Преобразование объекта в себя подразумевает, что его части, находящиеся в одном месте, совместятся после преобразования с частями, находящимися в другом месте. А это означает, что в объекте есть (его можно разделить на) равные части. Отсюда происходит само слово симметрия, означающее по-гречески соразмерность.

Таким образом, кратко можно сказать, что симметрия — это инвариантность объектов при некоторых их преобразованиях в пространстве описывающих их переменных.

переменных m, то можно рассматривать область их изменения как пространство m измерений с координатами точки в нем $x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_m$.

Совокупность координат обозначим через x. Они могут иметь как одинаковый смысл (например, три декартовые координаты), так и разный (например, одни — расстояния, другие — углы, третьи — те или иные физические параметры).

Пусть операция g осуществляет некоторое преобразование координат x пространства

$$g[x_1, x_2, \ldots, x_m] = x_1', x_2', \ldots, x_m'; \quad g[\mathrm{x}] = \mathrm{x}'. \tag{1}$$

Назовем F симметричным объектом (функцией, фигурой), а g — операцией или преобразованием симметрии, если F не меняется при действии g на исходные переменные:

$$F(x_1, \ldots, x_m) = F(g[x_1, \ldots, x_m]) = F(x_1', \ldots, x_m'),$$
$$F(\mathbf{x}) = F[g(\mathbf{x})] = F(\mathbf{x}'). \tag{2}$$

В записи (1) подразумевается, что задан конкретный способ, как получить каждую переменную x_i' из совокупности переменных x_i. При этом преобразование g может действовать на все переменные x_i, от которых зависит данная функция, или только на некоторые из них.

Отметим, что для каждого преобразования симметрии g (1), переводящего точки $\mathbf{x}$ в $\mathbf{x}'$, имеется обратное преобразование g^{-1}, переводящее точки $\mathbf{x}'$ в $\mathbf{x}$:

$$g^{-1}[\mathbf{x}'] = \mathbf{x}, \tag{3}$$

которое согласно (2) также есть преобразование симметрии.

Тождественное (единичное) преобразование $g = e$, оставляющее все переменные без изменения: $x_i = x_i'$, согласно (2) есть операция симметрии.

Нетрудно понять, что операция преобразования координатной системы есть $g^{-1}[X] = X'$, т. е. она обратна операции преобразования точек объекта $g[x] = x'$ (1). (Разумеется, можно считать исходной операцией преобразование осей, тогда обратной операцией будет преобразование координат точек.)

Преобразования пространства

Пространство, объект в нем, точки пространства. Операции симметрии действуют на все координаты x_i пространства, часть этого пространства может быть конечным объектом, объект может быть и бесконечным, занимающим все пространство. Тогда удобно говорить о симметрическом преобразовании всего пространства в себя, при этом конечный или бесконечный объект в этом пространстве, описываемый функцией F, преобразуется сам в себя.

Точки x и x′, переходящие друг в друга при симметрическом преобразовании $g[x]$ (1), будем называть симметрично равными точками. Назовем фигурами любые множества точек: дискретную конечную или бесконечную их совокупность, непрерывные многообразия — прямые или кривые линии, отрезки, разные замкнутые или незамкнутые плоскости, поверхности, объемы. Фигуры будем называть симметрично равными, если все соответствующие точки этих многообразий переводятся друг в друга по единому правилу $g[\mathbf{x}] = \mathbf{x}'$ (а значит, и $g^{-1}[\mathbf{x}'] = \mathbf{x}$).

Симметрические преобразования, сохраняющие неизменным метрические свойства пространства, называются изометрическими. При этих преобразованиях пространство не растягивается, не скручивается, т. е. является недеформируемым целым, так что расстояния между любой парой точек после преобразования сохраняются.

