



П. В. Серба, Е.В. Луговой

Теория симметрии кристаллов

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО
ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
Федерального государственного образовательного учреждения
высшего профессионального образования
ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

П.В. Серб, Е.В. Луговой

Теория симметрии кристаллов

**Учебное пособие по курсу
«Кристаллография»**

Таганрог 2009

УДК 548(07) К 825

Рецензенты:

А.А. Лаврентьев, д-р ф.-м. наук, профессор, зав. кафедрой «Электротехника и электроника» ДГТУ.

А.И. Жорник, д-р ф.-м. наук, профессор, зав. кафедрой методики преподавания физики и технологий ТГПИ.

Серба П.В., Луговой Е.В. Теория симметрии кристаллов. – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2009. – 76 с.

В учебном пособии последовательно излагается теория симметрии кристаллов. Рассматривается геометрическое и аналитическое описание свойств симметрии твердых тел.

Предназначено для студентов и научных работников, осваивающих дисциплину «Кристаллография».

Табл. 6. Ил. 27. Библиогр.: 12 назв.

Содержание

1. Понятие о симметрии.....	5
2. Основные положения теории групп.....	7
3. Группы преобразований симметрии.....	14
4. Точечные группы симметрии.....	27
5. Предельные группы симметрии (группы Кюри).....	36
6. Матричный метод описания операций симметрии.....	43
7. Суперпозиция групп симметрии. Принцип Кюри.....	54
8. Симметрия структуры кристаллов.....	59
9. Основные теоремы взаимодействия закрытых и открытых элементов симметрии с трансляциями.....	62
10. Обозначения пространственных групп симметрии.....	63
11. Вывод пространственных групп симметрии.....	64
Библиографический список.....	68

1. Понятие о симметрии

Симметрия тела определяется совокупностью тех перемещений, которые совмещают тело с самим собой; об этих перемещениях говорят, как о преобразованиях симметрии. Каждое из возможных преобразований симметрии можно представить в виде комбинации одного или нескольких из трех основных типов преобразований. Этими тремя существенно различными типами являются: поворот тела на определенный угол вокруг некоторой оси, зеркальное отражение в некоторой плоскости и параллельный перенос тела на некоторое расстояние. Из них последним типом может обладать, очевидно, только неограниченная среда (кристаллическая решетка). Тело же конечных размеров (в частности, молекула) может быть симметрично только по отношению к поворотам и отражениям.

Если тело совмещается само с собой при повороте вокруг некоторой оси на угол $2\pi/n$, то такая ось называется осью симметрии n -го порядка. Число n может иметь любое целое значение: $n = 2, 3, \dots$; значение $n=1$ соответствует повороту на угол 2π или, что то же, на 0, т. е. соответствует тождественному преобразованию. Операцию поворота вокруг данной оси на угол $2\pi/n$ мы будем обозначать символически посредством C_n . Повторяя эту операцию 2, 3, ... раза, мы получим повороты на углы $2(2\pi/n)$, $3(2\pi/n)$, ..., которые тоже совмещают тело с самим собой; эти повороты можно обозначать как C_n^2 , C_n^3 , ... В частности, произведя поворот n раз, мы вернемся в исходное положение, т. е. произведем тождественное преобразование; последнее принято обозначать посредством e , т. е. можно написать

$$C_n^n = e.$$

Если тело совмещается с самим собой при зеркальном отражении в некоторой плоскости, то такая плоскость называется плоскостью симметрии. Операцию отражения в плоскости мы будем обозначать символом m . Очевидно, что двукратное отражение в одной плоскости есть тождественное преобразование

$$m^2 = e.$$

Одновременное применение обоих преобразований – поворота и

отражения – приводит к так называемым зеркально-поворотным осям. Тело обладает зеркально-поворотной осью n -го порядка, если оно совмещается с самим собой при повороте вокруг этой оси на угол и последующем отражении в плоскости, перпендикулярной к оси (рис. 1).

Легко сообразить, что это есть некоторый новый вид симметрии только в том случае, если n – четное число. Действительно, если n – нечетное число, то n -кратное повторение зеркально-поворотного преобразования будет равносильно простому отражению в плоскости, перпендикулярной к оси (поскольку угол поворота будет равен 2π , а нечетное число отражений в одной и той же плоскости есть простое отражение). Повторяя это преобразование еще n раз, найдем в результате, что зеркально-поворотная ось сводится к одновременному наличию независимых оси симметрии n -го порядка и перпендикулярной к ней плоскости симметрии. Если же n – четное число, то n -кратное повторение зеркально-поворотного преобразования возвращает тело в исходное положение.

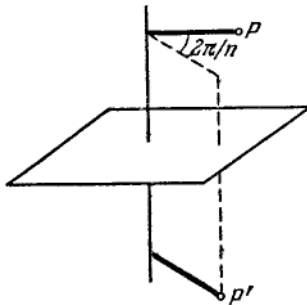


Рис. 1. Зеркально-поворотное преобразование

Зеркально-поворотное преобразование обозначаем символом S_n . Важным частным случаем является зеркально-поворотная ось второго порядка. Легко сообразить, что поворот на угол π с последующим отражением в плоскости, перпендикулярной к оси вращения, представляет собой преобразование инверсии, при котором точка P тела переводится в другую точку P' , лежащую на продолжении прямой,

соединяющей P с точкой O пересечения оси с плоскостью, так что расстояния OP и OP' одинаковы. О теле, симметричном относительно этого преобразования, говорят, что оно обладает центром симметрии. Операцию инверсии мы будем обозначать символом I (рис. 2), равным

$$I \equiv S_2$$

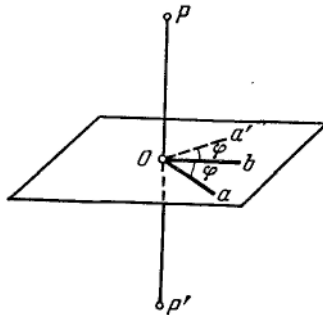


Рис. 2. Преобразование инверсии

2. Основные положения теории групп

Помимо наглядного геометрического описания симметрии с помощью элементов симметрии широко применяется теория групп. Ее методы основаны на том замечательном обстоятельстве, что операции симметрии физических систем и геометрических объектов могут комбинироваться друг с другом, лишь образуя замкнутые множества, которые называются группами.

Пусть имеется множество G однотипных (т. е. имеющих общие характерные признаки) элементов

$$G = \{g_1, g_2, \dots, g_k, \dots\}. \quad (1)$$

(Элементами множества G могут быть различные математические объекты: числа, матрицы, преобразования пространства, операторы и т. д.)

Пусть на данном множестве G задана бинарная операция, согласно которой каждой упорядоченной паре из этого множества ставится в соответствие по некоторому правилу элемент из этого же множества G .

Операция называется «умножением» и обозначается знаком $*$. Так, если элементы g_i и g_k принадлежат множеству G , то и поставленный им в соответствие элемент g_m также принадлежит множеству G , т. е.

$$g_i * g_k = g_m, \quad (2)$$

где $g_i, g_k, g_m \in G$. При этом обычно говорят, что множество G замкнуто относительно заданной операции умножения.

Множество G называется группой, если для его элементов и заданной операции умножения выполняются следующие условия.

1. Умножение ассоциативно, т. е.

$$(g_i * g_k) * g_m = g_i * (g_k * g_m). \quad (3)$$

2. Среди элементов g_i множества G есть элемент $e \in G$ такой, что

$$g_i * e = e * g_i = g_i. \quad (4)$$

Элемент e называется единичным (тождественным) элементом группы G .

3. Для каждого элемента g_i можно найти элемент, обозначаемый обычно через g_i^{-1} , принадлежащий тому же множеству G , такой, что

$$g_i^{-1} * g_i = g_i * g_i^{-1} = e. \quad (5)$$

Элемент g_i^{-1} называется элементом, обратным элементу g_i .

Перечисленные свойства множества G , определяющие его как группу, часто называются групповыми постулатами.

В общем случае умножение элементов группового множества некоммукативно. Если же все элементы группы коммутируют друг с другом, то группа называется абелевой. Множество G может быть дискретным (конечным или бесконечным) и непрерывным. В соответствии с этим различают дискретные и непрерывные группы. Если количество элементов группового множества равно некоторому числу, то группа называется конечной. Количество элементов конечной группы называется ее порядком. При бесконечном числе элементов группового множества группа называется бесконечной.

Часто группы содержат подмножества, которые в свою очередь являются группами относительно той же операции умножения. Такие подмножества называются подгруппами. Очевидно, что любая группа

имеет две тривиальные подгруппы – подгруппу, множество которой состоит лишь из единичного элемента e , и подгруппу, тождественную самой группе.

Пусть некоторая группа G порядка n содержит нетривиальную подгруппу R . Вследствие нетривиальности подгруппы R ее порядок r подчиняется неравенствам $1 < r < n$.

Для конечных групп справедлива Теорема Лагранжа.

Порядок подгруппы является целым делителем порядка n группы, т. е.

$$\frac{n}{r} = p.$$

Целое число p называется индексом подгруппы R в группе G . Группа G по отношению к R является надгруппой, что обозначается как $G \supset R$.

Введем еще одно важное понятие теории групп. Пусть R – некоторая подгруппа группы G , т. е. $R \subset G$. Обозначим через g_k элемент группы G , не входящий в подгруппу R ($g_k \in G, g_k \notin R$). Будем умножать этот элемент g_k на все элементы подгруппы R , оставляя всегда g_k левым сомножителем. Символически это записывается в виде $g_k * R$. Множество полученных значений образует так называемый левый смежный класс относительно подгруппы R . Термин «левый» является существенным, так как в общем случае умножение элементов группового множества некоммутативно. Правым смежным классом группы G относительно подгруппы R называется множество элементов, полученных перемножением всевозможных элементов $g_i \in R$ и g_k таким образом, что g_k является правым сомножителем, т. е. множество $R * g_k$. Очевидно, что оба смежных класса являются подмножествами группового множества G , так как оба класса были получены перемножением элементов группы G .

Любую группу G можно разложить по подгруппе R , представив ее групповое множество в виде объединения элементов правых или левых смежных классов:

$$\begin{aligned} G &= e * R \cup g_1 * R \cup g_2 * R \cup \dots \cup g_{p-1} * R, \\ G &= R * e \cup R * g_1 \cup R * g_2 \cup \dots \cup R * g_{p-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

Правые и левые смежные классы по подгруппе в общем случае не совпадают. Если же разложения на правые и левые смежные классы по некоторой подгруппе совпадают, то такая подгруппа называется инвариантной или нормальным делителем.

Элемент g_i некоторой группы называется сопряженным с элементом g_j , если в группе найдется элемент g_k , такой, что

$$g_i = g_k g_j g_k^{-1} \quad (7)$$

Если элементы g_j и g_l оба являются сопряженными элементу g_i , то отсюда сразу следует, что элементы g_j и g_l также являются сопряженными друг с другом, поскольку если

$$g_i = g_k g_j g_k^{-1} \text{ и } g_i = g_m g_l g_m^{-1},$$

то

$$g_j = g_k^{-1} g_i g_k = g_k^{-1} g_m g_l g_m^{-1} g_k = (g_k^{-1} g_m) g_l (g_k^{-1} g_m)^{-1}. \quad (8)$$

Это приводит к понятию «класса», в котором все элементы сопряжены друг с другом. При этом ни один элемент не может принадлежать более чем к одному классу.

Пусть группа K содержит две подгруппы H и G , элементы которых коммутируют, так что $h_i g_j = g_j h_i$, где h_i – любой элемент подгруппы H , а g_j – любой элемент подгруппы G . Кроме того, если любой элемент группы K может быть записан единственным образом в виде произведения $h_i g_j$, то группу K называют «прямым произведением» групп H и G , изображая это как $K = H \times G$. Данное определение означает, что единственным общим элементом групп H и G является единичный элемент.

Одним из наиболее полных способов описания конечной группы является ее представление в виде таблицы умножения, которая иногда называется квадратом Кэли. Чтобы получить квадрат Кэли для группы, строят квадратную таблицу, в первой строке и первом столбце которой записываются все элементы группового множества. На пересечении каждой строки и столбца записывается элемент группы, являющийся результатом умножения соответствующих элементов, находящихся в первой строке и первом столбце.

