

Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

Л. АКСЕЛЬРУД, Р. ГЛАДИШЕВСЬКИЙ

СИМЕТРІЯ 6D МОДУЛЬОВАНИХ СТРУКТУР

Монографія

У чотирьох частинах

Частина 1

Львів
ЛНУ імені Івана Франка
2021

УДК 548.736

А 42

Рецензенти:

д-р хім. наук, проф. *Л. О. Василечко*
(Національний університет “Львівська політехніка”);
д-р *П. Ю. Завалій*
(Університет Меріленду, Вашингтон)

*Рекомендовано до друку Вченою радою
Львівського національного університету імені Івана Франка
Протокол № 21/11 від 3 листопада 2021 р.*

Аксельруд Л.

А 42 Симетрія 6D модульованих структур : монографія : у 4 ч. Ч. 1 / Л. Аксельруд, Р. Гладишевський. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2021. – 594 с.

ISBN 978-617-10-0693-5

ISBN 978-617-10-0694-2 (Ч. 1)

Монографія містить повні таблиці надпросторових груп для 6D модульованих структур з операціями симетрії та систематичними погашеннями для встановлення надпросторової групи з експериментальних даних. Ці характеристики є важливою складовою дослідження реальних модульованих кристалічних структур. У таблицях наведено 4531 6D надпросторову групу для 135 вихідних символів 3D просторових груп (триклінна, моноклінна та ромбічна сингонії, №№ 1-46).

Для дослідників у галузі кристалографії, кристалохімії та хімії і фізики твердого тіла.

УДК 548.736

ISBN 978-617-10-0693-5

ISBN 978-617-10-0694-2 (Ч. 1)

© Аксельруд Л., Гладишевський Р., 2021

© Львівський національний університет
імені Івана Франка, 2021

Зміст

Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.	Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.
1	P1	P 1	7	21: cab	A222	A 2 2	80
2	P-1	-P 1	7	21: bca	B222	B 2 2	83
3: c	P2: c = P112 = P2	P 2	7	22	F222	F 2 2	86
4: c	P2: c = P112 ₁ = P21	P 2c	10	23	I222	I 2 2	91
5: c2	C2: c2 = B112 = B2	B 2	11	24	I2 ₁ 2 ₁	I 2b 2c	94
6: c	Pm: c = P11m = Pm	P -2	12	25	Pmm2	P 2 -2	96
7: a3	Pc: a3 = P11a = Pa	P -2ya	15	25: bca	Pm2m	P -2 -2	132
7: c3	Pc: c3 = P11b = Pb	P -2b	16	25: cab	P2mm	P -2 2	161
8: c2	Cm: c2 = B11m = Bm	B -2	17	26	Pmc2 ₁	P 2c -2	187
9: -c1	Cc: -c1 = B11b = Bb	B -2b	19	26: -cba	P2 ₁ am	P -2 2a	197
10: c	P2/m: c = P112/m = P2/m	-P 2	19	26: cab	P2 ₁ ma	P -2a 2a	202
11: c	P2 ₁ /m: c = P112 ₁ /m = P2 ₁ /m	-P 2c	24	26: bca	Pb2 ₁ m	P -2 -2b	210
12: c2	C2/m: c2 = B112/m = B2/m	-B 2	26	26: ba-c	Pcm2 ₁	P 2c -2c	213
13: c1	P2/c: c1 = P112/a = P2/a	-P 2a	29	26: a-cb	Pm2 ₁ b	P -2b -2	219
13: c3	P2/c: c3 = P112/b = P2/b	-P 2b	31	27	Pcc2	P 2 -2c	223
14: c1	P2 ₁ /c: c1 = P112 ₁ /a = P2 ₁ /a	-P 2ac	32	27: cab	P2aa	P -2a 2	231
14: c3	P2 ₁ /c: c3 = P112 ₁ /b = P2 ₁ /b	-P 2bc	33	27: bca	Pb2b	P -2b -2b	237
15: -c1	C2/c: -c1 = B112/b = B2/b	-B 2b	33	28	Pma2	P 2 -2a	241
16	P222	P 2 2	34	28: -cba	P2cm	P -2c 2	253
17: cab	P2 ₁ 22	P 2a 2a	50	28: cab	P2mb	P -2b 2	261
17: bca	P22 ₁ 2	P 2 2b	55	28: ba-c	Pbm2	P 2 -2b	266
17	P222 ₁	P 2c 2	58	28: bca	Pc2m	P -2c -2c	273
18	P2 ₁ 2 ₁ 2	P 2 2ab	62	28: a-cb	Pm2a	P -2a -2a	280
18: bca	P2 ₁ 22 ₁	P 2ac 2ac	64	29	Pca2 ₁	P 2c -2ac	290
18: cab	P22 ₁ 2 ₁	P 2bc 2	65	29: cab	P2 ₁ ab	P -2b 2a	293
19	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	P 2ac 2ab	67	29: -cba	P2 ₁ ca	P -2ac 2a	295
20	C222 ₁	C 2c 2	68	29: a-cb	Pb2 ₁ a	P -2a -2ab	297
20: cab	A2 ₁ 22	A 2a 2a	70	29: ba-c	Pbc2 ₁	P 2c -2b	298
21	C222	C 2 2	71	29: bca	Pc2 ₁ b	P -2ac 2a	300