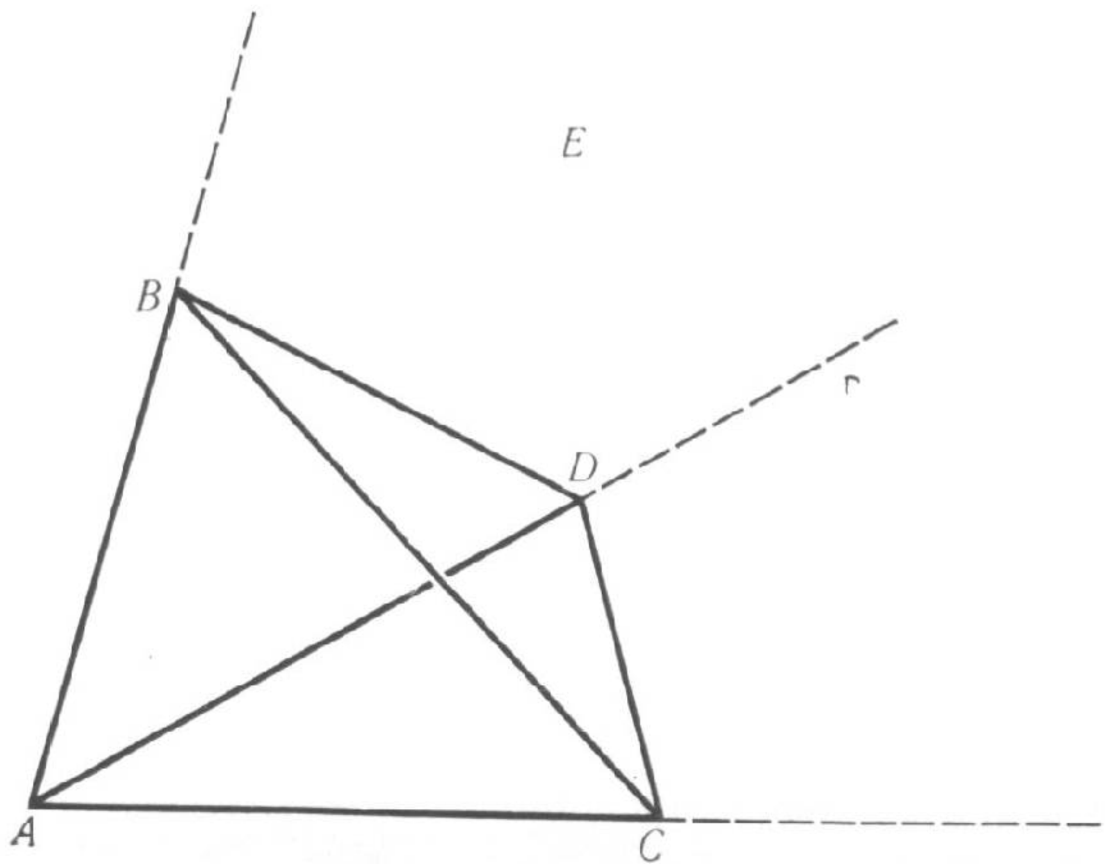
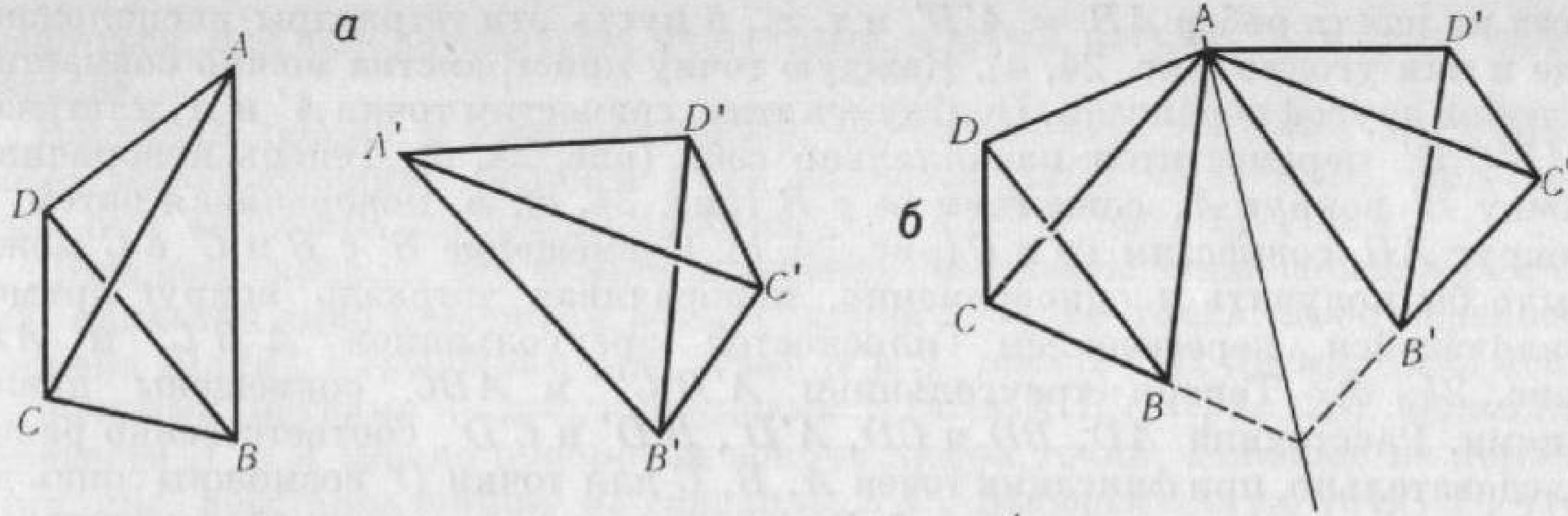


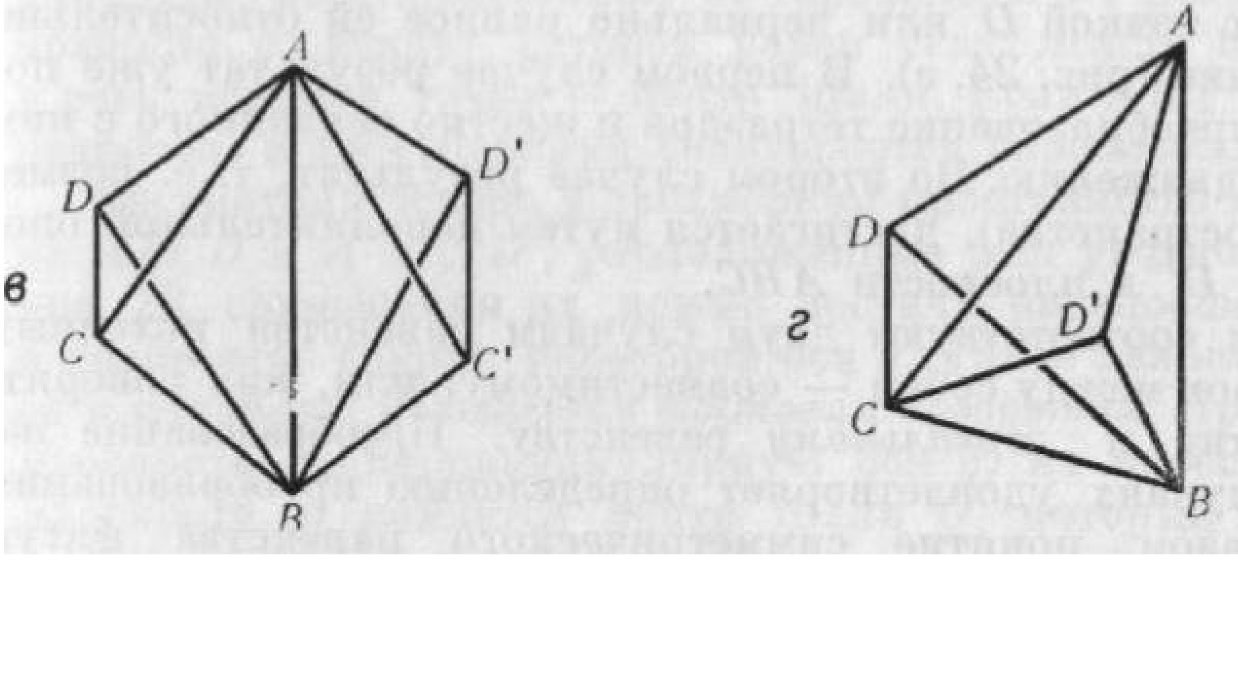
Рис. 23
Асимметричный тетраэдр как метка точки A и координатный репер любой точки E

Одна точка, прямая или плоскость (и любое количество точек, лежащих на них) не могут служить метками, так как они могут остаться на месте при некоторых преобразованиях симметрии. Жестко связанной с трехмерным пространством меткой могут служить четыре некомпланарные точки A, B, C, D (рис. 23), расстояния между которыми различны, или образуемая соединением этих точек фигура асимметричного (т. е. не имеющего никакой симметрии) тетраэдра. Три (любые) ребра этого тетраэдра, исходящие из общей вершины, могут рассматриваться как координатные оси (с соответствующими осевыми единицами). Следовательно, любая точка пространства E имеет определенные координаты относительно этих осей и пространство в целом однозначно связано с таким тетраэдром.

