Acta Cryst. (1971). A**27**, 511

О применении 4-мерных пространственных групп симметрии к выводу 3-мерных *p*-цветных групп ($p=1, 2, 3, 4, 6$)

Н. В. Белов и Т. С. Кунцевич

Институт кристаллографии Академии Наук СССР, Москва В-333, Ленинскай проспект 59, СССР

(*Поступила* 9 *июля* 1971 *г*)

The four-dimensional space symmetry groups of the lower systems previously obtained by the authors (*Kristallografiya* (1971), **16**, 5, 268) are used for the independent derivation of 660 Shubnikov groups of triclinic, monoclinic, and orthorhombic systems, and also 179 antisymmetry groups of two-sided infinite bands in three-dimensional space. The crystallographic symmetry groups have been.derived for four-dimensional polar and non-polar rods which, in particular, are used for deriving 126 three-dimensional *p*-coloured point groups ($p=1,2,3,4,6$).

Существует способ вывода (n–1)-мерных кристаллографических одно-, двух- и многоцветных групп симметрии посредством проектирования n-мерных одноцветных групп. Примером может служить вывод А. В. Шубниковым (1951) плоских черно-белых и серых групп антисимметрии конечных фигур с помощью 32 трехмерных точечных групп. Харли (Hurley, 1967) расширил область применения метода лроектирования, давши независимый вывод 122 трехмерных точечных групп антисимметрии из 227 одноцветных 4-мерных групп. Аналогичным образом неоднократно отбирались среди 230 федоровских групп 80 плоских бесконечных групп антисимметрии (Белов, 1959) и 18 плоских p-цветных групп ($p=3,4,6$) (Белов и Тархова, 1956; Инденбом, Белов и Неронова, 1960). В свое время 1651 шубниковская группа были получены чисто трехмерными способами (Заморзаев, 1957, Белов, Неронова и Смирнова, 1955, 1957) только потому, что не были известны 4-мерные федоровские группы. Сейчас созданы предпосылки для полного вывода 4-мерных пространственных групп симметрии в виде 227 кристаллографических геометрических классов (Hurley, 1967) и 64 типов Бравэ решетки (Neubüser & Wondratschek, 1967; Wondratschek, Bülow & Neubüser, 1971) и найдены простейшие 4-мерные федоровскиегруппы–в числе 1237–,содержащие элементы симметрии не выше второго порядка (Кунцевич и Белов, 1971). Указанные группы могут быть использованы в проективном методе для независимого вывода 660 групп антисимметрии триклинной, моноклинной и ромбической сингоний и 179 шубниковских групп бесконечных двусторонних лент (бордюров), что и сделано в настоящей работе. Здесь дается также вывод 126 групп симметрии 4-мерных направленных стержней, изоморфных найденным Заморзаевым и Галярским (Галярский и Заморзаев, 1963; Заморзаев, 1968) 3-мерным группам симметрии подобия. При проектировании вдоль стержневого направления эти 4-мерные группы дают полный набор p-цветных ($p=1,2,3,4,6$) точечных 3-мерных групп: 32 одноцветные, 58 двухцветных (черно-белых) и 36 трех-, четырех- и шестицветных групп, включая энантиоморфные группы.

1. Вывод шубниковских групп низших систем методом проектирования

Исходя из того очевидного факта, что пригодными для проектирования могут быть не все 4-мерные точечные группы симметрии (кристаллические классы), а лишь те из них, которые приводятся к форме

$$\begin{bmatrix} X & 0 \\ 0 & \pm 1 \end{bmatrix} \tag{1}$$

где X–набор целочисленных 3×3 -матриц, Харли (Hurley, 1967) нашел полное число таких классов, равное 88. Распределение этих классов по 15 сингониям можно найти в статье Янсена (Janssen, 1969), а также в систематизированном полном каталоге Вондрачека, Нейбюсера и Бюлова (Wondratschek, Bülow & Neubüser, 1971). В последней работе приведены, в частности, матрицы генераторов для всех голоэдрических классов. 4-мерные точеченые операции симметрии, имеющие $+1$ в нижней строке матричной формы (1), при проектировании вдоль четвертой координаты дадут классические, одноцветные, операции симметрии, в то время как операции симметрии, характеризуемые -1 в форме (1), приводят к двухцвэтным (черно-белым или серым) операциям антисимметрии. Из 24 точечных операций симметрии в $R4$ только 14 приводятся к форме (1) и, следовательно, ригоднып к проектированию. Эти операции представлены в Таблице 1 в обозначениях Харли (Hurley, 1967) и Германа (Hermann, 1949).

Соответствующие 3-мерные операции симметрии (антисимметрии) даны здесь в интернациональной символике (Белов, Неронова и Смирнова, 1955, 1957). Обозначения Германа позволяют сразу определить, одну или две 3-мерные операции антисимметрии дает в проекции та или иная 4-мерная операция обычной симметрии. Напомним, что в символике Германа позиция каждого частного порядка соответствует либо одному независимому координатному направлению, либо нескольким эквивалентным осям, связанным между собой симметрическими операциями. В первом случае частный порядок может быть либо 1, что соответствует $+1$ в форме (1), либо 2, чтос оответствует -1 в форме (1); во втором случае частные порядки равны 3, 4 или 6. Любое направление, которому отвечает частный порядок 1 или 2, может быть взято в качестве проектной оси*, и если в символе Германа фигурируют одновременно оба эти частные порядки, то в проекции получаем две 3-мерные операции, обычную и черно-белую (или серую). Если же символ Германа содержит одноименные частные порядки: либо только 1, либо только 2, – то в проекции получаем одну трехмерную операцию, обычную для 1 и черно-белую или серую для 2.