Номер	Символи		Номер	Символи		Стор.
	Нерманн-Маугуин	Hall	Номер	Нерманн-Маугуин	Hall	Стор.
30	Pnc2	P 2 -2bc	38	Amm2	A 2 -2	409
30:-cba	P2an	P -2ab 2	38:a-cb	Am2m	A -2 -2	417
30:cab	P2na	P -2ac 2	38:cab	B2mm	B -2 2	422
30:bca	Pb2n	P -2ab-2ab	38:ba-c	Bmm2	B 2 -2	425
30:ba-c	Pcn2	P 2 -2ac	38:-cba	C2mm	C -2 2	432
30:a-cb	Pn2b	P-2bc-2bc	38:bca	Cm2m	C -2 -2	447
31	Pmn2 ₁	P 2ac -2	39	Abm2	A 2 -2c	454
31:cab	P2:imn	P -2ab 2ab	39:a-cb	Ac2m	A -2c -2c	462
31:a-cb	Pm2:in	P -2ab -2	39:ba-c	Bma2	B 2 -2c	467
31:bca	Pn2:im	P -2 -2bc	39:cab	B2cm	B -2c 2	473
31:ba-c	Pnm2 ₁	P 2bc -2bc	39:-cba	C2mb	C -2b 2	476
32	Pba2	P 2 -2ab	39:bca	Cm2a	C -2b -2b	491
32:cab	P2cb	P -2bc2	40	Ama2	A 2 -2a	498
32:bca	Pc2a	P -2ac-2ac	40:a-cb	Am2a	A -2a -2a	501
33	Pna2 ₁	P 2c -2n	40:cab	B2mb	B -2b 2	503
33:-cba	P2:cn	P -2n 2a	40:ba-c	Bbm2	B 2 -2b	504
33:cab	P2:nb	P -2bc 2a	40:-cba	C2cm	C -2c 2	505
33:ba-c	Pbn2 ₁	P 2c -2ab	40:bca	Cc2m	C -2c -2c	510
33:bca	Pc2:in	P -2n -2ac	41	Aba2	A 2 -2ac	512
33:a-cb	Pn2:ia	P -2ac-2n	41:a-cb	Ac2a	A -2ac-2ac	515
34	Pnn2	P 2 -2n	41:cab	B2cb	B -2bc 2	517
34:cab	P2nn	P -2n 2	41:ba-c	Bba2	B 2 -2bc	518
34:bca	Pn2n	P -2n -2n	41:-cba	C2cb	C -2bc2	519
35	Cmim2	C 2 -2	41:bca	Cc2a	C -2bc-2bc	524
35:cab	A2mm	A -2 2	42	Fmm2	F 2 -2	526
35:bca	Bm2m	B -2 -2	42:bca	Fm2m	F -2 -2	539
36	Cmc2 ₁	C 2c -2	42:cab	F2mm	F -2 2	548
36:ba-c	Ccm2 ₁	C 2c -2c	43	Fdd2	F 2 -2d	560
36:-cba	A2:iam	A -2 2a	43:bca	Fd2d	F -2d -2d	562
36:cab	A2:ima	A -2a 2a	43:cab	F2dd	F -2d 2	562
36:bca	Bb21m	B -2 -2b	44	Imm2	I 2 -2	564
36:a-cb	Bm21b	B -2b -2	44:bca	Im2m	I -2 -2	567
37	Ccc2	C 2 -2c	44:cab	I2mm	I -2 2	568
37:cab	A2aa	A -2a 2	45	lba2	I 2 -2c	572
37:bca	Bb2b	B -2b -2b	45:bca	Ic2a	I -2b -2b	574

Номер	Символи Hermann-Mauguin	Номер	Символи Hermann-Mauguin	Стор.
45: cab	I 2c b	46: ba-c	I 2 -2b	587
46	I ma 2	46: bca	I -2c -2c	589
46: -cba	I 2c m	46: a-cb	I -2a -2a	591
46: cab	I 2m b			

Вступ

Для класичної кристалографії та кристалохімії, що базуються на симетрії 3-вимірних (3D) просторових груп [1], періодичність ґратки є фундаментальним поняттям. Натомість, багато реальних кристалів є аперіодичними – їхні структури характеризуються дальнім порядком без 3D трансляційної симетрії. Дослідження таких кристалів, відомих як модульовані і композитні структури та квазікристали, вимагає використання груп симетрії багатовимірних просторів (4D-6D). Модуляцію розглядають як періодичну деформацію базової структури, що має симетрію 3D просторової групи. Якщо періодичність модуляції не можна описати періодичністю базової структури, то модульовану кристалічну структуру називають неспіввимірною.

