видно из рис. 31, *б*, при этом всегда возникает еще одна, параллельная m плоскость m', отстоящая на $t/2$. То же справедливо и для скользящих плоскостей, перпендикулярных t. По аналогии нетрудно понять, что если есть трансляционно равные оси симметрии четного порядка, то параллельно им и на середине расстояния между ними есть оси второго порядка. Также между трансляционно равными центрами инверсии посередине есть и производные центры инверсии. Таким образом, в группах Φ существуют бесконечные системы параллельных элементов симметрии, выводимые из некоторых исходных, причем как трансляционно равные, так и производные, лежащие на половине расстояния между ними.

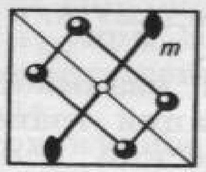
8.6. Принципы вывода пространственных групп. Симморфные группы. Для вывода групп Φ используются геометрические, арифметические, комбинаторные, теоретико-групповые и иные методы. Мы будем опираться на геометрические представления и на теорию групп.

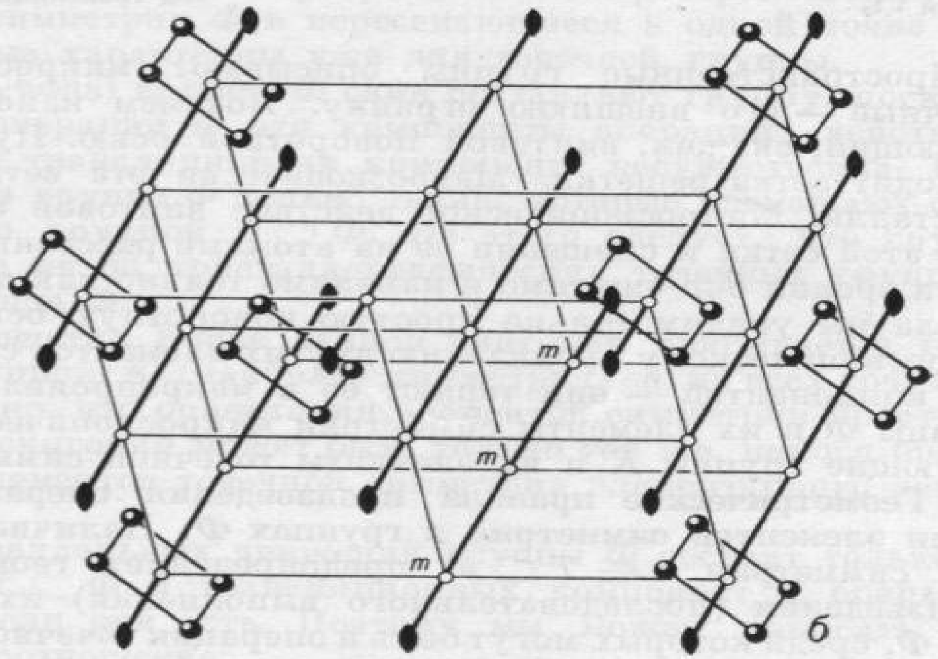
Из рассмотрения группы переносов T и групп Браве, а также установления гомоморфности (при соответствующих ориентациях) групп Φ и K (94) следует простой способ вывода симморфных пространственных групп. Он состоит в том, что можно комбинировать между собой операции t_i группы T

Рис. 98

Возникновение симморфной пространственной группы как произведения точечной группы и трансляционной группы Браве

а — точечная группа $2/m$ и правильная система точек в ней (для наглядности точки соединены прямыми; они образуют прямоугольник);





б — «рассаженные» по узлам примитивной косоугольной решетки Браве элементы симметрии и правильные системы точек группы $2/m$ (это дает пространственную группу $P2/m$; в ней, кроме исходных элементов симметрии группы $2/m$, возникают на половинных расстояниях дополнительные элементы 2, m, $\bar{1}$); *в* — стандартное изображение пространственной группы $P2/m$ в проекции на косоугольную грань

