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 2

Ленинград 1984

Утверждено на заседании кафедры
кристаллографии геологического факультета

Составитель С.К.Филатов

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 2

I. КЛАССИФИКАЦИЯ КРИСТАЛЛОВ ПО СИММЕТРИИ

Кристаллы классифицируют по общности выбираемых в них координатных систем, количеству не повторяющихся направлений, общности симметрии. Каждый из этих признаков является проявлением симметрии кристалла.

I.I. Единичные и симметрично-равные прямые и направления

Векторные свойства кристалла характеризуются определенными направлениями. По этой причине важнейшее значение приобретает симметрия различных направлений и их взаимосвязь.

По традиции в кристаллографической литературе нередко под направлениями подразумевают прямые линии, хотя прямой линии соответствуют два направления. Следуя В.В.Нардову [I2], будем различать эти понятия.

Прямые (или направления) в кристалле, которые можно взаимно совместить преобразованиями симметрии данного кристалла, называются с и м м е т р и ч н о - р а в н ы м и . Очевидно, что свойства кристалла вдоль симметрично-равных направлений одинаковы. Прямые (или направления) в кристалле, которые нельзя размножить всеми преобразованиями симметрии данного кристалла, называются е д и н и ч н ы м и .

В силу однородности кристаллов их свойства по параллельным направлениям одинаковы. Поэтому любое направление можно провести через центр многогранника, где пересекаются все точечные элементы симметрии. При этом центр симметрии сохраняет любую прямую линию единичной. Плоскость симметрии сохраняет единичными прямые, лежащие в самой плоскости и перпендикулярно к ней. Оси симметрии выше первого порядка (поворотные и инверсионные) сохраняют единичной

саму ось, а ось второго порядка – еще и перпендикулярные к ней прямые.

Таким образом, в кристалле, обладающем симметрией не выше оси первого порядка (поворотной или инверсионной), все прямые являются единичными. В кристалле более высокой симметрии единичной может быть лишь прямая, совпадающая с единственной осью симметрии высшего порядка, а если эта ось является двойной осью – то и нормальные к ней прямые.

I.2. Умножение преобразований симметрии

Кристаллический многогранник может обладать набором точечных преобразований симметрии. Их совместное действие заключается в последовательном преобразовании кристалла. Эквивалент совместного действия преобразований можно найти умножением соответствующих им матриц. Два преобразования симметрии, описываемые матрицами A и B, порождают третье им равнодействующее преобразование, описываемое матрицей C = BA.

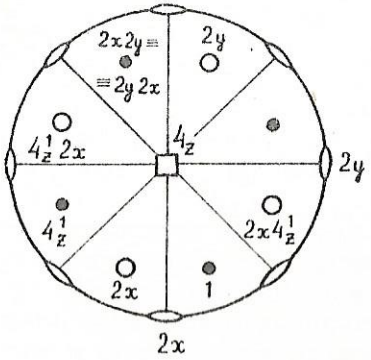


Рис. I.I .

В общем случае небезразлично, какое преобразование выполняется первым BA ≠ AB, т.е. преобразования не коммутируют между собой. Запись произведения BA читается справа налево: сначала выполняется преобразование, описываемое матрицей A, затем B.

На стереограмме (рис. I.I) приведены примеры коммутирующих $2y^1 \cdot 2x^1 = 2x^1 \cdot 2y^1$ и некоммутирующих $2x^1 \cdot 4z^1 \neq 4z^1 \cdot 2x^1$ преобразований симметрии. Каждое из преобразований $2x^1$ и $2y^1$ не меняет положения элемента симметрии другого преобразования, в то время как преобразование $4z^1$ изменяет положение оси $2x$ – переводит ее в ось $2y$, что и является причиной некоммутативности преобразований $4z^1$ и $2x^1$. Это составляет содержание следующего п р и з н а к а к о м м у т а т и в н о с т и п р е о б р а з о в а н и й : если два преобразования не размножают (сохраняют инвариантными или переводят в себя) инвариантные подпространства друг друга, то они коммутируют между собой; если хотя бы одно преобразование размножает инвариантное подпространство другого преобразования, то эти преобразования не коммутируют между собой.

При анализе возможных в кристаллических многогранниках комбинаций преобразований симметрии – точечных групп симметрии кристаллов – полезно знать закономерности взаимодействия преобразований (понятие группы дано в п. 3.I). Такие закономерности даются теоремами об у м н о ж е н и и п р е о б р а з о в а н и й с и м м е т р и и или, согласно традиционной терминологии, теоремами о с л о ж е н и и э л е м е н т о в с и м м е т р и и. Ниже приводятся некоторые такие теоремы. Поскольку модельные доказательства теорем неоднократно приводились в кристаллографической литературе [I4, I, I2 и др.], то ограничимся доказательством некоторых теорем с использованием матричного аппарата. Иллюстрации к теоремам можно найти среди стереограмм, приведенных на рис. 3.5 части I.

Все теоремы о сложении точечных элементов симметрии являются частными случаями теоремы Эйлера.

Теорема I.I (Эйлер). Поворот вокруг двух пересекающихся осей эквивалентен повороту вокруг третьей, равнодействующей им оси.

Доказательство теоремы приводится в работах [I, с. 83; 5, с. 5I и др].

Теорема Эйлера справедлива для поворотных и инверсионных осей симметрии, которыми исчерпываются точечные элементы симметрии. Поэтому из этой теоремы получается, в частности, следующая теорема.

Теорема I.Iа. Два точечные преобразования симметрии порождают третье им равнодействующее преобразование симметрии.

Оси симметрии у Эйлера имеют произвольный угол поворота. В кристаллографической практике важным является вариант этой теоремы для осей второго порядка, приведенный и доказанный в монографии Ю.Г.Загальской и Г.П.Литвинской [8].

Теорема I.2. Взаимодействие двух осей симметрии 2-го порядка, поворотных или инверсионных, приводит к возникновению проходящей через точку их пересечения третьей оси симметрии с элементарным углом поворота, вдвое превышающим угол между исходными осями. Результирующая ось окажется поворотной, если исходными будут две одинаковые оси (обе поворотные или обе инверсионные), и инверсионной, если оси будут разными.

Ниже приведены некоторые частные случаи этой теоремы в виде, удобном для вывода групп симметрии.

Теорема I.3. Точка пересечения поворотной оси симметрии четного порядка и перпендикулярной к ней плоскости симметрии является центром симметрии.

Возьмем поворотную ось симметрии произвольного четного порядка n и перпендикулярную к ней плоскость симметрии m. От точки их пересечения отложим векторы ортогонального базиса: $\vec{c}$ - вдоль оси симметрии, $\vec{a}$ и $\vec{b}$ - в плоскости симметрии. Обозначим ось n_z, плоскость m_z. Ось n_z, как ось четного порядка, обладает, в частности, преобразованием симметрии 2^1_z. Оно выразится матрицей

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

Матрица плоскости симметрии имеет вид

$$m_z = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix}.$$

Тогда их произведение

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

Результирующая матрица описывает преобразование выбранного базиса центром симметрии, расположенным в начале координат, что и требовалось доказать.

Неверно было бы говорить о тождественности совместного действия оси четного порядка и перпендикулярной к ней плоскости симметрии действию центра симметрии. В частности, оси 4_z соответствуют преобразования симметрии 4^1_z, $4^2_z \equiv 2^1_z$, 4^3_z и $4^4_z \equiv I$, которые при взаимодействии с преобразованием m_z порождают четыре производные преобразования $\bar{4}^{-1}_z$, $\bar{I}$, $\bar{4}^1_z$ и m_z, а не только центр симметрии.

Доказанную взаимосвязь преобразований симметрии $2^1 \cdot m_\perp \equiv \bar{I}$ можно записать еще двумя способами: $m \cdot \bar{I} \equiv 2^1_\perp$ и $2^1 \cdot \bar{I} \equiv m_\perp$. Эти записи составляют содержание следующих следствий теоремы I.3.

Следствие I. Плоскость симметрии и лежащий на ней центр симметрии порождают поворотную ось симметрии второго порядка, проходящую перпендикулярно плоскости через центр.

Следствие 2. Поворотная ось симметрии четного порядка и лежащий на ней центр симметрии порождают плоскость симметрии, проходящую перпендикулярно оси через центр.

Теорема I.4. Если поворотную ось симметрии n порядка n пересекает перпендикулярная к ней поворотная ось симметрии 2 второго порядка, то через точку их пересечения проходят n осей 2, расположенных перпендикулярно оси n под углом $360^0/2n$ друг к другу.