Рассмотрим несколько примеров групп.

Пример 1. Пусть G – множество всех целых чисел Z . В качестве умножения зададим операцию сложения чисел. Покажем, что данное множество является группой. Очевидно, что множество всех целых чисел замкнуто относительно операции сложения, так как сумма любых целых чисел в свою очередь является целым числом. Проверим выполнение для данного множества групповых постулатов. Как известно, сложение чисел всегда ассоциативно. Единичным элементом является ноль, а каждому целому числу можно поставить в соответствие обратное – число, равное ему по модулю и имеющее противоположный знак. Следовательно, рассматриваемое множество является группой. Это дискретная абелева группа бесконечного порядка. Она имеет бесконечное количество подгрупп. Так, например, подмножество четных чисел образует подгруппу, в чем легко убедиться непосредственной проверкой.

Пример 2. Рассмотрим множество, состоящее из четырех матриц:

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$c = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad e = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

В качестве операции умножения возьмем операцию умножения матриц. Для доказательства того, что это множество является группой, построим «таблицу умножения» (квадрат Кэли) этого множества:

	a	b	c	e
a	b	c	e	a
b	c	e	a	b
c	e	a	b	c
e	a	b	c	e

Видно, что множество из перечисленных четырех матриц действительно замкнуто относительно операции умножения матриц.

Умножение матриц, как известно, ассоциативно: в качестве единицы служит единичная матрица e , для матрицы a обратным элементом в данном множестве является матрица c , матрицы b и e совпадают с обратными. Таким образом, множество матриц a , b , c , e образует группу четвертого порядка. Нетрудно увидеть, что эта группа имеет нетривиальную подгруппу второго порядка, состоящую из элементов b и e . Квадрат Кэли для этой подгруппы имеет вид

	b	e
b	e	b
e	b	e

Пример 3. Рассмотрим множество, состоящее из преобразований поворота пространства вокруг некоторой прямой на углы 90° , 180° , 270° и 360° . В качестве операции умножения выберем последовательное выполнение поворотов, причем результатом умножения двух поворотов будет поворот вокруг той же оси на угол, равный сумме углов поворотов сомножителей по модулю 360° . Это значит, что если результирующий угол φ получится более 360° , то угол принимается равным $\varphi - 360^\circ$. Обозначая операцию поворота значением угла поворота, составим «таблицу умножения» для данного множества:

	90°	180°	270°	360°
90°	180°	270°	360°	90°
180°	270°	360°	90°	180°
270°	360°	90°	180°	270°
360°	90°	180°	270°	360°

Нетрудно видеть, что это множество также образует группу четвертого порядка, причем единичным элементом является поворот на 360° , взаимно обратными являются повороты на углы 90° и 270° , а поворот на 180° совпадает с обратным. Эта группа содержит нетривиальную подгруппу второго порядка, состоящую из

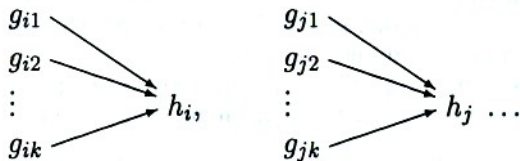
поворотов на углы 180° и 360° с таблицей умножения

	180°	360°
180°	360°	180°
360°	180°	360°

Заметим, что рассмотренные нами группы матриц и поворотов в примерах 2 и 3 различаются лишь обозначением элементов группового множества и конкретным смыслом, вкладываемым в понятие «операция умножения». Математические свойства этих групп полностью идентичны. В этом смысле группы неразличимы и называются изоморфными. При этом говорят, что одна из групп является изоморфным представлением другой. В общем случае изоморфизм двух групп G и H означает, что между элементами групповых множеств имеет место взаимно-однозначное соответствие, т. е. если элементам $g_i, g_p \in G$ соответствуют элементы $h_k, h_n \in H$, то из $g_f = g_p * g_i$ и $h_f = h_n * h_k$ следует, что элементу g_f соответствует элемент h_f .

Изоморфные друг другу группы с точки зрения теории групп являются конкретными реализациями одной и той же группы, элементы которой не имеют конкретного геометрического смысла. Такие группы называются абстрактными. Свойства, установленные для абстрактной группы, справедливы для всех изоморфных ей конкретных групп.

Между двумя группами G и H может существовать и более общее соответствие, называемое гомоморфизмом. Пусть порядок группы G больше, чем порядок группы H . Тогда одному и тому же элементу h_i группы H могут быть сопоставлены сразу несколько элементов $g_{i1}, g_{i2}, \dots$ группы G . Схематически это можно представить следующим образом:



При этом произведение любых элементов $g_{im} * g_{jm}$ отображается в произведение элементов $h_i * h_j$.

Описывать (обозначать) группы можно несколькими способами. Для конечных групп небольшого порядка можно перечислить все элементы группового множества, указать операцию группового умножения и построить ее таблицу умножения. Однако для бесконечных и конечных групп достаточно большого порядка этот способ неприемлем.

Среди элементов группового множества всегда можно выделить конечное подмножество (в общем случае не являющееся подгруппой), такое, что при перемножении его элементов можно получить все остальные элементы группы. Такое подмножество называется множеством генераторов или образующих данной группы. Группы, обладающие одним генератором, называются циклическими. В циклических группах все элементы представляют собой «степени» одного генератора. Иначе говоря, все элементы циклической группы могут быть получены многократным перемножением ее генератора на себя. Нетрудно доказать, что циклическая группа обязательно является абелевой. Группы, приведенные в примерах 2 и 3, являются конечными циклическими.

Каждый элемент группы g_i является генератором некоторой циклической подгруппы. Порядок этой циклической подгруппы называется порядком элемента группы g_i .

Кроме отмеченных двух способов описания (обозначения) групп широко используется обозначение групп с помощью специальных символов.

3. Группы преобразований симметрии

Совокупность всех преобразований симметрии данного тела называют его группой преобразований симметрии или просто группой симметрии. Преобразования, входящие в состав группы симметрии тела конечных размеров (в частности, молекулы), должны быть такими, чтобы по крайней мере одна точка тела оставалась неподвижной при применении любого из этих преобразований.

Другими словами, все оси и плоскости симметрии молекулы должны иметь по крайней мере одну общую точку пересечения. Действительно, последовательный поворот тела вокруг двух непересекающихся осей или отражение в непересекающихся плоскостях приводит к поступательному перемещению тела, которое, очевидно, не может совместить его с самим собой. Группы симметрии, обладающие указанным свойством, называются точечными группами.

Перед тем как перейти к построению возможных типов точечных групп, изложим простой геометрический способ, позволяющий легко произвести распределение элементов группы по классам. Пусть Oa есть некоторая ось, а элемент группы A есть поворот вокруг этой оси на определенный угол. Далее, пусть, G есть преобразование из той же группы (поворот или отражение), которое, будучи применено к самой оси Oa , переводит ее в положение Ob . Покажем, что элемент $B = GAG^{-1}$ отвечает тогда повороту вокруг оси Ob на тот же угол, на который элемент A поворачивает вокруг Oa . Действительно, рассмотрим воздействие преобразования GAG^{-1} на саму ось Ob . Преобразование G^{-1} , обратное G , переводит ось Ob в положение Oa , так что последующий поворот A оставляет ее в этом положении; наконец, G переведет ее обратно в исходное положение. Таким образом, ось Ob остается в результате на месте, так что B есть поворот вокруг этой оси. Поскольку A и B относятся к одному классу, то порядок этих элементов одинаков; это значит, что они производят поворот на одинаковый угол.

Таким образом, мы приходим к результату, что 2 поворота на одинаковый угол относятся к одному классу, если в числе элементов группы имеется преобразование, с помощью которого можно совместить одну ось поворота с другой. Точно таким же образом можно показать, что и 2 отражения в различных плоскостях относятся к одному классу, если какое-либо преобразование группы переводит одну плоскость в другую. О самих осях или плоскостях симметрии, направления которых могут быть совмещены друг с другом, говорят как об эквивалентных.

Некоторые дополнительные замечания требуются для случая, когда

оба поворота производятся вокруг одной и той же оси. Элементом, обратным повороту C_n^k ($k=1, 2, \dots, n-1$) вокруг оси симметрии n -го порядка, является элемент $C_n^{-k} = C_n^{n-k}$, т. е. поворот на угол $(n-k)(2\pi/n)$ в том же направлении, или, что то же, поворот на угол $2k\pi/n$ в обратном направлении. Если в числе преобразований группы имеется поворот на угол π вокруг перпендикулярной оси (такой поворот меняет направление рассматриваемой оси на противоположное), то, согласно доказанному общему правилу, повороты C_n^k и C_n^{-k} будут относиться к одному классу. Отражение m в плоскости, перпендикулярной к оси, тоже меняет ее направление на обратное; однако надо иметь в виду, что отражение меняет также и направление вращения. Поэтому наличие m_h не делает элементы C_n^k и C_n^{-k} сопряженными. Отражение же m_v в плоскости, проходящей через ось, не меняет направления оси, но меняет направление вращения, и потому $C_n^{-k} = m_v C_n^k m_v$, так что при наличии такой плоскости симметрии C_n^k и C_n^{-k} относятся к одному классу. Если повороты вокруг оси на одинаковый угол в противоположных направлениях сопряжены, то мы будем называть ось двухсторонней.

Определение классов точечной группы часто облегчается следующим правилом. Пусть G есть некоторая группа, не содержащая инверсии I , а C_i – группа из двух элементов: I и e . Тогда прямое произведение $G \times C_i$ есть группа, содержащая вдвое больше элементов, чем G ; половина из них совпадает с элементами группы G , а остальные получаются умножением последних на I . Поскольку I коммутирует с любым другим преобразованием точечной группы, то ясно, что группа $G \times C_i$ содержит вдвое больше классов, чем G ; каждому классу A группы G соответствуют в группе $G \times C_i$ два класса: A и AI . В частности, инверсия I всегда составляет сама по себе класс.

Перейдем теперь к перечислению всех возможных точечных групп. Мы будем строить их, начиная от простейших и прибавляя к ним

новые элементы симметрии. Точечные группы будем обозначать жирными латинскими буквами с соответствующими индексами.

I. Группы C_n

Простейший тип симметрии содержит всего одну ось симметрии n -го порядка. Группа C_n есть группа поворотов вокруг оси n -го порядка. Эта группа, очевидно, циклическая. Каждый из ее n элементов составляет сам по себе класс. Группа C_1 содержит только тождественное преобразование e и соответствует отсутствию какой бы то ни было симметрии.

II. Группы S_{2n}

Это – группа поворотов вокруг зеркально-поворотной оси четного порядка $2n$. Она содержит $2n$ элементов и является циклической. В частности, группа S_2 содержит всего два элемента: e и I ; ее обозначают также посредством C_i . Отметим также, что если порядок группы есть число вида $2n=4p+2$, то среди ее элементов имеется инверсия; очевидно, что $(S_{4p+2})^{2p+1}=C_2m_h=I$. Такую группу можно написать в виде прямого произведения: $S_{4p+2}=C_{2p+1}\times C_i$.

III. Группы C_{nh}

Эти группы получаются присоединением к оси симметрии n -го порядка перпендикулярной к ней плоскости симметрии. Группа C_{nh} содержит $2n$ элементов: n поворотов группы C_n и n зеркально-поворотных преобразований $C_n^k m_h$ ($k=1,2,\dots,n$) (в том числе отражение $C_n^n m_h=m_h$). Все элементы группы коммутативны, т. е. группа абелева; число классов равно числу элементов. Если n – четно ($n=2p$), то группа содержит центр симметрии (так как $C_{2p}^p m_h=C_2 m_h=I$). Простейшая группа C_{1h} содержит всего 2 элемента: e и m_h ; ее обозначают также посредством C_s .