2.2. Основные изометрические преобразования пространства. Покажем, что любое преобразование пространства, сохраняющее его метрику, может быть сведено к параллельному переносу, иначе называемому трансляцией, повороту, отражению [1] или к некоторым комбинациям этих преобразований.

Для доказательства этого достаточно совместить с собой асимметричную метку пространства — тетраэдр. Пусть есть два таких тетраэдра: $ABCD$ и $A'B'C'D'$, равные друг другу, что означает соответственное равенство длин





Р и с. 24
Равные тетраэдры (*а*) и совмещение их путем последовательных переноса (*б*), поворота (*в*) и отражения (*г*)

всех их шести ребер $AB = A'B'$ и т. д., и пусть эти тетраэдры расположены где и как угодно (рис. 24, *а*). Каждую точку пространства можно совместить с любой другой переносом. Пользуясь этим, совместим точки A' и A, и тетраэдр $A'B'C'D'$ переместится параллельно себе (рис. 24, *б*). Теперь, поворачивая точку B' вокруг A, совместим ее с B (рис. 24, *в*), и, поворачивая затем C' вокруг AB, совместим ее с C (рис. 24, *г*). Совмещение B' с B и C' с C можно было бы получить и одновременно, поворачивая тетраэдр вокруг прямой, являющейся пересечением плоскостей треугольников $A'B'C'$ и ABC

для точки D' возможны лишь два положения: совпадение с точкой D или зеркально равное ей относительно плоскости ABC положение (рис. 24, *г*). В первом случае результат уже получен, и, очевидно, что преобразование тетраэдра и жестко связанного с ним пространства свелось к движению. Во втором случае результат, т. е. совмещения тетраэдров (и пространства), достигается путем дополнительной операции отражения точки D' в плоскости ABC.

Эти две возможности соответствуют двум случаям равенства исходных асимметричных тетраэдров между собой — совместимому, или, как говорят, *конгруэнтному*, равенству и *зеркальному* равенству. Преобразование же

Таким образом, понятие симметрического равенства фигур включает понятие совместимого или (и) зеркального их равенства. Преобразования переноса и поворота и их комбинации называются собственно *движениями*, или преобразованиями *первого* рода; преобразования, содержащие отражения,— преобразованиями *второго* рода, иногда *движениями второго* рода.

точка может служить меткой пространства, указывающей его ориентацию, если она рассматривается вместе со своим окружением, а минимальной меткой такого окружения являются три соседние точки, образующие вместе с ней асимметричный тетраэдр. Такую точку называют «кристаллографической». В отличие от этого математическая точка x, y, z не имеет признаков ориентации, она сама имеет максимальную симметрию — ее можно поворачивать вокруг любой оси или отражать в любой плоскости, проходящих через рассматриваемую точку, и она останется той же точкой. Кристаллографические же точки могут быть — и мы будем иногда их так называть — параллельными, повернутыми, отраженными.

любое преобразование первого рода является либо переносом, либо простым или винтовым поворотом пространства вокруг некоторой оси.

всякое движение плоскости, совмещающее ее с собой, является либо поворотом вокруг какой-либо ее точки, либо переносом (теорема Шаля).

винтовой поворот (спиральное движение) является наиболее общим преобразованием первого рода, переносы же и повороты можно рассматривать как его частные случаи. С другой стороны, винтовое движение можно разложить на поворот и перенос.

любая операция второго рода может быть представлена как операция зеркального поворота.

совокупность операций может быть заменена поворотом вокруг некоторой определенной оси[1] $\tilde{N}_\alpha$ и отражением в плоскости m, перпендикулярной этой оси (рис. 27). Эта операция и есть зеркальный поворот.

Специальными частными случаями зеркального поворота являются просто отражение в плоскости m ($\alpha = 0$) (рис. 28, *а*) и скользящее отражение a, когда $\tilde{N}_\alpha$ находится в бесконечности и поворот на α превращается в параллельный перенос вдоль некоторой прямой, параллельной m, на трансляцию t (рис. 28, *б*).

При $\alpha = \pi$ возникает другой специальный случай зеркального поворота — *инверсия* (обозначаемая $\bar{1}$), или преобразование относительно центра симметрии (рис. 28, *в*). Это преобразование характеризуется тем, что все прямые, проходящие через центр симметрии O, преобразуются в себя, но «меняют» свои концы (векторы $\mathbf{r}$ преобразуются в $-\mathbf{r}$), а все другие прямые или плоскости преобразуются в параллельные себе и находящиеся на том же расстоянии от O, но ориентированные (если на них поставить асимметричные метки) противоположно, т. е. становятся антипараллельными.