Возьмем поворотную ось симметрии четвертого порядка 4 и перпендикулярную к ней поворотную ось симметрии второго порядка 2. Из точки их пересечения отложим векторы правого ортогонального базиса: $\vec{c}$ - вдоль оси 4, $\vec{a}$ - вдоль оси 2. Обозначим оси 4_z и 2_x. Произведения преобразования 2^1_x на четыре преобразования симметрии оси 4_z (см. часть I, рис. 3.5, 3.6, выражения 3.6 и т.п.)

$$4^I_z \cdot 2^I_x = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -I & 0 \\ -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = 2^I_{z''},$$

$$4^2_z \cdot 2^I_x = 2^I_z \cdot 2^I_x = \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = 2^I_y, \qquad (I.I)$$

$$4^3_z \cdot 2^I_x = \begin{pmatrix} 0 & -I & 0 \\ I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = 2^I_{z'},$$

$$4^4_z \cdot 2^I_x \equiv I \cdot 2^I_x = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = 2^I_x$$

соответствуют четырем осям (поворотным) второго порядка 2, проходящим через начало координат перпендикулярно оси 4_z под углом $360/2 \cdot 4 = 45^0$ друг к другу. Это доказывает утверждение теоремы для оси 4_z, а в силу общности выбора ее ориентировки - и вообще для осей 4.

Теорема доказана также для осей 2, поскольку любая ось 4 обладает преобразованиями симметрии и оси 2 (2^I и $2^2 \equiv I$), которым в (I.I) соответствуют две оси второго порядка, расположенные перпендикулярно оси 2 под углом 90^0 друг к другу. Доказательством теоремы для поворотной оси первого порядка I служит то, что умножение преобразования I на 2^I порождает единственную ось 2 (I.I).

Доказательство для поворотных осей шестого (и третьего) порядков проводится аналогично и будет дано в п. 2.3 после введения

кристаллографической системы координат, в которой доказательство проводится наиболее просто.

Этим исчерпываются возможные в кристаллах поворотные оси симметрии.

Теорема I.5. Если через поворотную ось симметрии порядка n проходит параллельная ей плоскость симметрии m, то через эту ось проходит n таких плоскостей под углом $360^0/2n$ друг к другу.

Возьмем поворотную ось симметрии четвертого порядка 4 и параллельную ей плоскость симметрии m. Выберем правый ортогональный базис: вектор $\vec{c}$ - вдоль оси 4, $\vec{a}$ - перпендикулярно m. Обозначим ось 4_z, плоскость m_x. Произведения преобразования m_x на четыре преобразования симметрии оси 4_z

$$4_z^1 \cdot m_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_{z''},$$

$$4_z^2 \cdot m_x \equiv 2_z^1 \cdot m_x = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_y,$$

$$4_z^3 \cdot m_x = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_{z'},$$

$$4_z^4 \cdot m_x = 1 \cdot m_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_x$$

соответствуют четырем плоскостям симметрии m, проходящим через ось 4 под углом 45^0 друг к другу. Как и в предыдущей теореме, это служит доказательством для осей 4, 2 и I, что с учетом оговорок, сделанных относительно осей 6 и 3, позволяет считать теорему доказанной для кристаллов.

Аналогичным образом доказываются следующие утверждения.

Теорема I.6. Если инверсионную ось симметрии $\bar{n}$ порядка n (элемент симметрии порядка N) в ее особой точке пересекает перпендикулярная к ней поворотная ось симметрии второго порядка 2, то таких осей 2 будет $N/2$ под углом $360^0/N$ друг к другу, а под углом $360^0/2N$ к каждой из осей 2 пройдет $N/2$ плоскостей симметрии, параллельных оси $\bar{n}$.

Взаимосвязь элементов симметрии, описываемая этой теоремой, может быть записана также следующим образом.

Теорема I.7. Если параллельно инверсионной оси симметрии $\bar{n}$ порядка n (элементу симметрии порядка N) проходит плоскость симметрии, то таких плоскостей будет $N/2$ под углом $360^0/N$ друг к другу, а под углом $360^0/2N$ к каждой плоскости перпендикулярно оси $\bar{n}$ через ее особую точку пройдет $N/2$ поворотных осей второго порядка 2.

Задание. Решить задачи № 507-514 из [3].

I.3. Категории и сингонии

По принципу общности координатных систем решетки и кристаллы делятся на категории и сингонии. Любая решетка наиболее просто описывается в собственной системе координат. Оси такой системы (направления ребер элементарной ячейки) выбираются параллельно рядам узлов решетки, а единицы измерения вдоль них (длины ребер) принимаются равными расстояниям между ближайшими узлами ряда.

В каждой решетке существует множество узловых рядов. Условились направлять координатные оси вдоль рядов, являющихся осями симметрии (поворотными или инверсионными), и лишь в случае их отсутствия - вдоль рядов с наименьшими расстояниями между точками.

Системы координат, выбранные в соответствии с этими условиями, будем называть кристаллографическими системами, а соответствующие им элементарные ячейки - ячейками (параллелепипедами) Бравэ.

Трем возможным соотношениям между линейными параметрами элементарной ячейки $a \neq b \neq c \neq a$ *), $a = b \neq c$ *) и $a = b = c$ отвечают низшая, средняя и высшая категории соответственно (табл. I.I). Допустимые в каждой категории соотношения между угловыми параметрами α, β и γ кладутся в основу разделения решеток на сингонии **) [8 и др.] (табл. I.2). В низшей категории выделяются триклинная $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha$ *), моноклинная $\alpha = \beta = 90^0 \neq \gamma$ *) или в иной установке $\alpha = \gamma = 90^0 \neq \beta$ *) и ромбическая $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$ сингонии; в средней

*) Знак "$\neq$" допускает здесь равенство параметров в частных случаях, но это равенство не фиксировано симметрией. Подобных оговорок не требуют условия Р.В.Галиулина для категорий (a, в, c произвольные - низшая, a = в - средняя, a=в=c - высшая) и сингоний (в низшей категории α, β, γ произвольные - триклинная, $\alpha = \beta = 90^0$ или $\alpha = \gamma = 90^0$ - моноклинная, $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$ - ромбическая и т.п.).

**) Сингония означает соугольность.

Таблица I.I

Характеристика категорий кристаллов

Категория	Характерные соотношения параметров элементарной ячейки	Характерная симметрия	Количество единичных направлений
Низшая	$a \neq b \neq c \neq a$ [x)]	Оси симметрии (поворотные или инверсионные) не выше второго порядка	Больше одного
Средняя	$a = b \neq c$ [x)]	Одна ось симметрии (поворотная или инверсионная) выше второго порядка	Одно
Высшая	$a = b = c$	Четыре тройных оси, каждая под углом $54^{\circ}44'$ к кристаллографическим осям	Нет

категории - тетрагональная $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$ и гексагональная $\alpha = \beta = 90^{\circ}$, $\gamma = 120^{\circ}$ сингонии; в высшей категории единственная возможность $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$ отвечает кубической сингонии. Кристаллографические системы координат изображены на рис. I.2 и описаны ниже.

Эта классификация приводит к трем категориям и шести сингониям. Кроме того в средней категории выделяют по симметрии седьмую сингонию, которую в разное время называли ромбоэдрической или тригональной.

В табл. I.I и I.2 дана характеристика категорий и сингоний. Приведены отношения между линейными и угловыми параметрами ячейки, характерная симметрия, количество и ориентировка единичных направлений. Для каждой сингонии указана г о л о э д р и я - полная совокупность точечных преобразований симметрии решетки.

Кристаллы низшей категории имеют оси симметрии не выше второго порядка и более одного единичного направления; кристаллы сред-

x) Смотри первую сноску на с. 7.