IV. Группы C_{nv}

Если присоединить к оси симметрии n -го порядка проходящую через нее плоскость симметрии, то это автоматически приведет к появлению еще $(n-1)$ плоскостей, пересекающихся друг с другом

вдоль оси под углами π/n . Получающаяся при этом группа C_{nv} содержит, следовательно, $2n$ элементов: n поворотов вокруг оси n -го порядка и n отражений m_v в вертикальных плоскостях. На рис. 3 изображены в качестве примера системы осей и плоскостей симметрии групп C_{3v} и C_{4v} .

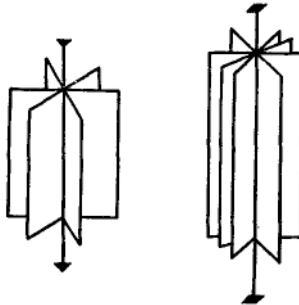


Рис. 3. Группы C_{3v} и C_{4v}

Для определения классов замечаем, что благодаря наличию проходящих через ось симметрии плоскостей симметрии эта ось двусторонняя. Фактическое распределение элементов по классам различно при четных и нечетных n .

Если n нечетно ($n=2p+1$), то последовательные повороты C_{2p+1} совмещают каждую из плоскостей последовательно со всеми остальными $2p$ плоскостями, так что все плоскости симметрии эквивалентны и отражения в них входят в один класс. Среди поворотов вокруг оси имеется $2p$ операций, отличных от тождественной, которые попарно сопряжены друг с другом, образуя p классов по 2 элемента (C_{2p+1}^k и C_{2p+1}^{-k} $k=1, 2, \dots, p$); кроме того, e составляет еще один отдельный класс. Таким образом, имеется всего $p+2$ классов.

Если же n четно ($n=2p$), то последовательными поворотами C_{2p} можно совместить лишь чередующиеся через одну плоскости; две соседние плоскости не могут быть совмещены друг с другом. Таким образом, имеются 2 набора по p эквивалентных плоскостей и

соответственно 2 класса по p элементов (отражений) в каждом. Что касается поворотов вокруг оси, то $C_{2p}^{2p}=e$ и $C_{2p}^p=C_2$ составляют каждый сам по себе класс, а остальные $2p-2$ поворотов попарно сопряжены и дают еще $p-1$ классов по 2 элемента. Следовательно, всего группа $C_{2p,v}$ имеет $p+3$ классов.

V. Группы D_n

Если к оси симметрии n -го порядка присоединить перпендикулярную ей ось второго порядка, то это приведет к появлению еще $(n-1)$ таких же осей, так что будет всего n горизонтальных осей второго порядка, пересекающихся под углами π/n . Получающаяся группа D_n содержит $2n$ элементов: n поворотов вокруг оси n -го порядка и n поворотов на угол π вокруг горизонтальных осей (условимся обозначать последние посредством U_2 , оставив обозначение C_2 для поворота на угол π вокруг вертикальной оси). На рис. 4 изображены в качестве примера системы осей групп D_3 и D_4 . Совершенно аналогично предыдущему случаю, убеждаемся, что ось n -го порядка является двусторонней, а горизонтальные оси второго порядка все эквивалентны, если n нечетно, или образуют два неэквивалентных набора, если n четно. Следовательно, группа D_{2p} имеет следующие $p+3$ классов: e , 2 класса по p поворотов U_2 в каждом, поворот C_2 и $(p-1)$ классов по 2 поворота вокруг вертикальной оси.

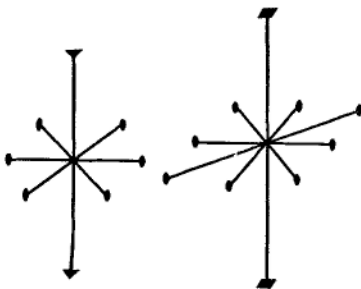


Рис. 4. Группы D_3 и D_4

Группа же D_{2p+1} имеет $p+2$ классов: e , $2p+1$ поворотов U_2 и p классов по 2 поворота вокруг вертикальной оси.

Важным частным случаем является группа D_2 . Ее система осей складывается из трех взаимно перпендикулярных осей второго порядка. Эту группу обозначают также посредством V .

VI. Группы D_{nh}

Если добавить к системе осей группы D_n горизонтальную плоскость симметрии, проходящую через n осей второго порядка, то при этом автоматически появится n вертикальных плоскостей, каждая из которых проходит через вертикальную ось и одну из горизонтальных осей. Получающаяся при этом группа D_{nh} содержит $4n$ элементов; кроме $2n$ элементов группы D_n в нее входят еще n отражений m_v и n зеркально-поворотных преобразований $C_n^k m_h$.

На рис. 5 изображена система осей и плоскостей группы D_{3h} . Отражение m_h коммутативно со всеми остальными элементами группы; поэтому можно написать D_{nh} в виде прямого произведения

$D_{nh} = D_n \times C_s$. При четном n в числе элементов группы имеется инверсия, и можно написать также $D_{2p,h} = D_{2p} \times C_i$.

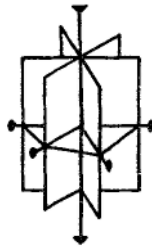


Рис. 5. Группа D_{3h}

Отсюда следует, что число классов в группе D_{nh} равно удвоенному числу классов в группе D_n . Половина из них совпадает с классами группы D_n (повороты вокруг осей), а остальные получаются из них

умножением на m_h . Отражения m_v в вертикальных плоскостях относятся все к одному классу (если n нечетно) или образуют 2 класса (при четном n). Зеркально-поворотные преобразования $m_h C_n^k$ и $m_h C_n^{-k}$ попарно сопряжены друг с другом.

VII. Группы D_{nd}

Присоединить плоскости симметрии к системе осей группы D_n можно еще одним способом, а именно провести их вертикально через ось n -го порядка посередине между каждыми двумя соседними горизонтальными осями второго порядка. Опять присоединение одной такой плоскости влечет за собой появление еще $(n-1)$ плоскостей. Получающаяся система осей и плоскостей симметрии определяет группу D_{nd} (на рис. 6 изображены оси и плоскости групп D_{2d} и D_{3d}).

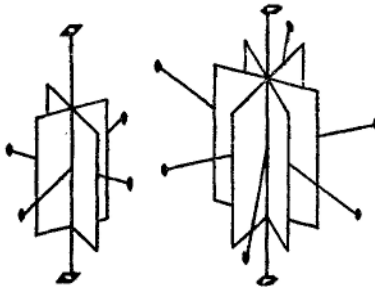


Рис. 6. Группы D_{2d} и D_{3d}

Группа D_{nd} содержит $4n$ элементов. К $2n$ элементам группы D_n присоединяется n отражений в вертикальных плоскостях (обозначаемых посредством m_d – «диагональные» плоскости) и n преобразований вида $G = U_2 m_d$. Для того чтобы выяснить характер последних, замечаем, что поворот U_2 можно написать в виде $U_2 = m_h m_v$, где m_v – отражение в вертикальной плоскости, проходящей через данную ось второго порядка; тогда $G = m_h m_v m_h$ (преобразований m_v , m_h самих по себе в числе элементов группы,

разумеется, нет). Поскольку плоскости отражений m_v и m_d пересекаются друг с другом вдоль оси n -го порядка, образуя угол $(\pi/2n)(2k+1)$, где $k = 1, \dots, (n-1)$ (поскольку здесь угол между соседними плоскостями равен $\pi/2n$), то имеем $m_v m_d = C_{2n}^{2k+1}$. Таким образом, находим, что $G = m_h C_{2n}^{2k+1} = S_{2n}^{2k+1}$, т.е. эти элементы представляют собой зеркально-поворотные преобразования вокруг вертикальной оси, оказывающейся не простой осью симметрии n -го порядка, а зеркально-поворотной осью $2n$ -го порядка.

Диагональные плоскости отражают две соседние горизонтальные оси второго порядка друг в друга; поэтому в рассматриваемых группах все оси второго порядка эквивалентны (как при четных, так и при нечетных n). Аналогично эквивалентны все диагональные плоскости. Зеркально-поворотные преобразования S_{2n}^{2k+1} и S_{2n}^{-2k-1} попарно сопряжены друг с другом.

Применяя эти соображения к группе $D_{2p,d}$, находим, что она содержит следующие $2p+3$ классов: e , поворот C_2 вокруг оси n -го порядка, $(p-1)$ классов по два сопряженных поворота вокруг той же оси, класс $2p$ поворотов U_2 , класс $2p$ отражений m_d и p классов по 2 зеркально-поворотных преобразования.

При нечетном n ($n=2p+1$) в числе элементов группы имеется инверсия (это видно из того, что одна из горизонтальных осей в этом случае перпендикулярна к вертикальной плоскости). Поэтому можно написать $D_{2p+1,d} = D_{2p+1} \times C_i$, так что группа $D_{2p+1,d}$ содержит $2p+4$ классов, получающихся непосредственно из $p+2$ классов группы D_{2p+1} .

VIII. Группа T (группа тетраэдра)

Система осей этой группы есть система осей симметрии тетраэдра. Она может быть получена добавлением к системе осей группы V четырех наклонных осей третьего порядка, повороты вокруг которых переводят 3 оси второго порядка друг в друга. Эту систему осей удобно представить, изображая 3 оси второго порядка как проходящие через центры противоположных граней куба, а оси третьего порядка –

как пространственные диагонали этого куба. На рис. 7 изображено расположение этих осей в кубе и в тетраэдре (по одной оси каждого типа).

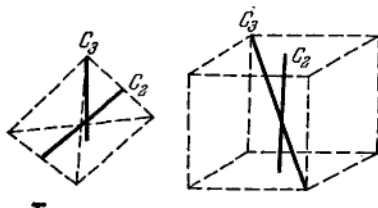
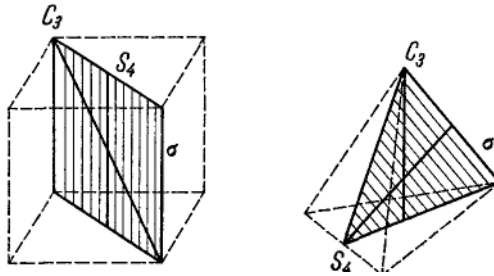


Рис. 7. Система осей группы тетраэдра

Три оси второго порядка эквивалентны между собой. Оси третьего порядка тоже эквивалентны, так как переводятся друг в друга поворотами C_2 , но они не являются двусторонними осями. Отсюда следует, что 12 элементов в группе T распределяются по четырем классам: e , 3 поворота C_2 , 4 поворота C_3 и 4 поворота C_3^2 .

IX. Группа T_d

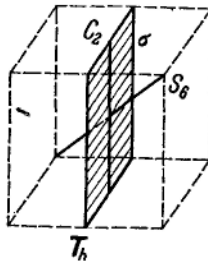
Эта группа содержит все преобразования симметрии тетраэдра. Систему ее осей и плоскостей можно получить, добавляя к осям группы T плоскости симметрии, каждая из которых проходит через одну ось второго и две оси третьего порядков. При этом оси второго порядка становятся зеркально-поворотными осями четвертого порядка (подобно тому как это имеет место в группе D_{2d}). Эту систему удобно представить, изображая 3 зеркально-поворотные оси проходящими через центры противоположных граней куба, 4 оси третьего порядка – как его пространственные диагонали, 6 плоскостей симметрии – проходящими через каждую пару противоположных ребер (на рис. 8 изображено по одному из каждого рода осей и плоскостей).

Рис. 8. Элементы симметрии группы T_d

Поскольку плоскости симметрии вертикальны по отношению к осям третьего порядка, то последние являются двусторонними осями. Все оси и плоскости каждого рода эквивалентны. Поэтому 24 элемента группы распределяются по следующим пяти классам: e , 8 поворотов C_3 и C_3^2 , 6 отражений в плоскостях, 6 зеркально-поворотных преобразований S_4 и S_4^3 , три поворота $C_2 = S_4^2$.

Х. Группа T_h

Эта группа получается из T добавлением центра симметрии $T_h = T \times C_i$. В результате появляются 3 взаимно перпендикулярные плоскости симметрии, проходящие через каждые две оси второго порядка, а оси третьего порядка становятся зеркально-поворотными осями шестого порядка (на рис. 9 изображено по одной из этих осей и плоскостей).