Таблица 1. *Проектирование на $R3$ 4-мерных точечных операций симметрии*

I	(1111)	$\to 1$	N'	(321)	$\to \bar{6};\ 3'$
I'	(2222)	$\to \bar{1}'$	R	(411)	$\to 4$
E	(2121)	$\to 2;\ \bar{2}'$	R'	(422)	$\to \bar{4}'$
F	(421)	$\to \bar{4};\ 4'$	T	(1121)	$\to 1';\ \bar{2}$
K	(311)	$\to 3$	T'	(2221)	$\to \bar{1};\ 2'$
K'	(622)	$\to \bar{3}'$	Z	(611)	$\to 6$
N	(621)	$\to \bar{3};\ 6'$	Z'	(322)	$\to \bar{6}'$

Очевидно, что для вывода шубниковских групп антисимметрии методом проектирования должны быть взяты 4-мерные федоровские группы, принадлежащие указанным выше 88 классам. При этом отбор пространственных групп, пригодных для проектирования, можно осуществить двумя различными способами, описанными в работе (Белов, 1959) для трехмерного случая. Применительно к 4-мерному пространству в одном случае отбираются группы, элементы которых сохраняют инвариантной некоторую двухстороннюю гиперплокость. Проектной осью X_4 здесь будет нормаль. к данной гиперплоскости $X_1X_2X_3$, а противоположные знаки (разные цвета) соответствуют двум сторонам особой гиперплоскости. Элементы 4-мерных пространственных групп симметрии двухсторонних гиперплоскостей не могут обладать скольжениями (и сдвигами, Кунцевич и Белов, 1971) вдоль особого направления X_4, а подгруппы трансляций данных групп (решетки Бравэ) не могут иметь компонентов центрирующих трансляций вдоль указанного направления. По существу, здесь мы имеем тот же принцип проектирования, что и для точечных групп, получая в $R3$ только двухцветные группы.

В работе (Белов, 1959) предложен другой принцип отбора проектируемых пространственных групп, согласно которому противоположные цвета (разные знаки) ассоциируются с двумя уровнями эквивалентных (т. е. связанных операциями симметрии) позиций вдоль направления проектирования, например знаком (+) может характеризоваться разность между уровнями, равная нулю, а знаком (–) – половине кратчайшей трансляции вдоль проектной оси X_4. Элементы пространственных групп, отбираемых по второму способу, могут иметь скольжения и сдвиги вдоль X_4, но не могут иметь компонентов зеркального отражения в гиперплоскости $X_1X_2X_3$, перпендикулярной особому направлению X_4. Этот второй способ дает возможность получить в $R3$ не только шубниковские, но вообще p-цветные группы (Janssen, 1969) ($p = 1, 2, 3, 4, 6$), если в число проектируемых групп включить группы, имеющие скользящие элементы симметрии высших порядков: F, K, N, N', R, Z, – и (или) обладающие соответствующим образом центрированными решетками Бравэ.

В данной работе вывод шубниковских групп низших систем осуществлен по первому, 'отражательному' способу. Из нашего списка 1237 пространственных 4-мерных групп симметрии низших систем были отобраны 392 группы, элементы которых сохраняют инвариантной гиперплоскость $X_1X_2X_3$. Поскольку элементы симметрии в указанных группах могут быть по-разному ориентированы относительно выделенного особого направления X_4, получаем 660 гиперпространственных групп симметрии двухсторонних гиперплоскостей в $R4$. При проектировании вдоль оси X_4 эти группы дают 660 трехмерных групп антисимметрии триклинной, моноклинной и ромбической сингоний. Полное совпадение результатов вывода с известным списком шубниковских групп (Заморзаев, 1957; Белов, Неронова и Смирнова, 1955, 1957) может служить определенным критерием правильности вывода 4-мерных пространственных групп симметрии низших систем (Кунцевич и Белов, 1971). Ввиду громоздкости таблиц здесь не приводится список проектируемых 4-мерных групп; егоможно найти в работе (Кунцевич, 1969).

Группы симметрии 4-мерного пространства, распадающегося на $R3$ и $R1$ привлекают особое внимание благодаря их изоморфизму дискретным подгруппам неоднородных групп Лоренца. Такие группы можно рассматривать как группы пространства-времени с дискретными пространственными и временной координатами. Некоторые авторы называют их обобщенными магнитными груп пами (GM), (Janssen, 1969).

* Формально частные порядки 1 и 2 могут соответствовать и связанным координатам (см. например Табл. 4), но в этом случае они не могут определять собой направление проектирования.