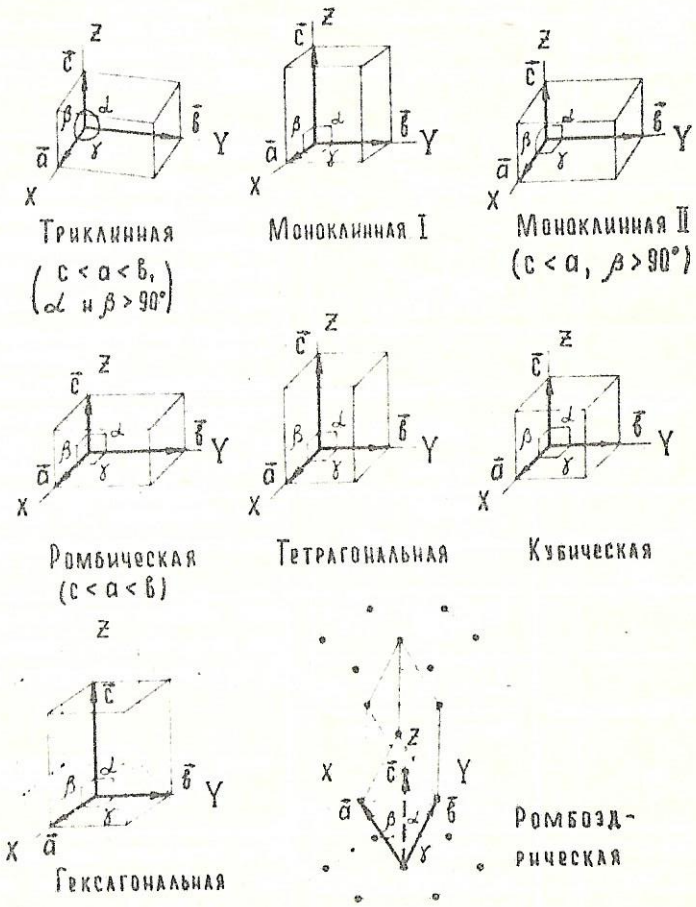


Рис. I.2

Характеристика сингоний

Категория	Сингония	Соотношения параметров элементарной ячейки	Характерная симметрия
Низшая	Триклинная	$a \neq b \neq c \neq a$ *) $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha$ *)	Только оси симметрии первого порядка (идентичности и инверсии)
	Моноклинная	I установка $a \neq b \neq c \neq a$ *) $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$ *) II установка $a \neq b \neq c \neq a$ *) $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ *)	Двойная ось (поворотная или инверсионная) в одном направлении, вдоль которого выбирается ось Z в I установке и ось Y во второй
	Ромбическая	$a \neq b \neq c \neq a$ *) $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Двойные оси (поворотные или инверсионные) в трех взаимно перпендикулярных направлениях, выбираемых за координатные оси
Средняя	Тетрагональная	$a = b \neq c$ *) $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Одна четверная ось (поворотная или инверсионная) вдоль оси Z
	Тригональная	Ромбоэдрические оси $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$ Гексагональные оси $a = b \neq c$ *) $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Одна тройная ось (поворотная или инверсионная) вдоль оси [111] в ромбоэдрических осях вдоль оси Z в гексагональных осях
	Гексагональная	$a = b \neq c$ *) $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Одна шестерная ось (поворотная или инверсионная) вдоль оси Z
Высшая	Кубическая	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Четыре тройных оси, каждая под углом $54^\circ 44'$ к координатным осям

*) Смотри первую сноску на с. 7.

Таблица I.2

(систем) кристаллов

Количество и положение единичных направлений	Точечные группы	Голоэдрия решетки
Все	I, $\bar{I}$	$\bar{I}$
Множество, но не все. Одно совпадает с двойной осью (поворотной и инверсионной) и все в плоскости, перпендикулярной оси	2, m, 2/m	2/m
Три. Совпадают с двойными осями (поворотными или инверсионными)	222 mm2 mmm	mmm
Одно. Совпадает с главной осью	4, $\bar{4}$, 4/m 422, 4mm, $\bar{4}$2m, 4/mmm	4/mmm
	3, $\bar{3}$, 32, 3m, $\bar{3}$m	$\bar{3}$m
	6, $\bar{6}$, 6/m, 622 6mm, $\bar{6}$m2, 6/mmm	6/mmm
Нет	23, m3, $\bar{4}$3m, 432, m3m	m3m

ней категории – одну ось симметрии выше второго порядка вдоль единственного единичного направления; кристаллы высшей категории имеют более одной оси симметрии выше второго порядка и не имеют единичных направлений.

В кристаллах триклинной сингонии угловые параметры являются произвольными и неравными друг другу, а все направления – единичными (рис. I.2). Условно приняли следующие правила выбора параметров ячейки триклинных кристаллов: $c < a < b$, α и $\beta > 90^0$ [I3, 2I].

Не оправданы попытки выделить "диклинную" сингонию ($\alpha = 90^0 \neq \beta \neq \gamma \neq 90^0$), имеющую два острых угла между координатными осями и один прямой. Такая координатная система может возникнуть как частный случай триклинной системы, но она не фиксирована симметрией. Поэтому диклинная сингония не существует.

В кристаллах моноклинной сингонии два угла между координатными осями обязательно являются прямыми. Присутствует поворотная или инверсионная ось второго порядка вдоль одного направления. Единичных направлений множество, но не все: направление оси симметрии и все нормали к ней. Ранее вдоль единственной двойной оси (поворотной или инверсионной) выбирали координатную ось Y (вторая установка). Это не согласуется с условием, по которому в других сингониях (ромбической, тетрагональной, тригональной, гексагональной) при наличии одной оси симметрии высшего порядка вдоль нее выбирается ось Z. Соответствующая установка моноклинных кристаллов предложена М.Бургером и названа им первой установкой [I9]. С достоинствами и недостатками каждой из этих двух установок моноклинных кристаллов можно познакомиться по работе В.Б.Татарского [I5]. Для второй установки принято выбирать $c < a$, $\beta > 90^0$ [I3, 2I].

В кристаллах ромбической сингонии все углы между координатными осями прямые. Присутствуют три оси второго порядка (поворотные или инверсионные) вдоль трех единичных направлений. В группе $mm2$ вдоль единственной поворотной оси выбирают ось Z. Условились выбирать $c < a < b$ [I3, 2I].

В сингониях средней категории с единственным единичным направлением совпадает главное направление кристалла – единственная ось симметрии выше второго порядка (поворотная или инверсионная): в тригональной сингонии – ось третьего порядка, в тетрагональной – четвертого, в гексагональной – шестого.

Целесообразность выделения седьмой сингонии (тригональной

или ромбоэдрической) несколько раз ставилась под сомнение [20]. Первоначально на основании морфологических исследований все кристаллы были отнесены к семи сингониям, среди которых была и ромбоэдрическая. Смущало то обстоятельство, что вдоль ромбоэдрических осей нет осей симметрии, хотя в кристалле они присутствуют, т.е. ромбоэдрическая система не является условной. С внедрением теории решеток стало ясно, что кристаллы, имеющие ромбоэдрическую решетку, могут быть с одинаковым успехом описаны как в ромбоэдрических, так и в гексагональных осях (рис. I.2). Поскольку гексагональные оси являются условными, то казалось логичным отнести ромбоэдрические кристаллы к гексагональной сингонии, устраняя тем самым седьмую сингонию. Позже развитие теории пространственных групп и затем рентгеновских методов исследования кристаллической структуры показало, что существуют сложности в случае кристаллов, обладающих одной осью третьего порядка без плоскости симметрии, ей перпендикулярной (пять точечных групп 3, $\bar{3}$, 32, $3m$, $\bar{3}m$, см. п. I.4). 230 пространственных групп получаются сложением 32 точечных групп с возможными в решетках трансляциями [3]. Оказалось, что каждый кристалл, принадлежащий к одной из пяти упомянутых точечных групп, может иметь пространственную группу, основанную либо на гексагональной, либо на ромбоэдрической решетке. Это служит основанием использования по выбору гексагональных или ромбоэдрических осей для кристаллов, принадлежащих к указанным пяти группам. Следовательно, нет возможности осуществить вполне удовлетворительную группировку точечных групп по сингониям. Пять упомянутых групп могут быть сгруппированы как тригональная сингония или как подраздел гексагональной сингонии. Некорректно называть их ромбоэдрическими, поскольку не может быть осей симметрии вдоль ребер ромбоэдра.

Задание. Показать невозможность в кристаллах диклинной сингонии и необоснованность выделения ромбоэдрической сингонии.

I.4. 32 точечные группы симметрии

Точечной группой (видом симметрии) кристалла называется его полная совокупность точечных преобразований симметрии. Напомним, что каждое точечное преобразование оставляет неподвижной хотя бы одну точку преобразуемого пространства.

Все точечные кристаллографические группы можно вывести, комбинируя возможные в кристаллах точечные преобразования симметрии (см. часть I, табл. 3.2). Но поскольку преобразования симметрии встречаются наборами, соответствующими элементам симметрии, то при выводе групп рационально комбинировать элементы симметрии(см. часть I, табл. 3.I). Вывод рассмотрим независимо для кристаллов с единичными направлениями и без них.

В кристаллах, имеющих хотя бы одно единичное направление, возможны следующие элементы симметрии, не нарушающие единичности направления: поворотные и инверсионные оси симметрии любого порядка вдоль единичного направления, а также оси второго порядка перпендикулярно к нему, центр симметрии, плоскость симметрии параллельно и перпендикулярно единичному направлению и их комбинация [20]. В табл. I.3 перебираются эти варианты. Символом n обозначена ось симметрии, обладающая элементарным углом поворота $360^0/n$, в скобках даны ссылки на теоремы, позволяющие найти полную совокупность элементов симметрии. На практике для обозначения точечных групп приняты сокращенные (международные) обозначения, подобные следующим:

Поворотная ось n.

Инверсионная ось $\bar{n}$.

Поворотная ось с зеркальной плоскостью, нормальной к ней n/m (см. теорему I.3).

