2 и 2_1) чередуются по горизонтальным координатным направлениям

$$d_x^{+} * d_y^{-} = m_x \vec{t}^{\,+}_{1/4y}\ \vec{t}^{\,+}_{1/4z} * m_y \vec{t}^{\,-}_{1/4x}\ \vec{t}^{\,+}_{1/4z} = 2_z\ \vec{t}_z\ \vec{t}^{\,-}_{1/4y}\ \vec{t}^{\,-}_{1/4x} = 2_{1z}\ [\tfrac{\bar{1}}{4}\tfrac{\bar{1}}{4}z]$$

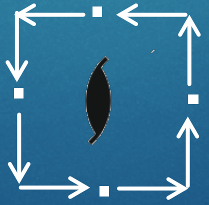
$$d_y^{-} * d_x^{+} = m_y \vec{t}^{\,-}_{1/4x}\ \vec{t}^{\,+}_{1/4z} * m_x \vec{t}^{\,+}_{1/4y}\ \vec{t}^{\,+}_{1/4z} = 2_z\ \vec{t}_z\ \vec{t}^{\,+}_{1/4y}\ \vec{t}^{\,+}_{1/4x} = 2_{1z}\ [\tfrac{1}{4}\tfrac{1}{4}z]$$

$$d_y^{-} * d_x^{-} = m_y \vec{t}^{\,-}_{1/4x}\ \vec{t}^{\,+}_{1/4z} * m_x \vec{t}^{\,-}_{1/4y}\ \vec{t}^{\,+}_{1/4z} = 2_z\ \vec{t}_z\ \vec{t}^{\,-}_{1/4y}\ \vec{t}^{\,+}_{1/4x} = 2_z\ [\tfrac{1}{4}\tfrac{\bar{1}}{4}z]$$

Операции не коммутативны!