2. Группы симметрии 4-мерных бордюрных орнаментов и их проекции на $R3$

Группы симметрии 4-мерных бордюрных орнаментов, или бесконечных дву-двусторонних лент, обладают элементами симметрии не выше второго порядка и потому могут быть легко выведены из нашего списка 1237 пространственных групп симметрии низших систем. Выберем координатную систему в рассматриваемом 4-мерном пространстве таким образом, чтобы ось X_1 совпадала с единственным трансляционным направлением – осью ленты – и определяла вместе с осью X_2, ей перпендикулярной, плоскость ленты. Тогда координата X_3, перпендикулярная плоскости ленты X_1X_2, будет фиксировать две стороны ленты в гиперплоскости $X_1X_2X_3$, а ось X_4 выполняет ту же роль относительно гиперплоскости $X_1X_2X_4$. Топологическую эквивалентность осей координат для данного случая можно выразить следующими соотношениями:

$$X_1 \neq X_2 \neq X_3 = X_4 \qquad (2)$$

Из общего числа 4-мерных групп симметрии низших систем отбираем такие группы, которые характеризуются: (1) примитивной решеткой Бравэ и (2) элементами симметрии, имеющими скольжения и сдвиги только вдоль трансляционной оси X_1, или не имеющими их вовсе. Исходя из соотношения топологической зависимости координатных осей (2), получаем 119 неэквивалентных групп симметрии 4-мерных бордюрных орнаментов.

В Таблице 2 приведен список выведенных групп в символах Германа, при этом так же как и в dаботе (Кунцевич и Белов, 1971) группы содержат только символы генераторов, то-есть независимых элементов группы. В Таблице 2 выписаны также полученные из данных групп путем проектирования вдоль оси X_4 группы антисимметрии 3-мерных бордюрных орнаментов в интернациональной символике (Белов, Кунцевич и Неронова, 1962). Проектирование проводились ‘отражательным’ способом, аналогично предыдущему случаю (§1). Выбирая в качестве проектирующего направления ось X_4, мы тем самым превращаем это направление в особое, топологически уже не тождественное оси X_3. В результате значительная часть групп симметрии 4-мерных бордюров из числа 119 входит в список проектируемых групп в двух неэквивалентных установках. Получаем 179 проектируемых вдоль оси X_4 групп симметрии 4-мерных бордюров, которые дают в $R3$ 179 шубниковских групп антисимметрии 3-мерных двусторонних бесконечных лент: 31 одноцветную, 31 серую и 117 черно-белых, – что совпадает с результатом, полученным ранее другими методами (Белов, Кунцевич и Неронова, 1962; Белов и Неронова, 1961).

Таблица 2. *Группы симметрии 4-мерных бордюрных орнаментов и их проекции на R3*

1.	$p1111$	$p1$
2.	$p2222$	$p\bar{1}'$
3.	$p2111$	$pm11$
4.	$p1211$	$p1m1$
5.	$p1121$	$p11m$
	$p1112$	$p1'$
6.	$p1_1211$	$p1a1$
7.	$p1_1121$	$p11a$
	$p1_1112$	$p'1$
8.	$p1222$	$p2'11$
9.	$p2122$	$p12'1$
10.	$p2212$	$p112'$
	$p2221$	$p\bar{1}$
11.	$p1_1222$	$p2'_111$
12.	$p2111;\ 1222$	$p2'/m11$
13.	$p1211;\ 2122$	$p12'/m1$
14.	$p1121;\ 2212$	$p112'/m$
	$p1112;\ 2221$	$p\bar{1}1'$
15.	$p1_1211;\ 2122$	$p12'/a1$
16.	$p1_1121;\ 2212$	$p112'/a$
	$p1_1112;\ 2221$	$p'\bar{1}$
17.	$p2111;\ 1_1222$	$p2'_1/m11$
18.	$p2211$	$p112$
19.	$p2121$	$p121$
	$p2112$	$pm'11$
20.	$p1221$	$p211$
	$p1212$	$p1m'1$
21.	$p1122$	$p11m'$
22.	$p1_1221$	$p2_111$
	$p1_1212$	$p1a'1$
23.	$p1_1122$	$p11a'$
24.	$p1122;\ 2211$	$p112/m'$
25.	$p1212;\ 2121$	$p12/m'1$
	$p1221;\ 2112$	$p2/m'11$
26.	$p1_1122;\ 2211$	$p112/a'$
27.	$p1_1212;\ 2121$	$p12/a'1$
	$p1_1221;\ 2112$	$p2_1/m'11$
28.	$p2111;\ 1211$	$pmm2$
29.	$p2111;\ 1121$	$pm2m$
	$p2111;\ 1112$	$pm111'$
30.	$p1211;\ 1121$	$p2mm$
	$p1211;\ 1112$	$p1m11'$
31.	$p1121;\ 1112$	$p11m1'$
32.	$p2111;\ 1_1211$	$pma2$
33.	$p2111;\ 1_1121$	$pm2a$
	$p2111;\ 1_1112$	$p'm11$
34.	$p1_1211;\ 1121$	$p2_1am$
	$p1_1211;\ 1112$	$p1a11'$
35.	$p1_1121;\ 1112$	$p11a1'$
	$p1_1112;\ 1121$	$p'11m$
36.	$p1211;\ 1_1121$	$p2_1ma$
	$p1211;\ 1_1112$	$p'1m1$
37.	$p1_1211;\ 1_1121$	$p2aa$
	$p1_1211;\ 1_1112$	$p'1a1$
38.	$p1_1121;\ 1_1112$	$p'11a$
39.	$p2211;\ 1222$	$p2'2'2$
40.	$p2121;\ 1222$	$p2'22'$
	$p2112;\ 1222$	$p2'/m'11$
41.	$p1221;\ 2122$	$p22'2'$
	$p1212;\ 2122$	$p12'/m'1$
42.	$p1122;\ 2212$	$p112'/m'$
43.	$p2211;\ 1_1222$	$p2'_12'2$
44.	$p2121;\ 1_1222$	$p2'_122'$
	$p2112;\ 1_1222$	$p2'_1/m'11$
45.	$p1_1221;\ 2122$	$p2_12'2'$
	$p1_1221;\ 2122$	$p12'/a'1$
46.	$p1_1122;\ 2212$	$p112'/a'$
47.	$p2111;\ 1211;\ 1122$	$pmmm'$
48.	$p2111;\ 1121;\ 1212$	$pmm'm$
	$p2111;\ 1112;\ 1212$	$p2/m111'$