Рис. 9. Элементы симметрии группы T_h

Группа содержит 24 элемента, распределенных по восьми классам, непосредственно получающимся из классов группы ***T***.

XI. Группа ***O*** (группа октаэдра)

Системой осей этой группы является система осей симметрии куба: 3 оси четвертого порядка проходят через центры противоположных граней, 4 оси третьего порядка – через противоположные вершины и 6 осей второго порядка – через середины противоположных ребер (рис. 10).

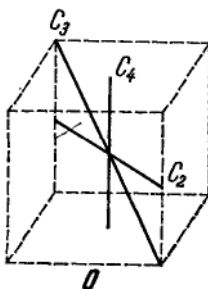


Рис. 10. Система осей группы октаэдра

Легко видеть, что все оси одинакового порядка эквивалентны и каждая из них – двусторонняя. Поэтому 24 элемента распределяются по следующим 5 классам: e , 8 поворотов C_3 и C_3^2 , 6 поворотов C_4 и C_4^3 , 3 поворота C_2^2 и 6 поворотов C_2 .

XII. Группа ***O_h***

Это есть группа всех преобразований симметрии куба. Она получается добавлением к группе ***O*** центра симметрии: ***O_h*** = ***O*** × ***C_i***. Оси третьего порядка группы превращаются при этом в зеркально-поворотные оси шестого порядка (пространственные диагонали куба); кроме того, появляются еще шесть плоскостей симметрии, проходящих через каждую пару противоположных ребер, и три плоскости, параллельные граням куба (рис. 11).

Группа содержит 48 элементов, распределенных по десяти

классам, которые могут быть непосредственно получены из классов группы O .

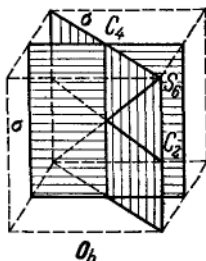


Рис. 11. Элементы симметрии группы O_h

Именно 5 совпадают с классами группы O , а остальными являются: I ; 8 зеркально-поворотных преобразований S_6 и S_6^5 ; 6 зеркально-поворотных преобразований C_4m_h , $C_4^3m_h$ вокруг осей четвертого порядка; 3 отражения m_h в плоскостях, горизонтальных по отношению к осям четвертого порядка; 6 отражений m_v в плоскостях, вертикальных по отношению к этим осям.

XIII, XIV. Группы Y , Y_h (группы икосаэдра)

Эти группы осуществляются в природе в качестве групп симметрии молекул лишь в исключительных случаях. Поэтому мы ограничимся здесь указанием, что Y есть группа 60 поворотов вокруг осей симметрии икосаэдра (правильного 20-гранника с треугольными гранями) или пентагонального додекаэдра (правильного 12-гранника с пятиугольными гранями), причем имеется 6 осей пятого порядка, 10 – третьего и 15 – второго. Группа Y_h получается добавлением центра симметрии: $Y_h = Y \times C_i$ и представляет собой полную группу преобразований симметрии указанных многогранников.

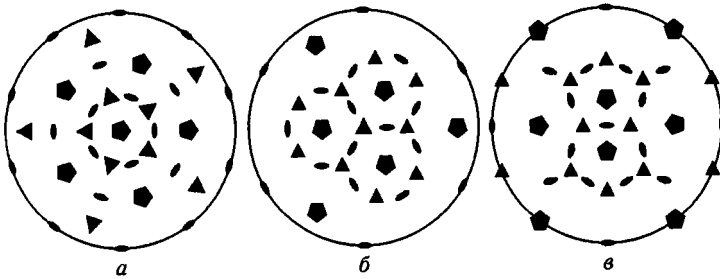


Рис. 12. Стереографическая проекция группы Y :
 а – плоскость проекции перпендикулярна оси 5-го порядка; б – оси 3-го порядка; в – оси второго порядка

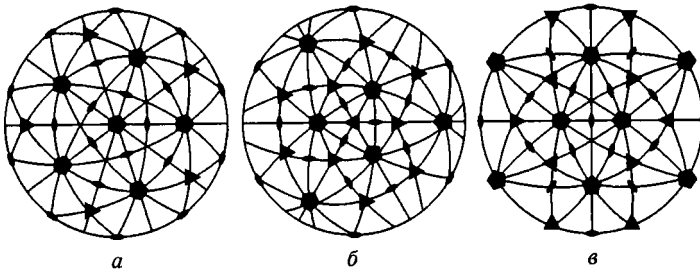


Рис. 13. Стереографическая проекция группы Y_h :
 а – плоскость проекции перпендикулярна оси 5-го порядка; б – оси 3-го порядка; в – оси второго порядка

4. Точечные группы симметрии

В кристалле могут существовать только оси 1, 2, 3, 4 и 6-го порядков. Другие типы преобразования связаны с действием центра инверсии. Центром инверсии называется такое преобразование, при котором каждое направление и плоскость заменяются на обратные. При этом правая система координат меняется на левую. Действие центра инверсии может быть совмещено с действием оси симметрии, при этом

результатирующий элемент симметрии называется инверсионной осью симметрии. Так же, как и для поворотных, в кристаллах возможны только инверсионные оси симметрии 1, 2, 3, 4 и 6-го порядков.

Инверсионную ось симметрии 1-го порядка называют центром симметрии.

Инверсионная ось 2-го порядка является плоскостью симметрии.

Действие инверсионной оси нечетного порядка может быть рассмотрено как комбинация центра симметрии и поворотной оси такого же порядка

Инверсионная ось четного порядка содержит поворотную ось вдвое меньшего порядка.

При обозначении элементов симметрии используются 3 системы обозначений – символика Бравэ, международная и графическая символика, предназначенная для использования на стереографических проекциях. В международной системе для обозначения кристаллографических классов (точечных групп) приняты: n – ось симметрии n -го порядка, $\bar{n}$ – инверсионная ось симметрии n -го порядка, m – плоскость симметрии, nm – ось симметрии n -го порядка и n плоскостей симметрии, проходящих вдоль нее, $\frac{n}{m}$ – ось симметрии порядка n и плоскость симметрии, перпендикулярная к ней, n^2 – ось симметрии порядка n и n осей 2-го порядка, перпендикулярных к ней, $\frac{n}{m}m$ или n/mmm – ось симметрии n -го порядка и плоскости, параллельные и перпендикулярные к ней.

Классом симметрии называется множество элементов симметрии, действующих на плоскости и направления в кристалле. Так как все плоскости и направления образуют кристаллический комплекс, действие элементов симметрии класса симметрии сохраняет центр комплекса неизменным.

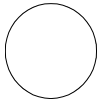
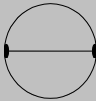
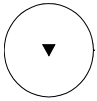
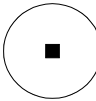
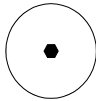
Таблица 1

Элементы симметрии конечных фигур и их обозначения

Название			Обозначение международное	Изображение по отношению к плоскости чертежа	
				перпендикулярное	параллельное
Плоскость симметрии					
Центр симметрии					
Оси симметрии	поворотные	Двойная			
		Тройная			
		Четвертная			
		Шестерная			
	инверсионные	Тройная			
		Четвертная			
		Шестерная			

Классы симметрии называют иначе точечными группами симметрии. 32 кристаллографические точечные группы были впервые выведены И.Гесселем в 1830 г., и независимо от него А.В.Гадолиным в 1867 г. Рассмотренный ниже вывод классов симметрии основан на анализе возможного положения поворотных и инверсионных осей, вытекающих из теоремы Эйлера. Возможны следующие случаи: случай выделенной оси и, возможно, осей 2-го порядка (в том числе и инверсионных). Каждая сингония объединяет несколько классов, имеющих один и несколько подобных элементов симметрии при одинаковом числе единичных направлений. Вначале рассмотрим многогранники, имеющие единичное направление, и будем последовательно к нему присоединять различные элементы симметрии, следя за тем, чтобы направление оставалось единичным.

1. Прimitивная ступень симметрии. Совмещаем с единичным направлением все возможные для кристаллического многогранника оси симметрии. При этом получаем 5 классов симметрии:

Символика	Браве	L_1	L_2	L_3	L_4	L_6
	Шенфлиса	C_1	C_2	C_3	C_4	C_6
	Международная	1	2	3	4	6
Эпюра элементов симметрии						

2. Центральные классы симметрии. К оси симметрии добавляем центр симметрии. В случае осей четного порядка это приводит к формированию плоскости симметрии, перпендикулярной оси. В случае оси нечетного порядка

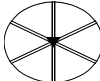
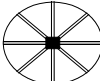
эквивалентно действию инверсионной оси. При этом получаем 5 классов симметрии:

Символика	Браве	C	L_2PC	L_3C	L_4PC	L_6PC
	Шенфлиса	C_i	C_{2h}	C_{3i}	C_{4h}	C_{6h}
	Международная	$\bar{1}$	$2/m$	$\bar{3}$	$4/m$	$6/m$
Эпюра элементов симметрии						

3. Аксиальные классы получают, комбинируя поворотную ось и перпендикулярную к ней ось симметрии 2-го порядка.

Символика	Браве	L_2	$3L_2$	L_33L_2	L_44L_2	L_66L_2
	Шенфлиса	C_2	D_2	D_3	D_4	D_6
	Международная	2	222	32	422	622
Эпюра элементов симметрии						

4. Планыльные классы симметрии получают, добавляя к исходному направлению совпадающую с ним плоскость симметрии.

Символика	Браве	P	$L_2 2P$	$L_3 3P$	$L_4 4P$	$L_6 6P$
	Шенфлиса	C_s	C_{2v}	C_{3v}	C_{4v}	C_{6v}
	Международная	m	$2mm$	$3m$	$4mm$	$6mm$
Эпюра элементов симметрии						

5. Планаксиальные классы симметрии получают, добавляя к единичному направлению одновременно центр и плоскость симметрии.

Символика	Браве	$L_2 PC$	$3L_2 3P$	$L_3 3L_2 3PC$	$L_4 4L_2 4PC$	$L_6 6P$
	Шенфлиса	C_{2h}	D_{2h}	D_{3d}	D_{4h}	D_{6h}
	Международная	$2/m$	mmm	$\bar{3}m$	$4/mmm$	$6/mmm$
Эпюра элементов симметрии						

6. Инверсионно-примитивные классы получают, совмещая единичное направление с осью инверсии. В случае осей четного порядка это приводит к формированию плоскости симметрии, перпендикулярной оси. В случае оси нечетного порядка эквивалентно действию инверсионной оси.

Символика	Браве	C	$L_2 PC$	$L_3 C$	$L_4 PC$	$L_6 PC$
	Шенфлиса	C_i	C_{2h}	C_{3i}	S_4	C_{3h}
	Международная	$\bar{1}$	$2/m$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
Эпюра элементов симметрии						

7. Инверсионно-планальные классы симметрии получают, комбинируя поворотную ось, оси второго порядка и центра симметрии. В этом случае перпендикулярно каждой оси второго порядка проходит плоскость симметрии. В случае поворотной оси нечетного порядка, действие поворотной оси и центра симметрии эквивалентно действию инверсионной оси.

Символика	Браве		$3L_2 3P$	$L_3 3L_2 3PC$	$L_4 L_2 4PC$	$L_6 6P$
	Шенфлиса		D_{2h}	D_{3d}	D_{2d}	C_{3h}
	Международная		mmm	$\bar{3}m$	$\bar{4}2m$	$\bar{6}m2$
Эпюра элементов симметрии						

*

Добавление других элементов симметрии приводит к одной из уже имеющихся комбинаций. Таким образом, у кристаллических многогранников, обладающих единичным направлением, имеется

* В таблицах выделены группы или полученные ранее, или которые относят к другим классам симметрии.

всего 27 классов симметрии.

Что касается кристаллов без единичного направления, то к ним относятся только правильные кристаллические многогранники: тетраэдр, куб, октаэдр.

Группа тетраэдра представляет собой совокупность осей симметрии, присущих тетраэдру. Эту группу отнесем к примитивной степени симметрии.

