МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ РСФСР

Ленинградский ордена Ленина
и ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет имени А. А. Жданова

МЕТОДИЧЕСКАЯ РАЗРАБОТКА ПО КУРСУ "ВВЕДЕНИЕ В МАТРИЧНУЮ КРИСТАЛЛОГРАФИЮ"

Часть I

Ленинград 1983

Утверждено на заседании кафедры
кристаллографии геологического факультета

Составитель С.К.Филатов

© Ленинградский
университет, 1983

Подписано в печать 07.01.83. Формат 60x84/16. Печ. л. 3,75.
Тираж 300 экз. Заказ № 79 . Бесплатно.
РИО ЛГУ. 199164, Ленинград, Университетская наб., 7/9.
ФОЛ ЛГУ. 199164, Ленинград, наб. Макарова, 6.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в учебную кристаллографическую литературу внедряется матричное представление симметрии кристаллов, которое оказывается плодотворным при выводе групп симметрии, доказательстве теорем о сложении элементов симметрии, при преобразованиях систем координат, кристаллографических индексов, координат атомов и т.п. В методическом плане матричное представление способствует пониманию студентами элементов и преобразований симметрии, групп преобразований как алгебраических структур, дает разнообразные упражнения для активизации у студентов знаний по алгебре матриц и теории групп.

Разделы по матричной кристаллографии различной полноты и сложности содержатся в монографиях Ю.Г.Загальской и Г.П.Литвинской [6], М.П.Шаскольской [11], П.М.Зоркого и Н.Н.Афониной [7], Б.К.Вайнштейна [2], Р.В.Галиулина [5], International tables [13] и др.

Для более широкого знакомства с предметом кристаллографии можно рекомендовать кроме упомянутых современных монографий также традиционные учебные пособия Г.Б.Попова и И.И.Шафрановского [10], В.В.Нардова [8] и ставшие библиографической редкостью "Начала кристаллографии" О.М.Аншелеса [1].

Методическая разработка подготовлена на кафедре кристаллографии Ленинградского университета для студентов-кристаллографов геологического факультета. Ее назначение - помочь студентам, не имеющим специального математического образования, овладеть основами матричной алгебры и умению применить их в кристаллографии.

В конце некоторых разделов Методической разработки помещены задания, выполнение которых поможет студентам приобрести навыки использования математического аппарата.

I. СВЕДЕНИЯ ИЗ МАТРИЧНОЙ АЛГЕБРЫ

I.I. Матрицы

М а т р и ц е й A строения $m \times n$ называют совокупность $m \cdot n$ чисел, расположенных в виде прямоугольной таблицы из m строк и n столбцов:

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \dots & \alpha_{mn} \end{pmatrix} = (\alpha_{ij}). \qquad (I.I)$$

Числа, составляющие матрицу, называют э л е м е н т а м и м а т р и ц ы. Вообще, элементами матрицы могут быть объекты различной природы: числа, векторы, матрицы, различные преобразования и др. Первый индекс элемента i указывает номер строки, второй j - номер столбца, на пересечении которых расположен данный элемент.

Две матрицы $A = (\alpha_{ij})$ и $B = (\beta_{ij})$ одинакового строения равны друг другу $A = B$ в том и только том случае, если $\alpha_{ij} = \beta_{ij}$ для всех i и j. А если

$$A = \begin{pmatrix} I & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} I & 2 & 0 \\ 3 & 4 & 0 \end{pmatrix}, \text{ то } A \neq B \ [I4-I9].$$

I.2. Сложение матриц

Сумма двух матриц $A = (\alpha_{ij})$ и $B = (\beta_{ij})$ строения $m \times n$ есть матрица $C = (\gamma_{ij})$ строения $m \times n$ из элементов $\gamma_{ij} = \alpha_{ij} + \beta_{ij}$:

$$A + B = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \dots & \alpha_{mn} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{m1} & \beta_{m2} & \dots & \beta_{mn} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha_{11}+\beta_{11} & \alpha_{12}+\beta_{12} & \dots & \alpha_{1n}+\beta_{1n} \\ \alpha_{21}+\beta_{21} & \alpha_{22}+\beta_{22} & \dots & \alpha_{2n}+\beta_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m1}+\beta_{m1} & \alpha_{m2}+\beta_{m2} & \dots & \alpha_{mn}+\beta_{mn} \end{pmatrix} = C. \qquad (I.2)$$

Для матриц разного строения сумма не определена.

Из определения видно, что сложение матриц сводится к сложению их элементов (чисел). По этой причине и в силу ассоциативности и коммутативности сложения чисел сложение матриц ассоциативно $(A + B) + C = A + (B + C)$ и коммутативно $A + B = B + A$ для любых матриц A, B, и C одинакового строения.

Примеры. I. $\begin{pmatrix} I & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I+5 & 2+6 \\ 3+7 & 4+8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 8 \\ I0 & I2 \end{pmatrix}$.

2. $\begin{pmatrix} I & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 5 & 6 & 7 \\ 8 & 9 & I0 \end{pmatrix}$ - сумма не определена,

так как складываются матрицы разного строения.

I.3. Умножение матрицы на число

Произведение матрицы $A = (\alpha_{ij})$ строения $m \times n$ на число λ есть матрица $C = (\gamma_{ij})$ строения $m \times n$ из элементов $\gamma_{ij} = \lambda \alpha_{ij}$:

$$\lambda A = \begin{pmatrix} \lambda\alpha_{11} & \lambda\alpha_{12} & \dots & \lambda\alpha_{1n} \\ \lambda\alpha_{21} & \lambda\alpha_{22} & \dots & \lambda\alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda\alpha_{m1} & \lambda\alpha_{m2} & \dots & \lambda\alpha_{mn} \end{pmatrix} = C. \qquad (I.3)$$

То есть умножение матрицы на число состоит в умножении на это число каждого элемента матрицы. В силу ассоциативности и коммутативности умножения чисел и дистрибутивности умножения чисел относительно сложения - умножение матриц на число ассоциативно:[I)] $(\lambda\gamma)A = \lambda(\gamma A)$, $A(\lambda\gamma) = (A\lambda)\gamma$, коммутативно: $\lambda A = A\lambda$, дистрибутивно относительно сложения: $(\lambda + \gamma)A = \lambda A + \gamma A$, $\lambda(A + B) = \lambda A + \lambda B$ для любых чисел λ, γ и любых матриц A и B одинакового строения [I6-I8].

Пример. $5\begin{pmatrix} I & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5\cdot I & 5\cdot 2 \\ 5\cdot 3 & 5\cdot 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & I0 \\ I5 & 20 \end{pmatrix}$.

I.4. Умножение матриц

Произведение матрицы $A = (\alpha_{ij})$ строения $m \times n$ на матрицу $B = (\beta_{jk})$ строения $n \times r$ есть матрица $C = (c_{ik})$ строения $m \times r$ из элементов $c_{ik} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ij} \cdot \beta_{jk}$:

$$AB = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \dots & \alpha_{mn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1r} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2r} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \dots & \beta_{nr} \end{pmatrix} =$$

I) Для элементов разной природы (например числа и матрицы) используется также термин квазиассоциативность, квазикоммутативность и т.п.

$$= \begin{pmatrix} \alpha_{11}\cdot\beta_{11} + \alpha_{12}\cdot\beta_{21} + \dots + \alpha_{1n}\cdot\beta_{n1} & \dots & \alpha_{11}\cdot\beta_{1r} + \alpha_{12}\cdot\beta_{2r} + \dots + \alpha_{1n}\cdot\beta_{nr} \\ \alpha_{21}\cdot\beta_{11} + \alpha_{22}\cdot\beta_{21} + \dots + \alpha_{2n}\cdot\beta_{n1} & \dots & \alpha_{21}\cdot\beta_{1r} + \alpha_{22}\cdot\beta_{2r} + \dots + \alpha_{2n}\cdot\beta_{nr} \\ \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m1}\cdot\beta_{11} + \alpha_{m2}\cdot\beta_{21} + \dots + \alpha_{mn}\cdot\beta_{n1} & \dots & \alpha_{m1}\cdot\beta_{1r} + \alpha_{m2}\cdot\beta_{2r} + \dots + \alpha_{mn}\beta_{nr} \end{pmatrix} = C. \qquad (I.4)$$

Таким образом, элемент c_{ik} матрицы $C = AB$ есть сумма произведений элементов i-й строки матрицы A на соответствующие элементы k-го столбца матрицы B. Строение перемножаемых матриц согласовано: количество столбцов матрицы A равно количеству строк матрицы B.

Умножение матриц ассоциативно: $A(BC) = (AB)C$; дистрибутивно относительно сложения: $A(B + C) = AB + AC$, $(B + C)A = BA + CA$; ассоциативно также умножение матриц на числа $\lambda(AB) = (\lambda A)B$, $(A\lambda)B = A(\lambda B)$, $(AB)\lambda = A(B\lambda)$; не коммутативно (в общем случае) $AB \neq BA$ для любого числа λ и любых матриц A, B, C согласованного строения [I6-I8].

Примеры. I. $\begin{pmatrix} I & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I\cdot 5 + 2\cdot 7 & I\cdot 6 + 2\cdot 8 \\ 3\cdot 5 + 4\cdot 7 & 3\cdot 6 + 4\cdot 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I9 & 22 \\ 43 & 50 \end{pmatrix}$.

2. $\begin{pmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 23 & 34 \\ 3I & 46 \end{pmatrix}$.

Примеры I и 2 иллюстрируют некоммутативность умножения матриц.

3. $\begin{pmatrix} I & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & I2 & I5 \\ I9 & 26 & 33 \end{pmatrix}$.

4. $\begin{pmatrix} I & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix}$ - произведение не определено, поскольку количество столбцов первой матрицы не равно количеству строк второй матрицы.

5. $\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I\cdot 3 + 0\cdot 0 & I\cdot 0 + 0\cdot 2 \\ 0\cdot 3 + 3\cdot 0 & 0\cdot 0 + 3\cdot 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 6 \end{pmatrix}$.

Из примера пять очевидно, что при умножении диагональных матриц (см. п. I.6) достаточно умножить диагональные элементы α_{ii} для равных значений i.

Задание. Решить задачи 464, 465, 468, 506 из [22] и 788-799 из [21].

I.5. Транспонирование матриц

Транспонированная матрица A^T получается из исходной матрицы A заменой в ней строк столбцами с теми же номерами (или столбцов - строками) так, что $A^T = (\alpha_{ij})^T = (\alpha_{ji})$

$$A^T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \dots & \alpha_{mn} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \dots & \alpha_{m1} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{m2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{1n} & \alpha_{2n} & \dots & \alpha_{mn} \end{pmatrix}. \qquad (I.5)$$

Дважды транспонированная матрица равна исходной матрице

$$(A^T)^T = A$$

поскольку для каждого ее элемента $((\alpha_{ij})^T)^T = (\alpha_{ji})^T = \alpha_{ij}$.

Для суммы матриц

$$(A + B)^T = A^T + B^T.$$

Если определено произведение матриц AB, то определено и произведение B^TA^T и

$$(AB)^T = B^TA^T.$$

Это утверждение справедливо для любого числа сомножителей. Пусть, в частности, определено произведение трех матриц ABC. Тогда согласно утверждению и в силу ассоциативности умножения матриц

$$(ABC)^T = (A(BC))^T = (BC)^T \cdot A^T = C^T \cdot B^T \cdot A^T.$$

I.6. Квадратные матрицы

Матрицу строения $n \times n$ называют квадратной матрицей порядка n

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}. \qquad (I.6)$$

Квадратная матрица первого порядка есть число. Элементы квадратной матрицы с равными индексами $i = j$ располагаются на ее главной диагонали. Квадратную матрицу называют диагональной, если из $i \neq j$ следует $\alpha_{ij} = 0$, т.е. все элементы вне главной диагонали равны нулю

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_{22} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha_{nn} \end{pmatrix}. \qquad (I.7)$$

Если $\alpha_{ii} = 1$ при $i = 1, \dots, n$ в (I.7), то такая матрица называется единичной

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 \dots & 1 \end{pmatrix}. \qquad (I.8)$$

Для любой матрицы B, имеющей n строк, EB = B; для любой матрицы C, имеющей n столбцов, CE = C; для любой квадратной матрицы A порядка n AE = EA = A. Единичная матрица первого порядка есть число 1.

Квадратную матрицу называют треугольной, если из $i > j$ следует $\alpha_{ij} = 0$:

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1n} \\ 0 & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots 0 & \alpha_{nn} \end{pmatrix} \qquad (I.9)$$

и с т р о г о т р е у г о л ь н о й, если из $i \geqslant j$ следует $\alpha_{ij} = 0$:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1n} \\ 0 & 0 & \alpha_{23} \cdots & \alpha_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{n-1n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}. \qquad (I.10)$$

Матрицу, удовлетворяющую условию $A = A^T$, т.е. $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$, называют с и м м е т р и ч е с к о й.