Таблица 2 *(продолжение)*

49.	$p1211;\ 1121;\ 2112$	$pm'mm$
	$p1211;\ 1112;\ 2121$	$p12/m11'$
50.	$p1121;\ 1112;\ 2211$	$p112/m1'$
51.	$p2111;\ 1_1211;\ 1122$	$pmam'$
52.	$p2111;\ 1211;\ 1_1122$	$pmma'$
53.	$p2111;\ 1_1211;\ 1_1122$	$pmaa'$
54.	$p2111;\ 1_1121;\ 1212$	$pmm'a$
	$p2111;\ 1_1112;\ 1221$	$p'2/m11$
55.	$p2111;\ 1121;\ 1_1212$	$pma'm$
	$p2111;\ 1112;\ 1_1221$	$p2_1/m11$
56.	$p2111;\ 1_1121;\ 1_1212$	$pma'a$
	$p2111;\ 1_1112;\ 1_1221$	$p'2_1/m11$
57.	$p1_1211;\ 1121;\ 2112$	$pm'am$
	$p1_1211;\ 1112;\ 2121$	$p12/a11'$
58.	$p1211;\ 1_1121;\ 2112$	$pm'ma$
	$p1211;\ 1_1112;\ 2121$	$p'12/m1$
59.	$p1_1211;\ 1_1121;\ 2112$	$pm'aa$
	$p1_1211;\ 1_1112;\ 2121$	$p'12/a1$
60.	$p1_1121;\ 1112;\ 2211$	$p112/a1'$
	$p1_1112;\ 1121;\ 2211$	$p'112/m$
61.	$p1_1121;\ 1_1112;\ 2211$	$p'112/a$
62.	$p2111;\ 1122$	$pm2'm'$
63.	$p2111;\ 1212$	$pmm'2'$
	$p2111;\ 1221$	$p2/m11$
64.	$p1211;\ 2121$	$p12/m1$
	$p1211;\ 2112$	$pm'm2'$
65.	$p1211;\ 1122$	$p2'mm'$
66.	$p1121;\ 2211$	$p112/m$
	$p1112;\ 2211$	$p1121'$
67.	$p1121;\ 2112$	$pm'2'm$
	$p1112;\ 2121$	$p1211'$
68.	$p1121;\ 1212$	$p2'm'm$
	$p1112;\ 1221$	$p2111'$
69.	$p2111;\ 1_1122$	$pm2'a'$
70.	$p2111;\ 1_1212$	$pma'2'$
	$p2111;\ 1_1221$	$p2_1/m11$
71.	$p1_1211;\ 2121$	$p12/a1$
	$p1_1211;\ 2112$	$pm'a2'$
72.	$p1_1211;\ 1122$	$p2'_1am'$
73.	$p1211;\ 1_1122$	$p2'_1ma'$
74.	$p1_1211;\ 1_1122$	$p2'aa'$
75.	$p1_1121;\ 2211$	$p112/a$
	$p1_1112;\ 2211$	$p'112$
76.	$p1_1121;\ 2112$	$pm'2'a$
	$p1_1112;\ 2121$	$p'121$
77.	$p1_1121;\ 1212$	$p2'_1m'a$
	$p1_1112;\ 1221$	$p'211$
78.	$p1121;\ 1_1212$	$p2'_1a'm$
	$p1112;\ 1_1221$	$p2_1111'$
79.	$p1_1121;\ 1_1212$	$p2'a'a$
	$p1_1112;\ 1_1221$	$p'2_111$
80.	$p1221;\ 2121$	$p222$
	$p1212;\ 2112$	$pm'm'2$
81.	$p1122;\ 1212$	$p2m'm'$
82.	$p1122;\ 2112$	$pm'2m'$
83.	$p1_1221;\ 2121$	$p2_122$
	$p1_1212;\ 2112$	$pm'a'2$
84.	$p1_1122;\ 1212$	$p2_1m'a$
	$p1_1122;\ 1221$	$p2a'a'$
85.	$p1122;\ 1_1212$	$p2_1a'm'$
86.	$p1_1122;\ 2112$	$pm'2a'$
87.	$p2111;\ 1211;\ 1121$	$pmmm$
	$p2111;\ 1211;\ 1112$	$pmm21'$
88.	$p1211;\ 1121;\ 1112$	$p2mm1'$
89.	$p2111;\ 1121;\ 1112$	$pm2m1'$
90.	$p2111;\ 1_1211;\ 1121$	$pmam$
	$p2111;\ 1_1211;\ 1112$	$pma21'$
91.	$p2111;\ 1211;\ 1_1121$	$pmma$
	$p2111;\ 1211;\ 1_1112$	$p'mm2$
92.	$p2111;\ 1_1211;\ 1_1121$	$pmaa$
	$p2111;\ 1_1211;\ 1_1112$	$p'ma2$
93.	$p1_1211;\ 1_1121;\ 1_1112$	$p'2aa$