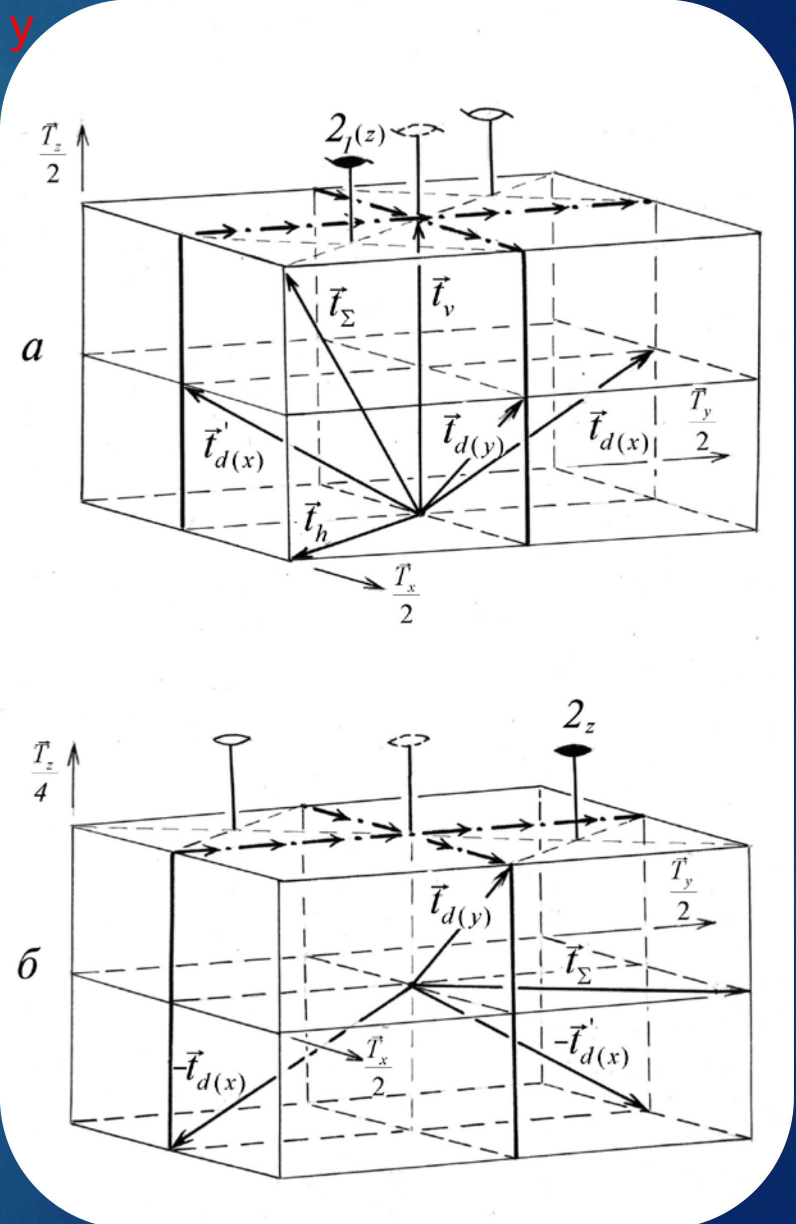


Если стрелочки плоскостей d вокруг оси встречаются или расходятся в вершинах прямоугольника – ось поворотная 2



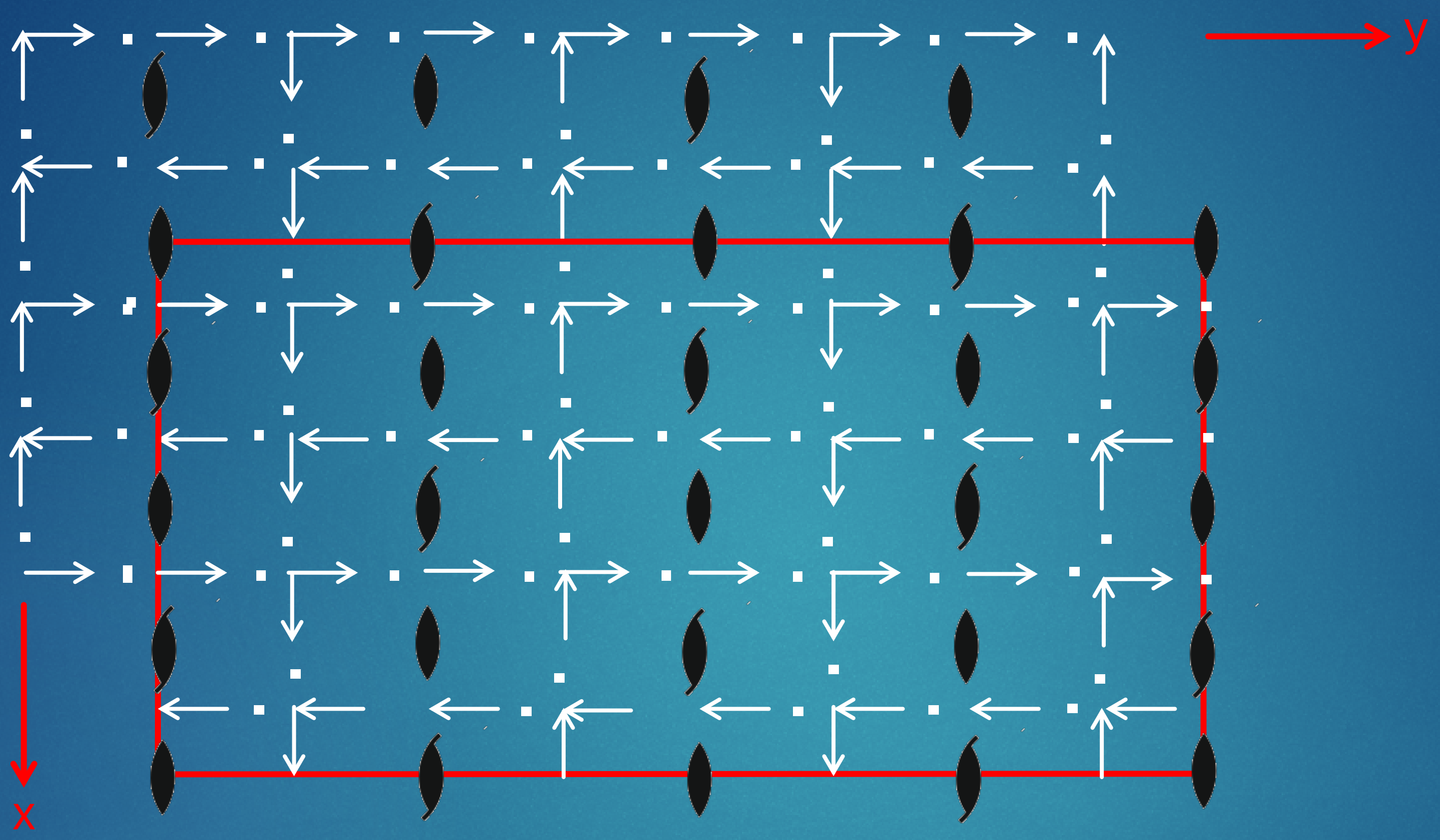
Если стрелочки плоскостей d вокруг оси закручиваются – ось винтовая 2_1

