Трехмерные решетки.

8.1. Трехмерная решетка. Начало развитию современных представлений о симметрии пространственной структуры кристаллов было положено работами французского кристаллографа А. Браве, который в 1848 г. установил наличие 14 типов трехмерно-периодических решеток, названных его именем. Л. Зонке в 1879 г., опираясь на работы К. Жордана (1869), описал группы движений, т. е. пространственные группы первого рода. Полный вывод пространственных групп был сделан Е. С. Федоровым и завершен им в 1890 г., и независимо от него, лишь немного позже, немецким математиком А. Шенфлисом. В ходе переписки Федоров и Шенфлис окончательно уточнили описание всех 230 пространственных групп.

Федоровские группы $\Phi \equiv G_3^3$ — это группы преобразования в себя трехмерного однородного дискретного пространства, они описывают атомную структуру кристаллов. Условие однородности и дискретности и определяет тот факт, что все они трехмерно-периодические $\Phi \supset T_3$, а значит, и все кристаллографические — с осями лишь 1, 2, 3, 4, 6-го порядков (далее будем вместо T_3 писать просто T).

Трансляционная подгруппа T федоровской группы Φ определяется тремя некомпланарными (и попарно неколлинеарными) базисными векторами $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$:

$$t = p_1\mathbf{a}_1 + p_2\mathbf{a}_2 + p_3\mathbf{a}_3; \quad p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots \tag{91}$$

Групповым действием в T является векторное сложение любых $\mathbf{t} : \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 =$ $\mathbf{t}_3 \in T$. Вектор, соответствующий единичной операции группы, обозна-

Групповым действием в T является векторное сложение любых $\mathbf{t}: \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 = \mathbf{t}_3 \in T$. Вектор, соответствующий единичной операции группы, обозначается через 0, операция, обратная каждому $\mathbf{t}$,— через $-\mathbf{t}$. Группа трансляций — бесконечная, абелева, метрически она характеризуется тройкой базисных векторов. Тройка векторов $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ является основной (базисной), если любая трансляция решетки $\mathbf{t}$ может быть представлена уравнением (91) с помощью этих векторов. В частности, за основную можно принять тройку кратчайших некомпланарных друг другу векторов. Бесконечная дискретная совокупность всех точек (узлов) $\mathbf{x}'$, выводимых из данной точки $\mathbf{x}$ операцией $\mathbf{x} + \mathbf{t} = \mathbf{x}'$, образует геометрический инвариант группы T — пространственную решетку. Параллелепипед, построенный на $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$, называется элементарным параллелепипедом (рис. 86).

Элементарный параллелепипед, построенный на основной тройке векторов, всегда является пустым или, как говорят, примитивным — внутри него нет дополнительных узлов решетки (ср. рис. 75). Аналогично двумерному случаю (рис. 75) тройку основных векторов, а значит и примитивный параллелепипед, можно выбрать бесчисленным множеством способов (рис. 86). Объемы всех основных параллелепипедов одинаковы. Несмотря на то что в данной решетке мы можем по-разному выбрать основные тройки векторов, все они описывают метрически одну и ту же трансляционную группу.

Вместе с тем в решетке существует бесконечное множество непримитивных параллелепипедов, содержащих на ребрах, или (и) на гранях, или (и) в объеме узлы, принадлежащие примитивной решетке (рис. 76, двумерный пример). Их ребрами являются три любые некомпланарные трансляции $\mathbf{t}_1$, $\mathbf{t}_2$, $\mathbf{t}_3$ из всего множества (91). Объемы таких параллелепипедов кратны объему основного. Ясно, что все группы $T' = \{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3\}$ являются подгруппами $T = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$, ибо решетка, выведенная группой T', не покрывает всех узлов таковой для T. Абстрактно все T' изоморфны между собой, T, т. е. группа T в абстрактном смысле, единственная.

8.4. Гомоморфизм пространственных и точечных групп. Возьмем в пространстве любую асимметричную точку A вместе с ее асимметричной меткой — тетраэдром, произведем над ней все операции симметрии данной пространственной группы и будем интересоваться только компонентами вращений (собственных и несобственных) этих операций, а трансляции и трансляционные компоненты любых операций, если они есть, оставим без внимания. Все вращения полученных точек A, A', A'',... сохранятся, если мы перенесем эти точки параллельно себе в одну общую точку O, а все переносы, естественно, будут отсутствовать. Например, если у нас была операция винтового поворота с осью N_q, дающая смещенные и повернутые точки, то теперь они будут только повернутыми вокруг оси N, соответствующей по порядку N_q. Операциям (и элементам) симметрии a, b, c, n, d будет соответствовать m в параллельной ориентации; операции N, $\bar{N}$ и m групп Φ остаются при этом таковыми же. Элементы симметрии групп Φ могут все пересекаться в одной точке (Федоров именно такую точку называл «центром симметрии», придавая этому термину иное, чем теперь, значение), но могут и не пересекаться. Рассматриваемая процедура превращает все пространственно-распределенные элементы симметрии Φ в пересекающиеся в одной точке элементы симметрии, которые характерны уже для точечной группы.

Все вращения (обоего рода) группы Φ сами составляют группу, поскольку при произведениях операций Φ эти компоненты операций действуют только друг на друга, а трансляционная компонента несущественна. В то же время эти вращения в группе Φ только такие, которые совмещают с со- ... группой $T \subset \Phi$. Из этого следует, что группа