Таблица 2 *(окончание)*

94.	$p1_1211;\ 1121;\ 1112$	$p2_1am1'$
95.	$p1211;\ 1_1121;\ 1112$	$p2_1ma1'$
	$p1211;\ 1121;\ 1_1112$	$p'2mm$
96.	$p1_1211;\ 1_1121;\ 1112$	$p2aa1'$
	$p1_1211;\ 1121;\ 1_1112$	$p'2_1am$
97.	$p1211;\ 1_1121;\ 1_1112$	$p'2_1ma$
98.	$p2111;\ 1_1121;\ 1112$	$pm2a1'$
	$p2111;\ 1121;\ 1_1112$	$p'm2m$
99.	$p2111;\ 1_1121;\ 1_1112$	$p'm2a$
100.	$p1112;\ 1221;\ 2121$	$p2221'$
	$p1121;\ 1212;\ 2112$	$pm'm'm$
101.	$p1211;\ 1122;\ 2112$	$pm'mm'$
102.	$p2111;\ 1122;\ 1212$	$pmm'm'$
103.	$p1_1112;\ 1221;\ 2121$	$p'222$
	$p1_1121;\ 1212;\ 2112$	$pm'm'a$
104.	$p1112;\ 1_1221;\ 2121$	$p2_1221'$
	$p1121;\ 1_1212;\ 2112$	$pm'a'm$
105.	$p1_1112;\ 1_1221;\ 2121$	$p'2_122$
	$p1_1121;\ 1_1212;\ 2112$	$pm'a'a$
106.	$p1_1211;\ 1122;\ 2112$	$pm'am'$
107.	$p1211;\ 1_1122;\ 2112$	$pm'ma'$
108.	$p1_1211;\ 1_1122;\ 2112$	$pm'aa'$
109.	$p2111;\ 1_1122;\ 1212$	$pmm'a'$
	$p2111;\ 1_1122;\ 1221$	$pma'a'$
110.	$p2111;\ 1122;\ 1_1212$	$pma'm'$
111.	$p1122;\ 1212;\ 2112$	$pm'm'm'$
112.	$p1_1122;\ 1212;\ 2112$	$pm'm'a'$
	$p1_1122;\ 1221;\ 2121$	$pm'a'a'$
113.	$p1122;\ 1_1212;\ 2112$	$pm'a'm'$
114.	$p2111;\ 1211;\ 1121;\ 1112$	$pmmm1'$
115.	$p2111;\ 1_1211;\ 1121;\ 1112$	$pmam1'$
116.	$p2111;\ 1211;\ 1_1121;\ 1112$	$pmma1'$
	$p2111;\ 1211;\ 1121;\ 1_1112$	$p'mmm$
117.	$p2111;\ 1_1211;\ 1_1121;\ 1112$	$pmaa1'$
	$p2111;\ 1_1211;\ 1121;\ 1_1112$	$p'mam$
118.	$p2111;\ 1211;\ 1_1121;\ 1_1112$	$p'mma$
119.	$p2111;\ 1_1211;\ 1_1121;\ 1_1112$	$p'maa$

3. Группы симметрии 4-мерных направленных стержней и их проекции на $R3$

Заморзаев и Галярский (Галярский и Заморзаев, 1963; Заморзаев, 1968) заметили, что 3-мерные группы симметрии подобия определенного вида (так называемые конические и часть неконических) изоморфны 4-мерным группам симметрии направленных стержней, и установили полное число этих последних, равное 108. Как оказалось, кристаллографические группы 4-мерных направленных (и ненаправленных) стержней легко выводятся из упомянутых выше 88 точечных групп. Прежде всего среди них следует отобрать классы, определяемые формой (1) §1 с положительной единицей. Таких групп будет 32; в проекции вдоль оси X_4 они дают классические трехмерные классы. Ось X_4 естественно выбрать в качестве оси стержня, т. е. единственного трансляционного направления в данном 4-мерном 'кристаллическом пространстве'. Очевидно, что решетка Бравэ для всех стержневых групп будет одномерной примитивной решеткой p. Это существенно упрощает процедуру вывода названных групп, которая сводится к последовательной замене точечных элементов симметрии в каждом из указанных выше 32 классов на соответствующие элементы со скольжением вдоль оси X_4. Для восьми классов низших сингоний (1–8 в Табл. 3) такие группы уже были выведены (Кунцевич и Белов, 1971), оставалось только их выписать. Для остальных 24 классов вывод проделан заново. В Таблице 3 выписаны полученные таким путем 126 групп симметрии 4-мерных направленных стержней, что согласуется с результатами Заморзаева и Галярского, если не считать 18 энантиоморфных цветных групп, помеченных в Табл. 3 звездочкой, которые были исключены из рассмотрения названными авторами. Как и в Табл. 2, германовский символ группы включает лишь 'генераторы'.

