

8.11. Правильные системы точек пространственных групп. Формулы вида (99), (100) дают возможность, зная все операции группы  $\Phi$ , получить из любой точки  $x$  все остальные, симметрично ей равные, т. е. ПСТ данной группы. Однако практически для этого проще пользоваться готовыми координатами правильных систем точек общего и всех частных положений, даваемых для каждой пространственной группы в Интернациональных таблицах (см. рис. 103). Напомним, что точка общего положения — асимметричная, число точек в ПСТ общего положения, приходящихся на одну элементарную ячейку, принято называть порядком  $\Phi$  (хотя  $\Phi$  — группы бесконечного порядка). Точки в частных положениях — на точечных элементах симметрии — сами имеют эту симметрию, а число их (кратность) соответственно меньше. Если  $\Phi$  содержит какую-нибудь точечную группу  $K$  в качестве подгруппы:  $\Phi \supset K$  (т. е. если в  $\Phi$  есть элементы точечной симметрии), то

ПСТ пространственной группы, объединяемая этой  $K$ , обладает такой точечной симметрией.

Точки правильной системы группы  $\Phi$ , эквивалентные по  $K$ , являются вершинами многогранника, называемого изогоном. Эти изогоны правильно расположены в пространстве согласно группе  $\Phi$ .

Как мы уже видели, в симморфных группах  $\Phi_c$  изогоны заданы просто ПСТ точечной группы  $K$ , входящей в (95), а их центры расположены по решетке, выводимой соответствующей группой переносов (рис. 98, 99, 101, а). Например, для группы  $Pmmm$  (рис. 101, а) таким образом получается система параллельно расположенных прямоугольных параллелепипедов.

При переходе к несимморфным группам  $\Phi_n \subset \Phi_c$  той же группы  $K$  ПСТ симморфной группы распадается на части, каждая из которых является ПСТ соответствующей подгруппы  $K_1 \subset K$ ,  $K_1 \subset \Phi_n$ , и изогон симморфной группы превращается в другой, менее симметричный изогон (рис. 101, б).

Как мы уже упоминали, есть 13 групп  $\Phi$ , не содержащих точечных подгрупп, кроме тривиальной 1. Естественно, что в них нет изогонов.

Каждая из этих групп  $\Phi$  имеет свой изогон, который является

При описании кристаллических структур, принадлежащих каждой определенной группе  $\Phi$ , указывают для каждого сорта атомов структуры, какую ПСТ — общего или частного положения — они занимают, и дают координаты  $x, y, z$  только одного базисного атома каждого сорта, остальные же координаты получаются по формулам размножения ПСТ, содержащимся в Интернациональных таблицах. Разные базисные атомы  $A, B, C, \dots$  структуры могут занимать различные или одинаковые по симметрии ПСТ, разумеется, в последнем случае исходные координаты их будут отличаться.

Нужно отметить, что часто в литературе встречаются словоупотребления такого рода: «структура состоит из вставленных друг в друга решеток атомов  $A$  и  $B$ ». Это означает, что указанные атомы занимают разные по базисным координатам ПСТ данной группы  $\Phi$ . То же имеется в виду, когда в некоторой «решетке» (т. е. кристаллической структуре) выделяют «подрешетку» тех или иных атомов.

Если взять одну ПСТ с высшей симметрией  $K$  в данной группе  $\Phi_c$ , то ее точки образуют решетку Браве. Так мы подходим к специальному и важному случаю многогранников, заполняющих пространство без промежутков, таких, которые выводятся друг из друга операциями трансляционной группы  $T$ . Это — аналог двумерной задачи о параллелогонах (см. рис. 51). На каждый из многогранников приходится один узел решетки Браве.

Такие многогранники, примыкающие друг к другу равными и параллельными (в отдельном многограннике и всей их совокупности) гранями, Федоров назвал параллелоэдрами. Частным случаем параллелоэдров для примитивных решеток являются сами элементарные параллелепипеды, характеризующие сингонию (см. рис. 88).

На рис. 108 изображены пять наиболее симметричных параллелоэдров Федорова — куб, ромбододекаэдр, кубооктаэдр, вытянутый ромбододекаэдр, гексагональная призма, соответствующие кубическим решеткам  $P$ ,  $F$  и  $I$ , тетрагональной решетке  $F$  и гексагональной решетке. На рис. 109 показано, как некоторые из них выполняют пространство. Эти пять основных параллелоэдров могут быть подвергнуты аффинным деформациям, но при этом они остаются параллелоэдрами — будут выполнять пространство без пропусков и перекрытий.

Совокупность всех этих параллелоэдров интересовала Федорова потому, что он связывал с ними вывод пространственных групп. Кристаллическое пространство, описываемое симморфными группами  $\Phi_c$ , может быть выполнено такими параллелоэдрами. Если же группа гемисимморфная  $\Phi_r$ , то это будет уже некий составной параллелоэдр, а в асимморфных группах  $\Phi_a$  — стереоэдр определенной формы.

Другого типа параллелоэдры можно определить построением Дирихле, соединяя узел решетки Браве со всеми ближайшими узлами прямыми линиями и проводя на середине полученных отрезков и перпендикулярно им плоскости, которые, пересекаясь, и замкнут искомую фигуру (рис. 110 — пример двумерного построения). Такую область в реальном пространстве называют областью Вороного — Дирихле, а в обратном пространстве — ячейкой Вигнера — Зейтца. Такие многогранники в обратном пространстве используются