

Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

Л. АКСЕЛЬРУД, Р. ГЛАДИШЕВСЬКИЙ

СИМЕТРІЯ 6D МОДУЛЬОВАНИХ СТРУКТУР

Монографія

У чотирьох частинах

Частина 4

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. 4 / Л. Аксельруд, Р. Гладішевський. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2021. – 354 с.

ISBN 978-617-10-0693-5
ISBN 978-617-10-0697-3 (Ч. 4)

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 1125 6D надпросторових груп для 103 вихідних символів 3D просторових груп (тетрагональна, тригональна, гексагональна та кубічна сингонії, №№ 128-230).

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

УДК 548.736

ISBN 978-617-10-0693-5
ISBN 978-617-10-0697-3 (Ч. 4)

© Аксельруд Л., Гладішевський Р., 2021
© Львівський національний університет
імені Івана Франка, 2021

Зміст

Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.	Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.
128	P4/mnc	-P 4 2n	6	157	P31m	P 3 -2	153
129	P4/nmm	-P 4a 2a	10	158	P3c1	P 3 -2" c	156
130	P4/ncc	-P 4a 2ac	23	159	P31c	P 3 -2c	156
131	P4 ₂ /mmc	-P 4c 2	28	160:H	R3m:H	R 3 2"	158
132	P4 ₂ /mcm	-P 4c 2c	41	161:H	R3c:H	R 3 -2" c	159
133	P4 ₂ /nbc	-P 4ac 2b	57	162	P-31m	-P 3 2	160
134	P4 ₂ /nmm	-P 4ac 2bc	65	163	P-31c	-P 3 2c	164
135	P4 ₂ /mbc	-P 4c 2ab	77	164	P-3m1	-P 3 2"	166
136	P4 ₂ /mnm	-P 4n 2n	82	165	P-3c1	-P 3 2" c	168
137	P4 ₂ /hmc	-P 4ac 2a	88	166:H	R-3m:H	-R 3 2"	169
138	P4 ₂ /hcm	-P 4ac 2ac	94	167:H	R-3c:H	-R 3 2" c	171
139	I4/mmm	-I 4 2	100	168	P6	P 6	172
140	I4/mcm	-I 4 2c	116	169	P6 ₁	P 6 ₁	173
141	I4 ₁ /amd	-I 4bd 2	130	170	P6 ₅	P 6 ₅	173
142	I4 ₁ /acd	-I 4bd 2c	135	171	P6 ₂	P 6 ₂	174
143	P3	P 3	139	172	P6 ₄	P 6 ₄	174
144	P3 ₁	P 3 ₁	141	173	P6 ₃	P 6 ₃	175
145	P3 ₂	P 3 ₂	141	174	P-6	P -6	175
146:H	R3:H	R 3	142	175	P6/m	-P 6	176
147	P-3	-P 3	142	176	P6 ₃ /m	-P 6c	177
148:H	R-3:H	-R 3	144	177	P622	P 6 2	177
149	P312	P 3 2	144	178	P6 ₁ 22	P 6 ₁ 2	179
150	P321	P 3 2"	146	179	P6 ₅ 22	P 6 ₅ 2	180
151	P3 ₁ 12	P 3 ₁ 2c	147	180	P6 ₂ 22	P 6 ₂ 2c	180
152	P3 ₁ 21	P 3 ₁ 2"	148	181	P6 ₄ 22	P 6 ₄ 2c	181
153	P3 ₂ 12	P 3 ₂ 2c	149	182	P6 ₃ 22	P 6 ₃ 2c	182
154	P3 ₂ 21	P 3 ₂ 2"	150	183	P6mm	P 6 -2	183
155:H	R32:H	R 3 2"	150	184	P6cc	P 6 -2c	185
156	P3m1	P 3 -2"	152	185	P6 ₃ cm	P 6c -2	186

Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.	Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.
186	P6 ₃ mc	P 6c -2c	187	209	F432	F 4 2 3	250
187	P-6m2	P -6 2	188	210	F4 ₁ 32	F 4 3 2	254
188	P-6c2	P -6c 2	189	211	I432	I 4 2 3	256
189	P-62m	P -6 -2	190	212	P4 ₃ 32	P 4acd 2ab 3	260
190	P-62c	P -6c -2c	191	213	P4 ₁ 32	P 4bd 2ab 3	261
191	P6/mmm	-P 6 2	191	214	I4 ₁ 32	I 4bd 2c 3	263
192	P6/mcc	-P 6 2c	198	215	P-43m	P -4 2 3	265
193	P6 ₃ /mcm	-P 6c 2	201	216	F-43m	F -4 2 3	269
194	P6 ₃ /mmc	-P 6c 2c	204	217	I-43m	I -4 2 3	272
195	P23	P 2 2 3	207	218	P-43n	P -4n 2 3	275
196	F23	F 2 2 3	209	219	F-43c	F -4c 2 3	278
197	I23	I 2 2 3	211	220	I-43d	I -4bd 2c 3	280
198	P2 ₁ 3	P 2ac 2ab 3	212	221	Pm-3m	-P 4 2 3	282
199	I2 ₁ 3	I 2b 2c 3	213	222	Pn-3n	-P 4a 2bc 3	291
200	Pm3	-P 2 2 3	214	223	Pm-3n	-P 4n 2 3	296
201	Pn3	-P 2ab 2bc 3	220	224	Pn-3m	-P 4bc 2bc 3	301
202	Fm3	-F 2 2 3	224	225	Fm-3m	-F 4 2 3	309
203	Fd3	-F 2uv 2vw 3	230	226	Fm-3c	-F 4c 2 3	319
204	Im3	-I 2 2 3	233	227	Fd-3m	-F 4vw 2vw 3	327
205	Pa3	-P 2ac 2ab 3	236	228	Fd-3c	-F 4cvw 2vw 3	333
206	Ia3	-I 2b 2c 3	239	229	Im-3m	-I 4 2 3	339
207	P432	P 4 2 3	242	230	Ia-3d	-I 4bd 2c 3	348
208	P4 ₂ 32	P 4n 2 3	246				

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 4) містить таблиці надпросторових груп тетрагональної, тригональної, гексагональної та кубічної сингоній (№№ 128-230 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 4) приведено 1125 6D надпросторових груп для 103 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 4

Формат 60x84/8. Ум. друк. арк. 41,2. 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.