Особенности взаимодействия плоскостей *d*



Выбор начала координат:
начало координат в этой группе не зафиксировано по высоте и находится в той оси 2, ближайшие плоскости d , которой имеют положительное скольжение вдоль координатных осей

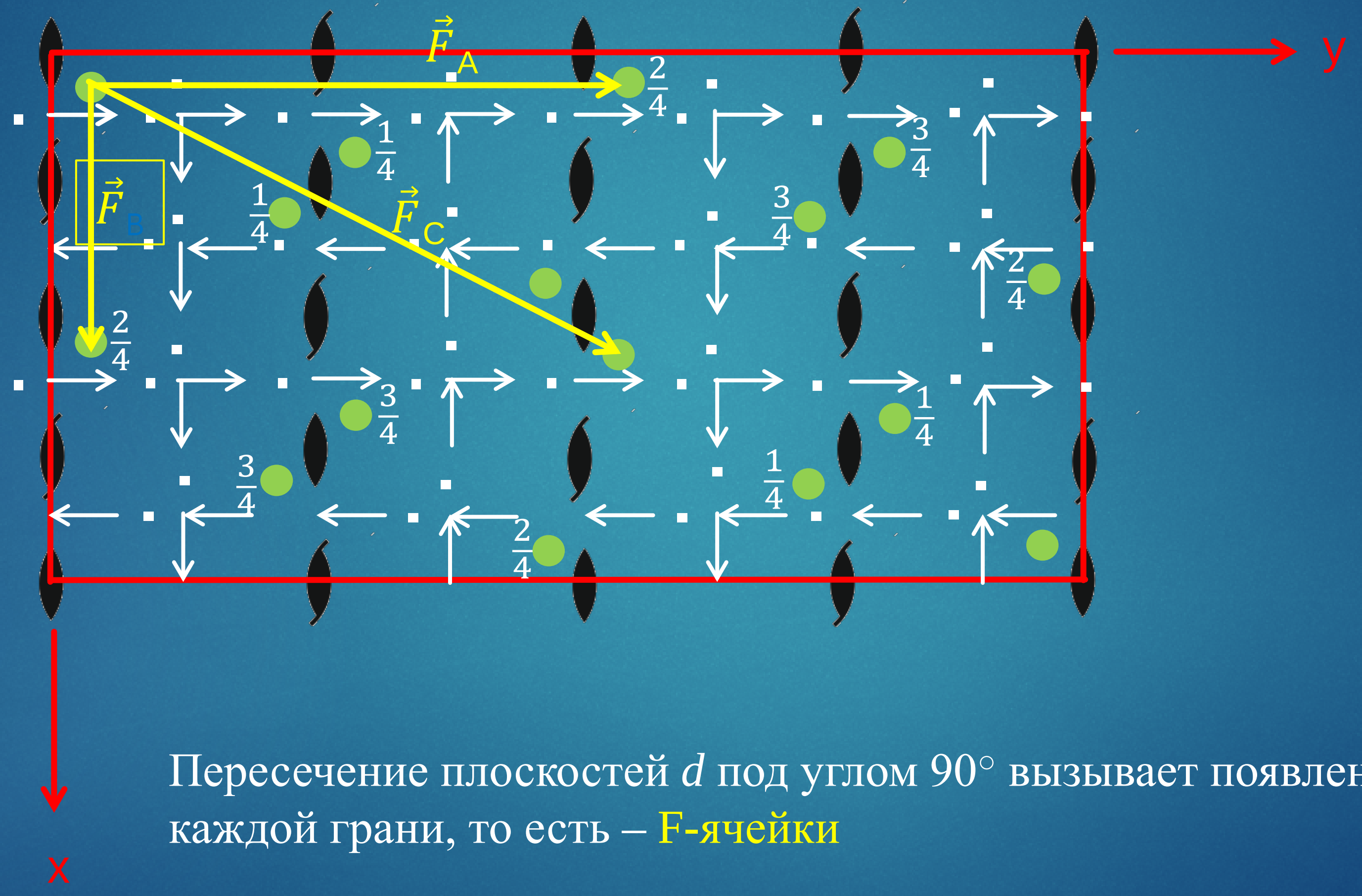
Особенности взаимодействия и размноженияплоскостей *d*