Поворотная ось с двойной осью, нормальной к ней $n2$ (см. теорему I.4).

Поворотная ось с зеркальной плоскостью (плоскостями), параллельной ей nm (см. теорему I.5).

Инверсионная ось с двойной осью (осями), нормальной к ней $\bar{n}2$ (см. теорему I.6).

Инверсионная ось с зеркальной плоскостью (плоскостями), параллельной ей $\bar{n}m$ (см. теорему I.7).

Поворотная ось с зеркальной плоскостью, нормальной к ней, и зеркальными плоскостями, параллельными ей n/mm (см. теоремы I.3 и I.5).

Получается 27 точечных групп кристаллов с единичными направлениями (табл. I.3).

В кристаллах без единичных направлений любая ось симметрии представлена неоднократно. Показано, что в таких кристаллах возможны сочетания осей симметрии правильных многогранников [I]:

тетраэдра $3L_2 4L_3$

куба и октаэдра $3L_4 4L_3 6L_2$ (I.2)

Координатные оси удобно совместить с тремя взаимно перпендикулярными осями: $3L_2$ в тетраэдре и $3L_4$ в кубе и октаэдре.

Принимаем минимальный набор осей $3L_2 4L_3$ за исходный и добавляем к нему элементы симметрии, не нарушающие условия (I.2). центр симметрии, координатные плоскости симметрии, диагональные плоскости симметрии, диагональные оси второго порядка и их комбинации (табл. I.3). Получаем еще 5 групп.

Выведенные 32 группы исчерпывают все возможные точечные группы симметрии кристаллов. В табл. I.3 для каждой группы изображена стереографическая проекция элементов симметрии в обозначениях, введенных в табл. 3.I части I. Пунктиром на стереограммах проведены вспомогательные линии, не являющиеся проекцией элементов симметрии. Указаны также полные наборы элементов симметрии групп в учебных символах Бравэ (слева) и сокращенные (международные) символы Германа-Могена (справа) (см. часть I, табл. 3.I).

В сокращенных обозначениях сохраняются элементы симметрии, достаточные для вывода всех элементов с помощью теорем о сложении I.3 - I.7. На первом месте пишется ось симметрии высшего порядка, например 32. Исключение составляют кубические группы 23, $m3$, в которых ось высшего порядка 3 помещается на второе место, что позволяет отличать эти группы от тригональных групп 32 и $3m$. Если оказывается достаточным записать плоскость симметрии или перпендикулярную к ней ось четного порядка, то предпочтение отдается плоскости, например, $6/mmm$, $m3m$. Для ряда групп принята неминимальная (избыточная) запись, например, 222, $6mm$ (достаточно было бы 22, $6m$) с тем, чтобы подчеркнуть независимость двух последних в записи элементов симметрии, которые не связаны друг с другом симметрией, т.е. являются одинаковыми (одноименными), но неравными. При переходе к пространственным группам эти элементы могут оказаться также и неодинаковыми [3, 20].

<u>Задание</u>. Используя теоремы о сложении элементов симметрии I.3 - I.7, вывести полные совокупности элементов симметрии из сокращенных обозначений всех точечных групп (см. табл. I.3), а также получить сокращенные обозначения из полных совокупностей элементов симметрии групп.

32 точечные группы

Категория	Сингония		n	$\bar{n}$	$\frac{n}{m}$
Низшая	Триклинная, моноклинная	Триклинная	L_1 1	$Li_1 \equiv C$ $\bar{1}$	
	Моноклинная, ромбическая	Моноклинная (II установка)	L_2 2	$Li_2 \equiv m$ m	L_2mC $\frac{2}{m}$
Средняя	Тетрагональная		L_4 4	Li_4 $\bar{4}$	L_4mC $\frac{4}{m}$
	Тригональная		L_3 3	$Li_3 \equiv L_3+C$ $\bar{3}$	
	Гексагональная		L_6 6	$Li_6 \equiv L_3+m_1$ $\bar{6}$	L_6mC $\frac{6}{m}$
Высшая	Кубическая		$4L_33L_2$ 23		$4L_33L_23mC$ $m3$

Таблица I.3

симметрии кристаллов

	$n2$	nm	$\bar{n}m$	$\frac{n}{m}m$
Моноклинная (II установка)	L_2 2	m m	L_2mC $\frac{2}{m}$	
Ромбическая	$3L_2$ 222	L_22m $mm2$		$3L_23mC$ mmm
	L_44L_2 422	L_44m $4mm$	Li_42L_22m $\bar{4}2m$	L_44L_25mC $\frac{4}{m}mm$
	L_33L_2 32	L_33m $3m$	Li_33L_23m $\bar{3}m$	
	L_66L_2 622	L_66m $6mm$	Li_63L_23m $\bar{6}m2$	L_66L_27mC $\frac{6}{m}mm$
	$4L_33L_46L_2$ 432		$4L_33Li_46m$ $\bar{4}3m$	$4L_33L_46L_29mC$ $m3m$

I.5. I4 решеток Бравэ

Бравэ показал, что во всякой решетке, кроме гексагональной, можно выбрать такую элементарную ячейку - ячейку Бравэ - точечная группа симметрии которой равна голоэдрии решетки. В гексагональной решетке голоэдрии соответствует точечная группа гексагональной призмы, и ячейка Бравэ строится на ребрах гексагональной призмы, исходящих из одной вершины.

В г. I.3 приведены условия выбора ячеек Бравэ, но оставлен без внимания вопрос о их центрированности. Ячейки Бравэ могут быть как примитивными, так и различным образом центрированными. В случае центрированных ячеек Бравэ центрированными тем же образом называют и решетки, в которых ячейки выбраны. Отметим, что в центрированных решетках можно выбрать примитивную ячейку, причем множеством образов, но симметрия каждой примитивной ячейки будет ниже симметрии решетки.

По центрированности выделяют следующие типы решеток Бравэ: P - примитивная - точки только в вершинах ячейки Бравэ, I - объемноцентрированная - точки в вершинах и центре ячейки; A, B и C - базоцентрированные - точки в вершинах ячейки и центрах пары противоположных граней ячейки (A - грани bc, B - грани ac, C - грани ab), F - гранецентрированная - точки в вершинах ячейки и центрах всех граней ячейки, R - примитивная ромбоэдрическая.

Существует всего I4 кристаллических решеток - решеток Бравэ, которые различаются координатными системами (сингониями) (см. рис. I.2) или центрированностью. Они распределены по сингониям следующим образом: триклинная P, моноклинная P и C (или A, B в иных установках), ромбическая P, C, I и F, тетрагональная P и I, тригональная R, гексагональная P (ранее она называлась базоцентрированной C [20]) и кубическая P, I, F.

Выбор в триклинной сингонии C, I и F ячеек увеличивает объем ячейки в 2, 2 и 4 раза соответственно (см. часть 3, рис. I.I - I.4) без повышения симметрии ячейки, поэтому такой выбор не практикуется и говорят, что C, I и F ячейки сводятся к P ячейке. Аналогично в моноклинной сингонии I ячейка сводится к C ячейке без изменения объема (см. часть 3, рис. I.5), а F - к C с уменьшением объема в 2 раза (см. часть 3, рис. I.6), в обоих случаях симметрия ячейки не изменяется; в тетрагональной сингонии C ячейка сводится

к P ячейке, а F - к I с уменьшением объема в два раза и без изменения симметрии; кубическая C ячейка невозможна в силу симметрии.

Решетки Бравэ или кристаллические решетки являются бесконечными постройками (см. часть I, п. 2.I). Все точки (узлы) решетки могут быть получены из одной точки с помощью некоторого минимального количества трансляций. Каждую трансляцию или их совокупность можно рассматривать как элементы симметрии. С этой точки зрения P решетка представляет собой трансляционный элемент симметрии - совокупность трех независимых трансляций $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, проведенных из начала координат в вершины ячейки Бравэ, в C решетке к ним добавляется четвертая трансляция $\frac{1}{2}(\vec{a}+\vec{b})$, проведенная из начала ячейки в центр грани ab, в I решетке добавляется четвертая трансляция $\frac{1}{2}(\vec{a}+\vec{b}+\vec{c})$, проведенная из начала в центр ячейки, в F-решетке к трем трансляциям примитивной решетки добавляются три трансляции $\frac{1}{2}(\vec{a}+\vec{b})$, $\frac{1}{2}(\vec{a}+\vec{c})$, $\frac{1}{2}(\vec{b}+\vec{c})$, проведенные из начала в центры граней ячейки ab, ac и bc соответственно. В каждой решетке, кроме того, существует множество производных трансляций, например, $\vec{a}+\vec{b}$, $\vec{a}+\vec{c}$, $\vec{b}+\vec{c}$, $\vec{a}+\vec{b}+\vec{c}$ в P ячейке.