Таблица 3. *Группы симметрии 4-мерных направленных стержней и их проекции на R3*

N пп	Классы в $R4$	в $R3$	4-Мерные группы	Проектные группы
1.	I	C_1	1. $p1111$	1
2.	$T+I$	C_s	2. $p2111$	m
			3. $p2111_1$	m'
3.	$T'+I$	C_i	4. $p2221$	$\bar{1}$
			5. $p2221_1$	$\bar{1}'$
4.	$E+I$	C_2	6. $p2211$	2
			7. $p2211_1$	$2'$
5.	$2T+E+I$	C_{2v}	8. $p2111$; 1211	$mm2$
			9. $p2111_1$; 1211	$m'm2'$
			10. $p2111_1$; 1211_1	$m'm'2$
6.	$T+E+T'+I$	C_{2h}	11. $p2111$; 1221	$2/m$
			12. $p2111_1$; 1221	$2/m'$
			13. $p2111$; 1221_1	$2'/m$
			14. $p2111_1$; 1221_1	$2'/m'$
7.	$3E+I$	D_2	15. $p1221$; 2121	222
			16. $p1221_1$; 2121	$2'22'$
8.	$3T+3E+T'+I$	D_{2h}	17. $p2111$; 1211; 1121	mmm
			18. $p2111_1$; 1211; 1121	$m'mm$
			19. $p2111_1$; 1211_1; 1121	$m'm'm$
			20. $p2111_1$; 1211_1; 1121_1	$m'm'm'$
9.	$2R+E+I$	C_4	21. $p411$	4
			22. $p411_1$	$4^{(4)}$
			23. $p411_2$	$4'$
			24. $p411_3$	$4^{(4)}*$
10.	$2R+4T+E+I$	C_{4v}	25. $p411$; 2111	$4mm$
			26. $p411$; 2111_1	$4m'm'$
			27. $p411_2$; 2111	$4'mm'$
11.	$2R+5E+I$	D_4	28. $p411$; 2121	422
			29. $p411$; 2121_1	$42'2'$
			30. $p411_2$; 2121	$4'22'$
12.	$2F+E+I$	S_4	31. $p421$	$\bar{4}$
			32. $p421_1$	$\bar{4}^{(4)}$
			33. $p421_2$	$\bar{4}'$
			34. $p421_3$	$\bar{4}^{(4)}*$
13.	$2R+2F+T+E+T'+I$	C_{4h}	35. $p411$; 1121	$4/m$
			36. $p411$; 1121_1	$4/m'$
			37. $p411_1$; 1121	$4^{(4)}:m$
			38. $p411_1$; 1121_1	$4^{(4)}:m'$
			39. $p411_2$; 1121	$4'/m$
			40. $p411_2$; 1121_1	$4'/m'$
			41. $p411_3$; 1121	$4^{(4)}:m*$
			42. $p411_3$; 1121_1	$4^{(4)}:m'*$
14.	$2F+3E+2T+I$	D_{2d}	43. $p421$; 2111	$\bar{4}2m$
			44. $p421$; 2111_1	$\bar{4}2'm'$
			45. $p421_2$; 2111	$\bar{4}'2'm$
			46. $p421_2$; 2111_1	$4'2m'$
15.	$2F+2R+5E+5T+T'+I$	D_{4h}	47. $p411$; 1121; 2111	$4/mmm$
			48. $p411$; 1121_1; 2111	$4/m'mm$