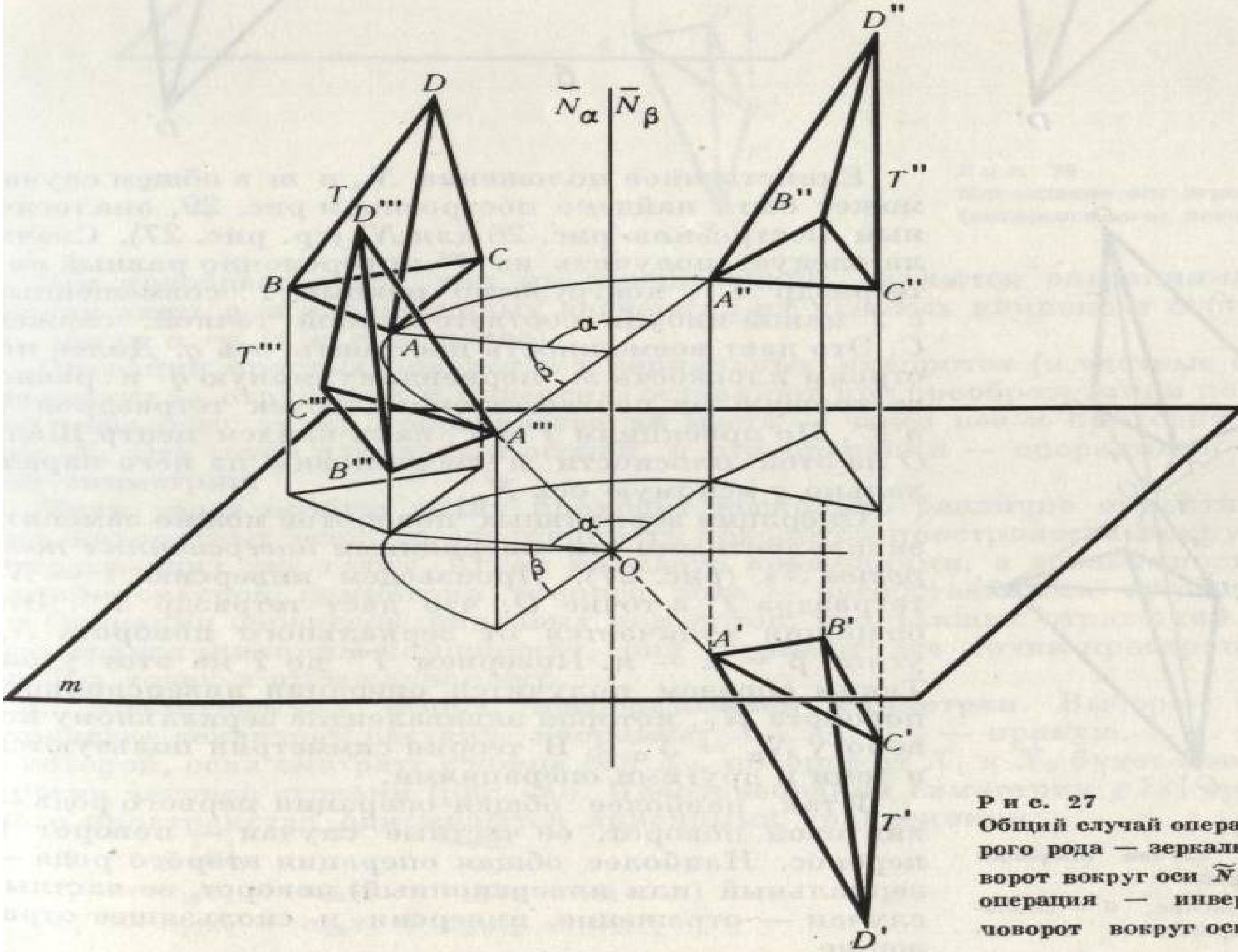
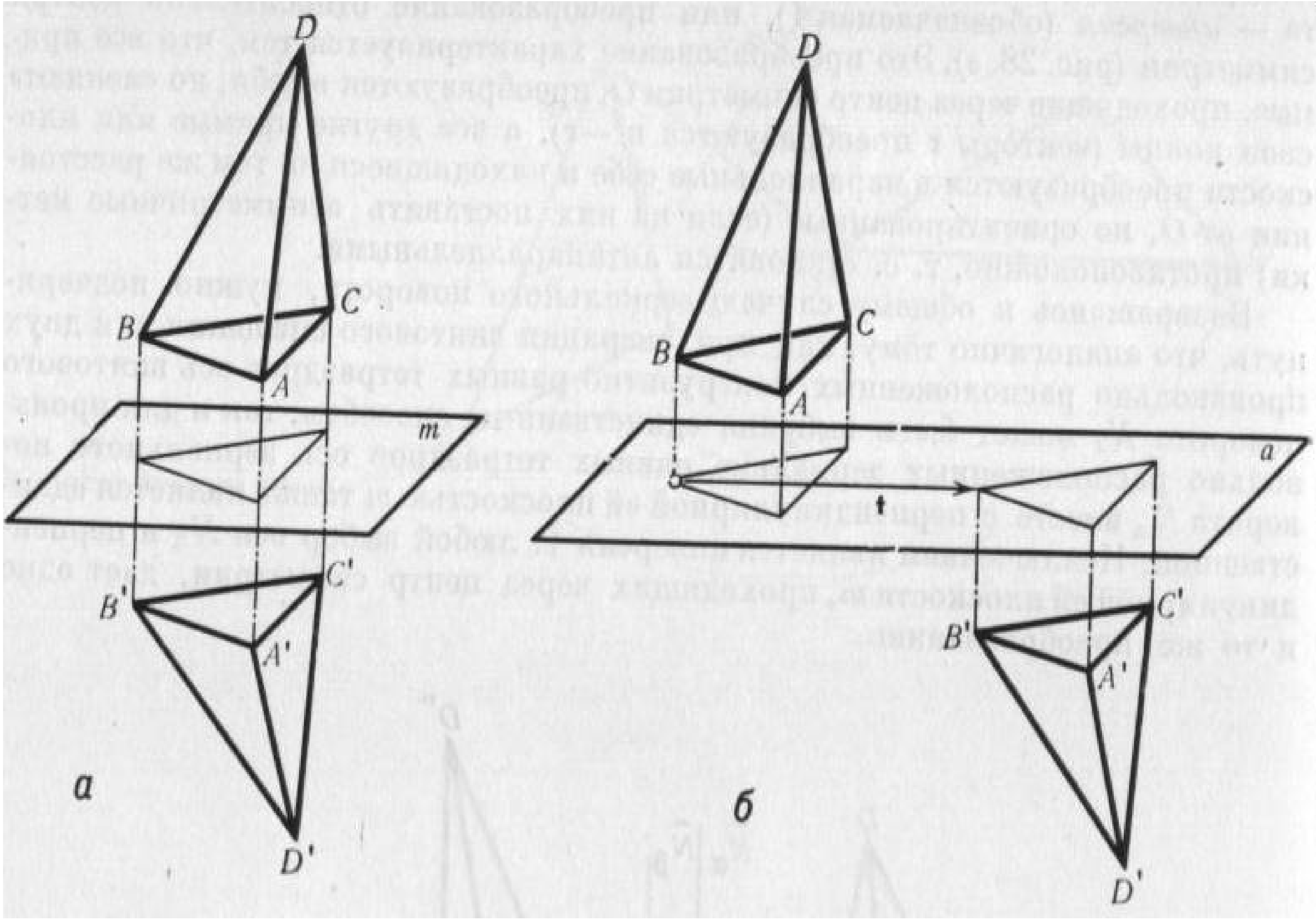