I.7. Матричная запись системы линейных уравнений

Пусть имеется система m уравнений первого порядка с n неизвестными

$$\left.\begin{aligned} \alpha_{11}X_1 + \alpha_{12}X_2 + \ldots + \alpha_{1n}X_n &= \gamma_1, \\ \alpha_{21}X_1 + \alpha_{22}X_2 + \ldots + \alpha_{2n}X_n &= \gamma_2, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \alpha_{m1}X_1 + \alpha_{m2}X_2 + \ldots + \alpha_{mn}X_n &= \gamma_m. \end{aligned}\right\} \qquad (I.11)$$

Вся информация о системе заключена в величине коэффициентов, их месте в уравнении и в свободных членах. Ее можно записать в виде матрицы

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \ldots & \alpha_{1n} & \gamma_1 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \ldots & \alpha_{2n} & \gamma_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \ldots & \alpha_{mn} & \gamma_m \end{array}\right) = (A|\Gamma). \qquad (I.11a)$$

Матрица A называется матрицей системы, Г - столбец свободных членов, $(A|\Gamma)$ - расширенная матрица системы. Каждая строка матрицы (I.11а) содержит коэффициенты и свободный член одного уравнения, а каждый столбец - коэффициенты при одном неизвестном. Систему (I.11) можно записать также в виде одного векторного уравнения

$$AX = \Gamma \qquad (I.11б)$$

в котором X - столбец неизвестных параметров $\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix}$.

I.8. Элементарные преобразования матриц

Э л е м е н т а р н ы м и п р е о б р а з о в а н и я м и м а т р и ц ы называются преобразования следующих трех типов [17].

1. Умножение строки I на произвольное число $\lambda \neq 0$. Запишем схематически это преобразование

$$\begin{pmatrix} \cdots \\ I \\ \cdots \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \cdots \\ \lambda I \\ \cdots \end{pmatrix}, \quad \lambda \neq 0.$$

2. Прибавление к одной строке I другой J, умноженной на $\forall\lambda$,

$$\begin{pmatrix} \cdots \\ I \\ \cdots \\ J \\ \cdots \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \cdots \\ I + \lambda J \\ \cdots \\ J \\ \cdots \end{pmatrix}.$$

3. Перестановка местами строк матрицы

$$\begin{pmatrix} \cdots \\ I \\ \cdots \\ J \\ \cdots \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \cdots \\ J \\ \cdots \\ I \\ \cdots \end{pmatrix}.$$

Аналогично определяются элементарные преобразования матрицы относительно ее столбцов.

I.9. Схема Гауса решения системы линейных уравнений

Решением системы линейных уравнений (I.II) является набор таких чисел $K_1, K_2, \ldots, K_n$, при подстановке которых вместо неизвестных величин $X_1, X_2, \ldots, X_n$, уравнения обращаются в равенства.

Если система уравнений не имеет ни одного решения, то она называется несовместной; если система имеет решения, она называется совместной; если решение единственное - система определенная; если решений больше одного (т.е. множество) - система неопределенная.

Системы уравнений (и их матрицы) называют эквивалентными или равносильными, если множества их решений совпадают. Вообще безразлично, решать данную систему или ей равносильную.

Можно показать, что две матрицы эквивалентны, если каждая из них может быть получена из другой цепочкой элементарных преобразований строк (но не столбцов). Это дает возможность приводить данную матрицу к виду, удобному для решения системы. Если же в матрице $(A|\Gamma)$ переставить местами столбцы коэффициенты при одном из неизвестных - то поменяются местами неизвестные. Эквивалентность системы сохраняется с точностью до перестановки переменных. Но место столбца Γ свободных членов менять нельзя.

Схема Гауса решения системы линейных уравнений заключается в последовательном исключении неизвестных из отдельных уравнений системы. Достигается это элементарными преобразованиями матрицы системы.

Покажем, что всякую матрицу элементарными преобразованиями можно привести к трапецеидальному виду [I7]:

$$\left(\begin{array}{cccccc|c}
\alpha_{11} & \alpha_{12} & \ldots & \ldots & \ldots & \alpha_{1n} & \gamma_1 \\
0 & \alpha_{22} & \ldots & \ldots & \ldots & \alpha_{2n} & \gamma_2 \\
0 & 0 & \alpha_{33} & \ldots & \ldots & \alpha_{3n} & \gamma_3 \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\
0 & 0 & 0 & \ldots & \alpha_{rr} \ldots & \alpha_{rn} & \gamma_r \\
0 & 0 & 0 & & 0 \ldots & 0 & \gamma_{r+1} \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots
\end{array}\right). \qquad (I.I2)$$

Действительно, вычитая из 2-й, 3-й, ..., m-й строк произвольной матрицы (I.IIa) первую строку с коэффициентом $\frac{\alpha_{i1}}{\alpha_{11}}$, получим новую матрицу B с нулями на месте элементов с индексами $i1$, $i=2,3,\ldots$ Аналогичными преобразованиями получаем нули на месте элементов с индексами $i2$, $i=3,4\ldots$ и т.д. В результате получится матрица вида (I.I2), элементы которой $\alpha_{ij}=0$, если $i>j$ или $i>r$.

Частным случаем трапецеидальной матрицы является треугольная матрица:

$$\left(\begin{array}{cccccc|c}
\alpha_{11} & \alpha_{12} & \ldots & \ldots & \ldots & \alpha_{1n} & \gamma_1 \\
0 & \alpha_{22} & \ldots & \ldots & \ldots & \alpha_{2n} & \gamma_2 \\
0 & 0 & \alpha_{33} & \ldots & \ldots & \alpha_{3n} & \gamma_3 \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\
0 & 0 & 0 & \ldots & \alpha_{n-1,n-1} & \alpha_{n-1,n} & \gamma_{n-1} \\
0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & \alpha_{nn} & \gamma_n
\end{array}\right). \qquad (I.I3)$$

Она приводит к следующей системе уравнений:

$$\left.\begin{array}{l}
\alpha_{11}X_1 + \alpha_{12}X_2 + \ldots + \alpha_{1n}X_n = \beta_1, \\
\alpha_{22}X_2 + \quad + \alpha_{2n}X_n = \beta_2, \\
\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\alpha_{nn}X_n = \beta_n,
\end{array}\right\} \qquad (I.I3a)$$

n-е уравнение системы (I.I3a) позволяет определить значение неизвестного параметра X_n. Подставляя это значение в $n-1$-е

уравнение, определяем X_{n-1} и т.д. Система имеет единственное решение.

В общем случае, когда элементарные преобразования исходной матрицы приводят к трапецеидальной матрице (I.I2), возможны следующие варианты решения.

I. Свободный член $\gamma_{r+1} \neq 0$. Тогда $r+1$-е уравнение системы имеет вид $0 = \gamma_{r+1} \neq 0$, т.е. система не совместна.

2. $\gamma_{r+1} = 0$. Тогда $r+1$-е и все последующие уравнения имеют вид: $0=0$ при любых значениях неизвестных $X_{r+1}, X_{r+2}, \ldots, X_n$. Придаем этим неизвестным произвольные значения $K_{r+1}, K_{r+2}, \ldots, K_n$. Подставляя эти значения в r-е уравнение, определяем K_r и т.д. Система совместная и неопределенная (имеет множество решений).

3. При $r=m=n$ получаем рассмотренный выше случай матрицы треугольного вида. Система совместна и определена (имеет единственное решение).

Схема Гауса проста и широко применяется в вычислительной практике. Другой метод решения системы линейных уравнений - метод Крамера - основан на использовании определителей матриц.

Задание. Решить задачи 398-420 из [22].

I.I0. Определитель матрицы

Рассмотрим систему двух уравнений с двумя неизвестными

$$\left.\begin{aligned} \alpha_{11} x_1 + \alpha_{12} x_2 &= \gamma_1 \\ \alpha_{21} x_1 + \alpha_{22} x_2 &= \gamma_2 \end{aligned}\right\}, \qquad (I.I4)$$

ей соответствует матрица второго порядка

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix}. \qquad (I.I4a)$$

Решим систему (I.I4). Для этого приравняем коэффициенты при x_2 (умножим обе части первого уравнения на α_{22}, второго - на α_{12}), вычтем из первого преобразованного уравнения второе и найдем x_1:

$$x_1 = \frac{\gamma_1 \alpha_{22} - \gamma_2 \alpha_{12}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}}. \qquad (I.I5)$$

Аналогично найдем x_2:

$$x_2 = \frac{\alpha_{11}\gamma_2 - \alpha_{21}\gamma_1}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}}. \qquad (I.I6)$$

Выражения (I.I5) и (I.I6) можно условно записать в виде таблиц. В частности для знаменателя:

$$\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21} = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{vmatrix} = \Delta \qquad (I.I7)$$

таблица совпадает с матрицей (I.I4а) системы. Выражение (I.I7) дает правило расчета числа по такой таблице: из произведения элементов, стоящих на главной диагонали, вычитается произведение элементов второй диагонали.

Правая часть (I.I7) - таблица вместе с указанным правилом вычисления по ней числа называется о п р е д е л и т е л е м с и с т е м ы (I.I4), в данном случае - определителем второго порядка. Определитель матрицы заключается в прямые скобки и обозначают символом Δ, $|A|$ или $\det A$.

Определитель $$\gamma_1\alpha_{22} - \gamma_2\alpha_{12} = \begin{vmatrix} \gamma_1 & \alpha_{12} \\ \gamma_2 & \alpha_{22} \end{vmatrix} = \Delta_1 \qquad (I.I8)$$

получается из определителя системы заменой в нем первого столбца столбцом свободных членов, а определитель

$$\alpha_{11}\gamma_2 - \alpha_{21}\gamma_1 = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \gamma_1 \\ \alpha_{21} & \gamma_2 \end{vmatrix} = \Delta_2 \qquad (I.I9)$$

- аналогичной заменой второго столбца.

Согласно (I.I5)-(I.I9)

$$x_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad x_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta}. \qquad (I.2C)$$

В случае трех уравнений с тремя неизвестными

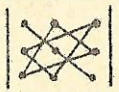
$$\left.\begin{aligned} \alpha_{11} x_1 + \alpha_{12} x_2 + \alpha_{13} x_3 &= \gamma_1, \\ \alpha_{21} x_1 + \alpha_{22} x_2 + \alpha_{23} x_3 &= \gamma_2, \\ \alpha_{31} x_1 + \alpha_{32} x_2 + \alpha_{33} x_3 &= \gamma_3. \end{aligned}\right\} \qquad (I.2I)$$

Решая эту систему, можно показать, что определитель системы равен

$$\Delta = \alpha_{11}\alpha_{22}\alpha_{33} + \alpha_{12}\alpha_{23}\alpha_{31} + \alpha_{13}\alpha_{21}\alpha_{32} - \\ - \alpha_{13}\alpha_{22}\alpha_{31} - \alpha_{11}\alpha_{23}\alpha_{32} - \alpha_{12}\alpha_{21}\alpha_{33}.$$

Записав его в виде таблицы

$$\Delta = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{vmatrix}, \qquad (I.22)$$

можно ввести следующее правило вычисления: определитель равен сумме произведений всех таких троек элементов таблицы, в которых представлены по одному элементу из каждой строки и каждого столбца, причем произведение входит в сумму со знаком плюс, если три или два его элемента лежат на прямой, параллельной главной диагонали таблицы:  , и со знаком минус, если они лежат на прямой, параллельной второй диагонали:  . Таблица (I.22) вместе с приведенным правилом вычисления по ней числа называется определителем третьего порядка.

Используя закономерности построения определителей второго и третьего порядков, можно вычислить определитель n-го порядка

$$\Delta = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} \end{vmatrix}. \qquad (I.23)$$

Его определяют как число, равное алгебраической сумме всевозможных произведений из n^2 элементов таблицы (I.23), в которых представлены по одному элементу из каждой строки и каждого столбца, причем произведение входит в сумму со знаком плюс, если его индексы составляют четную подстановку, и со знаком минус - в противном случае (теория подстановок описана, например, в учебнике [I8]; здесь в последующем изложении она не используется).

Практически определители выше третьего порядка вычисляют, используя понятие алгебраического дополнения.

М и н о р о м элемента α_{ij} называется определитель, который получается вычеркиванием из данного определителя i-й строки и j-го столбца. А л г е б р а и ч е с к и м д о п о л н е н и е м элемента α_{ij} называется его минор, взятый со знаком плюс, если сумма $i+j$ - четна, и со знаком минус, если эта сумма нечетна.

Определитель равен сумме произведений всех элементов произвольной его строки (столбца) на их алгебраические дополнения. Определитель четвертого порядка можно разложить, например, по элементам первой строки:

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & \alpha_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{vmatrix} = \alpha_{11} \begin{vmatrix} \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} \\ \alpha_{32} & \alpha_{33} & \alpha_{34} \\ \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{vmatrix} -$$

$$- \alpha_{12} \begin{vmatrix} \alpha_{21} & \alpha_{23} & \alpha_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{33} & \alpha_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{vmatrix} + \alpha_{13} \begin{vmatrix} \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{44} \end{vmatrix} - \alpha_{14} \begin{vmatrix} \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} \end{vmatrix}.$$

Понижая таким образом порядок определителя, можно найти его значение. Предварительно полезно так преобразовать определитель, чтобы какая-либо строка (или столбец) содержала возможно большее количество нулевых элементов, и разлагать определитель по этой строке (столбцу).