Добавляя к системе осей группы тетраэдра центр симметрии, получаем центральный класс симметрии – группу T_h .

Добавляя к системе осей группы тетраэдра плоскости симметрии, проходящие через одну ось симметрии 2-го порядка и две оси 3-го порядка, получим планальный класс – группу T_d .

Аксиальный класс получаем, добавляя к системе осей группы тетраэдра осей симметрии 2-го порядка, перпендикулярных осям симметрии 3-го порядка, при этом ранее существовавшие оси 2-го порядка становятся осями симметрии 4-го порядка. В результате получаем группу октаэдра.

Планаксиальный класс получаем, добавляя к системе осей группы октаэдра центра симметрии. В результате получаем группу O_h .

Класс симметрии		Примитив- ный	Цент- ральный	Аксиаль- ный	Планаль- ный	Планак- сиальный
Символика	Браве	$4L_3 3L_2$	$4L_3 3L_2$ 3PC	$3L_4 4L_3$ $6L_2$	$3L_4 4L_3$ 6P	$3L_4 4L_3$ $6L_2$ 9PC
	Шен- флиса	T	T_h	O	T_d	O_h
	Между- народ- ная	23	$m\bar{3}$	432	$\bar{4}3m$	$m\bar{3}m$
Эпюра элементов симметрии						

Таблица 2

Точечные группы симметрии

Категория	Сингония	Классы					
		Примитивные	Инверсионно-примитивные	Центральные	Аксиальные	Планальные	Инверсионно-планальные
Низшая	Триклинная	1		$\bar{1}$			
	Моноклинная				2	m	$2/m$
	Ромбическая				222	mm	mmm
Средняя	Тригональная	3		$\bar{3}$	32	3m	$\bar{3}m$
	Тетрагональная	4	$\bar{4}$	$4/m$	422	4mm	$\bar{4}mm$
	Гексагональная	6	$\bar{6}$	$6/m$	622	6mm	$\bar{6}m2$
Высшая	Кубическая	23		$m\bar{3}$	432	$\bar{4}3m$	$m\bar{3}m$

Для систематизации классов симметрии их делят на 7 сингоний. Каждая сингония объединяет несколько классов. В результате чего

можно построить таблицу точечных групп симметрии

5. Предельные группы симметрии (группы Кюри)

В отличие от числа точечных групп симметрии, описывающих кристаллические вещества, число точечных групп симметрии, которыми могут описываться конечные физические системы, бесконечно. Среди этого множества групп большое значение, наряду с кристаллографическими, имеют группы, содержащие оси симметрии бесконечного порядка. Такая симметрия характерна для физических полей, тел вращения и некоторых физических свойств кристаллов.

Точечные группы, содержащие оси симметрии бесконечного порядка, называются предельными группами симметрии, или группами Кюри.

Группы Кюри могут быть представлены как некоторые обобщения конечных точечных групп при условии, что порядок оси симметрии стремится в пределе к бесконечности. В этом заключается смысл термина «предельные» в их названии. Действительно, рассматривая множество точечных групп C_{nv} при неограниченном увеличении порядка оси n , мы получим предельную группу $C_{\infty v}$. Для групп D_n предельной является группа D_{∞} и т. д. В этом смысле каждая предельная группа является надгруппой некоторого бесконечного множества точечных групп.

Всего в трехмерном пространстве существует 7 предельных групп. Групповые множества их бесконечны и несчетны. Поэтому вместо перечисления элементов группового множества описывают группы с указанием их генераторов. Перечислим все предельные группы и проиллюстрируем их конкретными геометрическими и физическими объектами, которые инвариантны относительно операций этих групп.

1. Группа C_{∞} с международным символом ∞ представляет собой циклическую группу с одним элементом симметрии – полярной осью бесконечного порядка и является надгруппой всех точечных групп C_n для $n=1, 2, \dots, \infty$. Симметрией группы C_{∞} обладает конус, вращающийся вокруг своей геометрической оси.

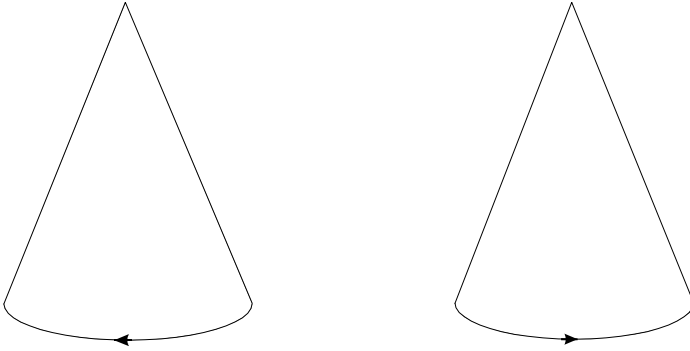


Рис. 14. Объекты обладающие предельной группой C_∞

в определенном направлении (рис. 14). Нетрудно увидеть, что этот конус самосовмещается при повороте вокруг оси конуса на любой (в том числе и бесконечно малый) угол; но данная фигура не симметрична относительно отражения в плоскости, проходящей через ось конуса, так как такое отражение будет менять направление вращения.

2. Все точечные группы C_n (при $n=1, 2, \dots, \infty$) являются подгруппами предельной группы $C_{\infty v}$ (международный символ ∞m). Относительно этой группы симметрии инвариантен неподвижный конус (рис. 15), постоянное однородное электрическое поле. Группа не содержит отражения в плоскости, перпендикулярной оси конуса, поэтому поворотная ось ∞ -го порядка является полярной.

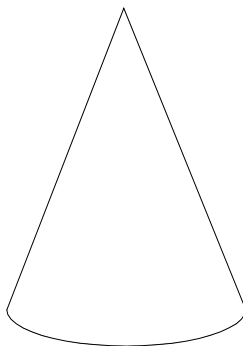


Рис. 15. Объект обладающий предельной группой $C_{\infty v}$

3. Группа $C_{\infty h}$ (международный символ $\frac{\infty}{m}$) является надгруппой конечных точечных групп C_{nh} и S_n ($n=1, 2, \dots, \infty$). Телом, имеющим симметрию $C_{\infty h}$, является вращающийся цилиндр (рис. 16). У этого тела есть плоскость отражения, перпендикулярная оси бесконечного порядка, но отсутствуют зеркальные плоскости, содержащие ось. Ось группы $C_{\infty h}$ – неполярная. В частности, симметрию группы $C_{\infty h}$ имеет однородное магнитное поле, которое характеризуется аксиальным вектором $\mathbf{B}$ – индукцией магнитного поля.

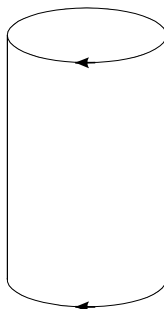


Рис. 16. Объект, обладающий предельной группой $C_{\infty h}$

Линии магнитной индукции направлены вдоль оси ∞ -го порядка.

4. Группа D_∞ содержит поворотную ось бесконечного порядка и бесконечное число осей 2-го порядка, перпендикулярных оси бесконечного порядка. Ее международный символ $\infty 2$, она является надгруппой всех точечных групп D_n и C_n для $n=1,2,\dots,\infty$. Объектом, имеющим симметрию группы D_∞ , является круговой цилиндр, у которого основания вращаются в противоположные стороны с одинаковой по величине угловой скоростью (рис. 17).

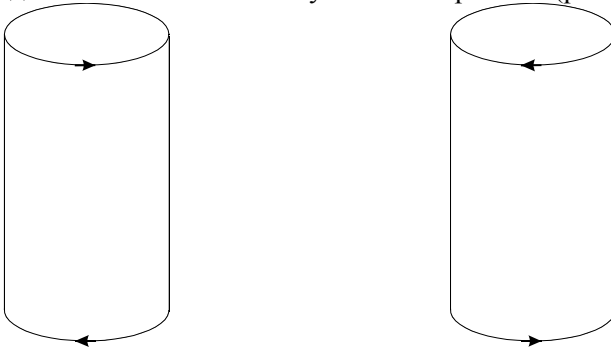


Рис. 17. Объект, обладающий предельной группой D_∞

5. Группа $D_{\infty h}$ (международный символ $\frac{\infty}{m}$) является надгруппой всех точечных групп D_{nh} , D_n , C_n и C_{nv} ($n=1,2,\dots,\infty$). Элементами симметрии этой группы, кроме элементов симметрии группы D_∞ , являются плоскость симметрии, перпендикулярная оси бесконечного порядка, бесконечное количество плоскостей отражения, содержащих ось бесконечного порядка, центр инверсии. Симметрию предельной группы $D_{\infty h}$ имеет, например, покоящийся цилиндр (рис. 18). Группа $D_{\infty h}$ описывает также симметрию однородного поля одноосных механических напряжений.



Рис. 18. Объект, обладающий предельной группой $D_{\infty h}$

6. Множество всех поворотов, относительно которых инвариантна сфера, обозначается символом R . Эта группа содержит бесконечное число осей бесконечного порядка и, следовательно, бесконечное число осей симметрии каждого порядка. Заметим, элементами симметрии этой группы являются только поворотные оси. Ее международный символ можно записать в виде ∞ . Группа R иногда называется группой вращений. Она является надгруппой кубических групп T и O , икосаэдрической группы Y , предельных групп C_∞ и D_∞ и, следовательно, всех точечных групп D_n и C_n , где $n=1, 2, \dots, \infty$. Симметрию группы R имеет вращающийся шар (Рис. 19).

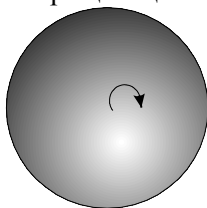


Рис. 19. Объект, обладающий предельной группой R

7. Надгруппой всех точечных групп, в том числе и вышеописанных предельных, является группа R_i , которая содержит все точечные операции в трехмерном пространстве, или, другими словами, все

движения, относительно которых инвариантна сфера или однородный шар (рис. 20). Ее международный символ можно записать в виде $\frac{\infty}{\infty}m$. Симметрией группы R_i обладает также множество ортогональных преобразований декартовых координат, т.е. преобразований, при которых реализуется переход от одного ортонормированного базиса к другому. При ортогональных преобразованиях не изменяются длины векторов и углы между ними, поэтому подобные преобразования часто используются в задачах кристаллографии и кристаллофизики. Поэтому предельную группу R_i часто называют ортогональной группой. Эта группа описывает также симметрию изотропной среды.

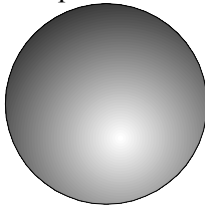


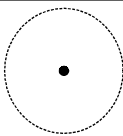
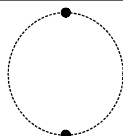
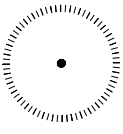
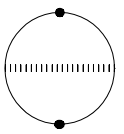
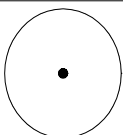
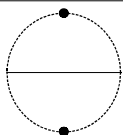
Рис. 20. Объект, обладающий предельной группой R_i

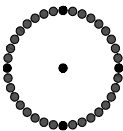
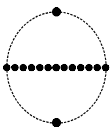
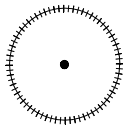
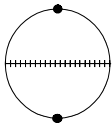
Основные характеристики предельных групп и их стереографические проекции приведены в табл. 3

Взаимные соотношения между точечными группами и подгруппами изображены на рис. 21. Толстыми штриховыми линиями соединены группы одной системы. Так высшая группа ромбической системы mmm включает в себя две подгруппы 222 и $mm2$. Подгруппой группы mmm является также группа $2/m$, которая уже не относится к ромбической системе, а является высшей группой моноклинной системы, связь между ними изображена тонкой линией. Слева и справа на рис. 21 отмечена кратность каждой подгруппы.