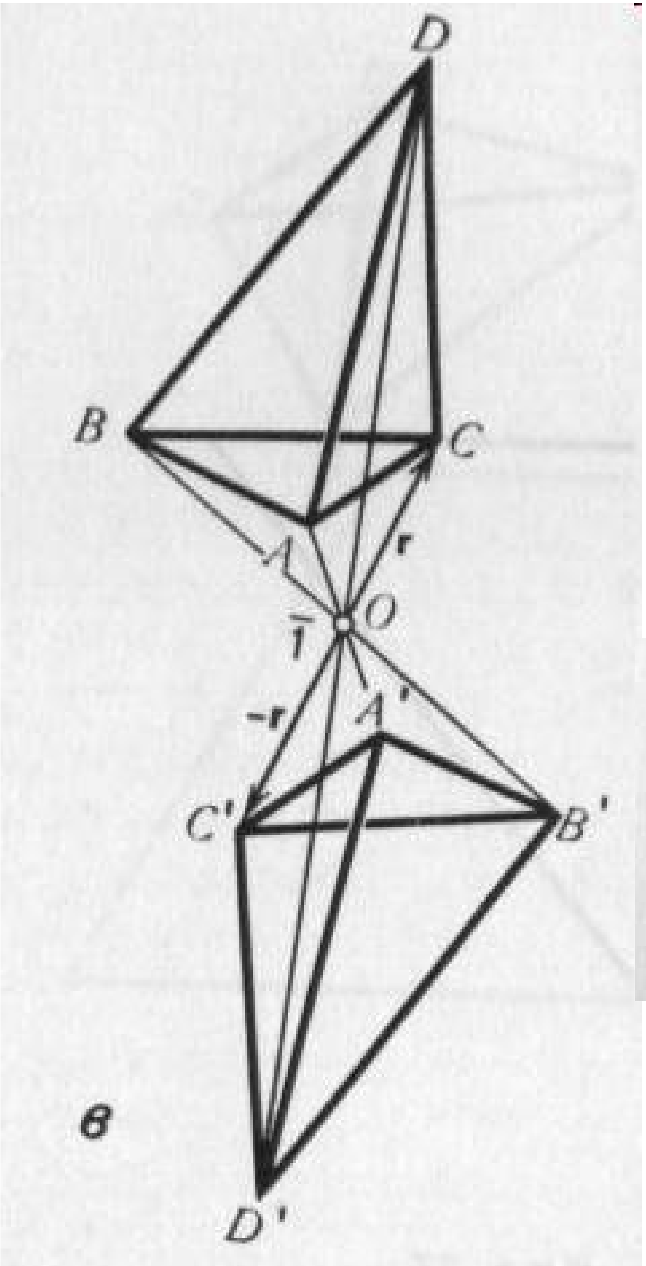