Таблица 3 *(продолжение)*

N пп	Классы в $R4$	в $R3$	4-Мерные группы	Проектные группы
			49. $p411$; 1121; 2111_1	$4/mm'm'$
			50. $p411$; 1121_1; 2111_1	$4/m'm'm'$
			51. $p411_2$; 1121; 2111	$4'/mmm'$
			52. $p411_2$; 1121_1; 2111	$4'/m'mm'$
16.	$2K+I$	C_3	53. $p311$	3
			54. $p311_1$	$3^{(3)}$
			55. $p311_2$	$3^{(3)}*$
17.	$2Z+2K+E+I$	C_6	56. $p611$	6
			57. $p611_1$	$6^{(6)}$
			58. $p611_2$	$6^{(3)}$
			59. $p611_3$	$6'$
			60. $p611_4$	$6^{(3)}*$
			61. $p611_5$	$6^{(6)}*$
18.	$2K+3T+I$	C_{3v}	62. $p311$; 2111	$3m$
			63. $p311$; 2111_1	$3m'$
19.	$2Z+2K+6T+E+I$	C_{6v}	64. $p611$; 2111	$6mm$
			65. $p611$; 2111_1	$6m'm'$
			66. $p611_3$; 2111	$6'mm'$
20.	$2K+3E+I$	D_3	67. $p311$; 2121	32
			68. $p311$; 2121_1	$32'$
21.	$2Z+2K+7E+I$	D_6	69. $p611$; 2121	622
			70. $p611$; 2121_1	$62'2'$
			71. $p611_3$; 2121	$6'22'$
22.	$2N+2K+T'+I$	C_{3i}	72. $p621$	$\bar{3}$ $(\bar{6})$
			73. $p621_1$	$\bar{3}^{(6)}$
			74. $p621_2$	$\bar{6}^{(3)}$
			75. $p621_3$	$\bar{3}'$ $(\bar{6}')$
			76. $p621_4$	$\bar{6}^{(3)}*$
			77. $p621_5$	$\bar{3}^{(6)}\underset{\circ}{*}$
23.	$2N'+2K+T+I$	C_{3h}	78. $p321$	$\bar{6}$ $(\mathring{6})$
			79. $p321_1$	$3^{(3)}:m'$
			80. $p321_2$	$3^{(3)}:\underset{\circ}{m}$
			81. $p321_3$	$\bar{6}\ '(\mathring{6}')$
			82. $p321_4$	$3^{(3)}:m*$
			83. $p321_5$	$3^{(3)}:m'*$
24.	$2N+2N'+2Z+2K+T+E+T'+I$	C_{6h}	84. $p611$; 1121	$6/m$
			85. $p611$; 1121_1	$6/m'$
			86. $p611$; 1121_1	$6^{(6)}:m$
			87. $p611_1$; 1121_1	$6^{(6)}:m'$
			88. $p611_2$; 1121	$6^{(3)}:m$
			89. $p611_2$; 1121_1	$6^{(3)}:m'$
			90. $p611_3$; 1121	$6'/m$
			91. $p611_3$; 1121_1	$6'/m'$
			92. $p611_4$; 1121	$6^{(3)}:m*$
			93. $p611_4$; 1121_1	$6^{(3)}:m'*$
			94. $p611_5$; 1121	$6^{(6)}:m*$
			95. $p611_5$; 1121_1	$6^{(6)}:m'*$
25.	$2N'+2K+4T+3E+I$	D_{3h}	96. $p321$; 2111	$\bar{6}m2$
			97. $p321$; 2111_1	$\bar{6}m'2'$
			98. $p321_3$; 2111	$\bar{6}'m2'$
			99. $p321_3$; 2111_1	$\bar{6}'m'2$
26.	$2N+2K+3T+3E+T'+I$	D_{3d}	100. $p621$; 2111	$\bar{3}m$
			101. $p621$; 2111_1	$\bar{3}m'$
			102. $p621_3$; 2111	$\bar{3}'m$
			103. $p621_3$; 2111_1	$\bar{3}'m'$
27.	$2N+2N'+2Z+2K+7T+7E+T'+I$	D_{6h}	104. $p611$; 2111; 1121	$6/mmm$
			105. $p611$; 2111_1; 1121	$6/mm'm'$
			106. $p611$; 2111; 1121_1	$6/m'mm$
			107. $p611$; 2111_1; 1121_1	$6/m'm'm'$
			108. $p611_3$; 2111; 1121	$6'mmm'$
			109. $p611_3$; 2111; 1121_1	$6'/m'mm'$
28.	$8K+3E+I$	T	110. $p31$; 2121	23
			111. $p31_1$; 2121	$3^{(3)}/2$
			112. $p31_2$; 2121	$3^{(3)}/2*$
29.	$8K+6R+9E+I$	O	113. $p31$; 2121; 1221	432
			114. $p31$; 2121; 1221_1	$4'32'$
30.	$8N+8K+3E$ $3T+T'+I$	T_h	115. p31; 2121; 2111	$m3$
			116. $p31$; 2121; 2111_1	$m'3$
			117. $p31_1$; 2121; 2111	$\bar{6}^{(3)}/2$
			118. $p31_1$; 2121; 2111_1	$\bar{6}^{(6)}/2$
			119. $p31_2$; 2121; 2111	$\bar{6}^{(3)}/2*$
			120. $p31_2$; 2121; 2111_1	$\bar{6}^{(6)}/2*$

Таблица 3 *(окончание)*

31.	$6F+8K+3E+6T+I$	T_d	121. $p31$; 2121; 1211	$\bar{4}3m$
			122. $p31$; 2121; 1211_1	$\bar{4}'3m'$
32.	$6F+8N+8K+6R+9E+9T+T'+I$	O_h	123. $p31$; 2121; 1221; 2111	$m3m$
			124. $p31$; 2121; 1221; 2111_1	$m'3m'$
			125. $p31$; 2121; 1221_1; 2111	$m'3m$
			126. $p31$; 2121; 1221_1; 2111_1	$m3m'$

В 4-мерных классах средних сингоний некоторое затруднение возникает при записи элементов симметрии второго порядка ввиду симметрической связанности между собой некоторых координатных осей и возросшей роли диагональных и 'апофемальных' (в 'гексагональных' системах) направлений. Одинаковые по внешнему виду элементы симметрии (в символах Германа) в разных классах могутиметь различную матричную форму. Для ясности мы выписали в Таблицу 4 все встречающиеся в Таблице 3 генераторы 4-мерных стержневых групп в матричном виде (без учета скольжений).

Проектируя выведенные группы на $R3$ вдоль оси стержня по способу Белова (Белов и Тархова, 1956), получаем полный набор 3-мерных p-цветных точечных групп ($p=1,2,3,4,6$) в составе 32 одноцветных, 58 двухцветных и 18 энантиоморфных пар трех-, четырех- и шестицветных групп симметрии. Если же проектировать 126 групп в направлении, нормальном оси стержня, используя описанный в §1 'отражательный' способ проектирования (при этом выпадают 17 групп №№ 110–126 в Табл. 3), то получим 175 трехмерных стержневых групп антисимметрии, входящих в общий список 394 групп Нероновой – Белова (Белов и Неронова, 1961). Остальные 219 групп из этого списка получаются как соответствующие проекции 4-мерных

Таблица 4. *Матрицы генераторов 4-мерных групп симметрии направленных стержней*

1. Классы № 1–8 Табл. 3 (низшие системы).