В бесконечных периодических постройках - кристаллических структурах - трансляции могут входить в качестве составных частей в сложные элементы симметрии - винтовые оси и плоскости скользящего отражения. Это расширяет набор элементов симметрии и их возможных сочетаний - 32 точечные группы симметрии кристаллов превращаются в 230 пространственных групп. Пространственная (трансляционная) симметрия кристаллов описана в работах [3, 9, 20 и др.].

2. МАТРИЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

Понятие о матричной записи преобразований было дано в части I, п. 3.2, различные примеры разбирались в последующем изложении. Ниже приводится систематическое матричное представление всех точечных преобразований симметрии кристаллов. Матричная запись преобразований многообразна в зависимости от выбора базиса.

2.I. Представление в кристаллографическом базисе

Наиболее просто симметрия кристаллов описывается матрицами в кристаллографическом базисе, построенном на ребрах параллелепипеда Бравэ (см. п. I.3).

Теорема 2.I. Матрицы, соответствующие преобразованиям симметрии решетки, записанным в базисе Бравэ этой решетки, состоят только из 0 и ±I [II].

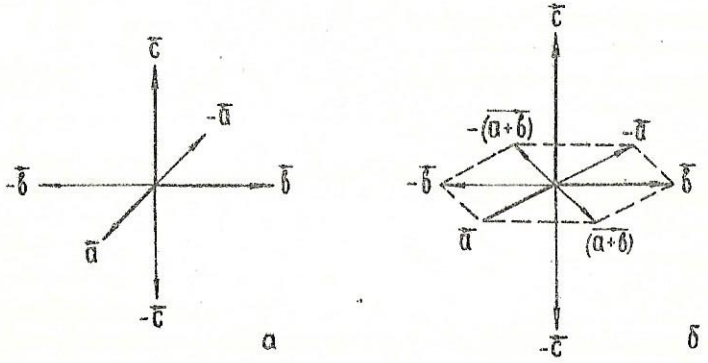
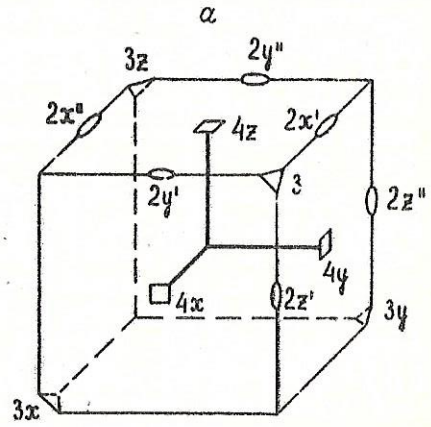


Рис. 2.I

Все кристаллографические группы симметрии представляют собой подгруппы кубической и гексагональной голоэдрий, и, следовательно, теорему достаточно доказать для этих двух голоэдрий.

Совокупность векторов, полученных из векторов базиса Бравэ всеми преобразованиями голоэдрии, назовем з в е з д о ч к о й Б р а в э . На рис. 2.I изображены звездочки Бравэ кубической (а) и гексагональной (б) голоэдрий.

Числа, записанные в строках матрицы преобразования, соответствуют координатам векторов нового базиса в старом (см. часть I, п. I.I4). Если матрица записана в базисе Бравэ, то ее строки – суть координаты векторов звездочки Бравэ. Как видно из рис. 2.I, координатами векторов звездочки Бравэ могут быть лишь 0 и ±I, а значит и матрицы преобразований симметрии, записанные в базисе Бравэ, должны содержать лишь 0 и ±I, что и требовалось доказать.



Система обозначений элементов симметрии кубической голоэдрии приведена на рис. 2.2, а. Оси четвертого порядка ориентированы вдоль координатных осей и обозначены соответственно 4_x, 4_y, 4_z. Одна из осей третьего порядка связывает полуоси X, Y, Z; она обозначена цифрой 3. Ось 3_x связывает полуоси X, -Y, -Z, ось 3_y – -X, Y, -Z, ось 3_z – -X, -Y, Z. Оси симметрии $2_{x'}$ и $2_{x''}$ перпендикулярны координатной оси X; оси $2_{y'}$ и $2_{y''}$ – оси Y; $2_{z'}$ и $2_{z''}$ – оси Z. Плоскость симметрии m_x перпендикулярна направлению

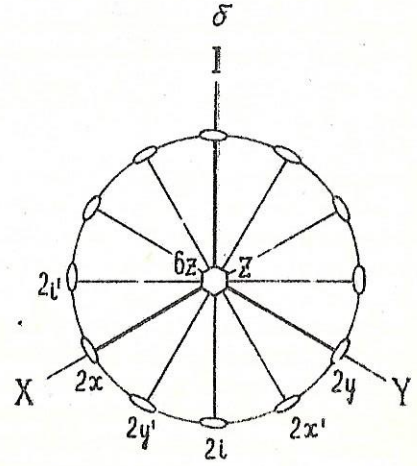


Рис. 2.2

X , плоскость $m_{x'}$ - направлению x' и т.д. (плоскости на рис. 2.2 не обозначены).

В кубической голоэдрии звездочка Браве образована шестью попарно связанными полуосями, каждая из которых может быть переведена операцией симметрии в любую другую. Полуось X , например, может принять одну из шести возможных ориентаций, после чего для полуоси Y остаются четыре возможные ориентации, а после этого для полуоси Z - две. Итого имеем 6 x 4 x 2 = 48 вариантов симметрических преобразований системы координат кубической голоэдрии (табл. 2.I).

Обозначения элементов симметрии гексагональной голоэдрии приведены на рис. 2.2, б. Ось шестого порядка 6_z совмещена с координатной осью Z , ось второго порядка 2_x - с осью X , 2_y - с Y , 2_i - с I . Ось $2_{x'}$ перпендикулярна оси X , ось $2_{y'}$ - оси Y , ось $2_{i'}$ - оси I . Плоскость m_z перпендикулярна оси Z , плоскость m_x - оси X , плоскость $m_{x'}$ - оси $2_{x'}$ и т.д.

В гексагональной голоэдрии (рис. 2.I, б) базисные векторы a и b в результате симметрических преобразований могут совмещаться с векторами звездочки Браве, лежащими в плоскости этих двух векторов. Вектор a , в частности, может принять одну из шести ориентаций, после чего для вектора b остаются лишь две возможные ориентации. При этом базисный вектор c преобразуется либо в себя, либо в противоположный. Итого имеем 6 x 2 x 2 = 24 варианта симметрических преобразований системы координат гексагональной голоэдрии (табл. 2.2).

При первом знакомстве с симметрией кристаллов легко воспринимаются "нормальные" элементы симметрии: центр, плоскость и поворотные оси симметрии. Неожиданным оказывается отсутствие в кристаллах в силу их решетчатого строения осей пятого и выше шестого порядков, но этот факт имеет строгие доказательства. Гораздо дольше сознание противится восприятию инверсионных осей симметрии и пытается подменить их "нормальными" элементами симметрии, и действительно, это удается сделать для всех осей, кроме инверсионной оси четвертого порядка. Вызывает на первых порах недоверие также вопрос о конечности числа преобразований элементов симметрии кристаллов.

Возможно, приведенный в этом пункте и табл. 2.I и 2.2 вывод возможных преобразований симметрии кристаллических многогранников поможет начинающему кристаллографу преодолеть указанные сомнения.

Таблица 2.I

Преобразования симметрии кубической голоэдрии и соответствующие им матрицы

1	2^1_x	2^1_y	2^1_z	$\bar{1}$	m_x	m_y	m_z
I 0 0	I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	I 0 0	I 0 0
0 I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0 I 0
0 0 I	0 0-I	0 0-I	0 0 I	0 0-I	0 0 I	0 0 I	0 0-I

$m_{x''}$	$m_{x'}$	$\bar{4}^1_x$	$\bar{4}^{-1}_x$	$2^1_{x''}$	$2^1_{x'}$	4^1_x	4^{-1}_x
I 0 0	I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	I 0 0	I 0 0
0 0 I	0 0-I	0 0-I	0 0 I	0 0-I	0 0 I	0 0 I	0 0-I
0 I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0 I 0

$m_{y'}$	$\bar{4}^{-1}_y$	$m_{y'}$	$\bar{4}^1_y$	$2^1_{y''}$	4^{-1}_y	$2^1_{y'}$	4^1_y
0 0 I	0 0-I	0 0-I	0 0 I	0 0-I	0 0 I	0 0 I	0 0-I
0 I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0 I 0
I 0 0	I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	I 0 0	I 0 0

$m_{z''}$	$\bar{4}^1_z$	$\bar{4}^{-1}_z$	$m_{z'}$	$2^1_{z''}$	4^1_z	4^{-1}_z	$2^1_{z'}$
0 I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0 I 0
I 0 0	I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	I 0 0	I 0 0
0 0 I	0 0-I	0 0-I	0 0 I	0 0-I	0 0 I	0 0 I	0 0-I