Рис. 27
Общий случай операции второго рода — зеркальный поворот вокруг оси $\widetilde{N}_\alpha$ (эта же операция — инверсионный човорот вокруг оси $\overline{N}_\beta$)


D
B
C
A
m
B'
C'
A'
D'
а
D
B
C
A
a
t
B'
C'
A'
D'
б



Частные случаи операции второго рода

а — отражение; *б* — скользящее отражение; *в* — инверсия

Итак, наиболее общая операция первого рода — винтовой поворот, ее частные случаи — поворот и перенос. Наиболее общая операция второго рода — зеркальный (или инверсионный) поворот, ее частные случаи — отражение, инверсия и скользящее отражение.

Операции простых поворотов и зеркальных поворотов (и частные случаи последних — отражение и инверсия) оставляют при преобразовании по крайней мере одну точку пространства на месте — через нее и проходит ось N или $\bar{N}$. Эта точка называется особой, а эти операции — операциями *точечной* симметрии.

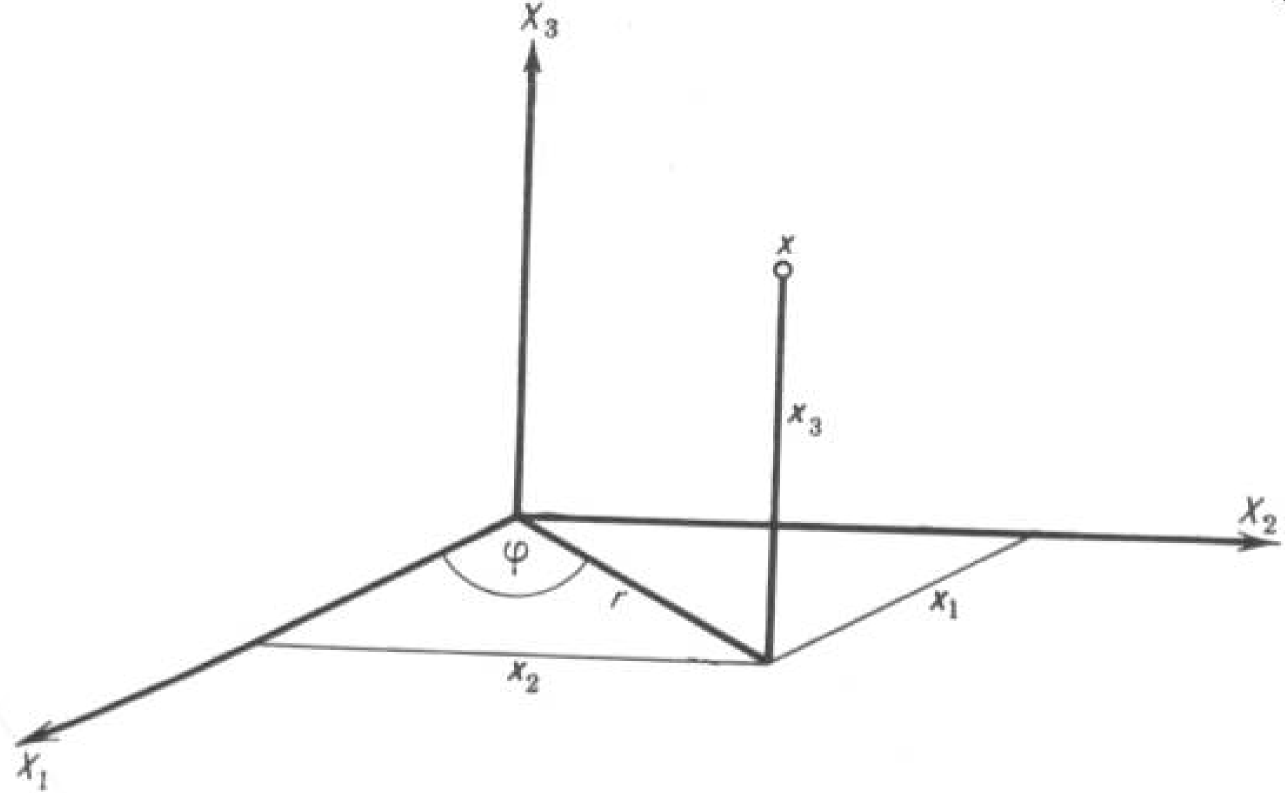
Если через особую точку проходит несколько различно ориентированных поворотных осей, то совокупность поворотов пространства вокруг них, сохраняющих эту точку, будем называть вращениями, а совокупность операций точечной симметрии второго рода — несобственными вращениями.

Операции переносов, винтовых поворотов, скользящих отражений содержат трансляционную компоненту, они смещают все точки пространства и особых точек в этом случае нет.

Аналитическая запись преобразования симметрии. Выберем в пространстве декартову систему координат X_1, X_2, X_3 — правую, т. е. такую, в которой, если смотреть с конца оси X_3, поворот от X_1 к X_2 будет поворотом против часовой стрелки (рис. 30). Преобразования симметрии $g\,[\mathbf{x}]$ трехмерного пространства описываются линейными уравнениями:

$$\mathbf{x}' = g\,[\mathbf{x}],$$

$$\begin{aligned} x_1' &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_1, \\ x_2' &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_2, \\ x_3' &= a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_3, \end{aligned} \tag{4}$$



Правая система декартовых и цилиндрических координат

которые в краткой матричной форме записываются так:

$$x_i{}' = (a_{ij})\, x_j + a_i \qquad (i,\ j = 1,\ 2,\ 3), \tag{5}$$

где

$$(a_{ij}) = \begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{Vmatrix} = D, \tag{6}$$

или в операторной форме

$$\mathbf{x}' = D\mathbf{x} + \mathbf{t}. \tag{7}$$

Матрица D описывает преобразования точечной симметрии, т. е. простые или зеркальные повороты, а $\mathbf{t}$ — трансляция, которая задается компонентами a_i.

Мы знаем, что преобразование симметрии можно рассматривать и как преобразование системы координат X_i в X'_i, причем преобразование координат точек и преобразование осей взаимно-обратны. Поэтому матрица преобразования осей (a'_{ij}) будет транспонированной относительно (6), т. е. будет матрицей (a_{ji}), а величины a_{ij} являются косинусами углов между преобразованными X'_j и начальными X_i осями. Из девяти этих величин независимы шесть, и они удовлетворяют соотношениям ортогональности:

$$\sum_{j=1,2,3} a_{ij}\, a_{kj} = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i \neq k. \end{cases} \tag{8}$$

Условие изометричности, т. е. неизменности расстояния между точками при преобразованиях симметрии, имеет вид

$$|x - y| = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2} = |x' - y'|, \tag{9}$$

оно обеспечивает и сохранение углов между преобразованными прямыми или плоскостями. Если изометрическое преобразование является точечным, т. е. не содержит переносов, то оно называется ортогональным. Из (9) следует, что детерминант матрицы D (6) всегда равен $+1$ или -1, т. е.

$$|D| = |a_{ij}| = \pm 1. \tag{10}$$

Параллельный перенос означает смещение всех точек $\mathbf{x}$ пространства в одном направлении на одинаковый вектор $\mathbf{t}$:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{t}, \qquad a_{ii} = 1, a_{ij} = 0 \text{ при } i \neq j, \text{ хотя бы одно из } a_i \neq 0. \tag{11}$$

Поворот пространства есть одинаковое угловое перемещение его точек относительно оси поворота. Если в качестве таковой выбрать ось X_3 и, глядя с ее конца на начало координат, отсчитывать углы против часовой стрелки (рис. 30), то при повороте на угол α в цилиндрических координатах r, φ, x_3

$$r' = r, \qquad x_3' = x_3, \qquad \varphi' = \varphi + \alpha \tag{12}$$

и в декартовых координатах

$$x_1' = r\cos\alpha, \qquad x_2' = r\sin\alpha, \qquad \varphi' = \varphi + \alpha, \tag{13}$$

так что матрица (6) имеет вид:

$$\begin{Vmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}. \tag{14}$$

Зеркальное отражение в плоскости m переводит каждую точку $\mathbf{x}$ в точку, лежащую по другую сторону от этой плоскости, равноотстоящую от нее и лежащую на едином к ней перпендикуляре. Если плоскостью m является плоскость X_1X_2, то

$$a_{11} = 1, \qquad a_{22} = 1, \qquad a_{33} = -1, \qquad a_{ij} = 0 \text{ при } i \neq j. \tag{15}$$

Для любого зеркального поворота вокруг X_3 матрица будет такой же, как (14), но $a_{33} = -1$. При инверсии все $a_{ii} = -1$, $a_{ij} = 0$ при $i \neq j$.