Таблица 3

Пределные группы симметрии

Обозначение		Стереографическая проекция		Характеристика
Международный символ	Символ Шен-флиса	Перпендикулярно плоскости чертежа	В плоскости чертежа	
∞	C_{∞}			Ось симметрии бесконечного порядка
∞m	$C_{\infty v}$			Ось симметрии бесконечного порядка и бесконечное число проходящих вдоль нее плоскостей
$\frac{\infty}{m}$	$C_{\infty h}$			Ось симметрии бесконечного порядка и перпендикулярная к ней плоскость симметрии

Обозначение		Стереографическая проекция		Характеристика
$\infty 2$	D_{∞}			Ось симметрии бесконечного порядка и бесконечное число поперечных осей 2-го порядка
$\frac{\infty}{m}$	$D_{\infty h}$			Ось симметрии бесконечного порядка, бесконечное число продольных плоскостей и поперечная плоскость
$\frac{\infty}{\infty}$	R	-	-	Бесконечное число осей симметрии бесконечного порядка, нет плоскостей симметрии
$\frac{\infty}{\infty} m$	R_i	-	-	Бесконечное число осей и бесконечное число плоскостей симметрии

6. Матричный метод описания операций симметрии

Группа преобразований симметрии конечной физической системы изоморфна некоторой группе матриц. Поэтому очень важным является

соответствовать матрицы α_{ij} и β_{ij} . Матрица α_{ij} позволяет осуществить переход от некоторой кристаллографической системы координат с базисными векторами $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ к другой кристаллографической системе с базисными векторами $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{pmatrix} = (\alpha) \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Каждый вектор базиса $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ можно разложить по базису $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix} = (\beta) \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Матрицы α_{ij} и β_{ij} являются взаимно обратными, т.е. их произведение равно единичной матрице. Детерминанты матриц α_{ij} и β_{ij} представляют собой отношения объемов элементарных ячеек, построенных на векторах трансляций $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ и $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$.

Пусть кристаллическое пространство инвариантно относительно некоторой точечной операции симметрии g , и $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ – базисные вектора трансляций, на которых можно построить примитивную элементарную ячейку. Тогда операцией симметрии g этот базис преобразуется в кристаллографический базис $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$, на котором также можно построить примитивную элементарную ячейку. Если $[[uv\omega]]$ – целые числа, представляющие собой индексы некоторого произвольно выбранного узла решетки в базисе $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$, то индексы $[[UVW]]$ этого же узла в базисе $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ также будут целыми числами. Отсюда следует, что матрицы преобразований симметрии кристаллического пространства могут содержать лишь целочисленные или нулевые элементы.

Из матричной алгебры известно, что детерминант матрицы преобразования равен отношению смешанных произведений базисных векторов исходной и преобразованной систем координат. Абсолютная

величина смешанного произведения базисных векторов равна объему параллелепипеда, построенного на этих векторах, и при изометрических преобразованиях величина объема не изменяется. Следовательно, детерминант матрицы любого точечного преобразования симметрии конечной физической системы должен равняться $+1$ или -1 . В соответствии со значением детерминанта матрицы преобразования a_{ij} все операции симметрии подразделяются на операции 1-го рода ($\det a_{ij} = +1$) и 2-го рода ($\det a_{ij} = -1$). Операции 1-го рода (повороты) не изменяют знака смешанного произведения базисных векторов системы координат, операции 2-го рода (отражения, инверсия и т. п.) преобразуют правую систему координат (тройку базисных векторов) в левую и наоборот.

Как известно, матрица преобразования системы координат, которое эквивалентно двум последовательно выполненным преобразованиям, равна произведению матриц этих преобразований. Этим свойством мы будем широко пользоваться при описании симметрии кристаллов. Сейчас заметим, что две последовательно выполненные операции симметрии 1-го рода или 2-го рода эквивалентны операции 1-го рода, так как детерминант матрицы-произведения равен произведению детерминантов матриц-сомножителей. Если же последовательно выполняются операции 1-го и 2-го рода, то им всегда эквивалентна операция 2-го рода.

Использование кристаллографических базисов не является обязательным для матричного описания операций симметрии. Иногда бывает удобно использовать ортогональные системы координат, несмотря на то, что элементы матриц симметрии получаются дробными или иррациональными.

Рассмотрим примеры матриц различных точечных операций симметрии кристаллов и других физических систем.

Матрица тождественного преобразования. В 3-мерном пространстве, очевидно, есть единичная матрица

$$e = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Поворот по часовой стрелке на некоторый угол $\varphi = 2\pi/n$. Для описания выберем ортогональную систему координат (не обязательно кристаллографическую) с базисными векторами X_1, X_2, X_3 , причем пусть вектор X_3 совпадает с осью поворота. Этот поворот, который мы будем обозначать символом $n(X_3)$, можно заменить поворотом системы координат на тот же угол φ , но против часовой стрелки (рис. 22).

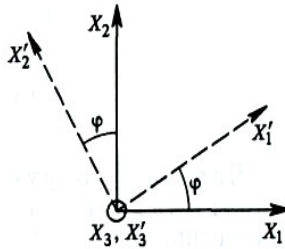


Рис. 22. К выводу матриц поворотов вокруг оси X_3 на произвольный угол φ

В ортогональной системе координат элементами матрицы изометрического преобразования являются значения косинусов углов между соответствующими базисными векторами (направляющие косинусы). Так как косинус – функция четная, достаточно составить матрицу абсолютных величин углов между новыми и старыми осями. Элементом матрицы φ_{ij} является абсолютная величина угла между i -й «новой» осью и j -й «старой».

Для заданного поворота матрица абсолютных величин углов между векторами X'_i и X_j будет иметь вид

$$\varphi_{ij} = \begin{bmatrix} \varphi & \pi/2 - \varphi & \pi/2 \\ \pi/2 + \varphi & \varphi & \pi/2 \\ \pi/2 & \pi/2 & 0 \end{bmatrix}, \quad (12)$$

а матрица направляющих косинусов

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (13)$$

Нетрудно аналогичным путем получить матрицы поворота на угол φ вокруг координатных осей X_1 и X_2 . Повороты против часовой стрелки описываются такими же матрицами вида (10), в которых угол φ полагается отрицательным.

В качестве важных частных случаев приведем матрицы поворотов на угол π вокруг осей 2-го порядка, совпадающих с координатными осями:

$$2^1(X_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad 2^1(X_2) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$2^1(X_3) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Поворот вокруг оси 2-го порядка, лежащей в координатной плоскости. Пусть ось 2-го порядка лежит в координатной плоскости $X_1 O X_2$ и образует угол β с осью OX_1 (рис. 23).

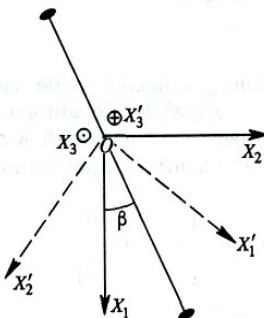


Рис. 23. К выводу матриц поворотов вокруг оси 2-го порядка, лежащей в координатной плоскости (значками, закрашенными темными овалами, обозначена ось 2-го порядка, расположенная в плоскости рисунка)

Из рис. 23 следует, что матрица абсолютных величин углов между новыми осями и старыми состоит из следующих элементов:

$$\varphi_{ij} = \begin{bmatrix} 2\beta & \pi/2 - 2\beta & \pi/2 \\ \pi/2 - 2\beta & \pi - 2\beta & \pi/2 \\ \pi/2 & \pi/2 & \pi \end{bmatrix}. \quad (14)$$

Матрица косинусов углов получит вид

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) & 0 \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Детерминант матрицы (13), как легко видеть, равен +1.

Отражение в плоскости симметрии. Пусть плоскость отражения проходит через ось X_3 и составляет угол θ с осью X_1 (рис. 24), проходя при этом через первый и третий квадранты системы

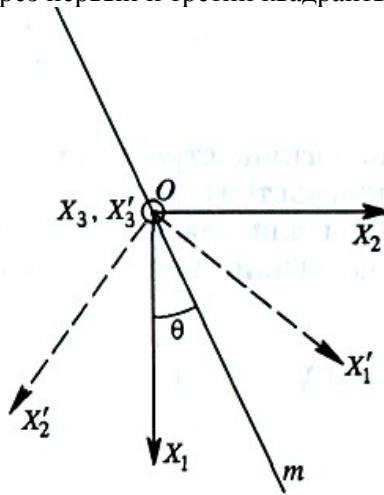


Рис. 24. К выводу матриц отражений в плоскостях симметрии, параллельных оси OX_3

координат. Ее нормаль лежит, естественно, во втором и четвертом квадрантах.

Матрица абсолютных величин углов между новыми и старыми

осями запишется как

$$\varphi_{ij} = \begin{bmatrix} 2\theta & \pi/2 - 2\theta & \pi/2 \\ \pi/2 - 2\theta & \pi - 2\theta & \pi/2 \\ \pi/2 & \pi/2 & 0 \end{bmatrix}, \quad (15)$$

а матрица косинусов – как

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) & 0 \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (16)$$

Детерминант матрицы (15) равен -1 , т.е. отражение является операцией 2-го рода.

Возьмем аналогичную плоскость отражения, но расположенную во втором и четвертом квадрантах. Нормаль к плоскости пройдет через первый и третий квадранты, и матрицы φ_{ij} и a_{ij} будут иметь вид

$$\varphi_{ij} = \begin{bmatrix} 2\theta & \pi/2 + 2\theta & \pi/2 \\ \pi/2 + 2\theta & \pi - 2\theta & \pi/2 \\ \pi/2 & \pi/2 & 0 \end{bmatrix}, \quad (17)$$

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} \cos(2\theta) & -\sin(2\theta) & 0 \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Аналогично строятся матрицы для произвольно ориентированных плоскостей отражения, содержащих другие координатные оси. Ниже приведены матрицы отражений в плоскостях, перпендикулярных координатным осям

$$m(X_1) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad m(X_2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$m(X_3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Зеркальный поворот на угол φ вокруг оси координат. Рассмотрим зеркальный поворот на некоторый угол φ вокруг оси OX_3 , представляющий собой сочетание поворота по часовой стрелке на угол φ вокруг оси и последующее отражение в плоскости, ей перпендикулярной. Данная операция представляется в виде произведения поворота и отражения. Матрица зеркального поворота может быть получена как произведение соответствующих матриц $m(X_3)$ и $N(X_3)$

$$m(X_3) * N(X_3) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Инверсия. Операция инверсии в начале координат приводит к изменению направления всех осей системы координат на противоположные. Матрица инверсии имеет вид

$$I = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (20)$$

Инверсионный поворот на угол φ вокруг оси координат. Инверсионный поворот представляет собой последовательность поворота вокруг оси и инверсии в точке, расположенной на этой оси. Рассмотрим инверсионный поворот на некоторый угол φ вокруг оси OX_3 . Матрицу этого поворота вычислим как произведение матрицы инверсии и обычного поворота вокруг оси OX_3

$$I * N(X_3) = \begin{bmatrix} -\cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & -\cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (21)$$

Поворот вокруг оси симметрии 3-го порядка. Для вывода матрицы

повернем базис на 120° против часовой стрелки вокруг оси X_3 . Оси X_1 и X_2 лежат в плоскости, перпендикулярной оси X_3 , и составляют друг с другом угол 120° (рис. 25).

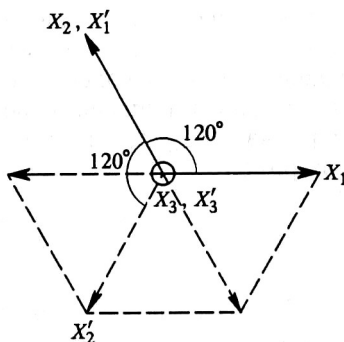


Рис. 25. К выводу матрицы поворота вокруг оси 3-го порядка в косоугольной системе координат

Записывая разложение векторов нового базиса по векторам старого, получим матрицу

$$3^1(X_3) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (22)$$

Перемножение матрицы (22) на себя дает матрицу поворота на угол 240° (или на эквивалентный ему угол -120°)

$$3^2(X_3) = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = 3^{-1}(X_3).$$

Умножив матрицу $3^2(X_3)$ на $3^1(X_3)$, получим, что $3^3(X_3) = e$, т.е. трехкратный поворот на 120° эквивалентен тождественному преобразованию.