3^1	3^1_y	3^1_z	3^1_x	$\bar{3}^1$	$\bar{3}^1_y$	$\bar{3}^1_z$	$\bar{3}^1_x$
0 I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0 I 0
0 0 I	0 0-I	0 0-I	0 0 I	0 0-I	0 0 I	0 0 I	0 0-I
I 0 0	I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	I 0 0	I 0 0

3^{-1}	3^{-1}_z	3^{-1}_x	3^{-1}_y	$\bar{3}^{-1}$	$\bar{3}^{-1}_z$	$\bar{3}^{-1}_x$	$\bar{3}^{-1}_y$
0 0 I	0 0-I	0 0-I	0 0 I	0 0-I	0 0 I	0 0 I	0 0-I
I 0 0	I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	-I 0 0	I 0 0	I 0 0
0 I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0-I 0	0 I 0	0-I 0	0 I 0

Таблица 2.2

Преобразования симметрии гексагональной голоэдрии и соответствующие им матрицы

1	6^{+}_{z}	3^{+}_{z}	2^{+}_{z}	3^{-}_{z}	6^{-}_{z}
$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
$m_{x'}$	m_y	$m_{l'}$	m_x	$m_{y'}$	m_l
$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
m_z	$\bar{3}^{+}_{z}$	$\bar{6}^{+}_{z}$	$\bar{1}$	$\bar{6}^{-}_{z}$	$\bar{3}^{-}_{z}$
$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$
2^{-}_{x}	$2^{+}_{y'}$	2^{+}_{l}	$2^{+}_{z'}$	2^{-}_{y}	$2^{+}_{l'}$
$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$

Таблица 2.3

Кристаллофизическая установка кристаллов

Сингония		Ось X_1	Ось X_2	Ось X_3
Триклинная		В плоскости, перпендикулярной направлению [001]		[001]
Моноклинная	I	В плоскости (001)	[010]	[001]
	II	В плоскости (010)	[010]	[001]
Ромбическая		[100]	[010]	[001]
Тетрагональная		[100]	[010]	[001]
Гексагональная		$[2\bar{1}\bar{1}0]$	$[01\bar{1}0]$	[0001]
Кубическая		[100]	[010]	[001]

2.2. Представление в кристаллофизическом базисе

В кристаллофизике принята правая прямоугольная система координат (рис. 2.3) – к р и с т а л л о ф и з и ч е с к а я с и с т е м а к о о р д и н а т . Координатные оси в ней обозначают X_1, X_2, X_3, углы между ними – α, β, γ, базисные векторы – $\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$, $\vec{e}_3$. Правила стандартной установки [17 и др.] кристаллофизических осей относительно кристаллографических указаны в табл. 2.3 и на рис. 2.4 для триклинной (а), моноклинной в I-й (б) и II-й (в) установках, ортогональных (ромбической, тетрагональной и кубической) (г) и гексагональной (д или е) сингоний. В табл. 2.3 в круглых скобках указаны символы плоскостей, в квадратных – символы направлений. Понятие о символах было дано в части I, п. 2.1.

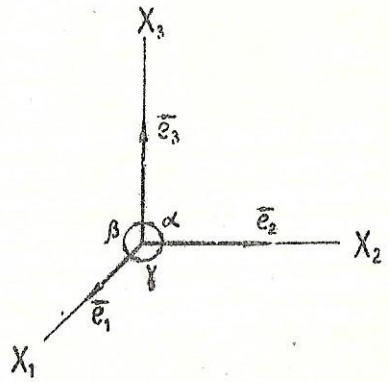


Рис. 2.3

Найдем коэффициенты матриц точечных преобразований симметрии кристаллов в кристаллофизическом базисе. Для этого нет оснований рассматривать общий случай, при котором длины векторов старого e и нового e' базисов различны $e \neq e'$. В низшей категории каждый вектор кристаллофизического базиса переводится преобразованиями симметрии только в себя или обратный вектор и потому после преобразования выражается через вектор той же длины $e_i' = \pm e_i$, где $i = 1, 2, 3$. В средней категории вектор $\vec{e}_3$ переводится в себя или обратный, а векторы $\vec{e}_1'$ и $\vec{e}_2'$ выражаются через $\vec{e}_1$ и $\vec{e}_2$, причем $e_1 = e_2 = e_1' = e_2'$. В кубических кристаллах $e = e'$. Это дает основание рассматривать для кристаллов любой симметрии лишь частный случай $e = e'$.

Пусть даны два кристаллофизических базиса: старый $\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$, $\vec{e}_3$ и новый $\vec{e}_1'$, $\vec{e}_2'$, $\vec{e}_3'$ с общим началом в точке 0 и разными длинами векторов $e = e'$. Выразим векторы нового базиса через старый:

$$\vec{e}_1' = a_{11}\vec{e}_1 + a_{12}\vec{e}_2 + a_{13}\vec{e}_3 ,$$
$$\vec{e}_2' = a_{21}\vec{e}_1 + a_{22}\vec{e}_2 + a_{23}\vec{e}_3 , \qquad (2.1)$$
$$\vec{e}_3' = a_{31}\vec{e}_1 + a_{32}\vec{e}_2 + a_{33}\vec{e}_3 .$$

Обозначим углы между каждым вектором нового базиса и векторами старого базиса:

	$\vec{e}_1$	$\vec{e}_2$	$\vec{e}_3$
$\vec{e}_1'$	α_{11}	α_{12}	α_{13}
$\vec{e}_2'$	α_{21}	α_{22}	α_{23}
$\vec{e}_3'$	α_{31}	α_{32}	α_{33}

(2.2)

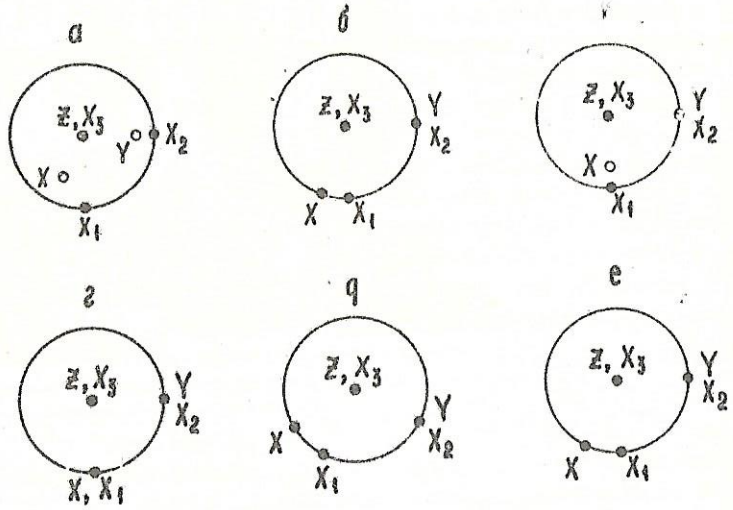


Рис. 2.4

В силу прямоугольности базисов и условия $e = e'$ из (2.1) и (2.2) имеем

$$\vec{e}_1' = \cos\alpha_{11}\vec{e}_1 + \cos\alpha_{12}\vec{e}_2 + \cos\alpha_{13}\vec{e}_3 ,$$
$$\vec{e}_2' = \cos\alpha_{21}\vec{e}_1 + \cos\alpha_{22}\vec{e}_2 + \cos\alpha_{23}\vec{e}_3 , \qquad (2.3)$$
$$\vec{e}_3' = \cos\alpha_{31}\vec{e}_1 + \cos\alpha_{32}\vec{e}_2 + \cos\alpha_{33}\vec{e}_3 .$$

Матрица перехода от старого базиса к новому имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} \cos\alpha_{11} & \cos\alpha_{12} & \cos\alpha_{13} \\ \cos\alpha_{21} & \cos\alpha_{22} & \cos\alpha_{23} \\ \cos\alpha_{31} & \cos\alpha_{32} & \cos\alpha_{33} \end{pmatrix} . \qquad (2.4)$$

Таким образом, элементами матрицы преобразования кристаллофизического базиса являются направляющие косинусы новых векторов относительно старых. Обозначив $\cos\alpha_{ij} = C_{ij}$, перепишем матрицу A:

$$A = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} . \qquad (2.5)$$

В кубической голоэдрии векторы кристаллофизического базиса переводятся преобразованиями симметрии в себя, друг в друга или в противоположные. Поэтому матричная запись всех преобразований симметрии кубической голоэдрии через направляющие косинусы кристаллофизического базиса совпадают с их записью в виде матриц перехода кристаллографического базиса (табл. 2.1). Например, в моноклинном кристалле преобразование симметрии 2^1_z записывается матрицей

$$2^1_z = \begin{pmatrix} \cos 180^0 & \cos 90^0 & \cos 90^0 \\ =\cos 90^0 & \cos 180^0 & \cos 90^0 \\ \cos 90^0 & \cos 90^0 & \cos 0^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} ,$$

которая совпадает с соответствующей матрицей табл. 2.1.

