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

230 ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП

К счастью, мы не будем долго говорить о 230 пространственных группах; отметим лишь, что их число больше, чем можно было бы ожидать. Для каждой кристаллической системы можно построить кристаллическую структуру с иной пространственной группой, помещая объект с симметрией каждой из точечных групп этой системы в каждую из решеток Бравэ системы. Таким способом, однако, удается получить лишь 61 пространственную группу, как это видно из табл. 7.4.

Таблица 7.4

Перечисление простых пространственных групп

Система	Число точечных групп	Число решеток Бравэ	Произведение
Кубическая	5	3	15
Тетрагональная	7	2	14
Ромбическая	3	4	12
Моноклинная	3	2	6
Триклинная	2	1	2
Гексагональная	7	1	7
Тригональная	5	1	5
Всего	32	14	61

Мы можем дополнительно насчитать еще пять групп, замечая, что объект с тригональной симметрией, будучи помещен в гексагональную решетку Бравэ, дает еще не учтенную нами пространственную группу [1]). Другие семь групп

[1]) Хотя тригональная точечная группа содержится в гексагональной, тригональную решетку Бравэ нельзя получить из простой гексагональной путем бесконечно малого искажения (в отличие от всех других пар систем, соединенных стрелками в иерархии симметрий на фиг. 7.7). Тригональная точечная группа содержится в гексагональной точечной группе, поскольку тригональную решетку Бравэ можно рассматривать как простую гексагональную с трехточечным базисом, образуемым точками

$$0; \quad \frac{1}{3}\mathbf{a}_1, \quad \frac{1}{3}\mathbf{a}_2, \quad \frac{1}{3}\mathbf{c} \quad \text{и} \quad \frac{2}{3}\mathbf{a}_1, \quad \frac{2}{3}\mathbf{a}_2, \quad \frac{2}{3}\mathbf{c}.$$

Тридцать две точечные группы.				
Система	Международное обозначение		Обозначение Шенфлиса	Формула симметрии
	краткое	полное		
Триклинная	1	1	C_1	L_1
	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$C_1(S_2)$	C
Моноклинная	2	2	C_2	L^2
	m	m	$C_s(C_{1h})$	P
	2/m	$\frac{2}{m}$	C_{2h}	L^2PC
Ромбическая	222	222	$D_2(V)$	$3L^2$
	mm2	mm2	C_{2v}	L^22P
	mmm	$\frac{2}{m}\ \frac{2}{m}\ \frac{2}{m}$	$D_{2h}(V_h)$	$3L^23PC$

Тетрагональная	4	4	C_4	L^4
	$\bar{4}$	$\bar{4}$	S_4	L^2_4
	$4/m$	$\frac{4}{m}$	C_{4h}	L^4PC
	422	422	D_4	L^44P
	4mm	4mm	C_{4v}	L^44P
	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	$D_{2d}(V_d)$	$L^2_4LL^22P$
	$4/mmm$	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	D_{4h}	L^44L^25PC

Тригональная	3	3	C_3	L^3
	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$C_{3i}(S_6)$	L^3_6C
	32	32	D_3	L^33L^2
	3m	3m	C_{3v}	L^33P
	$\bar{3}$m	$\bar{3}\dfrac{2}{m}$	D_{3d}	$L^3_6L^23PC$

Гексагональная	6	6	C_6	L^6
	$\bar{6}$	$\bar{6}$	C_{3h}	L^3P
	6/m	$\frac{6}{m}$	C_{6h}	L_6PC
	622	622	D_6	$L^6 6L^2$
	6mm	6mm	C_{6v}	$L^6 6P$
	$\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$	D_{3h}	$L^3 3L^2 4P$
	6/mmm	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	D_{6h}	$L^6 6L^2 7PC$

Кубическая	23	23	T	$3L^2 4L^3$
	m3	$\frac{2}{m}\bar{3}$	T_h	$3L^2 4L^3_6 3PC$
	432	432	O	$3L^2_4 4L^3 6P$
	$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	T_d	$3L^4 4L^3 6L^2$
	m3m	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	O_h	$3L^4 4L^3_6 6L^2 9PC$