Начало координат выбирается в оси 2, так, что бы ближайшие к началу координат плоскости *d* имели положительное скольжение вдоль координатных осей

Особенности взаимодействия и размножения плоскостей *d*

Общая правильная система точек группы *Fdd*2



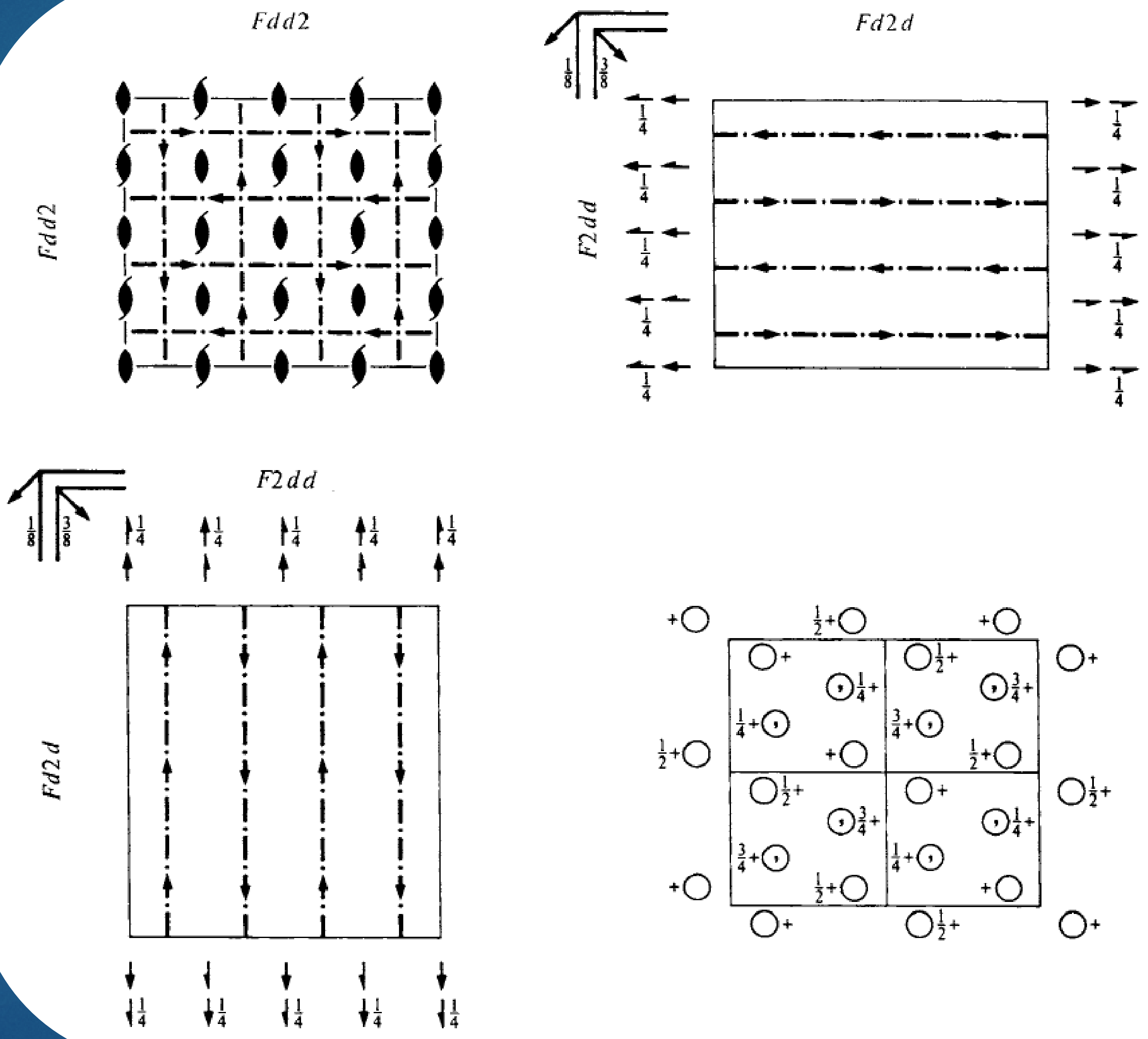
Пересечение плоскостей *d* под углом 90° вызывает появление трансляций в центр каждой грани, то есть – F-ячейки