В гексагональной голоэдрии при стандартном выборе кристаллофизического базиса (см. табл. 2.3) его векторы переводятся в себя, друг в друга или в противоположные лишь преобразованиями симметрии 1, $\bar{1}$, $2y$, $2y'$, 2_z, m_y, $m_{y'}$, m_z, и для них матрицы направляющих косинусов кристаллофизического базиса совпадают с матрицами преобразования кристаллографического базиса (см. табл. 2.2). Для остальных преобразований симметрии такого совпадения нет. Например, матрица направляющих косинусов операции 3^1_z имеет вид

$$3^1_z = \begin{pmatrix} \cos 120^0 & \cos 30^0 & \cos 90^0 \\ \cos 150^0 & \cos 120^0 & \cos 90^0 \\ \cos 90^0 & \cos 90^0 & \cos 0^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Матрицы такого типа сложнее и менее эффективны в кристаллографических расчетах, чем матрицы, записанные в кристаллографическом базисе.

Задание. Вывести матрицы в кристаллографическом и кристаллофизическом базисах для преобразований симметрии $\bar{4}^{I}_{z}$, $\bar{4}^{2}_{z}$, $\bar{4}^{3}_{z}$, 4^{4}_{z}, 6^{I}_{z}, 6^{2}_{z}, 6^{3}_{z}, 6^{4}_{z}, 6^{5}_{z}, 6^{6}_{z} и др.

2.3. К доказательству теорем об умножении преобразований симметрии

После введения кристаллографической системы координат и осуществления систематического матричного представления всех точечных преобразований симметрии кристаллов в этой системе можно применить более общий подход к доказательству теорем, сформулированных в п. I.2.

Доказательство теоремы I.4. Направим поворотную ось симметрии порядка n вдоль оси Z кристаллографической системы координат, а перпендикулярную к ней поворотную ось симметрии второго порядка 2 – вдоль оси X. В соответствии с основным законом симметрии кристаллов (часть I, теорема 3.I) ось n в кристаллах совмещает фигуру с собой при поворотах на углы 0°, 60°, 90°, 120°, 180°, 240°, 270°, 300°, $360^{o} \equiv 0^{o}$. Этим поворотам соответствуют преобразования симметрии I, 6^{I}_{z}, 4^{I}_{z}, $6^{2}_{z} \equiv 3^{I}_{z}$, $6^{3}_{z} \equiv 4^{2}_{z} \equiv 2^{I}_{z}$, $6^{4}_{z} \equiv 3^{2}_{z}$, 4^{3}_{z}, 6^{5}_{z}, матрицы которых для кристаллографических систем координат даны в табл. 2.I и 2.2. Умножая на них матрицу преобразования 2^{I}_{x}, взятую из тех же таблиц для кубической (куб.) или гексагональной (гекс.) голоэдрий

I) $I \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{x}$, 2) $6^{I}_{z} \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{y}$, 3) $4^{I}_{z} \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{z''}$,

4) $3^{I}_{z} \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{y}$, 5а) $2^{I}_{z} \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{x'}$ (гекс.), 5б) $2^{I}_{z} \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{y}$ (куб.),

6) $3^{2}_{z} \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{i}$, 7) $4^{3}_{z} \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{z'}$, 8) $6^{5}_{z} \cdot 2^{I}_{x} = 2^{I}_{y'}$,

убеждаемся с помощью табл. 2.I, 2.2 и рис. 2.2 в том, что произведение I доказывает теорему для оси первого порядка; произведения I и 5 – для оси 2-го порядка, причем, исходные оси 2 иной ориентировки сводятся к 2_z и 2_x переобозначением координатных осей или их иным выбором. Произведения I, 4, 6 служат доказательством для оси третьего порядка в гексагональной голоэдрии (в кубической голоэдрии перпендикулярные к оси 3 оси 2 невозможны). Произведения I, 3, 5б, 7 – для оси 4-го порядка (оси 4_x и 4_y сводят к 4_z переобо-

значением координатных осей). Произведения I, 2, 4, 5а, 6, 8 – для оси 6-го порядка. Теорема доказана.

Доказательство теоремы I.5. В доказательстве предыдущей теоремы заменим поворотную ось 2_x плоскостью симметрии m_x, перпендикулярной оси X. Получим следующие преобразования симметрии: I) $I \cdot m_x = m_x$, 2) $6^{I}_{z} \cdot m_x = m_{i'}$, 3) $4^{I}_{z} \cdot m_x = m_{z''}$, 4) $3^{I}_{z} \cdot m_x = m_y$ (гекс.), 5а) $2^{I}_{z} \cdot m_x = m_{x'}$ (гекс.), 5б) $2^{I}_{z} \cdot m_x = m_y$ (куб.), 6) $3^{2}_{z} \cdot m_x = m_i$ (гекс.), 7) $4^{3}_{z} \cdot m_x = m_{z'}$, 8) $6^{5}_{z} \cdot m_x = m_{y'}$. С помощью табл. 2.I, 2.2 и рис. 2.2 убеждаемся в том, что произведения преобразований под теми же номерами, что и в доказательстве предыдущей теоремы, служат доказательством данной теоремы для осей I, 2, 3, 4, 6 порядков. Оси симметрии 3 кубических кристаллов приводятся к 3_z (а оси 2 – к 2_x) выбором новой системы координат. Теорема доказана.

Для других теорем, приведенных в п. I.2, ход доказательства может быть аналогичным.

3. ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВОЙ АСПЕКТ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

3.I. Группа

Множество элементов и заданные на нем алгебраические действия, удовлетворяющие определенным аксиомам, образуют алгебраическую структуру. Одним из основных типов алгебраических структур является группа*) [22-27, 5, I6, I8 и др.].

Множество G отличных друг от друга элементов (математических объектов) называется группой, если выполнены следующие аксиомы.

I) Существует алгебраическое действие, которое каждой упорядоченной паре элементов g_1 и g_2 из G однозначно ставит в соответствие определенный элемент $g_3 = g_1 g_2$ из G.

Пара g_1, g_2 берется упорядоченной (с учетом последовательности элементов), поскольку в общем случае $g_1 g_2 \neq g_2 g_1$. Групповое действие обычно называют умножением, хотя оно может быть иным, например сложением.

2) Умножение ассоциативно, т.е. для любых трех элементов g_1, g_2, g_3 множества G справедливо равенство $(g_1 g_2) g_3 = g_1 (g_2 g_3) = g_1 g_2 g_3$.

3) Существует нейтральный элемент $e \in G$ такой, что $ge = eg = g$ для любого элемента $g \in G$.

4) Для каждого элемента $g \in G$ существует обратный элемент $g^{-1} \in G$ такой, что $gg^{-1} = g^{-1} g = e$.

Говоря схематически, группой называют совокупность элементов, замкнутую относительно действия, которое ассоциативно, гарантирует нейтральный и обратный элементы.

Условимся обозначать группу тем же символом, что и множество элементов, на котором она задана, в данном случае G. Нейтральный элемент по умножению обозначается обычно I.

Примером группы является множество $Z = \{\ldots -2, -I, 0, I, 2, \ldots\}$ целых чисел с заданным на нем сложением: I) сумма любых двух целых чисел есть целое число, 2) сложение чисел ассоциативно, 3) нейтральным элементом по сложению является 0, 4) обратными по сложению являются числа противоположного знака.

Множество всех вещественных чисел R является группой по сложению, но не является группой по умножению, так как ноль не имеет обратного элемента 0^{-I}. Множество всех вещественных чисел без нуля $R/\{0\}$ является группой по умножению.

*) Историческая справка по теории групп дана в [4, с. 405].

Исторически первой областью применения теории групп непосредственно в естествознании явилась кристаллография [4]. Понятие группы позволяет строго охарактеризовать симметрию той или иной геометрической фигуры. Каждой фигуре сопоставляется совокупность всех преобразований, совмещающих данную фигуру с ней самой. Эта совокупность является группой относительно последовательного выполнения преобразований. Она и характеризует симметрию фигуры.

Перейдем к рассмотрению групп матриц, описывающих преобразования симметрии. Матрицы точечных преобразований кристаллов приведены в табл. 2.I и 2.2.

Убедимся, в частности, что четыре матрицы

$$I = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}, \quad 2_z^I = \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}, \quad m_x = \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}, m_y = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \tag{3.I}$$

образуют группу по умножению. Для этого введем понятие квадрата Кейли.