Таблиці символів і спеціальних умов відбиттів (систематичних погашень) 4D (3+1D) надпросторових груп модульованих структур приведені в Міжнародних кристалографічних таблицях [2]. Відповідні таблиці для 5D та 6D модульованих структур були вперше укладені А. Ямамото [3], але були неповними і містили нестандартизовані символи 3D просторових груп, що ускладнювало їхнє використання. Недоліком цих таблиць також була відсутність переліку операцій симетрії та систематичних погашень для надпросторових груп зі змінним абрисом елементарної комірки. Удосконалені позначення надпросторових груп для 5D та 6D модульованих структур представлені в працях [4,5] і реалізовані на вебресурсі [6]. Доступна інформація містить лише символи надпросторових груп, а відповідні операції симетрії та систематичні погашення можуть бути одержані лише після додаткових розрахунків, що ускладнює використання ресурсу. Праця [7] містить повні таблиці 3332 5D надпросторових груп для 327 вихідних символів 3D просторових груп.

Монографія “Симетрія 6D модульованих структур” (Частина 1) містить таблиці надпросторових груп триклінної, моноклінної та ромбічної сингоній (№№ 1-46 3D просторових груп) для 6D модульованих структур з операціями симетрії, а також систематичними погашеннями, за якими надпросторова група може бути визначена з експериментальних даних. Для векторів модуляції прийняте основне стандартне формулювання згідно з Міжнародними кристалографічними таблицями: порядок компонентів α, β, γ відповідно до напрямів X, Y, Z.

Для надпросторових груп моноклінної сингонії стандартними є установки з кутом моноклінності γ . Всі параметри одержані за допомогою програм, що є частиною пакету програм WinCSD [8].

У таблицях застосований такий порядок запису:

1. Номер і символ 3D просторової групи згідно з Міжнародними кристалографічними таблицями.
2. Символ 6D надпросторової групи, який включає символ 3D просторової групи базової структури та такі елементи:
 - а) три вектори модуляції (α, β, γ) за напрямками X, Y, Z;
 - б) символи додаткових трансляцій 0, $s=1/2$, $q=1/4, 3/4$, $t=1/3, 2/3$, $h=1/6, 5/6$ за четвертою, п'ятою та шостою координатами.
3. **Coordinates** – координати атомів у загальній правильній системі точок, які позначені символами x, y, z, t, p, q з частковими трансляціями.
4. **Reflection conditions** – умови відбиттів (систематичні погашення) за індексами Міллера hklmni 6D оберненого простору.
5. **Bravais vector(s)** – вектори Браве.

У таблицях (Частина 1) приведено 4531 6D надпросторову групу для 135 вихідних символів 3D просторових груп.

1. T. Hahn (Ed.), International Tables for Crystallography, Volume A – Space-Group Symmetry, Dordrecht: Kluwer, 2002, 911 p.
2. A.J.C. Wilson, E. Prince (Eds.), International Tables for Crystallography, Volume C – Mathematical, Physical and Chemical Tables, Dordrecht: Kluwer, 1999, 992 p.
3. <http://wcp-ar.eng.hokudai.ac.jp/yamamoto/>
4. H.T. Stokes, B.J. Campbell, S. van Smaalen, Acta Cryst. A, 2011, Vol. 67, P. 45-55.
5. S. van Smaalen, B.J. Campbell, H.T. Stokes, Acta Cryst. A, 2013, Vol. 69, P. 75-90.
6. <https://stokes.byu.edu/iso/ssg.php>
7. Л. Аксельруд, Р. Гладішевський, Симетрія 5D модульованих структур, Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2020, 618 с.
8. L. Aksefud, Y. Grin, J. Appl. Cryst., 2014, Vol. 47, P. 803-805.

Наукове видання

**АКСЕЛЬРУД Лев Григорович,
ГЛАДИШЕВСЬКИЙ Роман Євгенович**

СИМЕТРІЯ 6D МОДУЛЬОВАНИХ СТРУКТУР

Монографія

У чотирьох частинах

Частина 1

Формат 60x84/8. Ум. друк. арк. 69,1. Тираж 100 пр. Зам.

Видавець та виготовлювач:
Львівський національний університет імені Івана Франка.
вул. Університетська, 1, м. Львів, 79000.

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру видавців, виготівників
і розповсюджувачів видавничої продукції.
Серія ДК №3059 від 13.12.2007 р.