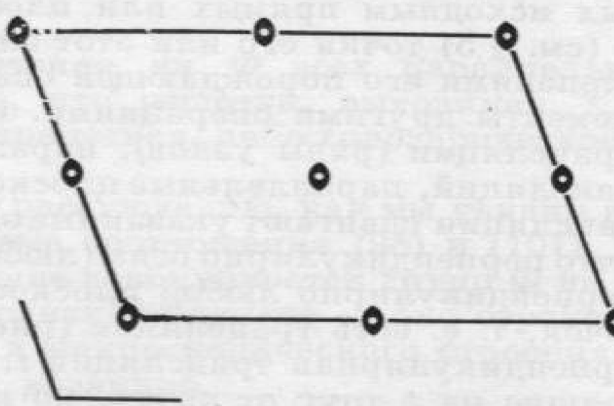


Таблица 11. **Распределение 73 симморфных групп Φ_c по сингониям**

Сингония	Число групп	Сингония	Число групп
Кубическая	$5\cdot3=15$	**Ромбическая**	$3\cdot4+1=13$
Тетрагональная	$7\cdot2+2=16$	**Моноклинная**	$3\cdot2=6$
Тригональная	$5\cdot1=5$	**Триклинная**	$2\cdot1=2$
Гексагональная	$12\cdot1+4=16$		

Нужно отметить, что взятая сама по себе одна решетка Браве из сферически-симметричных точек описывается самой симметричной из симморфных федоровских групп соответствующей центрировки данной сингонии. Эти группы даны в табл. 10.

8.7. Несимморфные группы $\Phi_н$. Для того чтобы получить другие, несимморфные федоровские группы, вспомним, что при образовании произведения групп в результирующей группе возможно выделение нетривиальных подгрупп. Это иллюстрируется рис. 33, на котором рассматривается произведение операции точечной группы m с одномерной трансляцией $t \parallel m$. Из возникшей группы G_1^2 можно выделить подгруппу с базисом $\{e, a\}$, содержащую скользящее отражение a (рис. 33, *г*).

Важно отметить, что хотя период переноса в новой группе $t' = 2t$, т. е.

щую скользящее отражение a (рис. 99, г).

Важно отметить, что хотя период переноса в новой группе $t' = 2t$, т. е. удвоен по сравнению с исходным, но теперь это не имеет значения, и его можно взять как элементарный, а трансляционной компонентой скользящего отражения a будет, как всегда, $t'/2$. Полученная группа является подгруппой симморфной группы G_1^2, но она не тождественна никакой другой симморфной группе этого типа.

Точно такой же подход справедлив и для групп G_3^3 (Копцик, 1966). Кратно увеличенные в одном, двух или во всех трех направлениях элементарные ячейки групп Φ_c содержат в себе не только исходные элементы симметрии и соответствующие операции, но также и операции с трансляционной компонентой, если кратный период принять за основной. Возьмем, например, шесть расположенных друг над другом ячеек группы Φ_c, содержащей ось 6 (рис. 100). В них есть операции $6^n (n = 0, \ldots, 5)$, а также $6^n \cdot t', \ldots, 6^n \cdot 5t'$. Отберем из них только $6^n \cdot nt'$. Они составляют винтовой поворот, и возникает нетривиальная подгруппа $\Phi_н \subset \Phi_c$ с периодом $t = 6t'$, содержащая винтовой поворот 6_1.

Таким образом получаются *несимморфные* группы $\Phi_н$, которые являются нетривиальными подгруппами групп Φ_c, $\Phi_c \supset \Phi_н$. Симморфные и несимморфные группы вместе составляют все федоровские группы. Соответственно все операции — элементы $g_i \in \Phi_н$ являются частью (подгруппой) совокупности элементов $\{\ldots g_i \ldots\} = \Phi_c$, входящих в симморфную группу (с кратными трансляциями). Группы $\Phi_н \subset \Phi_c$ гомоморфны тем же, что и Φ_c, точечным группам K.