Поворот вокруг оси симметрии 3-го порядка, расположенной по телесной диагонали ортогональной кристаллографической системы координат. Поворот на 120° вокруг такой оси приводит к тому, что

оси новой системы координат располагаются параллельно осям исходной системы. Это означает, что матрицы поворотов вокруг такой оси будут содержать в качестве элементов лишь единицы и нули. Так, например, поворот системы координат вокруг оси 3-го порядка 3_{XYZ} против часовой стрелки на угол 120° описывается матрицей

$$3^1(XYZ) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Приведенная матрица характеризует циклический последовательный переход между осями ортогональной системы координат.

Представление групповых множеств в матричной форме.

Рассмотрим матричное представление на примере точечной группы e . Эта группа циклическая, порождена одним генератором, ее групповое множество имеет вид

$$c_4 = \{e, 4^1, 4^2 = 2^1, 4^3 = 4^{-1}\}.$$

Здесь $4^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$, $4^2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$,

$$4^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Генератором группы является элемент 4^1 .

Квадрат Кели группы 4^1

	e	4^1	4^2	4^{-1}
e	e	4^1	4^2	4^{-1}
4^1	4^1	4^2	4^{-1}	e
4^2	4^2	4^{-1}	e	4^1
e	4^{-1}	e	4^1	

Изоморфной группой для C_4 является группа S_4 , таблица умножения которой одинакова с точностью до переобозначения элементов

	e	$\overset{\circ}{4}^1$	$\overset{\circ}{4}^2$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$
e	e	$\overset{\circ}{4}^1$	$\overset{\circ}{4}^2$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$
$\overset{\circ}{4}^1$	$\overset{\circ}{4}^1$	$\overset{\circ}{4}^2$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	e
$\overset{\circ}{4}^2$	$\overset{\circ}{4}^2$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	e	$\overset{\circ}{4}^1$
$\overset{\circ}{4}^{-1}$	$\overset{\circ}{4}^{-1}$	e	$\overset{\circ}{4}^1$	$\overset{\circ}{4}^2$

Здесь матрицы зеркальных поворотов имеют вид

$$\overset{\circ}{4}^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \overset{\circ}{4}^2 = 2^1 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\overset{\circ}{4}^{-1} = \overset{\circ}{4}^3 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

7. Суперпозиция групп симметрии. Принцип Кюри

Геометрические и физические системы, как правило, можно представить состоящими из некоторого количества составных частей. При этом система в целом и каждая из ее составных частей в отдельности могут быть инвариантными относительно, вообще говоря, неизоморфных групп симметрии. Одной из важных характеристик подобных систем является соотношение между симметрией всей системы и симметрией ее составных частей. В частности, для физики кристаллов весьма существенно соотношение

между симметрией атомной структуры кристалла в целом и симметрией ее частей, например молекул в органических кристаллах. Не менее важной задачей является определение симметрии кристалла, находящегося во внешнем поле с определенной симметрией.

Для иллюстрации возможных соотношений симметрии целого и его частей рассмотрим 2 примера. На рис. 26 показаны две геометрические системы, каждая из которых составлена из правильного треугольника и правильного шестиугольника таким образом, что их центры совпадают. При этом группа симметрии составной системы имеет групповое множество, составленное из операций симметрии, относительно которых инвариантны обе составные части одновременно.

Для характеристики симметрии составных систем воспользуемся понятием пересечения групповых множеств. Пересечением двух групповых множеств называется совокупность элементов, которые одновременно принадлежат к обоим групповым множествам. Из рис. 2.26 видно, что геометрически совпадающие оси 3-го и 6-го порядков дадут в пересечении ось 3-го порядка. Три из шести плоскостей симметрии шестиугольника совпадают с тремя плоскостями симметрии треугольника, и мы получаем группу симметрии составной фигуры C_{3v} . Существенно, что в зависимости от взаимной ориентации треугольника и шестиугольника плоскости симметрии треугольника могут не совпадать с плоскостями симметрии шестиугольника. Тогда составная система будет обладать симметрией C_3 (рис. 26).

На верхнем рисунке элементы симметрии группы треугольника C_{3v} полностью совпадают с соответствующими элементами симметрии группы шестиугольника C_{6v} . В результате составная система имеет симметрию $C_{3v} = C_{6v} \cap C_{3v}$.

На нижнем рисунке шестиугольник и треугольник расположены так, что плоскости симметрии группы треугольника C_{3v} не совпадают с плоскостями симметрии группы шестиугольника C_{6v} . Симметрия составной системы понижается до группы $C_3 = C_{6v} \cap C_{3v}$.

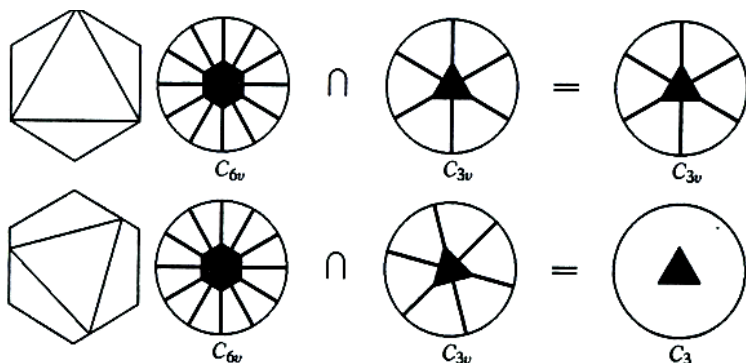


Рис. 26. Принцип суперпозиции групп симметрии на примере геометрической системы, состоящей из правильного шестиугольника и треугольника

Если наложить эти фигуры таким образом, что центры их не будут совпадать, то при произвольной взаимной ориентации этих фигур пересечением групп симметрии треугольника и шестиугольника может быть, вообще говоря, тривиальная группа C_1 .

В данном случае мы имеем процесс образования составной системы из неэквивалентных частей. Процесс понижения симметрии составной системы по отношению к симметрии составных частей называется диссимметризацией системы.

Частные случаи диссимметризации, связанные с понижением симметрии кристалла, находящегося во внешних полях, описывает принцип Кюри. Кристалл под внешним воздействием изменяет свою точечную симметрию таким образом, что сохраняет лишь операции симметрии, общие с операциями симметрии воздействия. Другими словами, точечная группа симметрии кристалла G в результате наложения возмущения с группой симметрии G^B переходит в группу G^A – общую подгруппу групп симметрии кристалла G и воздействия G^B :

$$G^A = G \cap G^B. \quad (22)$$

В качестве примера рассмотрим изменение точечной симметрии кристаллов, помещенных в однородное электрическое поле. Группа

симметрии однородного постоянного электрического поля – $C_{\infty v}$.

Рассмотрим, например, изменение точечной симметрии D_{2d} кристалла дигидрофосфата калия KH_2PO_4 , помещенного в однородное электрическое поле, при различной ориентации вектора напряженности поля E по отношению к элементам симметрии кристалла (рис. 27).

На рис. 27,а вектор электрического поля E направлен параллельно зеркально-поворотной оси 4-го порядка. Из рисунка видно, что в групповых множествах совпадают повороты лишь вокруг оси 2-го порядка и отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии, параллельных оси бесконечного порядка. В этом случае пересечение групп дает $C_{\infty v} \cap D_{2d} = C_{2v}$.

На рис. 27,б вектор напряженности поля лежит в плоскости симметрии кристалла. При этом в пересечении групповых множеств останется лишь одна плоскость симметрии, т.е. $C_{\infty v} \cap D_{2d} = C_s$. Наконец, если электрическое поле сориентировано по отношению к рассматриваемому кристаллу таким образом, что вектор напряженности параллелен оси 2-го порядка (рис. 27,в), то в пересечении групп останется лишь ось 2-го порядка: $C_{\infty v} \cap D_{2d} = C_2$.

Очевидно, что при произвольной ориентации вектора электрического поля относительно элементов симметрии кристалла в пересечении групповых множеств может остаться лишь единичный элемент. Таким образом, внешнее электрическое поле может понизить тетрагональную симметрию кристалла до триклинной.

На стереографических проекциях группы $C_{\infty v}$, ось бесконечного порядка перпендикулярна или параллельна плоскости проекций и изображена значком ∞ , а континуум проходящих через нее плоскостей симметрии – сплошной штриховкой плоскости проекций.



а



б



в

Рис. 27. Изменение симметрии кристалла дигидрофосфата калия в однородном электрическом поле: а – вектор напряженности поля направлен параллельно зеркально-поворотной оси 4-го порядка; б – вектор напряженности направлен параллельно плоскости симметрии; в – вектор напряженности параллелен оси 2-го порядка

8. Симметрия структуры кристаллов

В структуре кристаллов к конечным преобразованиям симметрии, входящим в точечную группу симметрии, добавляются еще бесконечные симметрические преобразования. Основное бесконечное симметрическое преобразование – трансляция. Определим идеальный кристалл как тело, состоящее из атомов, расположенных в пространственной решетке так, что можно ввести три вектора основных трансляций $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$, обладающих следующим свойством.

Таблица 4

Винтовые оси

n	τ	Винтовая ось
2	1/2	2_1
3	1/3	3_1
	2/3	$3_2 \equiv 3_{-1}$
4	1/4	4_1
	2/4	4_2
	3/4	$4_3 \equiv 4_{-1}$
6	1/6	6_1
	2/6	6_2
	3/6	6_3
	4/6	$6_4 \equiv 6_{-2}$
	5/6	$6_5 \equiv 6_{-1}$

При рассмотрении этой атомной решетки из произвольной точки $\mathbf{r}$ решетка имеет тот же вид, что и при рассмотрении из точки $\mathbf{r}'$:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} \quad (23)$$

где n_1 , n_2 , n_3 - произвольные целые числа.

Совокупность точек $\mathbf{r}'$, определяемая соотношением (23) при различных значениях чисел n_1 , n_2 , n_3 , определяет кристаллическую решетку, представляющую собой регулярное периодическое расположение точек в пространстве.

Комбинация поворота на угол $\alpha = 360^\circ/n$ и поступательного перемещения (трансляции) вдоль оси поворота на величину τ представляет собой операцию, которая называется винтовым поворотом, при этом $\tau = tq/n$. Здесь t – кратчайшая трансляция, q – целое число, n – порядок трансляции.

В уравнении $n\tau = tq$ правая часть может быть целым числом. В зависимости от сочетаний n и τ получаем винтовые оси различных порядков (табл. 4 и рис. 28). Винтовая ось обозначается цифрой с индексом. Цифра указывает порядок оси, а частное от деления индекса на порядок оси дает величину переноса (трансляции) вдоль оси, выраженную в долях элементарной трансляции. Различают правые и левые винтовые оси.