ВЫВОДЫ:

1. *d*-плоскости проходят в структуре только параллельно центрированной грани
2. *d*-плоскости в ромбической сингонии могут пересекаться только с *d*-плоскостями
3. В каждой плоскости *d* «живет» трансляция в центр параллельной грани.
3. *d*-плоскости в ромбической сингонии встречаются только в F-ячейках
4. *d*-плоскости, чередующиеся в структуре, эквивалентны, но носят **принципиально различный** характер.

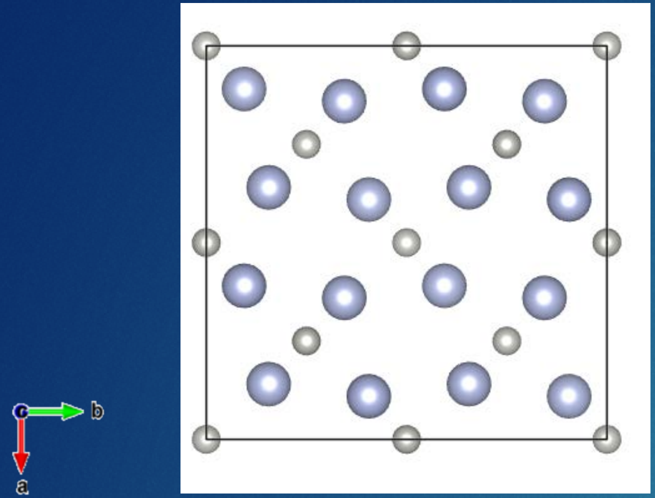
Графики группы *Fdd*2 в различных установках