Приведем простейшие свойства определителей.

I. Определитель не меняется при транспонировании. То есть в отличие от матриц в определителе строки и столбцы равноправны. Поэтому всякое утверждение о строках определителя справедливо для столбцов и обратно.

2. Определитель, содержащий: а) строку из нулей или б) две одинаковые строки, или в) две пропорциональные строки, или г) строку, являющуюся линейной комбинацией двух (или большего числа) его других строк, равен нулю.

3. От перестановки двух строк определитель лишь меняет знак.

4. Если все элементы некоторой строки определителя умножить на некоторое число K, то сам определитель умножится на K.

5. Если все элементы i-й строки определителя n-го порядка представлены в виде суммы двух слагаемых: $a_{ij} = b_j + c_j$, $j = 1, \ldots, n$, то определитель равен сумме двух определителей, у которых все строки, кроме i-й, такие же, как и в заданном определителе, а i-я строка в одном из слагаемых состоит из элементов b_j, в другом - из элементов c_j.

6. Определитель не меняется, если к элементам одной из его строк прибавляются соответственные элементы другой строки, умноженные на одно и то же число.

Задание. Решить задачи I-II, 43-53 из [2I] и I65-I7I из [22].

I.II. Метод Крамера решения системы линейных уравнений

Метод применим к решению широко распространенного типа систем, количество уравнений в которых равно количеству неизвестных величин. Матрица А такой системы является квадратной и имеет строение $n \times n$.

Пусть дана система линейных уравнений $AX = Г$. Если матрица системы А - квадратная матрица порядка n является неособенной, т.е. ее определитель отличен от нуля $|A| \neq 0$, то система совместна, имеет единственное решение и это решение задается формулами:

$$x_j = \frac{\Delta_j}{\Delta}, \quad j = 1, 2, \ldots, n,$$

где $\Delta = |A|$ - определитель матрицы системы (определитель системы), Δ_j - определитель, полученный из определителя системы заменой j-го столбца столбцом свободных членов.

С позиций вычислительных затрат при решении системы линейных уравнений с n неизвестными метод Крамера требует осуществления примерно $n!$ операций "+" и "x", а метод Гаусса- n^3. То есть для малых n больше подходит метод Крамера, а для больших - метод Гауса.

Задание. Решить задачи 554-563 из [2I] и 335-358 из [22].

I.I2. Обратные матрицы

Матрицу A^{-I} называют правой обратной матрице А, если $A A^{-I} = E$, левой обратной, если $A^{-I} A = E$, обратной матрицей, если $A A^{-I} = A^{-I} A = E$.

Прямоугольная матрица может иметь множество правых и левых обратных матриц, например:

$$(I\ 2\ 3)\begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ I \end{pmatrix} = I, \quad (I\ 2\ 3)\begin{pmatrix} -3 \\ I/2 \\ -I \end{pmatrix} = I \text{ и т.п.}$$

Квадратная матрица называется неособенной (невырожденной), если ее определитель отличен от нуля, и особенной (вырожденной), если ее определитель равен нулю.

Для особенной матрицы обратная матрица не существует.

Любой квадратной неособенной матрице соответствует единственная обратная матрица. Причем, если А - квадратная матрица порядка n (I.6), то

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{A_{11}}{|A|} & \frac{A_{12}}{|A|} & \ldots & \frac{A_{1n}}{|A|} \\ \frac{A_{21}}{|A|} & \frac{A_{22}}{|A|} & \ldots & \frac{A_{2n}}{|A|} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{A_{n1}}{|A|} & \frac{A_{n2}}{|A|} & & \frac{A_{nn}}{|A|} \end{pmatrix}^T, \qquad (I.24)$$

где $|A|$ - определитель матрицы A, а A_{ij} - алгебраическое дополнение элемента a_{ij} матрицы A.

Нередко при вычислении обратной матрицы бывает проще воспользоваться следующим практическим приемом:

$$(A|E) \xrightarrow{\text{элементарные преобразования}} (E|A^{-1}) \qquad (I.25)$$

Условие (I.25) означает, что если исходная матрица A приводится элементарными преобразованиями к единичной матрице, то теми же преобразованиями единичная матрица приводится к обратной матрице A^{-1}.

Для произведения матриц: $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$.

Пример. Найдем матрицу, обратную данной матрице

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

$|A| = -2 \neq 0$. Согласно (I.24)

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{4}{-2} & \frac{-3}{-2} \\ \frac{-2}{-2} & \frac{1}{-2} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} -2 & \frac{3}{2} \\ 1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Проверим $A\,A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -2 & 1 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Прием (I.25) дает тот же результат:

$$(A|E) = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 0 & 1 \end{array}\right) \Leftrightarrow \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & -3 & 1 \end{array}\right) \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & -2 & -3 & 1 \end{array}\right) \Leftrightarrow \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{array}\right) = (E|A^{-1}).$$

Задание. Решить задачи 836-845 из [21] и 480 из [22].

I.13. Матричные уравнения

Пусть A и B - известные квадратные матрицы, X - искомая квадратная матрица. Решим уравнение

$$AX = B. \qquad (I.26)$$

Если $|A| \neq 0$, то найдем обратную матрицу A^{-1} и умножим на нее обе части уравнения (I.26) слева

$A^{-1}AX = A^{-1}B$, $\quad EX = A^{-1}B$, $\quad X = A^{-1}B$.

Примеры. I. $XA = B$.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 23 & 34 \\ 31 & 46 \end{pmatrix},$$

$$|A| = -2 \neq 0;\ A^{-1} = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \text{ (см. п. I.12)},$$

$$XAA^{-1} = BA^{-1},\ X = BA^{-1};$$

$$X = \begin{pmatrix} 23 & 34 \\ 31 & 46 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -2 & 1 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{pmatrix}.$$

Проверим: $\begin{pmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 23 & 34 \\ 31 & 46 \end{pmatrix}$.

Задание. Решить задачи 861-870 из [21] и 481 из [22].

I.14. Матрицы преобразований базиса. Декартова система координат

Базисом в трехмерном пространстве называют три некомпланарные вектора, взятые в определенном порядке.

Базисом на плоскости называют два неколинеарные вектора на этой плоскости, взятые в определенном порядке.

Фиксируем в пространстве точку O - начало координат - и выбираем некоторый базис.

Декартовой системой координат

в пространстве называют совокупность начала координат и базиса. Базисные векторы в кристаллографии обозначают буквами $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$. Через начало координат в направлении базисных векторов проходят оси координат. Ось абсцисс обозначают буквой X, ось ординат - Y, ось аппликат - Z. Через каждые две оси координат проходит плоскость координат. Аналогично определяют декартову систему координат на плоскости, где параллельно двум базисным векторам проходят оси абсцисс и ординат.

В зависимости от порядка расположения базисных векторов различают правую и левую системы координат. Систему координат называют п р а в о й, если из конца третьего базисного вектора $\vec{c}$ кратчайший поворот от первого вектора $\vec{a}$ ко второму вектору $\vec{b}$ виден происходящим против хода часовой стрелки (рис. I.Iа). В противном случае систему называют л е в о й (рис. I.Iб). Эти названия заимствованы из механики. Если ввинчивать винт в направлении третьего вектора, вращая его от первого ко второму, то в случае правой системы резьба должна быть правой, а в случае левой системы - левой (см. рис. I.I). В кристаллографии принята правая декартова система координат.

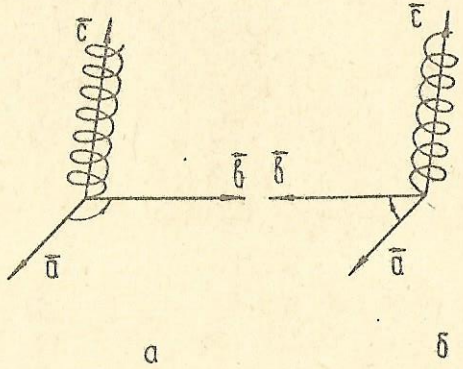


Рис. I.I.

К о о р д и н а т а м и в е к т о р а $\vec{d}$ в базисе ($\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$) (рис. I.2) называют числа x, y, z такие, что

$$\vec{d} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}. \qquad (I.27)$$

Векторы $x\vec{a}$, $y\vec{b}$, и $z\vec{c}$ являются к о м п о н е н т а м и в е к т о р а $\vec{d}$ в базисе ($\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$), а выражение (I.27) - его разложением по этому базису. Разложение данного вектора по данному базису единственно [I6].

Суммой векторов $\vec{d} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}$ и $\vec{e} = x'\vec{a} + y'\vec{b} + z'\vec{c}$ является диагональ $\vec{d} + \vec{e}$ параллелограмма, построенного на этих векторах, исходящая из общего с ними начала (правило паралеллограмма). Покомпонентное сложение векторов $\vec{d} + \vec{e} = (x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}) + (x'\vec{a} + y'\vec{b} + z'\vec{c}) = (x + x')\vec{a} + (y + y')\vec{b} + (z + z')\vec{c}$ сводится к сложению их одноименных координат, т.е. чисел. Из этого факта, а также из ассоциативности и коммутативности сложения чисел следует, что сложение векторов ассоциативно: $(\vec{d} + \vec{e}) + \vec{f} = \vec{d} + (\vec{e} + \vec{f})$ и коммутативно: $\vec{d} + \vec{e} = \vec{e} + d$ для любых векторов $\vec{d}, \vec{e}, \vec{f}$.

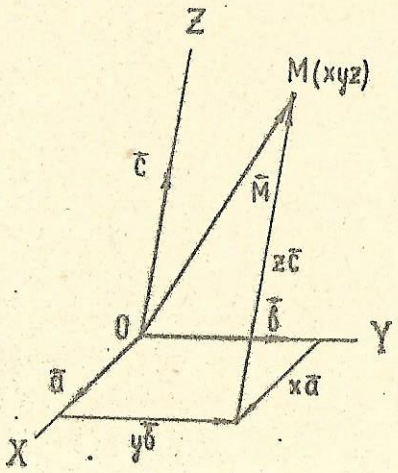


Рис. I.2.

Если векторы $\vec{d}$ и $\vec{e}$ имеют общее начало, то их разность $\vec{d} - \vec{e}$ представляет собой вектор, направленный из конца вычитаемого вектора в конец уменьшаемого.

При умножении вектора на число все компоненты вектора умножаются на это число. Например, произведение вектора $\vec{d}$ на число λ равно $\lambda\vec{d} = \lambda x\vec{a} + \lambda y\vec{b} + \lambda z\vec{c}$. Очевидна коммутативность этого действия $\lambda\vec{d} = \vec{d}\lambda$ [I6].

Распространено преобразование системы координат с сохранением начала - п р е о б р а з о в а н и е б а з и с а. Его можно описать матрицей, которая позволяет вычислять новые (в новом базисе) координаты точек по их старым координатам и т.п. [I6].

Пусть исходный (старый) базис e образован тройкой векторов ($\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$, $\vec{e}_3$), а новый базис e' - тройкой ($\vec{e}_1'$, $\vec{e}_2'$, $\vec{e}_3'$). Базисы e и e' имеют общее начало.

Всякий вектор можно выразить через старый базис. В частности, векторы нового базиса равны

$$\left.\begin{aligned} \vec{e}_1' &= \alpha_{11}\vec{e}_1 + \alpha_{12}\vec{e}_2 + \alpha_{13}\vec{e}_3, \\ \vec{e}_2' &= \alpha_{21}\vec{e}_1 + \alpha_{22}\vec{e}_2 + \alpha_{23}\vec{e}_3, \\ \vec{e}_3' &= \alpha_{31}\vec{e}_1 + \alpha_{32}\vec{e}_2 + \alpha_{33}\vec{e}_3. \end{aligned}\right\} \qquad (I.28)$$

Матрица полученной системы:

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}. \qquad (I.28a)$$

Квадратная матрица A называется матрицей перехода от старого базиса e к новому - e'. В силу единственности разложения вектора по базису матрица перехода от базиса e к базису e' единственна. Точно так же векторы старого базиса e можно выразить через векторы нового e' и получить матрицу B обратного перехода от базиса e' к базису e:

$$B = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} \end{pmatrix}. \qquad (I.29)$$

Покажем, что матрицы прямого A и обратного B переходов взаимосвязаны. Запишем систему (I.28) в виде векторного уравнения

$$e' = Ae, \qquad (I.30)$$

где $e' = \begin{pmatrix} \vec{e}_1' \\ \vec{e}_2' \\ \vec{e}_3' \end{pmatrix}$ - столбец векторов нового базиса, $e = \begin{pmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \\ \vec{e}_3 \end{pmatrix}$ - столбец векторов старого базиса.

