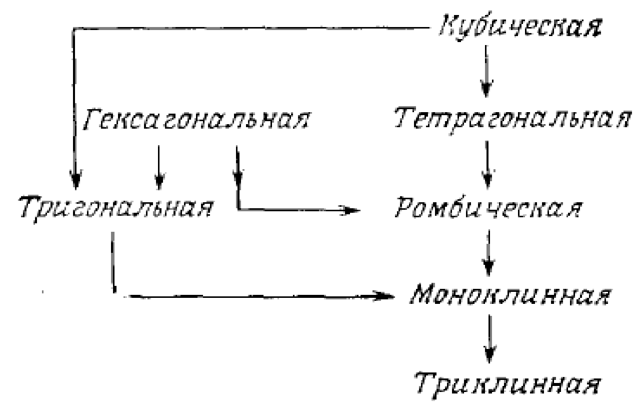
Иерархия симметрий кристаллических систем.

[1]) Понятие иерархии симметрий кристаллических систем требует некоторого разъяснения. На фиг. 7.7 каждая из кристаллических систем обладает более высокой симметрией по сравнению с теми, которых можно достигнуть, двигаясь от нее по направлению стрелок. Иначе говоря, соответствующая точечная группа решетки Бравэ не содержит операций, не имевшихся в группах, из которых ее можно достигнуть. На первый взгляд такая схема неоднозначна, поскольку четыре пары: кубическая — гексагональная, тетрагональная — гекса-



Фиг. 7.7. Иерархия симметрий для семи кристаллических систем.
Каждая точечная группа решетки Бравэ содержит в себе все другие группы, которых можно достичь, двигаясь в направлении стрелок.

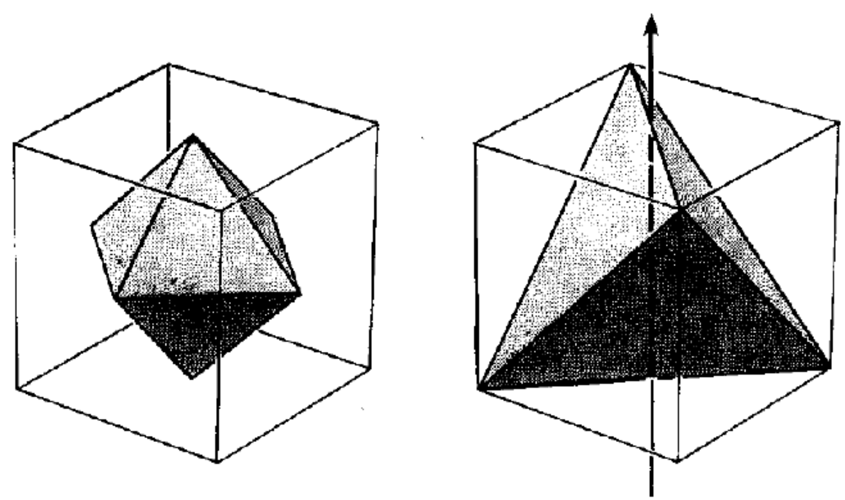
гональная, тетрагональная — тригональная и ромбическая — тригональная системы — не соединены стрелками. Поэтому, казалось бы, можно представить себе объект, все операции симметрии которого принадлежат как к тетрагональной, так и к тригональной группе, но не к группе, лежащей ниже их обеих. Про группу симметрии подобного объекта можно было бы сказать, что она принадлежит сразу тетрагональной и тригональной системам, поскольку для нее нет однозначной системы с более низкой симметрией. Оказывается, однако, что как в этом, так и в трех других неоднозначных случаях все элементы симметрии, общие двум группам из пары, принадлежат группе, находящейся ниже их обеих в иерархии. (Например, любой элемент, общий для тетрагональной и тригональной групп, принадлежит также моноклинной группе.) Поэтому всегда существует только одна-единственная группа с низшей симметрией.

Элементы симметрии куба. Кубические кристаллы относятся к высшей категории.

Всякая операция симметрии куба является операцией симметрии правильного октаэдра и наоборот.