Е. С. Федоров подразделял несимморфные группы на два вида — гемисимморфные и асимморфные. Возьмем какую-нибудь симморфную группу второго рода Φ_c^{II}. При удвоении ее периода можно отбросить те операции второго рода, элементы которых пересекаются в той же точке, где и оси. Это и дает гемисимморфные группы $\Phi_г^{II}$, все они второго рода, число их 54.

Из симморфных групп Φ_c можно при кратном увеличении их периодов эобрать такие подгруппы $\Phi_н$, у которых нет точек, в которых пересекаются оси всех направлений,— они и являются асимморфными $\Phi_а$. Характерным примером асимморфных групп являются группы с винтовыми осями (ср. рис. 100). Таким образом, в симморфной группе Φ_c по определению (95) есть положения точек, симметрия которых и есть симметрия сходственной точечной группы K. В гемисимморфной группе $\Phi_г^{II}$ наивысшая симметрия положений точек описывается одной из подгрупп первого рода K^{I} индекса два группы K^{II}, гомоморфной $\Phi_г^{II}$, т. е. положение точек в K^{II} расщепляется на два энантиоморфных положения в K^{I}. Например, группа $Pmmm$ — симморфная, имеет положение с симметрией mmm (рис. 101, a), группа $Pnnn$ — гемисимморфная, наивысшая симметрия положения 222 (рис. 101, $б$). Аналогично группа $Pm\bar{3}m$ — симморфная с наивысшей симметрией положения $m\bar{3}m$, группа $Pn\bar{3}m$ — гемисимморфная с наивысшей симметрией положения 432, группа же $Pm\bar{3}n$ — асимморфная, в ней нет положений с симметрией $m\bar{3}m$ и 432.

Число групп $\Phi_а$ — 103, среди них $\Phi_а^{I}$ — 41, $\Phi_а^{II}$ — 62.

Рассмотрим запись операций несимморфных групп $\Phi_н$:

$$\Phi_н \ni g_i: \quad \mathbf{x}' = D\mathbf{x} + \alpha(D) + \mathbf{t}, \tag{100}$$

где $D\mathbf{x}$ по (4), (5) определяет все точечные преобразования симметрии данной группы (если они есть), $\alpha(D)$ — компоненты винтового переноса или скольжения, связанные с собственным или несобственным вращением, $\mathbf{t}$ — операция трансляций группы Браве (92).

Нужно отметить, что аналитическая запись операций пространственных групп зависит от выбора начала координат. Поэтому, в частности, операции симморфных групп имеют вид (99) только в том случае, если начало выбрано в точке пересечения всех их элементов симметрии, при выборе же его в другой точке и их операции записываются в наиболее общем виде (100).

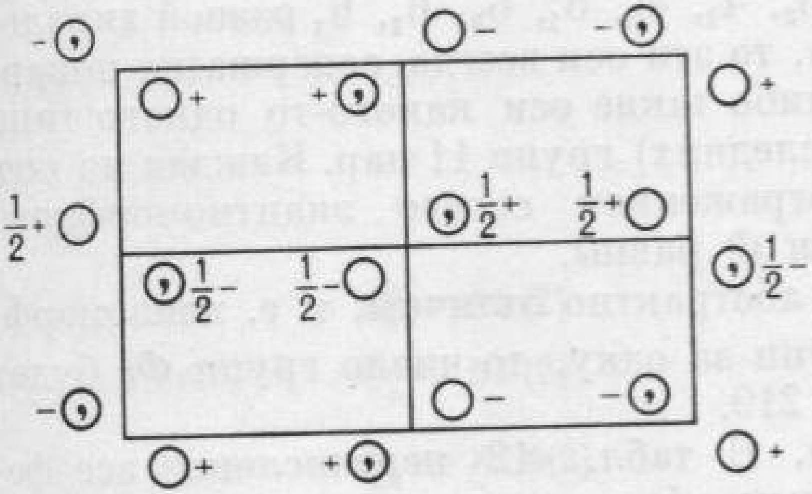
Обратимся еще раз к соображениям о связи любых федоровских групп с точечными. Фактор-группа несимморфной группы $\Phi_{\text{н}}$ по подгруппе трансляций ввиду наличия члена $\alpha(D)$ в выражении (100) не совпадает с точечной группой K, как это имело место для симморфных групп по (98). Однако в этом случае получается некая группа K', которая включает и операции с трансляционными компонентами. При этом уславливаются, что степень операций, дающих трансляцию (например, $3_1^3 = t$ — рис. 102), эквивалентна единичной операции e, и называют такую группу группой по модулю, в данном случае по модулю 3_1^3. При таком условии группа K' оказывается изоморфной соответствующей обычной точечной группе K, а на первую из них отображается фактор-группа

