

Міністерство освіти і науки України  
Львівський національний університет імені Івана Франка

**Л. АКСЕЛЬРУД, Р. ГЛАДИШЕВСЬКИЙ**

# **СИМЕТРІЯ 6D МОДУЛЬОВАНИХ СТРУКТУР**

Монографія

У чотирьох частинах

**Частина 2**

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. 2 / Л. Аксельруд, Р. Гладишевський. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2021. – 598 с.

ISBN 978-617-10-0693-5

ISBN 978-617-10-0695-9 (Ч. 2)

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 3603 6D надпросторові групи для 76 вихідних символів 3D просторових груп (ромбічна сингонія, №№ 47-64).

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

УДК 548.736

ISBN 978-617-10-0693-5

ISBN 978-617-10-0695-9 (Ч. 2)

© 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.
47	Pmmm	-P 2 2	6	54:bca	Pcb	-P 2bc 2b	390
48	Pnnn	P 2 2 -1n	99	54:-cba	Pcaa	-P 2ac 2c	393
49	Pccm	-P 2 2c	107	54:ba-c	Pccb	-P 2b 2c	400
49:bca	Pbmb	-P 2b 2b	127	55	Pbam	-P 2 2ab	403
49:cab	Pmaa	-P 2a 2	139	55:bca	Pcma	-P 2ac 2ac	408
50:1	Pban	P 2 2 -1ab	169	55:cab	Pmcb	-P 2bc 2	413
50:bca	Pcna	P 2 2 -1ac	176	56	Pccn	-P 2ab 2ac	419
50:cab	Pncb	P 2 2 -1bc	184	56:bca	Pbnb	-P 2bc 2ab	421
51	Pmma	-P 2a 2a	192	56:cab	Pnaa	-P 2ac 2bc	422
51:cab	Pbmm	-P 2 2b	213	57	Pbcm	-P 2c 2b	425
51:-cba	Pcmm	-P 2c 2c	233	57:bca	Pbma	-P 2a 2ab	429
51:a-cb	Pmam	-P 2 2a	255	57:ba-c	Pcam	-P 2c 2ac	432
51:bca	Pmcm	-P 2c 2	288	57:a-cb	Pcmb	-P 2bc 2c	438
51:ba-c	Pmmb	-P 2b 2	309	57:-cba	Pmab	-P 2b 2a	442
52	Pnna	-P 2a 2bc	323	57:cab	Pmca	-P 2ac 2a	448
52:cab	Pbnn	-P 2n 2b	325	58	Pnmm	-P 2 2n	459
52:-cba	Pcnn	-P 2ab 2c	330	58:bca	Pnmn	-P 2n 2n	461
52:a-cb	Pnan	-P 2n 2bc	332	58:cab	Pmnn	-P 2n 2	462
52:bca	Pncn	-P 2ab 2n	334	59	Pmmn	-P 2ab 2a	465
52:ba-c	Pnmb	-P 2b 2n	337	59:bca	Pmnm	-P 2c 2a	471
53	Pmna	-P 2ac 2	338	59:cab	Pnmm	-P 2c 2bc	480
53:cab	Pbmn	-P 2ab 2ab	345	60	Pbcn	-P 2n 2ab	488
53:-cba	Pcmm	-P 2 2ac	353	60:bca	Pbna	-P 2ac 2b	489
53:a-cb	Pman	-P 2ab 2	362	60:ba-c	Pcan	-P 2n 2c	490
53:bca	Pncm	-P 2 2bc	366	60:a-cb	Pcnb	-P 2b 2ac	491
53:ba-c	Pnmb	-P 2bc 2bc	370	60:-cba	Pnab	-P 2bc 2n	492
54	Pcca	-P 2a 2ac	373	60:cab	Pnca	-P 2a 2n	494
54:cab	Pbaa	-P 2a 2b	379	61	Pbca	-P 2ac 2ab	497
54:a-cb	Pbab	-P 2b 2ab	387	61:ba-c	Pcab	-P 2bc 2ac	500

Номер	Символи Hermann-Mauguin	Символи Hall	Стор.	Номер	Символи Hermann-Mauguin	Символи Hall	Стор.
62	Pnma	-P 2ac 2n	500	63: cab	Amma	-A 2a 2a	539
62: cab	Pbnm	-P 2c 2ab	502	63: bca	Bbmm	-B 2 2b	545
62: -cba	Pcmn	-P 2n 2ac	505	63: a-cb	Bmmb	-B 2b 2	549
62: bca	Pmcn	-P 2n 2a	507	64	Cmca	-C 2bc 2	553
62: ba-c	Pmnb	-P 2bc 2a	508	64: ba-c	Ccmb	-C 2bc 2bc	572
62: a-cb	Pnam	-P 2c 2n	509	64: cab	Abma	-A 2ac 2ac	577
63	Cmcm	-C 2c 2	510	64: -cba	Acam	-A 2 2ac	582
63: ba-c	Ccmm	-C 2c 2c	530	64: bca	Bbcm	-B 2 2bc	586
63: -cba	Amam	-A 2 2a	534	64: a-cb	Bmab	-B 2bc 2	590

## 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 деформування 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 2) містить таблиці надпросторових груп ромбічної сингонії (№№ 47-64 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  $\alpha, \beta, \gamma$  відповідно до напрямів X, Y, Z.

Для надпросторових груп моноклінної сингонії стандартними є установки з кутом моноклінності  $\gamma$ . 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 ( $\alpha, \beta, \gamma$ ) 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  $hklmn$  6D оберненого простору.
5. **Bravais vector(s)** – вектори Браве.

У таблицях (Частина 2) приведено 3603 6D надпросторові групи для 76 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. Aksefrud, 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 2**

Формат 60x84/8. Ум. друк. арк. 69,5. 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.