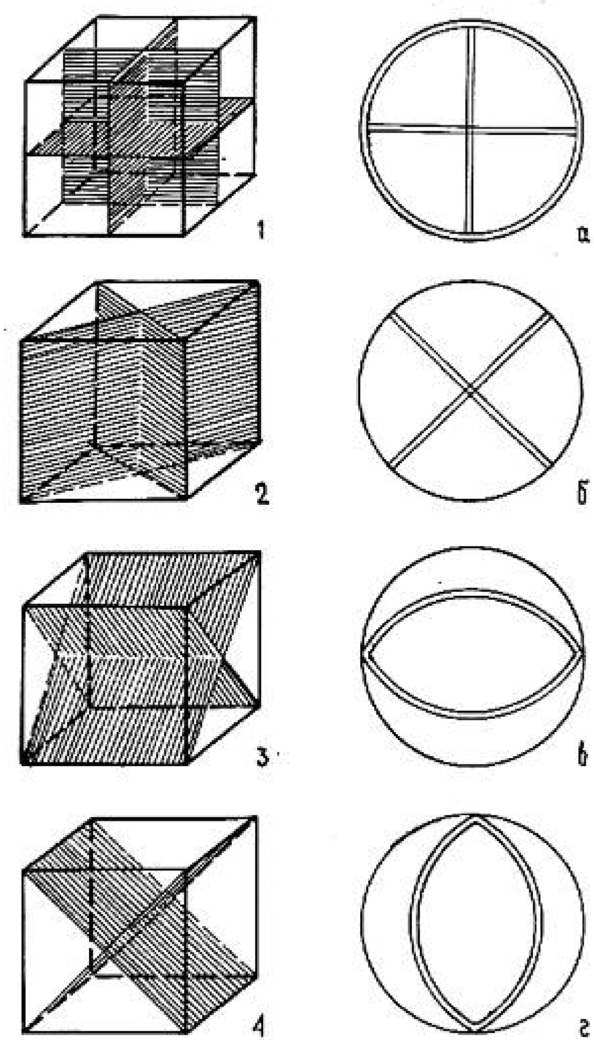
Поэтому группа симметрии куба идентична группе октаэдра (а).

Не всякая операция симметрии куба является операцией тетраэдра, так поворот на 90о вокруг вертикальной оси переводит в себя куб, но не тетраэдр(б).

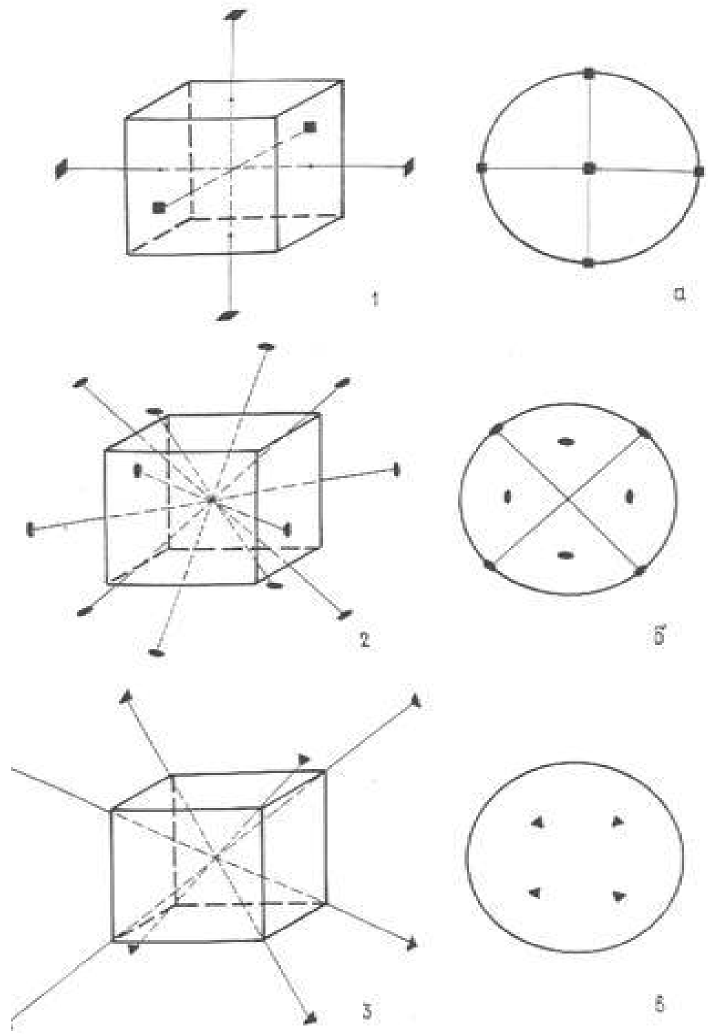


а б

Плоскости симметрии куба и их стереографические проекции



Оси симетрии куба и их стереографические проекции:
1, а – 3L4;
2, б – 6L2;
3, в – 4L3



КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ И ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ

Опишем теперь результаты аналогичного анализа, проведенного не для решеток Бравэ, а для произвольных кристаллических структур. Обратимся к структурам, которые получаются, если произвольный объект подвергнуть трансляциям, образующим решетку Бравэ, и попытаемся классифицировать группы симметрии таких структур. Они зависят как от симметрии объекта, так и от симметрии решетки Бравэ. Поскольку мы теперь не требуем, чтобы объекты имели максимальную (т. е. сферическую) симметрию, число групп симметрии значительно возрастает: существует 230 различных групп симметрии решеток с базисами — 230 *пространственных групп*. (Сравните это с четырнадцатью пространственными группами, которые возникают, когда наложено условие полной симметрии базиса.)

Таблица 7.1

Точечные и пространственные группы решеток Бравэ и кристаллических структур

	Решетка Бравэ (сферически-симметричный базис)	Кристаллическая структура (базис произвольной симметрии)
Число точечных групп	7 (7 кристаллических систем)	32 (32 кристаллографические точечные группы)
Число пространственных групп	14 (14 решеток Бравэ)	230 (230 пространственных групп)

Точечные группы, возможные для произвольной кристаллической структуры, также все перечислены. Они описывают операции симметрии, переводящие кристаллическую структуру в саму себя и оставляющие при этом неподвижной одну из ее точек, т. е. нетрансляционные элементы симметрии. Кристаллическая структура может иметь тридцать две различные точечные группы; их называют *тридцатью двумя кристаллографическими точечными группами*. (Сравните это с семью точечными группами, которые получаются при требовании полной симметрии базиса.)

Обозначения Шенфлиса для некубических кристаллографических точечных групп. Как уже говорилось, горизонтальные ряды табл. 7.3 соответствуют указанным слева обозначениям Шенфлиса. Поясним эти обозначения [1]).

C_n: группы содержат только ось n-го порядка.

C_{nv}: кроме оси n-го порядка, группы имеют зеркальную плоскость, содержащую ось вращения, плюс такое число дополнительных зеркальных плоскостей, которого требует существование оси n-го порядка.

C_{nh}: кроме оси n-го порядка, группы содержат зеркальную плоскость, перпендикулярную этой оси.

S_n: группы содержат только зеркально-поворотную ось n-го порядка.

D_n: кроме оси n-го порядка, группы содержат ось 2-го порядка, перпендикулярную оси n-го порядка, плюс такое число дополнительных осей 2-го порядка, которого требует существование оси n-го порядка.

D_{nh}: эти (наиболее симметричные) группы содержат все элементы групп D_n плюс зеркальную плоскость, перпендикулярную оси n-го порядка

D_{nd}: группы содержат все элементы групп D_n плюс зеркальные плоскости, содержащие ось n-го порядка и делящие пополам углы между осями 2-го порядка.

Рекомендуем читателю самостоятельно убедиться в том, что приведенные в табл. 7.3 объекты действительно обладают симметрией, требуемой их обозначениями Шенфлиса.

Международные обозначения для некубических кристаллографических точечных групп. Ряды в табл. 7.3 сгруппированы также в соответствии с указанными справа международными обозначениями. Три символа, используемых в международных обозначениях, совпадают по смыслу с обозначениями Шенфлиса:

n совпадает с C_n.

nmm совпадает с C_{nv}. Два символа m указывают на наличие двух различных типов зеркальных (mirror) плоскостей, содержащих ось n-го порядка. Чтобы их представить, следует обратиться к изображениям объектов, принадлежащих группам $6mm$, $4mm$ и $2mm$. Они показывают, что ось $2j$-го порядка переводит вертикальную зеркальную плоскость в j зеркальных плоскостей, но при этом автоматически возникает еще j других плоскостей, которые делят пополам углы между смежными плоскостями в первом наборе. Ось $(2j+1)$-го порядка, однако, переводит зеркальную плоскость в $2j+1$ эквивалентных плоскостей