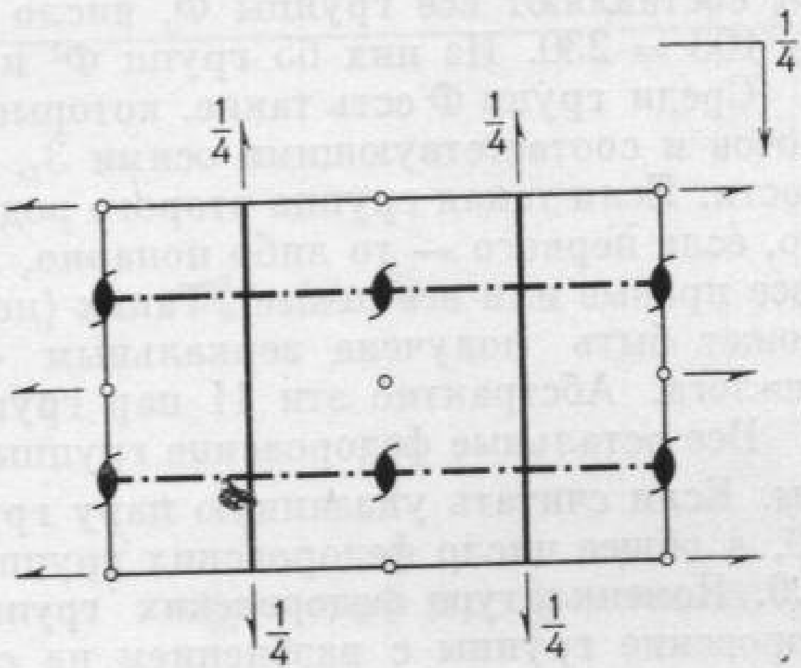
$$\Phi_{\text{н}}/T \leftrightarrow K' \leftrightarrow K. \qquad (101)$$

Другими словами, фактор-группа любой федоровской группы по подгруппе трансляций T всегда изоморфна кристаллографической группе K.

8.8. Число федоровских групп. Конечность числа федоровских групп следует из способа их вывода. Действительно, число симморфных групп $\Phi_{\text{с}}$ конечно, так как они являются произведением конечного числа групп Браве и конечного числа групп K при конечном числе возможных комбинаций групп K с группами Браве. Число же групп $\Phi_{\text{н}}$ конечно, так как они являются подгруппами первых при конечном (кратном) увеличении периодов в 2, 3, 4, 6 (не более) раз. Если же брать бóльшие кратные периоды, то новых

Orthorhombic mmm — $P2_1/n2_1/m2_1/a$ — **No. 62** — $P.ma$ — D_{2h}^{16}





Origin at $\bar{1}$

Number of positions, Wyckoff notation and point symmetry			Co-ordinates of equivalent positions	Conditions limiting possible reflections
				General:
				hkl: No conditions
8	d	1	$x, y, z;\ \frac{1}{2}+x,\ \frac{1}{2}-y,\ \frac{1}{2}-z;$	$0kl$: $k+l=2n$