Операции первого рода — движения будем обозначать символом g^{I}, второго рода — символом g^{II}.

2.4. Связь и различие операций первого и второго рода. Матрицы операций первого рода g^{I} имеют определитель (10), равный $+1$:

$$|a_{ij}|_{g^{\mathrm{I}}} = +1. \tag{16}$$

Последовательное проведение (произведение) любого числа q таких операций $g_1^{\mathrm{I}} g_2^{\mathrm{I}} \ldots g_q^{\mathrm{I}} = g_r$ имеет определитель

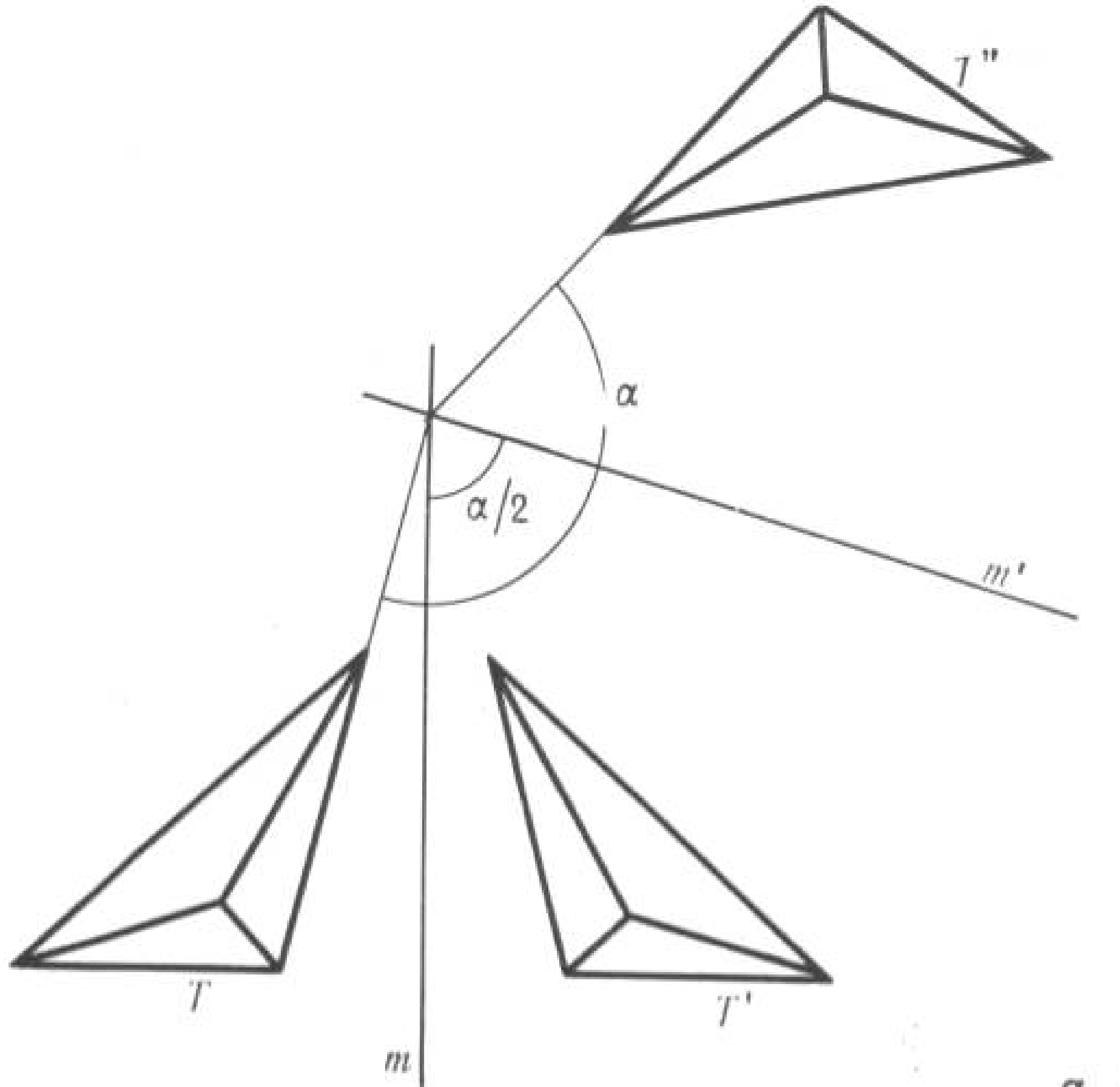
$$|a_{ij}|_{g_r} = (+1)^q = +1. \tag{17}$$

Следовательно, произведение любого числа операций первого рода всегда есть операция первого рода: $g_r = g_r^{\mathrm{I}}$, т. е. произведение движений всегда есть движение.

Для операций g^{II} второго рода определитель (10) всегда равен -1:

$$|a_{ij}|_{g^{\mathrm{II}}} = -1. \tag{18}$$

Сравнивая (17) и (18), видим, что никакая операция второго рода g^{II} не может быть получена какой-либо комбинацией движений g^{I}. Действительно, перемещая асимметричную фигуру — тетраэдр, можно совместить его лишь с конгруэнтно равным тетраэдром, но не с зеркально равным — для этого нужна операция второго рода.