Аналогично уравнение для обратного перехода имеет вид:

$$e = Be'. \qquad (I.31)$$

Подставим (I.30) в (I.31):

$$e = BAe. \qquad (I.32)$$

Последнее равенство сократим на столбец e (это возможно в силу линейной независимости базисных векторов):

$$E = BA. \qquad (I.33)$$

Аналогично, подставляя (I.31) в (I.30) и преобразуя, получим

$$E = AB. \qquad (I.34)$$

Равенства (I.33) и (I.34) показывают, что матрица B является обратной к матрице A, т.е. $B = A^{-1}$.

Таким образом, матрица перехода от произвольного базиса e к базису e' и матрица обратного перехода от e' к e являются взаимно обратными.

2. ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

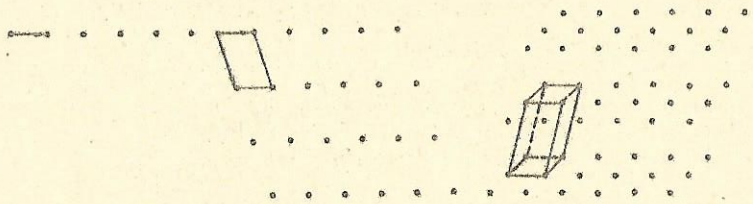
2.I. Решетчатое строение кристаллов

Древние называли кристаллами лед, а позднее - горный хрусталь, который считали окаменевшим льдом. Впоследствии представления о кристаллах расширились: к ним относили все твердые тела, имеющие естественную огранку. В настоящее время известно, что лишь незначительная часть кристаллических тел огранена. Скрытокристаллические образования окружают нас всюду. Мы живем на кристаллах, едим кристаллы, и сами частично состоим из кристаллов [II и др.].

Что же такое кристалл? Ответ на этот вопрос дал в 1912 году мюнхенский физик Макс Лауэ. По его инициативе был осуществлен эксперимент, доказавший возможность дифракции рентгеновских лучей на кристаллах. Первая в истории рентгенограмма показала, что кристаллы периодичны, и периоды повторяемости в них сопоставимы с длиной волны использованного рентгеновского излучения. Сложившиеся к тому времени представления о длине волны рентгеновских лучей и размерах атомов (порядка 10^{-8} см = = 1 Å - ангстрем) свидетельствовали о том, что кристаллы периодичны на атомном уровне.

Периодичность или решетчатое строение является основным свойством кристаллов, отличающим их от твердых аморфных тел, жидкостей и газов.

Кристаллическая решетка. Повторением точки вдоль прямой линии через равные промежутки получается бесконечный ряд точек, который можно назвать одномерной решеткой (рис. 2.Iа).



а б в

Рис. 2.I.

Периодическим повторением ряда получается бесконечная сетка, называемая двумерной решеткой (рис. 2.Iб). Повторение сетки дает трехмерную решетку (рис. 2.Iв) - бесконечное упорядоченное распределение точек, каждая из которых имеет одинаковое окружение в одинаковой ориентировке.

Вектор, при параллельном переносе на который решетка совмещается с собой (т.е. начальное и конечное состояния оказываются неразличимыми), называется трансляцией.

Трехмерная решетка полностью определяется тремя некомпланарными трансляциями. Построенный на них параллелепипед называется элементарным параллелепипедом или элементарной ячейкой. Двумерная решетка полностью определяется двумя неколинеарными трансляциями, и ее элементарной ячейкой является параллелограмм. Одномерная решетка описывается одной трансляцией, которая и является ее "элементарной ячейкой".

Если элементарная ячейка содержит точки решетки только в вершинах, то она называется примитивной. Существует множество

вариантов выбора примитивной элементарной ячейки в каждой трехмерной и двумерной (рис. 2.2) решетке, и лишь один в одномерной [I3 и др].

Координаты узлов решетки. Векторы элементарной ячейки обычно обозначаются $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, их величины - a, b, c; направления ребер элементарной ячейки обозначаются как оси X, Y и Z, углы между осями $\widehat{YZ}=\alpha$, $\widehat{ZX}=\beta$, $\widehat{XY}=\gamma$ (рис. 2.3).

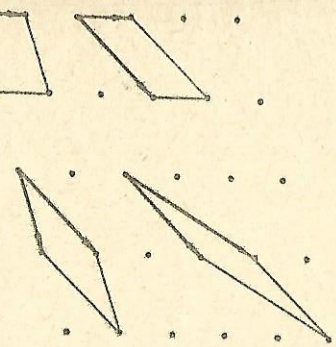


Рис. 2.2.

Если какую-либо точку решетки взять за начало, то вектор, соответствующий любой другой точке решетки, может быть представлен как

$$u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

где $u, v, w = 0, 1, 2, \ldots$ - целые числа, которые называют координатами данной точки и пишут без скобок u, v, w.

Вектор, соответствующий любой произвольной позиции в пространстве, может быть представлен как

$$(u+x)\vec{a} + (v+y)\vec{b} + (w+z)\vec{c},$$

где u, v, w - целые числа, а числа x, y, z - меньшие единицы. Координаты данной позиции записываются как x, y, z (без скобок) [I3].

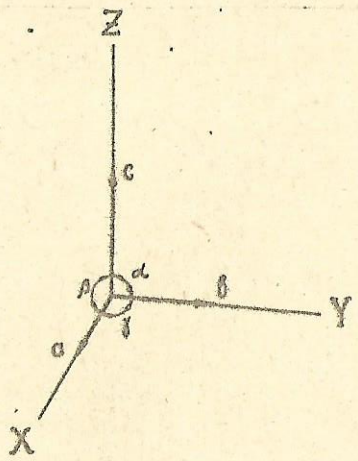


Рис. 2.3.

Кристаллографические символы. Решетка может быть рассечена сериями эквивалентно расположенных параллельных плоских сеток бесконечным количеством способов. Одна из них показана на рис. 2.4. Возьмем какую-либо точку решетки за начало. Если в серии плоскостей ближайшая к началу (но не проходящая через начало) плоскость отсекает на векторах элементарной ячейки отрезки a/h, b/k, c/ℓ (см. рис. 2.4), то говорят, что серия плоскостей имеет индексы h, k, ℓ и символ $(hk\ell)$. (На рис. 2.4 изображены плоскости (123)). Такой же символ используется для обозначения грани монокристалла, параллельной данной серии плоскостей. Полная совокупность граней, связанных симметрией - простая форма - обозначается использованием фигурных скобок $\{hk\ell\}$. Индексы h, k, ℓ направления атомного ряда, проходящего через начало, равны координатам узла, ближайшего к началу, но не лежащего в начале. Символ атомного ряда $[hk\ell]$ заключается в квадратные скобки. На рис. 2.5 указаны символы некоторых атомных рядов. Каждый ряд имеет два противоположных направления. Координаты узла, а следовательно, и индексы ряда могут быть отрицательными. Так, направление $[0\bar{1}0]$ является противоположным направлению $[010]$, а $[1\bar{1}0]$ - противоположным $[110]$. Все параллельные атомные ряды имеют одинаковый символ [13 и др.].

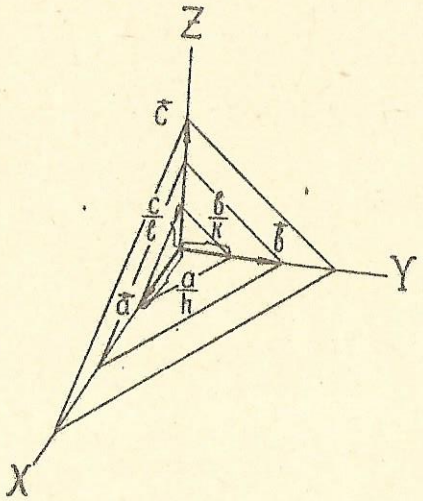


Рис. 2.4.

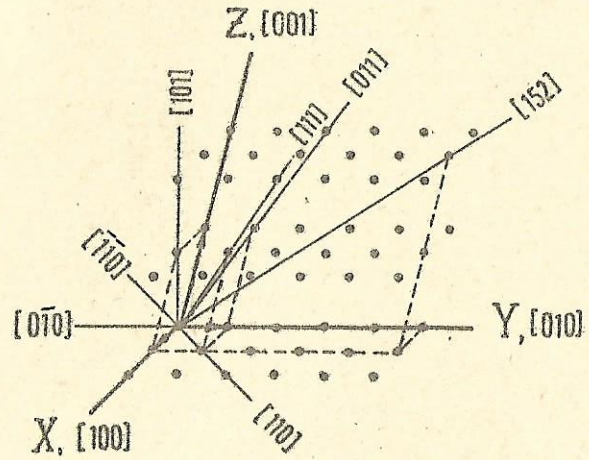


Рис. 2.5.

Кристаллическая структура. На рис. 2.6а изображен слой (001) атомов углерода в структуре графита. Возьмем точки

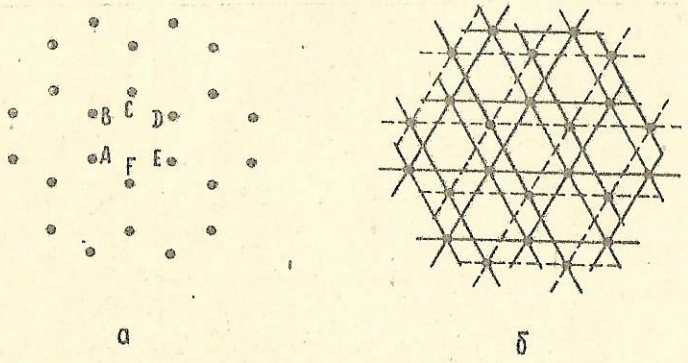


Рис. 2.6.

A и B в центрах двух атомов. Они находятся в середине одинаковых правильных треугольников с атомами в вершинах, т.е. имеют одинаковое окружение. Однако треугольники по-разному ориентированы, что противоречит определению решетки. Следовательно, точки A и B трансляционно неэквивалентны и не принадлежат одной решетке. Аналогичный анализ показывает, что точки A, C и E принадлежат одной решетке, которая на рис. 2.6б выделена сплошными линиями. Точки B, D и F принадлежат другой решетке, выделенной пунктирными линиями. Центры всех атомов слоя являются точками этих двух решеток. Решетки метрически равны, но смещены друг относительно друга.

Если в кристалле имеется не два, а большее количество атомов, не связанных трансляциями, то центр каждого из них порождает метрически равные смещенные друг относительно друга решетки. Любая другая точка (а не только центр атома) порождает такую же решетку со своим смещением.

Трехмерный бесконечный периодический мотив из всех атомов кристалла называют кристаллической структурой данного кристалла. Полную информацию о структуре дает ее элементарная ячейка, которую можно определить как элементарный параллелепипед решетки, "вырезанный" из кристалла вместе со всем его содержимым. Охарактеризовав элементарную ячейку (линейными и угловыми параметрами, числом сортов атомов, количеством атомов каждого сорта в ячейке, их координатами, симметрическими соотношениями и т.п.), мы можем многократно повторить элементарную ячейку трансляциями, на которых она построена, и тем самым заполнить пространство и получить весь кристалл [10, 11].

Периодичность внутреннего строения кристаллов проявляется в их внешнем облике (габитусе) и свойствах. Приводим основные из этих проявлений.

2.2. Однородность и анизотропность

Однородность кристаллов проявляется в том, что по параллельным направлениям свойства кристаллов одинаковы. Однородными могут быть так же аморфные тела, жидкости и газы.

Анизотропность или разносвойственность заключается в том, что по непараллельным направлениям свойства кристалла, вообще говоря, различны. Этим кристаллы отличаются от аморфных твердых тел, жидкостей и газов.

2.3. Симметрия

Несмотря на анизотропность кристаллов, их свойства по непараллельным направлениям часто оказываются равными. Теплопроводность кристаллов кварца по всем направлениям, перпендикулярным главной оси, одинакова. Одинаковы и показатели преломления, и коэффициенты теплового расширения, и многие другие свойства. А по главной оси и по любому другому направлению - иные [8 и др.].

Те же свойства в кристалле поваренной соли одинаковы по всем направлениям, но рентгеновские лучи, дифрагированные кристаллом поваренной соли в разных направлениях, имеют разную интенсивность в общем случае, и одинаковую, если они "дифрагированы" любой из шести граней куба.

В огранке кристалла можно найти примерно равные грани. Измерив углы между гранями, убеждаемся, что и среди них есть равные. Эти и многие другие примеры показывают, что в кристаллах часто существуют равные и равнорасположенные части: атомные ряды, атомные плоскости, направления, грани и т.п. Это свойство кристаллов называется симметрией.

Мы видели (п. 2.1), что равные параллельные ряды и плоскости атомов можно совместить друг с другом с помощью трансляций. Забегая вперед, скажем, что равные части кристалла при их определенном расположении могут быть совмещены друг с другом также путем их поворота вокруг некоторой прямой линии (оси

симметрии), отражения в некоторой плоскости (плоскости симметрии), инверсии в некоторой точке (центры симметрии) или совместным действием этих преобразований. Такие элементы называют нетрансляционными элементами симметрии.