$2111(T)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $1121(T)$: $\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

$1211(T)$: $\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&\bar{1}&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $2221(T')$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\0&\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $2211(E)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\0&\bar{1}&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

$1221(E)$: $\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $2121(E)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

2. Классы № 9–15 ('тетрагональные' системы).

$411(R)$: $\begin{pmatrix}0&1&0&0\\\bar{1}&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $421(F)$: $\begin{pmatrix}0&1&0&0\\\bar{1}&0&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $2121(E)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

$2111(T)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $1121(T)$: $\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

3. Классы № 16–27 ('гексагональные' системы).

$311(K)$: $\begin{pmatrix}0&1&0&0\\\bar{1}&\bar{1}&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $611(Z)$: $\begin{pmatrix}1&1&0&0\\\bar{1}&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $621(N)$: $\begin{pmatrix}1&1&0&0\\\bar{1}&0&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

$321(N')$: $\begin{pmatrix}0&1&0&0\\\bar{1}&\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $2111(T)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\1&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $1121(T)$: $\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

$2121(E)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\1&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

4. Классы № 28–32 ('кубические' системы).

$31(K)$: $\begin{pmatrix}0&1&0&0\\0&0&1&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $2121(E)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $1221(E)$: $\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&\bar{1}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

$2111(T)$: $\begin{pmatrix}\bar{1}&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ $1211(T)$: $\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$

групп ненаправленных стержней, которые выведены нами в числе 206 (11 из них не могут быть проектируемы по нормали к оси стержня). Заметим, что при проектировании по нормали к оси стержня отброшенные Заморзаевым и Галярским 18 энантиоморфных 4-мерных стержневых групп дают трехмерные шубниковские группы, входящие в состав 1651. Таблицы всех 4-мерных стержневых групп симметрии ввиду их громоздкости здесь не приводятся. При проектировании групп симметрии 4-мерных ненаправленных стержней вдоль оси стержня, комбинируя оба описанные в §1 принципа проектирования, мы можем получить 3-мерные точечные группы двухкратной антисимметрии.

Литература

Белов, Н. В. (1959). *Кристаллография*, **4**, 775.

Белов, Н. В., Кунцевич, Т. С. и Неронова, Н. Н. (1962). *Кристаллография*, **7**, 805.

Белов, Н. В. и Неронова, Н. Н. (1961). *Кристаллография*, **6**, 3.

Белов, Н. В., Неронова, Н. Н. и Смирнова, Т. С. (1955). *Труды Института кристаллогр. Акад. Наук*, **11**, 33.

Белов, Н. В., Неронова, Н. Н. и Смирнова, Т. С. (1957). *Кристаллография*, **2**, 315.

Белов, Н. В. и Тархова, Т. Н. (1956). *Кристаллография*, **1**, 4.

Галярский, Э. И. и Заморзаев, А. М. (1963). *Кристаллография*, **8**, 691.

Hermann, C. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 139.

Hurley, A. C. (1957). In *Quantum Theory of Atoms, Molecules and Solid State*, Edited by P. O. Löwdin, p. 571. New York: Academic Press.

Заморзаев, А. М. (1957). *Кристаллография*, **2**, 15.

Заморзаев, А. М. (1968). *Доклады Акад. Наук, СССР*, **179**, 836.

Инденбом, В. Л., Белов, Н. В. и Неронова, Н. Н. (1960). *Кристаллография*, **5**, 497.

Janssen, T. (1969). *Physica*, **42**, 71.

Кунцевич, Т. С. (1969). Диссертация, Горький.

Кунцевич, Т. С. и Белов, Н. В. (1971). *Кристаллография*, **16**, 5, 268.

Neubüser, T. & Wondratschek, H. (1969). *Acta Cryst.* A**25**, S1.

Шубников, А. В. (1951). *Симметрия и антисимметрия конечных фигур.* Москва: Изд. Акад. Наук СССР.

Wondratschek, H., Bülow, R. & Neubüser, T. (1971). *Acta Cryst.* A**27**, 523.

Acta Cryst. (1971). A**27**, 517

On Crystallography in Higher Dimensions. I. General Definitions

By J. Neubüser

Lehrstuhl D für Mathematik der Technischen Hochschule Aachen, Germany

H. Wondratschek

Kristallographisches Institut der Universität Karlsruhe, Germany

and R. Bülow

Lehrstuhl D für Mathematik der Technischen Hochschule Aachen, Germany

(*Received* 19 *March* 1970)

(*Dedicated to Wolfgang Gaschütz on the occasion of his* 50*th birthday*)

For use in subsequent parts of this series, some main concepts of mathematical crystallography (arithmetic crystal class, geometric crystal class, lattice, Bravais type, crystal family, holohedry, crystal system) are defined algebraically.

In order to deal with n-dimensional crystallography, one first has to discuss how the concepts, familiar from 2- and 3-dimensional space, can be described mathematically in such a way that they can be carried over to higher dimensions. For us this task arose when – some time ago – we started to investigate crystallographic groups of 4-dimensional space; in particular we wanted to use formulations suitable for the applications of group theoretical computer programs (*cf.* Felsch & Neubüser, 1963). In this first paper we give such formulations in an algebraic way. We do not claim that these formulations are new. The methods of our investigations will be described in a second paper, a third one will contain some of the results.

Although its main purpose is to prepare the ground for these investigations, the formulations in this paper may also help towards a better understanding of some problems of 3-dimensional crystallography. As an ex-