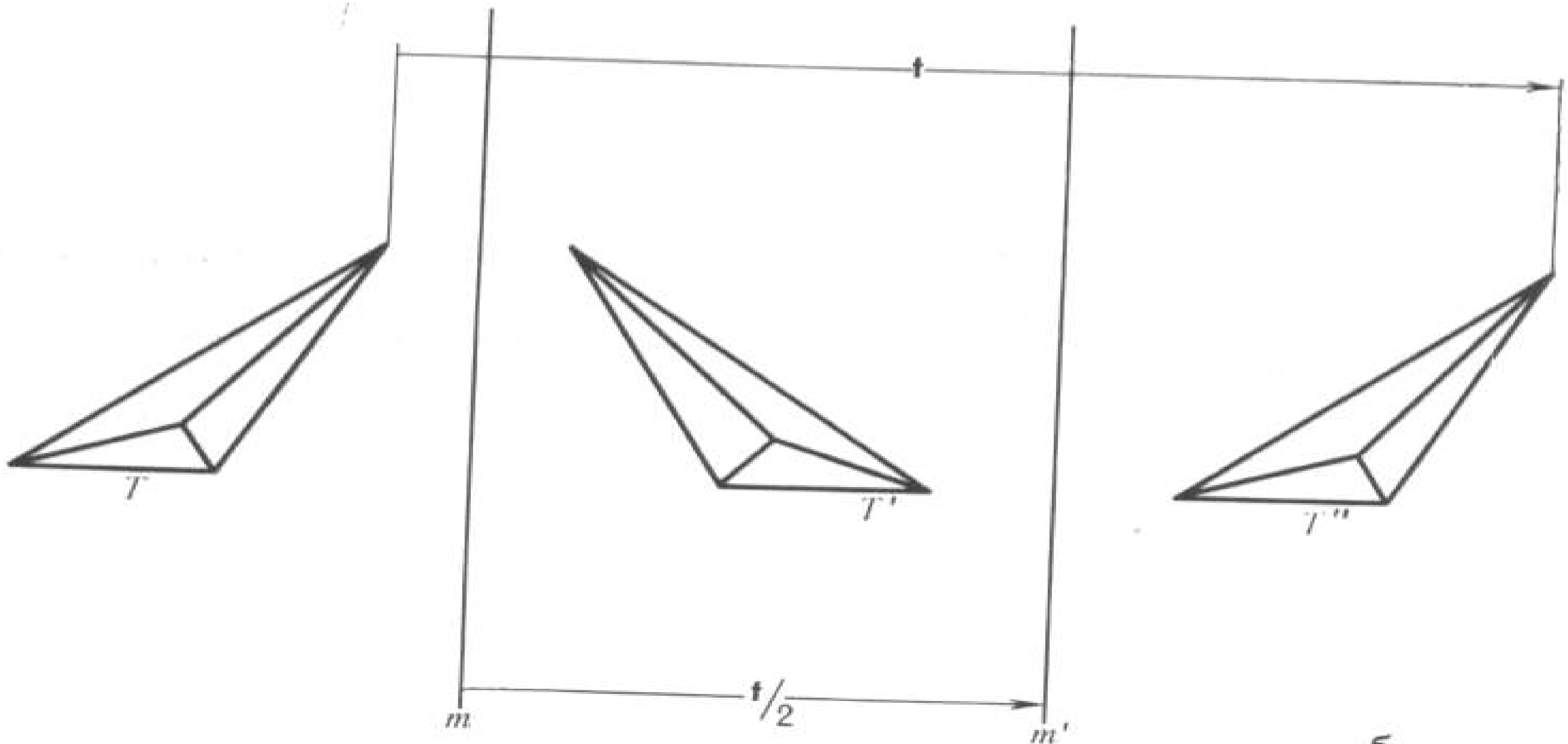


а

Операция движения как результат последовательных отражений в двух плоскостях *m* и *m'*

а — поворот (плоскости *m* и *m'* пересекаются, прямая пересечения — ось поворота);

б — трансляция (плоскости *m* и *m'* параллельны)



б

Последовательность из q операций второго рода $g_1^{\rm II}\, g_2^{\rm II} \ldots g_q^{\rm II} = g_r$ имеет определитель

$$|a_{ij}|_{g_r} = (-1)^q = \begin{cases} +1 & \text{при } q = 2n: \qquad g_r^{\text{чет}} = g^{\rm I}, \\ -1 & \text{при } q = 2n+1: g_r^{\text{нечет}} = g^{\rm II}. \end{cases} \quad \begin{matrix} (19) \\ (20) \end{matrix}$$

Следовательно, произведение четного числа операций второго рода $g^{\rm II}$ (19) есть операция первого рода $g^{\rm I}$. Нечетное же число таких операций $g^{\rm II}$ (20) является операцией второго рода $g^{\rm II}$, к движениям несобственным равнодействующих осей.)

Таким образом, как мы видели, операции первого рода можно свести к четному числу операций второго рода. Но, разумеется, они существуют и могут вводиться независимо от операций второго рода. В то же время из изложенного следует, что любую операцию симметрии можно представить как результат одного или нескольких зеркальных отражений.

Существование двух типов симметрического равенства — совместимого и зеркального — является фундаментальным свойством нашего пространства и всех физических объектов и играет важную роль в кристаллографии.

Перейдем теперь к вопросу о возможных сочетаниях операций симметрии, их взаимодействиях, т. е. к вопросу о группах операций симметрии.

Основы теории групп

Взаимодействие операций. Рассмотрим точечную симметрию кристалла кварца, идеальная форма которого изображена на рис. 10. Фигура совмещается с собой при следующих операциях симметрии:

$$g_0 = e, \qquad g_1 = 3, \qquad g_2 = 3^2, \qquad g_3 = 2_x, \qquad g_4 = 2_y, \qquad g_5 = 2_u, \qquad (21)$$

где g_1 — поворот на угол $2\pi/3$ против часовой стрелки вокруг оси, обозначенной на рис. 10 символом 3; g_2 — поворот на угол $2\cdot 2\pi/3$ против часовой стрелки вокруг оси 3 (или, что то же самое, на $2\pi/3$ по часовой стрелке); g_3, g_4, g_5 — повороты на π вокруг осей, обозначенных символами 2_x, 2_y, 2_u на рис. 10, перпендикулярных оси 3 и расположенных под углом $2\pi/3$ друг к другу.

Последовательное выполнение двух (или нескольких) операций симметрии также является операцией симметрии, поскольку по условиям (1), (2) после первой (и каждой следующей) операции фигура не изменяется. Так, в нашем примере дважды проведенная операция g_1 эквивалентна операции g_2, что записывают как $g_1 g_1 = g_1^2 = g_2$. Аналогично $g_1 g_4 = g_3$ и т. д. (Подразумевается, что при последовательном проведении операций $g_i g_j$ первой производится операция g_j.) Операции g_1 и g_2 взаимно-обратны: $g_1 = g_2^{-1}$, операции g_3, g_4, g_5 обратны сами себе: $g_3 = g_3^{-1}$.