Нетрансляционная симметрия не является обязательным свойством кристаллов. Существует обширная группа кристаллов (многие триклинные кристаллы), у которых каждое направление (вектор) и свойства по нему уникальны, и следовательно, нетрансляционная симметрия отсутствует [13].

2.4. Способность самограняться

Каждый кристалл в силу решетчатого строения способен самограняться. При росте в благоприятных условиях он покрывается плоскими гранями, пересекающимися по прямолинейным ребрам с образованием выпуклого кристаллического многогранника. Нередко создается впечатление, что кристаллический многогранник имеет равные и равнорасположенные грани и ребра. Однако измерения показывают, что это равенство приближенное и может нарушаться как угодно сильно [1, 10].

Дело в том, что габитус (облик) кристаллического многогранника определяется не только симметрией кристалла. Относительный размер граней и ребер зависит также от условий образования кристалла. (Примером может быть кристалл везувиана, изображенный на рис. 2.8а. Грани 3-10 связаны между собой элементами симметрии, однако метрически они различны.) Параметрами, отражающими симметрию кристалла, являются углы между его гранями и ребрами.

2.5. Закон постоянства углов. Стереографические проекции

Симметрия кристаллов проявляется в следующем свойстве, известном как з а к о н п о с т о я н с т в а у г л о в Стенона - Роме-Делиля: углы между соответственными гранями (и ребрами) у всех кристаллов одного и того же состава и строения при одинаковых условиях постоянны.

Измерив углы между гранями кристаллического многогранника и обнаружив среди них равные, можно сделать заключение о симметрии кристалла. Именно этот путь долгое время оставался основным в изучении симметрии кристаллов. Углы измеряли угломерными приборами - гониометрами. Измерения заносили в справочники, по которым осуществляли также и диагностику кристаллов. Естественно, что для гониометрических исследований пригодны лишь ограненные кристаллы.

Открытие дифракции рентгеновских лучей на кристаллах дало новые возможности и в измерении углов. Дифракция позволила измерять углы между любыми плоскостями атомов (а не только теми, которые проявились в виде граней) на бесформенном микроскопическом кристалле. Родился новый метод исследования кристаллов - рентгенография, который можно назвать также рентгеновской гониометрией. В настоящее время рентгенография является одним из совершеннейших методов изучения симметрии кристаллических материалов и их фазового состояния и широко применяется во всех областях естествознания.

Закон постоянства углов показывает, что углы между гранями и ребрами являются важнейшими характеристиками внешнего облика и симметрии кристаллов. Может изменяться количество граней кристаллического многогранника, их форма, размер и габитус кристалла в целом, но углы между соответственными гранями сохраняются постоянными. По этой причине в кристаллографии широко используются способы проектирования кристаллов, отражающие их угловые характеристики и не чувствительные к линейным. Таким является с т е р е о г р а ф и ч е с к о е п р о е к т и р о в а н и е [1, 8, 10 и др.].

На рис. 2.7а показано построение стереографической проекции прямой линии. Элементами проектирования являются: сфера проекции C с центром в точке O - центре проекции, центральное сечение сферы - круг проекции K, ось проекции NS, проходящая через центр перпендикулярно кругу проекции и пересекающая сферу в точках N и S - полюсах проекции.

Проектирование осуществляется на круг проекции. Для этого проектируемую прямую переносят параллельно себе так, чтобы она прошла через центр проекции (если она не проходит через него)

и в этом положении точку A ее пересечения со сферой соединя-

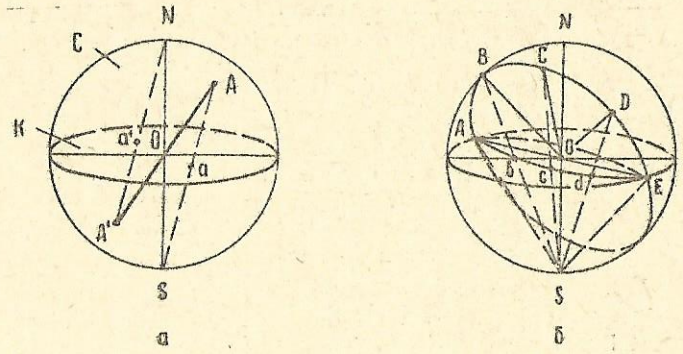


Рис. 2.7.

ют лучом AS с удаленным полюсом. За проекцию принимают точку a пересечения луча AS с кругом проекции.

Прямая линия имеет два противоположных направления (полюса), каждое из которых проектируется в виде точки. Таким образом, стереографической проекцией направления является точка на круге проекций, проекцией прямой линии - две точки. Чтобы различать проекции направлений, идущих вверх и вниз от круга проекций, их можно обозначать разными значками, например, точками - верхние направления и кружками - нижние.

Стереографическое проектирование прямой линии лежит в основе проектирования и плоскости (рис. 2.7б). Переносим плоскость параллельно себе так, чтобы она прошла через центр проекции (если она не проходит через него). Полуплоскость, лежащая выше круга проекции, пересекает сферу проектирования по дуге ABCDE. Представляя плоскость как совокупность прямых, проходящих через центр (например: OA, OB, OC и т.д.), проектируем каждую прямую отдельно. В результате получаем на круге проекции дугу - меридиан AbcdE - стереографическую проекцию верхней полуплоскости. Нижняя полуплоскость проектируется аналогичным образом с использованием полюса N.

Стереографическое проектирование используется для построения проекций элементов симметрии. При этом проекцией каждой оси симметрии являются две точки на круге проекций, проекцией плоскости симметрии - дуга-меридиан, которая вырождается в прямую линию для вертикальных плоскостей (параллельных оси NS). Такие проекции позволяют наглядно представить повороты вокруг точки и отражения в прямой линии или в дуге.

Однако при построении проекций граней кристалла стереографическое проектирование становится избыточным. Десяткам граней кристаллического многогранника соответствовали бы десятки дуг на круге проекций, перегружая его и затрудняя анализ. В то же время ориентировка плоскости в пространстве определяется ориентировкой нормали к плоскости. По этим причинам за проекцию грани кристалла принимается стереографическая проекция ее нормали, проведенной из центра проекции (например грань 3 на рис. 2.8а). Такая проекция плоскости называется г н о м о с т е р е о г р а ф и ч е с к о й. Она используется при проектировании граней кристаллов в гониометрии и любых атомных плоскостей в рентгеновской гониометрии. Условимся верхние грани обозначать крестиками, а нижние - ноликами.

Грани, пересекающиеся в параллельных ребрах, образуют зону (пояс). Прямая, параллельная всем граням зоны, является осью зоны. Гномостереографические проекции всех граней зоны ложатся на один меридиан. Этот меридиан является стереографической проекцией плоскости, в которой лежат нормали ко всем граням зоны. В кристаллическом многограннике всегда можно выделить несколько наиболее развитых зон (с наибольшим количеством граней), что упростит проектирование [8, 10].

На рис. 2.8а изображен кристаллический многогранник везувиана и некоторые элементы его проектирования, а на рис. 2.8б - гномостереографическая проекция его граней, совмещенная с плоскостью чертежа. Проекция выявляет более высокую симметрию кристалла, чем можно предположить по его внешнему виду.

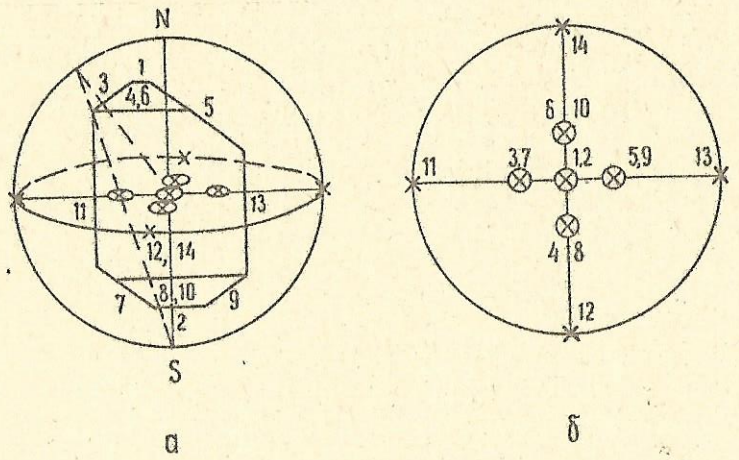


Рис. 2.8.

2.6. Закон (тенденция) Бравэ

Бравэ первым высказал мысль, что кристаллы покрываются гранями с наибольшей ретикулярной плотностью.

В кристалле можно выделить множество атомных плоскостей, ретикулярная плотность которых (количество атомов на единицу площади) изменяется от некоторой максимальной до практически нулевой. Вся практика наблюдения кристаллических многогранников показывает, что кристаллы покрыты плотными гранями, хотя и не обязательно самыми плотными. Ретикулярная плотность является лишь одним из факторов, определяющих габитус кристалла, поэтому закон Бравэ имеет силу тенденции.

Наблюдения за кристаллами в процессе их роста показывают, что присоединение вещества к кристаллу происходит послойно, в результате чего грани перемещаются параллельно себе. Скорость продвижения граней вдоль своих нормалей - скорость роста гра-

ней - для разных граней различна в общем случае. Грани, обладающие большей скоростью роста, нередко исчезают из огранки кристалла (рис. 2.9). Этот факт в сочетании с тенденцией Бравэ может, в частности, означать, что неплотные грани обладают большими скоростями роста и поэтому зарастают и исчезают из огранки кристалла [10].

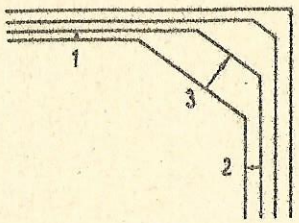


Рис. 2.9.

Может возникнуть впечатление, что большая скорость роста неплотных граней обусловлена тем, что эти грани требуют мало вещества для продвижения. Эта предпосылка опровергается тем, что менее плотные атомные плоскости чаще повторяются в кристалле. В результате количество вещества на единицу объема - плотность соединения - конечно же постоянна. Объяснение можно искать в нескомпенсированных силах, которых на поверхности менее плотных граней больше.

2.7. Закон целых чисел (закон Аюи)

Двойные отношения отрезков, отсекаемых двумя любыми гранями кристалла на трех его пересекающихся ребрах, равны отношению целых небольших чисел.

В основе и этого свойства кристаллов лежит их решетчатое строение. Поскольку грани кристалла - это атомные плоскости, а его ребра - атомные ряды, то речь, следовательно, идет о двойных отношениях отрезков, отсекаемых атомными плоскостями на атомных рядах. Рис. 2.10 иллюстрирует целочисленность таких отношений:

$$\frac{OA_1}{OB_1}:\frac{OA_2}{OB_2}:\frac{OA_3}{OB_3}=\frac{1}{3}:\frac{2}{4}:\frac{3}{6}=2:3:3\,.$$

Их малость обеспечивается законом Бравэ.

Описывая кристаллический многогранник, исследователь не

видит атомные ряды. Тем не менее, закон целых чисел позволяет определять символы граней (см. п. 2.I), поскольку отрезки, отсекаемые гранями на ребрах, пропорциональны межатомным расстояниям. Для этого одна из граней, например грань, соответствующая атомной плоскости А на рис. 2.I0, принимается за единичную, а отрезки, отсекаемые этой гранью на координатных осях - за единицы измерения вдоль соответствующих осей. Так, символ грани В (рис. 2.I0) равен

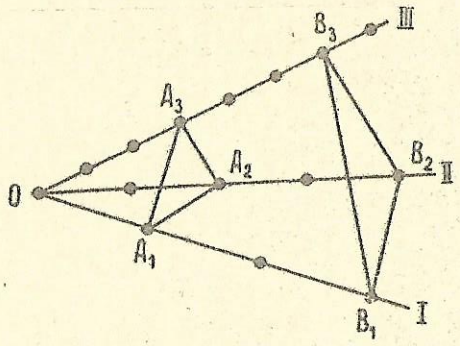


Рис. 2.I0.

$$\frac{OA_1}{OB_1}\cdot\frac{OA_2}{OB_2}\cdot\frac{OA_3}{OB_3}=\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}=2:3:3\Rightarrow(233).$$

При этом неоднозначность выбора единичной грани влечет неоднозначность определения символов. Подробнее с определением символов граней, а также ребер кристаллических многогранников можно познакомиться по учебным пособиям [I0, 8, I и др.].

В этом разделе мы рассмотрели свойства кристаллов, необходимые для понимания их симметрии. Можно отметить также, что самопроизвольное "выстраивание" атомов в кристаллы - кристаллизация определяется свойством минимума энергии: кристаллическое состояние энергетически выгоднее твердого аморфного, жидкого и газообразного состояний. Теория и практика кристаллообразования составляют предмет самостоятельной науки - кристаллогенезиса [I0 и др.]. Электрические, магнитные, тепловые, оптические, механические и другие физические свойства кристаллов являются предметом кристаллофизики [I0, 3, 4]. Закономерности кристаллического строения изучает кристаллохимия [I0, II,97], нарушение кристаллического строения реальных кристаллов - наука о дефектах в кристаллах и т.п.

3. ТОЧЕЧНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

3.I. Понятие о преобразованиях и элементах симметрии

Если фигура составлена из равных частей, равно расположенных друг относительно друга, то существуют преобразования, совмещающие равные части фигуры друг с другом, а фигуру с собой. Такую фигуру называют симметричной, а преобразования совмещения - преобразованиями или операциями симметрии.

Преобразования симметрии сохраняют неизменными расстояния, т.е. являются ортогональными [I7]. Существуют следующие типы ортогональных преобразований: перенос, поворот, отражение в плоскости, инверсия в точке и их комбинации.

Точки решетки лишены размерности и потому являются равными. Каждая из них может быть совмещена с любой другой путем переноса на трансляцию. Решетка в целом при этом самосовмещается. Это означает, что все решетки обладают трансляционной симметрией. Следствием является равенство всех связанных трансляциями рядов и сеток.

Если в решетке оказываются равными трансляционно неэквивалентные ряды и сетки точек, то решетка обладает также нетрансляционной симметрией. И тогда существуют преобразования, совмещающие эти равные части.

Преобразования симметрии решеток можно разделить на следующие восемь типов [5]:

I) преобразование идентичности;
2) поворот вокруг прямой линии;
3) отражение в плоскости;
4) инверсия в точке;
5) поворот вокруг прямой линии с одновременной инверсией в точке;
6) параллельный перенос;
7) поворот вокруг прямой линии с одновременным переносом;

8) отражение в плоскости с одновременным переносом.

Каждое из первых пяти типов преобразований оставляет инвариантной (неподвижной) по крайней мере одну точку преобразуемого пространства и потому называется точечным преобразованием. Лишь точечные преобразования симметрии возможны в конечных кристаллических многогранниках.

Последние три типа преобразований решеток включают переносы, поэтому возможны только в бесконечных фигурах - кристаллических решетках и структурах, которые ниже рассматриваться не будут [13].

Традиционным является представление об элементе симметрии, как подпространстве преобразуемого пространства, наделенном определенным свойством преобразовывать пространство в себе, но остающимся при этом инвариантным [5, 8, 10 и др.]. При отражении в плоскости инвариантным подпространством является сама плоскость - плоскость симметрии, при повороте вокруг прямой линии - сама прямая линия - ось симметрии, при инверсии в точке - сама точка - центр симметрии.

Существует также представление об элементе симметрии как о совокупности всех степеней какого-либо преобразования симметрии [7]. Так, если фигура совмещается с собой при поворотах вокруг прямой линии на углы 90°, 180°, 270° и 360°, то говорят, что эти четыре преобразования симметрии соответствуют элементу симметрии - оси четвертого порядка. Оба подхода позволяют объединять преобразования симметрии в группы, соответствующие элементам симметрии. Каждой такой группе сопоставляется геометрический образ - плоскость, ось и центр симметрии.

В классификации ортогональных преобразований важное значение имеет понятие ориентации. Ориентация является обобщением понятия направления на прямой линии на более сложные геометрические фигуры. Это одно из основных понятий геометрии. Проиллюстрируем примерами понятия ориентации прямой линии, поверхности и пространства.

На рис. 3.1 изображен многогранник (тетраэдр) до и после отражения в плоскости симметрии. На отрезке AB перемещение от точки A к точке B осуществляется слева направо, на отрезке A'B' аналогичное перемещение происходит справа налево. Такие два отрезка называются противоположно ориентированными.

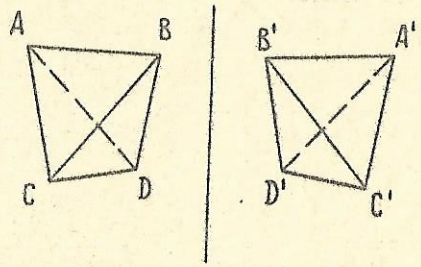


Рис. 3.1.

Грани тетраэдра ограничены простыми (без самопересечений) замкнутыми кривыми. При обходе грани ABC по ее контуру в направлении от точки A к точке B грань остается справа, при аналогичном обходе грани A'B'C' она остается слева. Такие две грани (части плоскости) называются противоположно ориентированными.

Тетраэдры ABCD и A'B'C'D' как замкнутые многогранники ограничивают определенные части пространства. Эти тетраэдры (и ограниченные ими части пространства) имеют противоположную ориентацию, поскольку их грани, наблюдаемые снаружи, представляются ориентированными противоположным образом.

Ортогональные преобразования, сохраняющие ориентацию преобразуемой фигуры, называются движениями или преобразованиями первого рода. Движениями являются параллельные переносы, вращения и их комбинации. Ортогональные преобразования, изменяющие ориентацию преобразуемой фигуры на противоположную, называются инверсиями или преобразованиями второго рода. Инверсиями являются отражение в плоскости (см. рис. 3.1) и инверсия в точке.

Ортогональные преобразования (сохраняются расстояния)			
Движения (сохраняется ориентация)		Инверсия (ориентация изменяется на противоположную)	
Перенос	Поворот	Инверсия в точке	Отражение в плоскости

Поскольку любая инверсия изменяет ориентацию фигуры на противоположную, то комбинация из двух или любого четного числа инверсий сохраняет ориентацию фигуры, т.е. является движением. И вообще, каждая комбинация ортогональных преобразований, включающая четное число инверсий, является движением, а каждая комбинация, включающая нечетное число инверсий, является инверсией.

Среди перечисленных выше восьми типов преобразований симметрии кристаллов четыре преобразования, приведенные под номерами I, 2, 6, 7, являются движениями (преобразованиями I рода), остальные 3, 4, 5, 8 - инверсиями (преобразованиями II-го рода).

Ортогональных преобразований множество. Далеко не каждое из них возможно в кристаллах. Одним из красивейших следствий решетчатого строения кристаллов является основной закон симметрии кристаллов, утверждающий, что в кристаллах возможны оси симметрии лишь I-, 2-, 3-, 4- и 6-го порядков. Из того факта, что центр и плоскость симметрии также можно представить как оси симметрии (инверсионные), следует, что данный закон охватывает все возможные в кристаллах точечные элементы симметрии [I0 и др.].

3.2. Понятие о матричной записи преобразований симметрии

Ортогональное преобразование фигуры можно заменить преобразованием системы координат относительно неподвижной фигуры с изменением направлений поворотов на противоположные. При этом преобразование можно характеризовать изменением системы координат и записывать в виде матрицы перехода от старой системы к новой (см. п. I.I4).

Для каждого преобразования в общем случае возможно множество матричных записей в зависимости от выбора исходного базиса. До введения в разделе 4 кристаллографической системы координат будем особо оговаривать базис, в котором производится преобразование.

3.3. Центр симметрии

Центром симметрии (центром инверсии) называют особую точку фигуры, при инверсии в которой фигура совмещается с собой. Операция инверсии состоит в том, что из каждой точки фигуры (рис. 3.2) проводят луч через центр симметрии и на этом луче с противоположной стороны от центра на равном от него расстоянии находят точку, эквивалентную исходной. Фигура в целом при этом изменяет ориентацию на противоположную, т.е. преобразование центром симметрии является инверсией. Центр симметрии обозначают заглавной буквой C в тексте и маленьким незаштрихованным кружком на проекции.

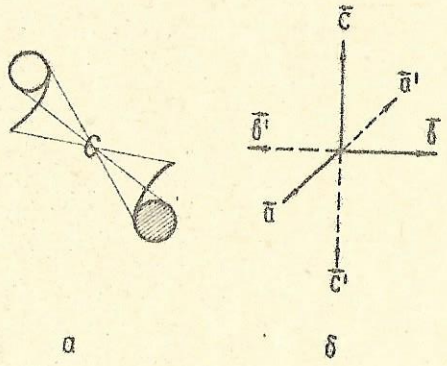


Рис. 3.2.

На рис. 3.2б сплошными стрелками изображены исходные базисные векторы $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, а пунктирными - результат их инверсии $\vec{a}'$, $\vec{b}'$, $\vec{c}'$ в начале координат. Векторы нового "штрихованного" базиса выражаются через старый базис следующим образом:

$$\begin{aligned} \vec{a}' &= -1\cdot\vec{a} + 0\cdot\vec{b} + 0\cdot\vec{c}, \\ \vec{b}' &= 0\cdot\vec{a} - 1\cdot\vec{b} + 0\cdot\vec{c}, \\ \vec{c}' &= 0\cdot\vec{a} + 0\vec{b} - 1\cdot\vec{c}. \end{aligned} \qquad (3.I)$$

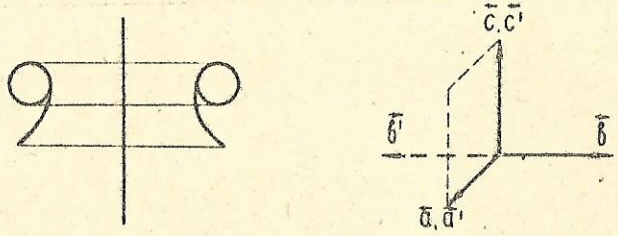
Матрица перехода от старого базиса к новому, а следовательно, и матрица центра инверсии имеет вид

$$C = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (3.2)$$

Преобразование может быть записано и с помощью транспонированной матрицы, составленной из столбцов координат векторов $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$. Это следует иметь в виду при сопоставлении матриц, взятых из разных литературных источников.

3.4. Плоскость симметрии

П л о с к о с т ь ю с и м м е т р и и называют плоскость, при отражении в которой фигура совмещается с собой. Операция отражения состоит в том, что из каждой точки преобразуемой фигуры (рис. 3.3а) проводят прямую, перпендикулярную плоскости, и на ней с противоположной стороны от плоскости на равном от нее рас-



а б

Рис. 3.3.

стоянии находят точку, эквивалентную исходной. Фигура при этом изменяет ориентацию на противоположную, т.е. отражение в плоскости является инверсией. Плоскость симметрии называют также плоскостью зеркального отражения и обозначают буквой m в тексте и толстой (или двойной) линией на проекции.

На рис. 3.3б изображено преобразование прямоугольной системы координат плоскостью симметрии m, перпендикулярной оси Y. Векторы нового базиса $\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'$ так выразятся через векторы старого базиса $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$: $\vec{a}'=a$, $\vec{b}'=-b$, $\vec{c}'=c$.

Матрица преобразования m_y имеет вид

$$m_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \qquad (3.3)$$

Аналогично находят матрицы преобразований симметрии, соответствующих плоскостям симметрии иной ориентировки.

3.5. Поворотные оси симметрии

П о в о р о т н о й о с ь ю с и м м е т р и и L называют прямую линию, при поворотах вокруг которой на углы, кратные некоторому углу α, фигура совмещается с собой. Фигура при этом сохраняет ориентацию, т.е. поворот является движением. Наименьший угол α, при повороте на который фигура совмещается с собой, называется элементарным углом поворота. Фигура совмещается с собой также при поворотах на углы 2α, $3\alpha, \ldots, k\alpha, \ldots$ Поворотные оси симметрии называют также осями симметрии (опуская слово поворотные).

Если угол α такой, что $360/\alpha = n$, где $n = 1, 2, 3, \ldots$ – целые числа, то ось симметрии называют осью симметрии n-го порядка и обозначают n или L_n. Очевидно, что ось симметрии n-го порядка совмещает фигуру с собой при повороте на угол α в любую сторону.

Вообще элементарный угол поворота может быть произвольный. В кристаллах в силу их решетчатого строения возможны лишь такие оси симметрии, которые не нарушают дискретность и прямолинейность кристаллической решетки.

Теорема 3.1 (Основной закон симметрии кристаллов). В кристаллах возможны оси симметрии только 1-, 2-, 3-, 4- и 6-го порядков.

На рис. 3.4 точка L - выход оси симметрии n-го порядка с элементарным углом поворота $360^\circ/n = \alpha$. Точку L принимаем за узел кристаллической решетки. Слева и справа от нее на расстоянии трансляции a расположены узлы решетки A и B. Повернем эти узлы на угол α вокруг оси симметрии: точку A - по ходу часовой стрелки, точку B - против хода часовой стрелки. Полученные точки A' и B' лежат на прямой, параллельной трансляции а, следовательно, в кристалле между ними должно укладываться целое число трансляций na. Из рисунка следует также, что

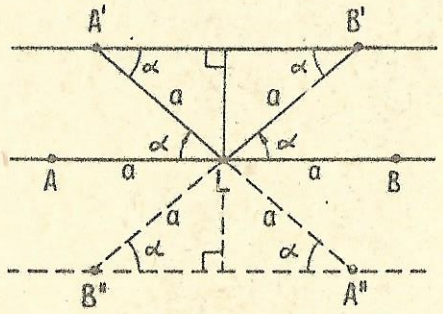


Рис. 3.4.

$$na = A'B' = 2a \cdot \cos\alpha, \qquad (3.4)$$

откуда

$$n = 2 \cdot \cos\alpha \ . \qquad (3.5)$$

В правой части равенства (3.5) стоит целочисленная функция. Это возможно при значениях косинуса I, I/2, 0, -I/2, - I, что соответствует элементарным углам поворота 0°, 60°, 90°, 120° и 180°, т.е. осям симметрии I-, 2-, 3-, 4- и 6-го порядков, что и требовалось доказать. Графическое доказательство теоремы дано в работах [I0, 8 и др.].