Стандартная установка

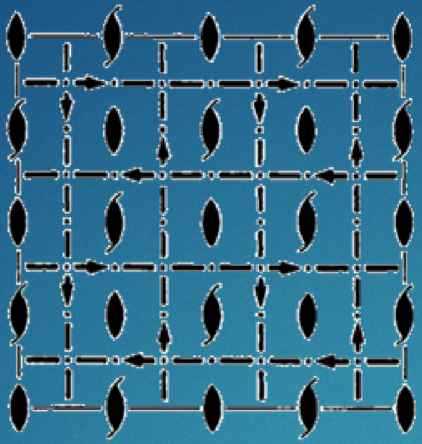


Кристаллическая структура PdF_4

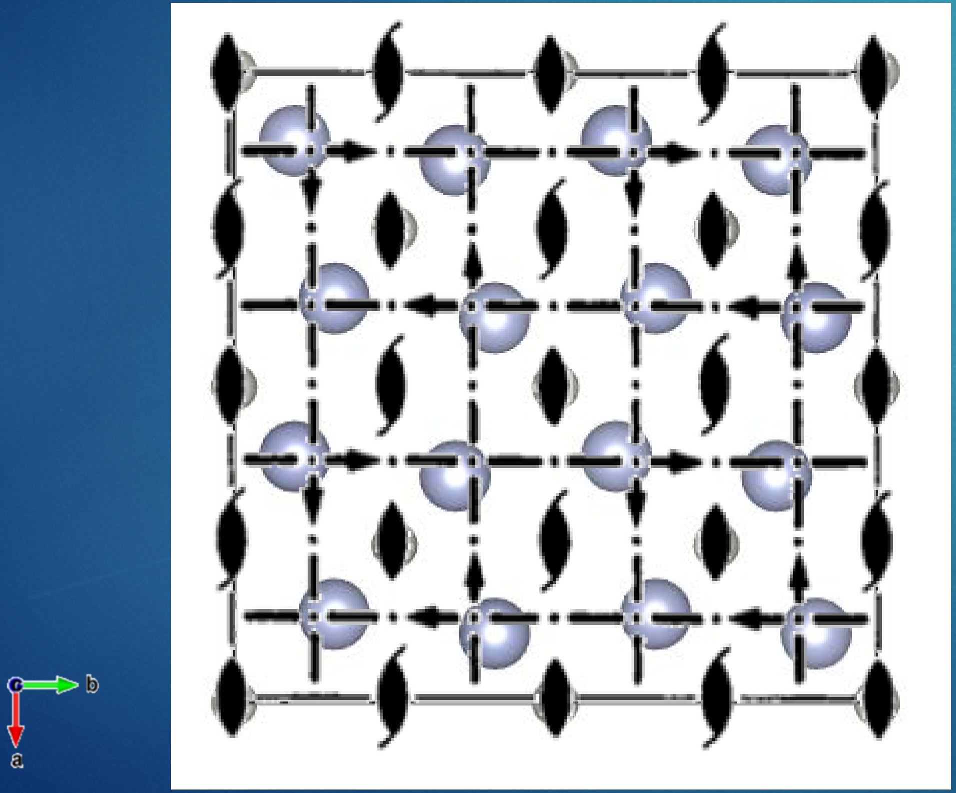
Пространственная группа Fdd2

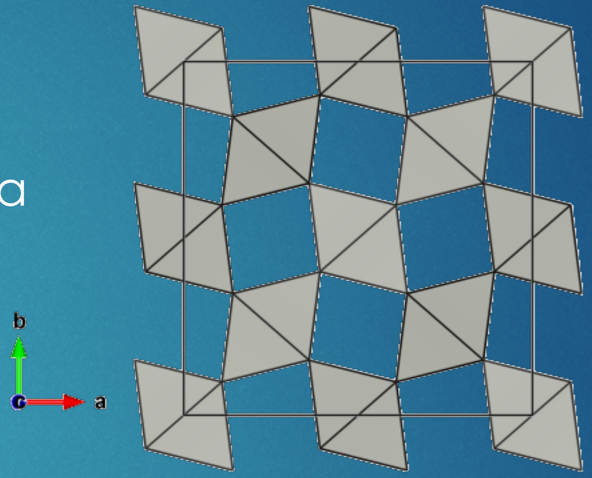


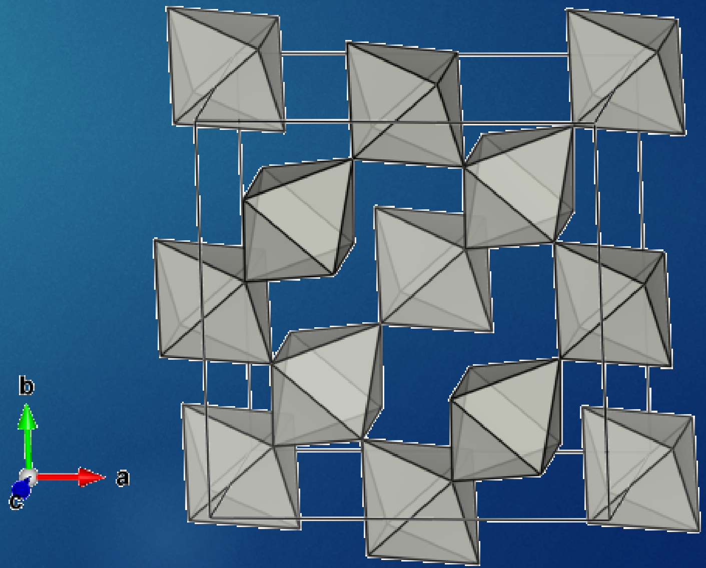
Структура PdF_4



Пространственная группа







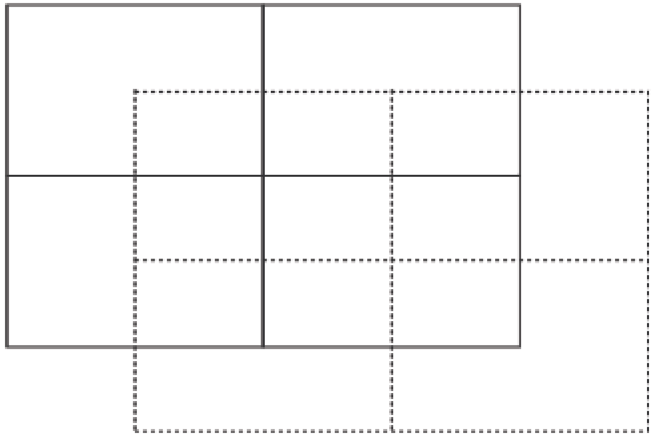


График пространственной группы

Пространственная группа					
Величина симметрии группы (ВСГ)					
Характеристики правильных систем точек пространственной группы					
№	Симметрия позиции	Величина симметрии позиции (ВСП)	Число степеней свободы (ЧСС)	Кратность позиции (ВСГ/ВСП)	Координаты всех точек правильной системы
1					
2					
3					
4					

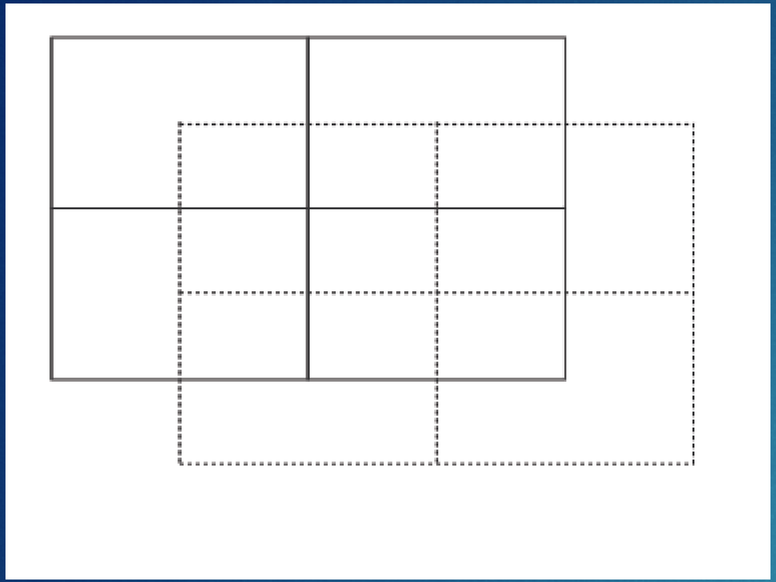


График пространственной группы

Описание конкретной структуры отличается от описания пространственной группы тем, что описываются не все ПСТ, а только занятые атомами. Еще добавляется описание словесное описание структуры с выделением значимых полиэдров

Описание структуры

Пространственная группа					
Величина симметрии группы (ВСГ)					
Характеристики правильных систем точек пространственной группы (ПСТ)					
Атом	Симметрия позиции	Величина симметрии позиции (ВСП)	Число степеней свободы (ЧСС)	Кратность позиции (ВСГ/ВСП)	Координаты всех точек правильной системы
1					
2					
3					
4					

Пространственные группы ромбической сингонии.

Фактор-группа	*mm2*	222	*mmm*	ИТОГО
P	10	?	?	?
C	3	?	?	?
A(B)	4	?	?	?
F	2	?	?	?
I	3	?	?	?
ИТОГО	22	?	?	59