Сочетание трансляции и отражения в плоскости симметрии порождает преобразование с помощью плоскости скользящего отражения. Плоскости скользящего отражения обозначаются символами a , b , c , если скольжение направлено вдоль осей a , b , c (XYZ) и величина его составляет $a/2$, $b/2$, $c/2$. Скольжение может быть направлено и вдоль диагонали параллелограмма, построенного на элементарных трансляциях a , b , c , лежащих в плоскости скольжения. Если при этом перенос производится на половину длины диагонали параллелограмма $(a+b)/2$, то плоскость обозначают символом n , если на четверть длины диагонали $(a+b)/4$ – символом d . Плоскости скользящего отражения изображают пунктирами разных типов. При отражении в плоскости скользящего отражения c фигурка перемещается на половину периода трансляции оси c , перпендикулярно плоскости чертежа. Чтобы показать, что фигурка

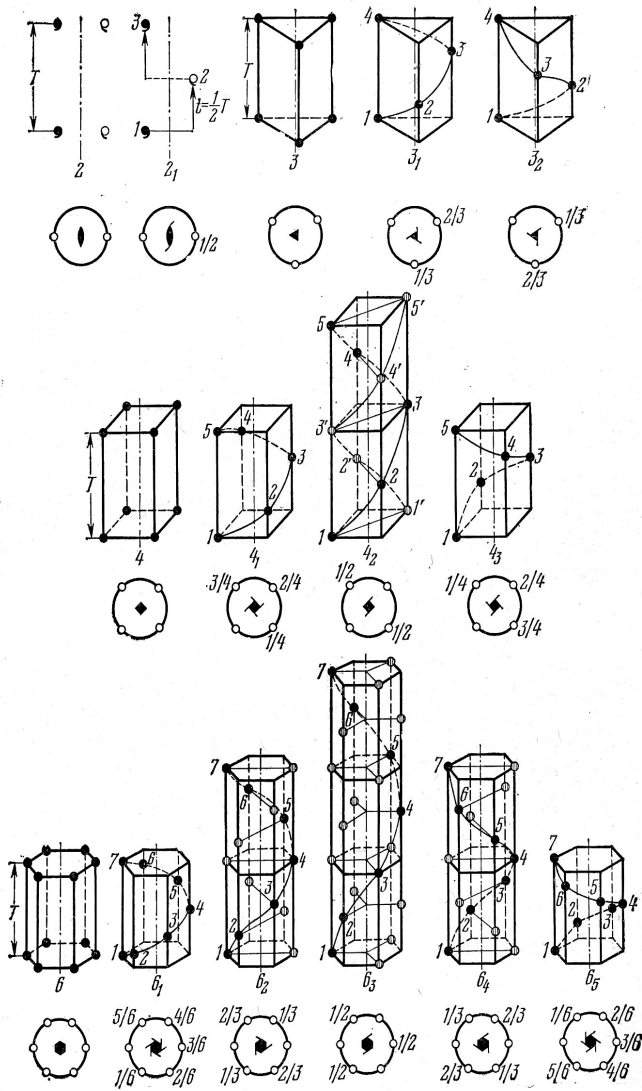


Рис. 28. Винтовые оси симметрии

теперь расположена на высоте $c/2$ над плоскостью чертежа, около нее ставится число «1/2».

В табл. 5 сведены условные обозначения винтовых осей и плоскостей скользящего отражения.

Таблица 5

Пространственные преобразования симметрии

Оси			Плоскости		
Вертикальные	Горизонтальные	Наклонные	Вертикальные	Горизонтальные	Наклонные
2 2_1 2_2 2_3 2_4 2_5 2_6 2_7 2_8 2_9 2_{10} 2_{11} 2_{12} 2 2_1 2_2 2_3 2_4 2_5 2_6 2_7 2_8 2_9 2_{10} 2_{11} 2_{12} 2 2_1 2_2 2_3 2_4 2_5 2_6 2_7 2_8 2_9	m a,b c n d m a b n d	m a,b n,d			

9. Основные теоремы взаимодействия закрытых и открытых элементов симметрии с трансляциями

Теорема 1. Последовательное отражение в двух параллельных плоскостях симметрии, расстояние между которыми a , равносильно трансляции на расстояние $t=2a$.

Теорема 2. Плоскость симметрии и перпендикулярная ей трансляция $\mathbf{t}$ порождает новые, вставленные плоскости симметрии, параллельные данной, аналогичные ей и отстоящие от нее на

расстояние $t/2$.

Теорема 3. Ось симметрии и перпендикулярная ей трансляция t порождает новые оси симметрии, параллельные данной, аналогичные ей и отстоящие от нее на расстояние $t/2$.

Теорема 4. Плоскость симметрии m и трансляция t , составляющая с плоскостью угол α , порождает плоскость скользящего отражения, параллельную данной, отстоящую от нее на расстояние $t/2\sin\alpha$ и имеющую скольжение $t\cos\alpha$.

Теорема 5. При пересечении двух пересекающихся под углом α плоскостях симметрии по линии пересечения появляется ось симметрии с углом поворота 2α .

10. Обозначения пространственных групп симметрии

Для обозначения пространственных групп симметрии применяют международные символы (табл. 6) или символы Шенфлиса. В международном символе пространственной группы на первом месте стоит буква, обозначающая тип ячейки Браве; далее – порождающие элементы симметрии, каждый на определенном месте. При помощи теорем о сочетании элементов симметрии по виду символа можно наглядно представить всю совокупность элементов симметрии этой группы.

Обозначение по Шенфлису пространственных групп симметрии аналогично обозначению точечных групп, за исключением верхнего индекса, который указывает порядок следования данной пространственной группы в международных таблицах.

Таблица 6

Обозначение пространственных групп симметрии по международной символике

Сингония	Позиция в символе			
Триклинная	Тип решетки Браве	Имеющийся элемент симметрии		
Моноклинная		ось 2 или 2 ₁ и плоскость, перпендикулярная ей		
Ромбическая		Плоскость, перпендикулярная или осью параллельная		
		Оси X	Оси Y	Оси Z
Тригональная гексагональная		Ось высшего порядка и плоскость, перпендикулярная ей	Координатная плоскость или ось (большая диагональ ромба с γ=120 ⁰)	Диагональная плоскость или ось (малая диагональ ромба с γ=120 ⁰)
Тетрагональная		Ось высшего порядка и плоскость, перпендикулярная ей	Координатная плоскость или ось	Диагональная плоскость или ось
Кубическая		Координатная плоскость или ось	3	Диагональная плоскость или ось

11. Вывод пространственных групп симметрии

При выводе пространственных групп симметрии за исходные принимают 32 точечные группы симметрии, выписывая в соответствии с решеткой Браве для каждой из групп все возможные сочетания порождающих элементов симметрии. Этот принцип был

предложен Н.В. Беловым и получил название «классного», так как имелось ввиду преподавание курса по пространственным группам в высшей школе (классе) для студентов, не имеющих фундаментальной математической подготовки. Добавив к каждой из 32 точечных групп симметрии все допустимые ею трансляционные подгруппы (Решетки Браве), получим пространственные группы, в которых полностью сохранился как осевой, так и плоскостной комплекс точечных групп, т.е. симморфные группы (73 группы). Так, например, из точечной группы mmm получим пространственные группы $Pmmm$, $Cmmm$, $Immm$, $Fmmm$. Для получения несимморфных пространственных групп симметрии следует у каждой симморфной группы последовательно заменить все макроэлементы на их микроэлементы симметрии. Например, из $Pmmm$, заменяя плоскости отражения на плоскости скольжения, получим $Pmma$, $Pbam$, $Pbca$ и т. д. Несимморфные группы разделяются на 54 гемисимморфных и 103 асимморфных. В первых полностью сохранился осевой комплекс их точечных групп, во вторых – ни осевой, ни плоскостной комплекс точечных групп не сохраняется. Всего существует 230 пространственных групп.

Рассмотрим получение пространственных групп на примере триклинной и моноклинной сингоний.

Наиболее просто выписываются пространственные группы триклинной сингонии с единственно возможной примитивной решеткой Браве и единственным помимо осей 1-го порядка элементом макросимметрии, не имеющим пространственных разновидностей, – центром инверсии: PI (C_1^1) и $P\bar{1}$ (C_1^2).

При выводе групп моноклинной сингонии, например, для класса C_{2h} ($2/m$) из трех присутствующих элементов симметрии: $\bar{1}$, m и 2 , порождающими удобно считать ось 2-го порядка и перпендикулярную к ней плоскость симметрии. И тогда, учитывая, что для каждого из трех знаков символа группы имеются две возможности: решетки P и C , оси 2 и 2_1 , плоскости зеркальные (m) и скользящего отражения, легко получить четыре примитивные и две базоцентрированные группы.

В присутствии лишь одного особого направления исчезает возможность принудительного фиксирования двух координатных направлений, а следовательно, и необходимость рассмотрения центрировки косоугольной грани элементарной ячейки, поскольку любая ее центрировка приведет к появлению более короткого трансляционного вектора и соответственно к возможности выбора Р-ячейки меньшего размера. Оси 2 и 2_1 так же, как и перпендикулярные к ним плоскости, в Р-ячейке из-за отсутствия косо-расположенных к оси Y трансляционных векторов становятся независимыми. Поскольку выбор двух координатных осей в моноклинной ячейке в плоскости, перпендикулярной единственному особому направлению, произволен, то трансляционная компонента плоскости скользящего отражения может оказаться по-разному ориентированной относительно выбранного координатного репера.

С учетом вышесказанного получим 4 пространственные группы с Р-решеткой: симморфную $P\frac{2}{m} (C_{2h}^1)$, гемисимморфные $P\frac{2_1}{m} (C_{2h}^2)$ и $P\frac{2}{c} (C_{2h}^4)$ и асимморфную $P\frac{2_1}{c} (C_{2h}^5)$.

Чтобы представить графики пространственных групп моноклинной сингонии, строится проекция на плоскость, перпендикулярную оси Z ячейки, т.е. проекция на плоскость xOy (рис. 29,а). Такую прямоугольную проекцию полезно сопровождать графиком группы, спроектированной на плоскость косоугольной грани xOz , т.е. в новой установке, в которой угол моноклинности оказывается не искаженным (рис. 29,б).

230 пространственных групп были выведены в 1890 – 1894 гг. одновременно и независимо Е.С. Федоровым и А. Шенфлисом за два десятилетия до того, как удалось экспериментально доказать существование кристаллических структур. Дифракция рентгеновских лучей на кристаллических структурах была впервые продемонстрирована Лауэ в 1912 г.

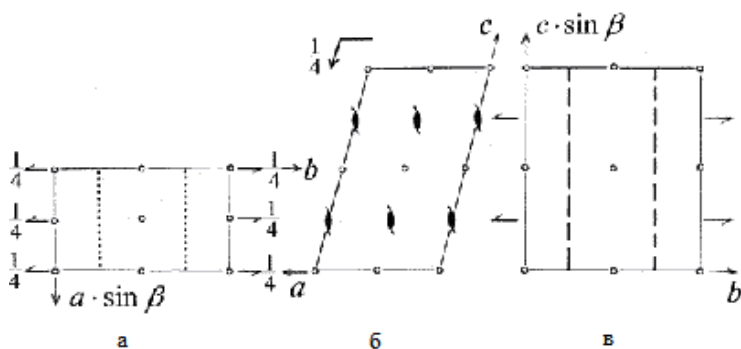


Рис. 29. График пространственной группы $P\frac{2_1}{c}$ в проекциях на плоскости xOy (а), xOz (б), yOz (в)

Графики 230 пространственных (федоровских) групп симметрии приведены в справочнике «Интернациональные таблицы по структурной кристаллографии».

Библиографический список

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М., 1978.
2. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фадеев М.А. Кристаллография. – М.: Изд-во физико-математической литературы, 2000. – 496 с.
3. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. – М.: Наука, 1975. – 680 с.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. – М., 1974.
5. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теоретическая физика. Т.Ш. Квантовая механика. – М.: Наука, 1989. – 768 с.
6. Кузьмичева Г.М. Основные разделы кристаллографии. – М.: МИТХТ, 2002. – 80 с.
7. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П. Теория симметрии кристаллов. – М.: ГЕОС, 2000. – 410 с.
8. Серба П.В., Мирошниченко С.П. Контроль параметров микроструктуры материалов методами дифракционного анализа. – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2009. – 40 с.
9. Блинов Ю.Ф., Серба П.В., Московченко Н.Н. Кристаллография: Методическое пособие для самостоятельной и практической работы. – Таганрог: Изд-во ТРТУ, 2005. – 54 с.
10. Кушта Г. П. Введение в кристаллографию. – Львов : Вища школа, 1976. – 238 с.
11. Эварестов Р.А. Квантовохимические методы в теории твердого тела. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1982. – 280 с.
12. Ормонт Б.Ф. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. – М.: Высшая школа, 1973. – 656 с.

Серба Павел Викторович
Луговой Евгений Владимирович

Теория симметрии кристаллов

Учебное пособие по курсу
Кристаллография

Редактор Проценко И.А.
Корректор Надточий З.И.

ЛР020565 от 23.06.1997г. Подписано к печати

Печать офсетная. Бумага офсетная

Формой 60х84^{1/16} Уч.- изд.л. - 4,5.

Усл. п. л. - 4,75

Заказ №

Тираж

ЭКЗ.

C''

Издательство Технологического института

Южного федерального университета

ГСП 17А, Таганрог, 28, Некрасовский, 44

Типография Технологического института

Южного федерального университета

ГСП 17А, Таганрог, 28, Энгельса, 1