Пунктирная часть рис. 3.4 служит для аналогичного анализа порядка инверсионных осей симметрии (см. п. 3.6).

В международной символике [I3] оси симметрии обозначаются арабскими цифрами I, 2, 3, 4, 6, равными порядку оси. Преобразования симметрии, соответствующие осям, обозначаются теми же цифрами с надстрочными индексами, указывающими кратность поворота на элементарный угол. Например, оси симметрии 3 соответствуют три преобразования симметрии 3^I, 3^2, $3^3 \equiv I$, заключающиеся в повороте вокруг оси на углы 120°, $120^\circ\ 2 = 240^\circ$, $120^\circ\ 3 = 360^\circ$ соответственно.

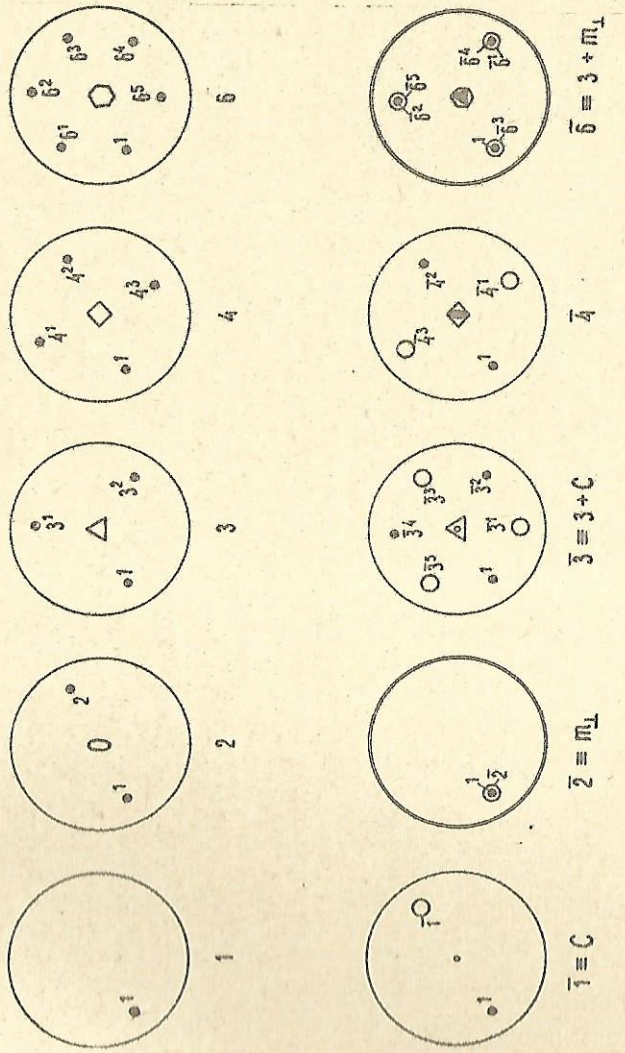


Рис. 3.5.

Преобразования симметрии, соответствующие всем поворотным осям симметрии, изображены на рис. 3.5. Приведены стереограммы полюсов эквивалентных направлений, полученных из полюса I преобразованиями поворотных осей симметрии I, 2, 3, 4 и 6.

Рассмотрим примеры матричного представления этих преобразований. На рис. 3.6 представлены первые степени преобразова-

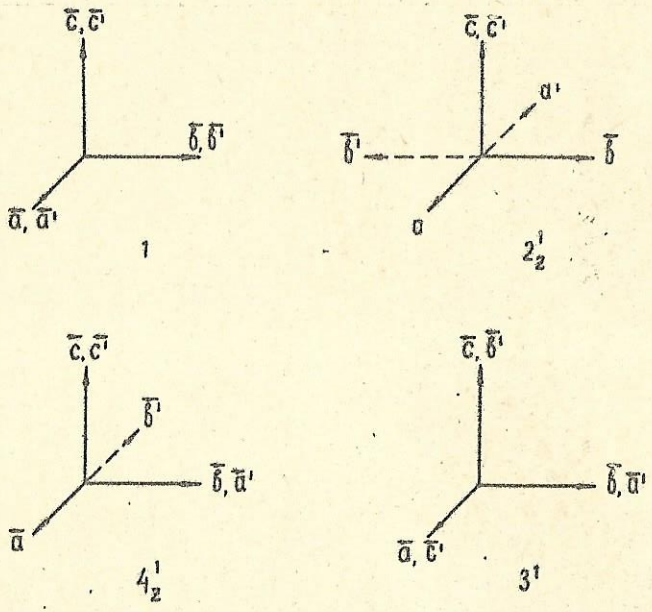


Рис. 3.6.

ний прямоугольной системы координат, соответствующих осям симметрии I, 2_z, 4_z, параллельным координатной оси Z, и оси 3, равнонаклонной к координатным осям X, Y, Z. Матрицы, соответствующие этим преобразованиям, имеют вид:

$$I = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}, \qquad 2_z^1 = \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix},$$

$$4_z^1 = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}, \qquad 3^1 = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \\ I & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (3.6)$$

3.6. Инверсионные оси симметрии

Рассмотрим комбинации из поворотов и инверсии в точке. Инверсионной осью симметрии порядка n называют прямую линию, при повороте вокруг которой на угол $\alpha = 360/n$ и инверсии в особой точке этой прямой фигура совмещается с собой; фигура совмещается с собой также при любом многократном повторении комбинации из двух указанных преобразований. Особая точка располагается в центре тяжести фигуры. Она может и не быть центром симметрии.

Полагая, что L (рис. 3.4) - инверсионная ось симметрии с элементарным углом поворота α, получаем из узла A решетки узел A'', из B - B'', после чего так же, как в п. 3.5, убеждаемся, что и инверсионные оси в кристаллах возможны лишь I-, 2-, 3-, 4-, и 6-го порядков. Обозначают их $\bar{n}$ или L_{in}, где n - порядок оси. Соответствующие инверсионным осям преобразования симметрии обозначают символом $\bar{n}^k$, где надстрочный индекс k означает кратность повторения элементарной комбинации преобразований. Например, оси симметрии $\bar{2}$ соответствуют два преобразования симметрии $\bar{2}^I$, заключающееся в повороте вокруг оси на 180^0 и отражении в центре фигуры как в центре симметрии, и преобразование $\bar{2}^2 \equiv I$, заключающееся в повороте фигуры на $180^0 \cdot 2 = 360^0$ и двукратной инверсии в центре (т.е. в отсутствии инверсии).

Преобразования симметрии, соответствующие всем инверсионным осям симметрии, изображены на рис. 3.5.

Первые степени $\bar{n}^1$ преобразований, соответствующих инвер-

сионным осям, содержат по одному преобразованию инверсии. Тем самым они изменяют ориентацию фигуры и являются преобразованиями II-го рода. То же можно сказать и о всех нечетных степенях этих преобразований. Четные степени означают отсутствие инверсии и являются чистыми поворотами, т.е. преобразованиями I-го рода.

Матричное представление преобразований симметрии инверсионных осей рассмотрим на примере оси $\bar{4}$, параллельной координатной оси Z.

Результат воздействия четырех преобразований оси $\bar{4}$ на прямоугольную систему координат представлен на рис. 3.7.

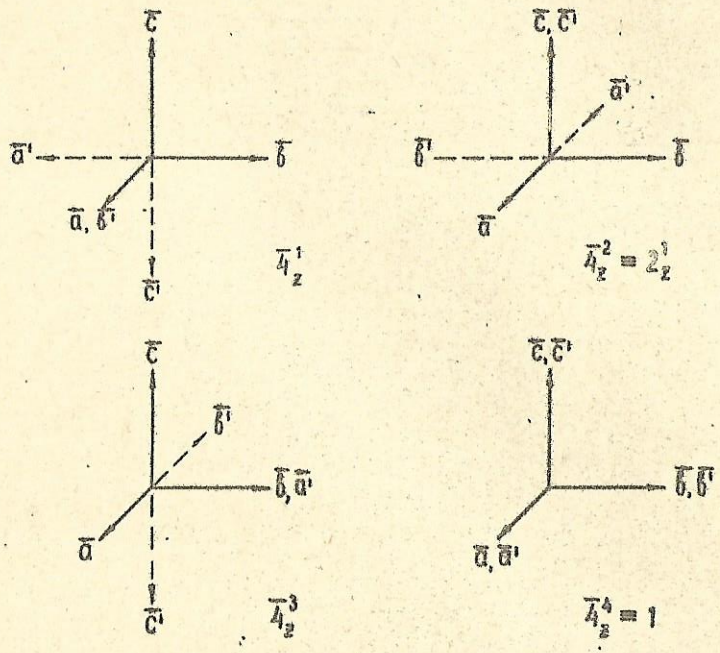


Рис. 3.7.

Матрицы этих преобразований имеют вид:

$$\bar{4}_z^1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \bar{4}_z^2 \equiv 2_z^1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\bar{4}_z^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \bar{4}_z^4 \equiv 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \qquad (3.7)$$

3.7. Элементы симметрии, равнодействующие инверсионным осям

Точечные преобразования симметрии, соответствующие инверсионным осям, наименее наглядны. Поэтому, когда это возможно, инверсионные оси заменяют равнодействующими им простыми элементами симметрии: поворотными осями, плоскостью и центром симметрии [10, 8, 1 и др.].

Приводим теоремы, устанавливающие равнодействующие элементы симметрии для инверсионных осей всех порядков, кроме четвертого. Ось $\bar{4}$ равнодействующих элементов не имеет. Модельными доказательствами этих теорем могут служить стереограммы (см. рис. 3.5). При доказательстве с использованием матричного аппарата воспользуемся тем обстоятельством, что эквивалент совместного действия двух преобразований находится умножением матриц этих преобразований.

Теорема 3.2. Преобразование инверсионной осью симметрии первого порядка тождественно преобразованию центром симметрии $\bar{1} \equiv C$.

В соответствии с определением инверсионной оси первого порядка доказательство теоремы сводится к умножению матриц преобразований поворотной оси первого порядка 1 (преобразования идентичности) (3.6) и центра симметрии C (3.2):

$$\bar{1} \equiv 1 \cdot C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = C.$$

По этой причине центр симметрии C обозначают также символом $\bar{1}$.

Теорема 3.3. Преобразование инверсионной осью симметрии второго порядка тождественно преобразованию плоскостью симметрии, ей перпендикулярной $\bar{2} \equiv m_{\perp}$.

Возьмем инверсионную ось симметрии второго порядка $\bar{2}$. Независимо от ее ориентировки направим вдоль нее координатную ось z, а оси X и Y перпендикулярно z. В соответствии с определением оси $\bar{2}$ доказательство теоремы сводится к умножению матриц преобразований 2_z^1 (3.6) и C (3.2):

$$\bar{2}_z^1 = 2_z^1 \cdot \bar{1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = m_z .$$

Результирующая матрица описывает симметрическое преобразование плоскостью m_z, перпендикулярной оси $\bar{2}_z$, что и требовалось доказать.

Инверсионная ось симметрии второго порядка $\bar{2}$ не используется в кристаллографической практике, а заменяется плоскостью симметрии, ее перпендикулярной.

Теорема 3.4. Преобразование инверсионной осью симметрии третьего порядка тождественно совместному преобразованию поворотной осью симметрии третьего порядка той же ориентировки и центром симметрии $\bar{3} \equiv 3 + \bar{1}$.

Инверсионная ось симметрии третьего порядка является элементом симметрии шестого порядка, т.е. ей соответствуют шесть неэквивалентных преобразований симметрии (см. рис. 3.5): $\bar{3}^1$, $\bar{3}^2 \equiv 3^2$, $\bar{3}^3 \equiv \bar{1}$, $\bar{3}^4 \equiv 3^1$, $\bar{3}^5$, $\bar{3}^6 \equiv 1$. Три из них 1, 3^1, 3^2 являются преобразованиями поворотной оси третьего порядка 3, три оставшиеся: $\bar{1}$, $\bar{3}^1$, $\bar{3}^5$ являются комбинацией первых трех с центром симметрии $\bar{1}$.

Теорема 3.5. Преобразование инверсионной осью симметрии шестого порядка тождественно совместному преобразованию поворотной осью симметрии третьего порядка той же ориентировки и перпендикулярной к ней плоскости симметрии $\bar{6} \equiv 3 + m_{\perp}$.

Инверсионной оси шестого порядка соответствуют шесть неэквивалентных преобразований симметрии (см. рис. 3.5):

$\bar{6}^1$, $\bar{6}^2 \equiv 3^1$, $\bar{6}^3 \equiv \bar{2}^1 \equiv m_{\perp}$, $\bar{6}^4 \equiv 3^2$, $\bar{6}^5$, $\bar{6}^6 \equiv 1$. Три из них 1, 3^1, 3^2 являются преобразованиями поворотной оси симметрии третьего порядка 3, три оставшиеся: $m_{\perp}$, $\bar{6}^1$, $\bar{6}^5$ являются комбинациями первых трех с преобразованием плоскостью симметрии $m_{\perp}$.

