Трехмерные решетки.

8.1. Трехмерная решетка. Начало развитию современных представлений
о симметрии пространственной структуры кристаллов было положено рабо-
тами французского кристаллографа А. Браве, который в 1848 г. устано-
вил 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 уточ-
нили описание всех 230 пространственных групп.

Федоровские группы $\Phi \equiv G_3^3$ — это группы преобразования в себя трех-
мерного 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 $\mathbf{t}: \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 =$
$\mathbf{t} \in T$. 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, и 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

же время эти вращения в группе Φ только такие, которые совмещают с собой решетку, выводимую группой $T \subset \Phi$. Из этого следует, что группа этих вращений есть одна из 32 кристаллографических точечных групп K, которая гомоморфна группе Φ.

Поскольку каждая решетка Браве данной сингонии описывается голоэдрической точечной группой K (наиболее симметричной из всех точечных групп этой сингонии), ясно, что ориентация элементов симметрии пространственной группы данной сингонии может быть только той же, какова ориентация соответственных элементов точечной симметрии элементарного параллелепипеда.

Вся совокупность параллельных движений группы Φ состоит только из ее группы трансляций $T \subset \Phi$ и трансляционных компонент α операций вращений обоего рода, если они есть. Поэтому мы можем написать следующее символическое соотношение:

$$\Phi : (T + \alpha) \leftrightarrow K, \tag{94}$$

которое означает: исключение из Φ всех параллельных движений дает группу K, причем такую, что решетка, выводимая T, описывается либо самой K, если она голоэдрическая, либо голоэдрической по отношению к K ее надгруппой.

Этому геометрическому рассуждению, как мы увидим ниже, соответствуют строгие теоретико-групповые соотношения (98) и (101).

Гомоморфное отображение совокупностей групп Φ на определенные группы K не есть только абстрактное понятие — оно отражает физический факт связи микроскопического и макроскопического строения кристаллов и, собственно говоря, из него и возникло.

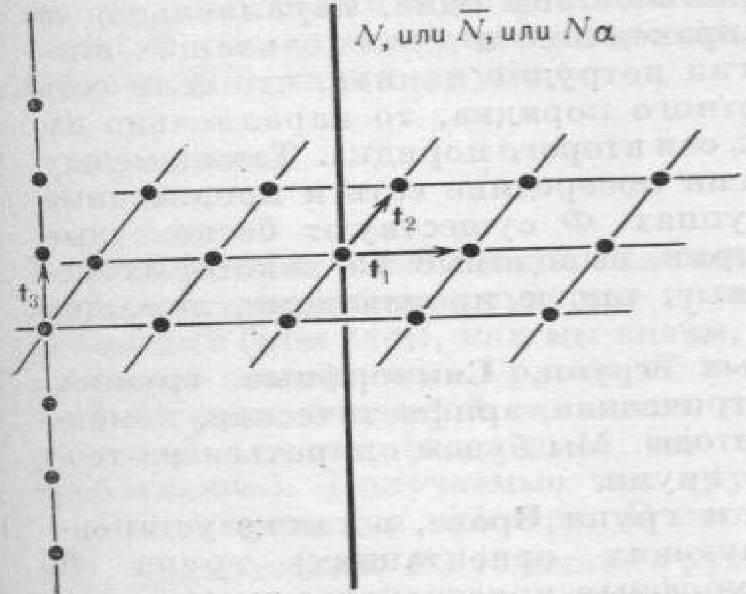

Рис. 96
Трансляция t_3, параллельная оси симметрии, и перпендикулярная ей сетка трансляций t_1t_2

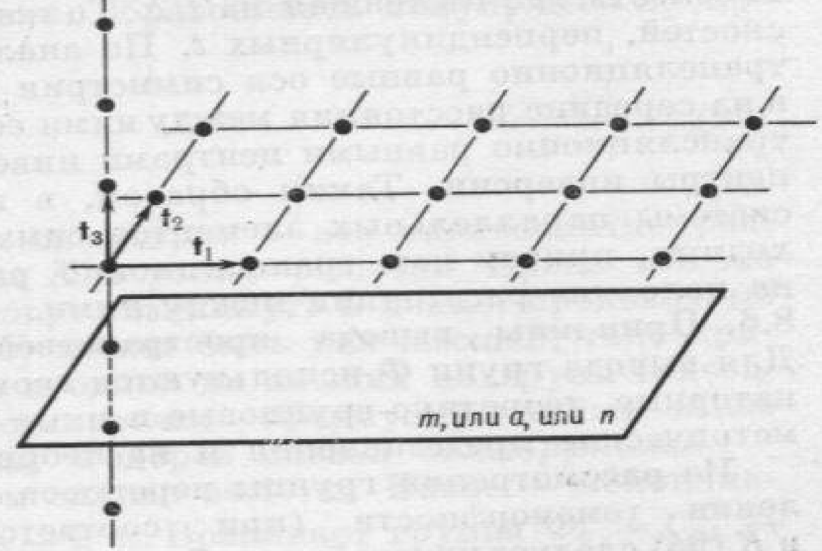

Рис. 97
Сетка трансляций t_1t_2, параллельная плоскости симметрии, и перпендикулярная ей трансляция t_3

Пространственные группы описывают микроструктуру кристалла, а точечные — его внешнюю огранку. Возьмем какой-нибудь кристалл, обладающий, скажем, винтовой поворотной осью. Пусть наклонно к этой оси проходит сетка решетки. Макроскопически эта сетка выражена как грань кристалла. Микроскопическое действие винтовой оси заключается в повороте этой сетки и смещении ее на атомные расстояния. С макроскопической точки зрения оно ощутимо и измеримо только как поворот, и в огранке кристалла мы увидим только простую поворотную ось. То же относится и к макроскопическому проявлению других элементов симметрии с трансляционной компонентой — они теряют ее в макропроявлении. Другими словами, группы Φ и их элементы симметрии макроскопически «видны» как соответствующие группы K и их элементы точечной симметрии.

8.5. Геометрические правила произведения операций и взаимной ориен-

ствующие группы К и их элементы …
8.5. Геометрические правила произведения операций и взаимной ориен-
тации элементов симметрии в группах Φ. Наличие операций трансляцион-
ной симметрии $t \in T \subset \Phi$ предопределяет геометрические особенности
произведения (последовательного выполнения) их с другими операциями
$g_i \in \Phi$, среди которых могут быть и операции точечной симметрии $g_i \in K \subset \Phi$.
Трансляции породят из любой прямой или плоскости бесконечное мно-
жество параллельных исходным прямых или плоскостей. По определению
элемента симметрии (см. § 5) точки его или этот элемент в целом преобразу-
ются в себя всеми степенями его порождающей операции, а он целиком — в
аналогичные ему элементы другими операциями. Отсюда следует, что в ре-
шетке всегда есть трансляции (ряды узлов), параллельные осям симметрии
(рис. 96), и сетки трансляций, параллельные плоскостям симметрии (рис. 97),
поскольку такие трансляции сдвигают указанные элементы параллельно себе.
Из рисунков видно, что перпендикулярно осям (любого типа) всегда есть сетки
точек (рис. 96), а перпендикулярно любой плоскости симметрии всегда есть
одномерные ряды точек, т. е. есть трансляции (рис. 97).
Плоскость m, перпендикулярная трансляции t, размножается ею в такие
же плоскости, отстоящие на t друг от друга, но по теореме II п. 2.4 и, как

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