Теоремы 3.4 и 3.5 помогают при анализе симметрии кристаллических многогранников отыскать непростые для восприятия инверсионные оси $\bar{3}$ и $\bar{6}$ по равнодействующим им элементам симметрии $3 + \bar{1}$ и $3/m$ соответственно. Совместное присутствие оси четвертого порядка 4 и центра симметрии $\bar{1}$ означает также и присутствие инверсионной оси симметрии четвертого порядка $\bar{4}$. При отсутствии оси симметрии четвертого порядка 4 необходимыми, но не достаточными условиями присутствия инверсионной оси четвертого порядка $\bar{4}$ являются: присутствие оси второго порядка 2 той же ориентировки и отсутствие центра симметрии.

3.8. 10 точечных элементов симметрии

Мы познакомились с поворотными и инверсионными осями, центром и плоскостью симметрии кристаллических многогранников и убедились в том, что преобразование центром симметрии тождественно преобразованию инверсионной осью первого порядка, а преобразование плоскостью симметрии тождественно преобразованию перпендикулярной к ней инверсионной осью второго порядка. Таким образом, все точечные элементы симметрии кристаллов можно рассматривать как поворотные или инверсионные оси симметрии. Направление каждой из этих осей является особым направлением в кристалле.

Могут ли встретиться в кристаллических многогранниках другие элементы симметрии? Равные части фигуры можно совместить друг с другом, например, путем двойного преобразования - поворота на элементарный угол α вокруг оси и отражения в плоскости, перпендикулярной оси. Такие оси называют зеркальными осями и обозначают $\bar{n}$ или $\tilde{t}_n$, где $n = 1, 2, 3, 4, 6$. Однако преобразование зеркальной осью с любым элементарным углом α (рис. 3.8) можно заменить преобразованием инверсионной осью с элементарным углом поворота $180° - \alpha$. Следовательно, преобразования зеркальными осями являются лишь иной трактовкой преоб-

разований инверсионными осями. Из двух наборов элементов симметрии: инверсионных и зеркальных осей - достаточно использовать один. В международной символике используют инверсионные оси [13, 10 и др.].

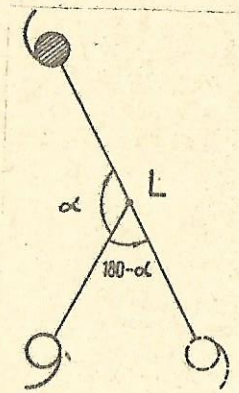


Рис. 3.8.

В учении о симметрии все возможные в кристаллах элементы симметрии строго выводятся. Вывод основывается на следующей теореме [10].

Теорема 3.6. Любые две равные части любой фигуры можно взаимно совместить отражением в плоскостях, количество которых не превышает четырех.

Перебирая дозволенные теоремой варианты из одной, двух, трех и четырех плоскостей симметрии различной взаимной ориентировки, получают все элементы симметрии кристаллов. В частности, точечные элементы симметрии кристаллов приведены в табл. 3.1. В ней даны названия элементов симметрии, их обозначения в тексте и на проекции, и соответствующие им преобразования симметрии. Символика Германа-Могена принята Международным Союзом кристаллографов.

Таблица 3.1

10 точечных элементов симметрии кристаллов

Год преобразования	Элемент симметрии	Преобразования симметрии	Обозначение элемента симметрии: в тексте по Бравэ (учебные символы)	в тексте по Герману-Могену (международные символы)	на стереограмме
	Поворотная ось симметрии:	Поворот на углы, кратные $360^\circ/n$	L_n	n	
I	I-го порядка	360°	L_1	I	
	2-го порядка	180°	L_2	2	⬭
	3-го порядка	120°	L_3	3	△
	4-го порядка	90°	L_4	4	□
	6-го порядка	60°	L_6	6	⬡
	Инверсионная ось симметрии:	Поворот на углы, кратные $360^\circ/n$, и инверсия в точке	L_{in}	$\bar{n}$	
II	первого порядка ≡ центр симметрии	(360° и инверсия в точке) ≡ инверсия в точке	$(L_{i1})\equiv C$	$\bar{1}(\equiv C)$	∘
	второго порядка ≡ плоскость симметрии	(180° и инверсия в точке) ≡ отражение в плоскости	$(L_{i2})\equiv m_\perp$	$\bar{2}(\equiv m_\perp)$	‖
	третьего порядка	120° и инверсия в точке	L_{i3}	$\bar{3}(\equiv 3+\bar{1})$	⊿
	четвертого порядка	90° и инверсия в точке	L_{i4}	$\bar{4}$	⊠
	шестого порядка	60° и инверсия в точке	L_{i6}	$\bar{6}(\equiv 3+m_\perp)$	⬡

3.9. I6 типов точечных преобразований симметрии

Систематизируем точечные преобразования симметрии кристаллов. Поворот на 360^0 описывает состояние покоя. Его называют преобразованием идентичности и обозначают единицей $\underline{I}$ (различные, не повторяющиеся типы преобразований будем подчеркивать). Симметрией I обладает любое направление любой фигуры, поэтому указание симметрии I носит формальный характер. Центру симметрии $\bar{I}$ соответствуют преобразования однократной $\bar{I}^I$ и двукратной $\bar{I}^2 \equiv I$ инверсии, для которых приняты обозначения $\underline{\bar{I}}$ и I. Аналогично плоскости симметрии m соответствуют преобразования $\underline{m}^1$ и I; поворотной оси второго порядка 2 - $\underline{2}^I$ и I; оси 3 - $\underline{3}^I$, $\underline{3}^2$ и $3^3 \equiv I$; оси 4 - $\underline{4}^I$, $4^2 \equiv 2^I$, $\underline{4}^3$ и $4^4 \equiv I$; оси 6 - $\underline{6}^I$, $6^2 \equiv 3^I$, $6^3 \equiv 2^I$, $6^4 \equiv 3^2$, $\underline{6}^5$ и $6^6 \equiv I$ (см. рис. 3.5).

Инверсионная ось симметрии первого порядка $\bar{I}$ тождественна центру симметрии, а инверсионная ось второго порядка $\bar{2}$ - плоскости симметрии. Инверсионной оси третьего порядка $\bar{3}$ (см. рис. 3.5) соответствуют преобразования $\underline{\bar{3}}^I$, $\bar{3}^2 \equiv 3^2$, $\bar{3}^3 \equiv \bar{I}$, $\bar{3}^4 \equiv 3^I$, $\underline{\bar{3}}^5$, $\bar{3}^6 \equiv I$; оси $\bar{4}$ - преобразования $\underline{\bar{4}}^I$, $\bar{4}^2 \equiv 2^I$, $\underline{\bar{4}}^3$, $\bar{4}^4 \equiv I$; оси $\bar{6}$ - $\underline{\bar{6}}^I$, $\bar{6}^2 \equiv 3^I$, $\bar{6}^3 \equiv \bar{2}^I$, $\bar{6}^4 \equiv 3^2$, $\underline{\bar{6}}^5$, $\bar{6}^6 \equiv I$.

Таким образом, существуют I6 точечных разноименных преобразований симметрии кристаллов (табл. 3.2). 8 из них являются преобразованиями I-го рода, т.е. движениями; и 8 - преобразованиями II-го рода - инверсиями. Положительными поворотами принято считать повороты фигуры относительно неподвижной системы координат по ходу часовой стрелки или повороты системы координат относительно неподвижной фигуры против часовой стрелки.

Полное многообразие точечных преобразований симметрии кристаллов, учитывающее различие ориентировки элементов симметрии, дано во второй части пособия.

В табл. 3.2 приведены системы обозначений преобразований. Первые две системы являются производными от международной системы обозначений элементов симметрии. Символы первой системы

Таблица 3.2

I6 типов точечных преобразований симметрии кристаллов

Род превращения	Преобразование симметрии	Варианты обозначения I	2	3
I	Поворот вокруг прямой линии на угол $\alpha = 360^0/n$:			
	По ходу часовой стрелки	n^1	n^1	C_n^+
	против хода часовой стрелки	n^{-1}	n^{n-1}	C_n^-
	360^0 (преобразование идентичности)	1	1	E
	180^0	2^1	2^1	C_2
	120^0 по ч.с.	3^1	3^1	C_3^+
	120^0 против ч.с.	3^{-1}	3^2	C_3^-
	90^0 по ч.с.	4^1	4^1	C_4^+
	90^0 против ч.с.	4^{-1}	4^3	C_4^-
	60^0 по ч.с.	6^1	6^1	C_6^+
	60^0 против ч.с.	6^{-1}	6^5	C_6^-
II	Поворот вокруг прямой линии на угол $\alpha = 360^0/n$:			
	по ч.с. и инверсия в точке	$\bar{n}^1$	$\bar{n}^1$	S_n^+
	против ч.с. и инверсия в точке	$\bar{n}^{-1}$	$\bar{n}^{(n-1)}$	S_n^-
	(360^0 и инверсия в точке) ≡ инверсия в точке	$\bar{I}$	$\bar{I}$	I
	(180^0 и инверсия в точке) ≡ отражение в плоскости	m	m	σ
	120^0 по ч.с. и инверсия в точке	$\bar{3}^1$	$\bar{3}^1$	S_3^+
	120^0 против ч.с. и инверсия в точке	$\bar{3}^{-1}$	$\bar{3}^2$	S_3^-
	90^0 по ч.с. и инверсия в точке	$\bar{4}^1$	$\bar{4}^1$	S_4^+
	90^0 против ч.с. и инверсия в точке	$\bar{4}^{-1}$	$\bar{4}^3$	S_4^-
	60^0 по ч.с. и инверсия в точке	$\bar{6}^1$	$\bar{6}^1$	S_6^+
	60^0 против ч.с. и инверсия в точке	$\bar{6}^{-1}$	$\bar{6}^5$	S_6^-

3^{I} и $\bar{3}^{I}$ и др. естественнее отражают взаимную обратность преобразований, нежели символы 3^{I} и 3^{2} второй системы. К недостаткам первой системы можно отнести неудобства написания и прочтения черточек и минусов, например, $\bar{3}$, $\bar{3}^{I}$ и $\bar{3}^{-I}$. Третья система [I2] далека от международной символики, принятой для элементов симметрии.

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

По кристаллографии

I. АНШЕЛЕС О.М. Начала кристаллографии. Л., I952. 276 с.
2. ВАЙНШТЕЙН Б.К. Современная кристаллография, т. I. М., I979. 384 с.
3. ВАСИЛЬЕВ Д.М. Физическая кристаллография. М., I972. 280 с.
4. ВУСТЕР У. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов. М., I977. 384 с.
5. ГАЛИУЛИН Р.В. Матрично-векторный способ вывода федоровских групп. № I094-69. Деп. ВИНИТИ, I969.
6. ЗАГАЛЬСКАЯ Ю.Г., ЛИТВИНСКАЯ Г.П. Геометрическая кристаллография. М., I973. I64 с.
7. ЗОРКИЙ П.М., АФОНИНА Н.Н. Симметрия молекул и кристаллов. М., I979. I76 с.
8. НАРДОВ В.В. Практическое руководство по геометрической кристаллографии. Л., I974. I44 с.
9. НАЙ Дж. Физические свойства кристаллов. М., I967. 386 с.
I0. ПОПОВ Г.М., ШАФРАНОВСКИЙ И.И. Кристаллография. М., I972. 352 с.
II. ШАСКОЛЬСКАЯ М.П. Кристаллография. М., I976, 39I с.
I2. Bradley C.J. and Chacknell A.P. The mathematical theory of symmetry in Solids - Clarendon press. Oxford, 1972, 745 p.
I3. International Tables for X-ray crystallography. Vol.1.- The Kynoch press. Birmingham, 1959. 558 p.

По матричной алгебре

I4. БЕЛЛМАН Р. Введение в теорию матриц. М., I976. 352 с.
I5. БОРЕВИЧ З.И. Определители и матрицы. М., I970. 200 с.
I6. КОРН Г. и КОРН Т. Справочник по математике. М., I977. 832 с.
I7. КОСТРИКИН А.И. Введение в алгебру. М., I977. 496 с.
I8. КУРОШ А.Г. Курс высшей алгебры. М., I975. 43I с.
I9. ФАДДЕЕВ Д.К., СОМИНСКИЙ И.С. Алгебра для самообразования. М., I966. 528 с.

Сборники задач

20. ЗАГАЛЬСКАЯ Ю.Г., ЛИТВИНСКАЯ Г.П. Геометрическая кристаллография. М., I973. I64 с.
2I. ПРОСКУРЯКОВ И.В. Сборник задач по линейной алгебре. М., I974. 384 с.
22. ФАДДЕЕВ Д.К., СОМИНСКИЙ И.С. Сборник задач по высшей алгебре. М., I972. 303 с.

С О Д Е Р Ж А Н И Е