3.2. Квадрат Кейли

Для проверки первой аксиомы группы требуется перебрать всевозможные попарные произведения элементов множества. Наиболее просто это делается путем построения таблицы умножения, называемой также квадратом Кейли – квадратной таблицы, в которой все элементы множества записаны в верхней строке и в левом столбце:

	I	2_z	m_x	m_y
I	I	2_z	m_x	m_y
2_z	2_z	I	m_y	m_x
m_x	m_x	m_y	I	2_z
m_y	m_y	m_x	2_z	I

(3.2)

Полученный квадрат не содержит новых элементов. Следовательно, умножение матриц (3.I) всюду задано на данном множестве или, как говорят, множество замкнуто относительно умножения.

Квадрат Кейли группы содержит полную информацию о ней. В нем представлены все элементы группы и все их попарные произведения. В каждой строке и каждом столбце квадрата любой элемент груп

встречается ровно один раз. Вид квадрата зависит от нумерации (расположения) элементов.

Квадрат Кейли содержит также информацию, необходимую для проверки других аксиом группы.

Умножение матриц, элементами которых являются числа, ассоциативно.

Нейтральным элементом является единичная матрица, например, $I \cdot 2_z^I = 2_z^I \cdot I = 2_z^I$ (см. (3.2)).

Каждый элемент данного множества является себе обратным, например, $2_z^I \cdot 2_z^I = I$ (см. (3.2)).

Итак, преобразования симметрии I, 2_z, m_x, m_y образуют группу симметрии $mm2$ – одну из 32 точечных групп симметрии.

Помещая преобразование идентичности I всегда на первое место, получаем в квадрате одинаковыми две первые строки и два первых столбца, что позволяет записать квадрат в более "экономичном виде"

$$\begin{array}{cc|cc} I & 2_z & m_x & m_y \\ 2_z & I & m_y & m_x \\ \hline m_x & m_y & I & 2_z \\ m_y & m_x & 2_z & I \end{array} \qquad (3.2\ а)$$

Записанный таким образом квадрат группы $mm2$ можно разбить на блоки

$$\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline B & A \end{array},$$

где блок $A = \begin{matrix} I & 2 \\ 2 & I \end{matrix}$ является квадратом группы $2\ (I,\ 2_z)$.

Приведем еще один пример. Матрицы

$$I = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}, \quad 3^I = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ -I & -I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}, \quad 3^{-I} = \begin{pmatrix} -I & -I & 0 \\ I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix},$$

$$2_x^I = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ -I & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix}, \quad 2_y^I = \begin{pmatrix} -I & -I & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix}, \quad 2_l^I = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} \qquad (3.3)$$

также образуют группу, в чем нетрудно убедиться, анализируя соответствующий квадрат Кейли (3.4). Для того чтобы квадрат содержал на диагонали в общем случае только единицы, располагаем симметрично по отношению к диагонали взаимно обратные элементы.

$$\begin{array}{ccc|ccc} I & 3^I & 3^{-I} & 2_x^I & 2_y^I & 2_l^I \\ 3^{-I} & I & 3^I & 2_l^I & 2_x^I & 2_y^I \\ 3^I & 3^{-I} & I & 2_y & 2_l & 2_x \\ \hline 2_x^I & 2_l^I & 2_y^I & I & 3^{-I} & 3^I \\ 2_y^I & 2_x^I & 2_l^I & 3^I & I & 3^{-I} \\ 2_l^I & 2_y^I & 2_x^I & 3^{-I} & 3^I & I \end{array} \qquad (3.4)$$

Штриховыми линиями квадрат разбит на блоки двух типов, один из которых является квадратом Кейли группы $3\ (I,\ 3^I,\ 3^{-I})$.

Задание. 1. Определить, являются ли следующие множества преобразований группами по умножению матриц преобразований в кубической и гексагональной гоноэдриях: а) $\{3_z^I,\ 3_z^2,\ 3_z^3,\ m_z\}$, б) $\{2_z^I,\ 2_z^2,\ m_x,\ m_y\}$, в) $\{I,\ 2_x^I,\ 2_y^I,\ 2_z^I\}$.

2. Решить задачу № 520 из [8].

3.3. Порядок группы и элемента

Количество элементов (конечное или бесконечное) в группе называется **порядком** n **группы** G. Мы будем заниматься только группами конечного порядка – **конечными группами**.

Порядок точечной группы симметрии кристаллов равен количеству граней, которые порождаются из одной грани общего положения всеми преобразованиями симметрии группы. Иными словами, порядок группы равен количеству граней в общей простой форме данной группы.

Для того чтобы дать определение порядка элемента группы, введем понятие степени элемента. Если k – любое натуральное число, то произведение k элементов, равных элементу g, называется **k-й степенью элемента** g и обозначается g^k. Отрицательные степени g^{-k} элемента g можно рассматривать как произведение k множителей, равных элементу g^{-1}. Под нулевой степенью g^0 элемента g условимся понимать единицу e.

Если среди степеней $g^0 = e$, g^1, g^2, g^3, ... элемента g группы G имеются равные, то существует наименьшее натуральное число s такое, что $g^s = e$. Такое число s называется **порядком элемента** g.

Рассмотренная группа $mm2$ имеет четвертый порядок, за элементы 2_z, m_x, m_y второго порядка ($2_z^2 = m_x^2 = m_y^2 = I$).

Группа 32 шестого порядка, ее элементы 2_x^I, 2_y^I, 2_i^I второго порядка ($2_x^2 = 2_y^2 = 2_i^2 = I$) элементы 3^I, 3^{-I} третьего порядка ($3^3 = 3^{-3} = I$).

Задание. Определить порядок следующих групп и их элементов: I, 2, 3, 4, 6, 222, $\bar{3}$, $4/m$, $6/mmm$, 23, 32, $m3m$, $3m$.

3.4. Подгруппы

Множество H группы G называется **подгруппой** группы G, если оно само является группой относительно действия, определенного в группе G.

Если группа G имеет конечный порядок n, то порядок n_1 всякой ее подгруппы H является делителем n : $n = n_1 j$; число j называется **индексом подгруппы** H относительно группы G. Это является содержанием **теоремы Лагранжа**: порядок конечной группы делится на индекс и порядок ее подгруппы.

Каждая группа содержит в качестве подгрупп себя и единичную группу, состоящую только из нейтрального элемента e. Эти две подгруппы называются тривиальными.

В соответствии с определением каждая группа (и подгруппа) включает нейтральный элемент.

Согласно теореме Лагранжа группа четвертого порядка $mm2$ (3.2) может иметь подгруппы не выше четвертого порядка $4/I = 4$, $4/2 = 2$ и $4/4 = I$; из них нетривиальными являются лишь подгруппы второго порядка I, 2_z ; I, m_x ; I, m_y .

Группа 32 шестого порядка имеет нетривиальные подгруппы второго порядка I, 2_x ; I, 2_y ; I, 2_i и третьего порядка I, 3^I, 3^{-I}.

Можно показать, что всякий элемент конечной группы имеет конечный порядок, порядок всякого элемента конечной группы делит порядок этой группы, в конечной группе порядка n n-я степень всякого элемента равна единице.

Задание. Определить все подгруппы каждой голоэдрии.

3.5. Смежные классы, разложение по подгруппе

Левым смежным классом gH в группе G по ее подгруппе H называется множество всех произведений gh данного элемента g из G и любых элементов h из H. Аналогично **правый смежный класс** Hg есть множество всех произведений вида hg [22-27 и др.].

Смежный класс по подгруппе H сам является подгруппой в том и только в том случае, если g есть элемент из H ; при этом условии $gH = Hg = H$. Два левых смежных класса группы G по H либо совпадают, либо не имеют ни одного общего элемента; то же самое справедливо и для двух правых смежных классов. Это позволяет разложить группу на подгруппу и ее смежные классы.

Каждая подгруппа H группы G определяет **разложение группы** G на конечное или бесконечное число j левых смежных классов и разложение G на j правых смежных классов. Если G – группа конечного порядка n , то j равняется индексу n/n_1 подгруппы H порядка n_1 . Тогда

$$G = H + g_2 H + g_3 H + \ldots + g_j H . \qquad (3.5)$$

В общем случае при заданных G и H системы представителей $\{g_2, g_3, g_4, \ldots, g_j\}$ могут быть выбраны разными способами.

В группе $mm2$ (3.2) левыми смежными классами по ее подгруппе (I, 2_z) являются m_x(I, 2_z) и m_y(I, 2_z), т.е. m_x, m_y и m_y , m_x – равные классы. Правые смежные классы в данном случае равны левым. Выбрав в качестве системы предоставителей, например, $\{I, m_x\}$, разложим группу $mm2$ порядка 4 по подгруппе (I, 2_z) порядка 2 на сумму двух (4/2 = 2) смежных классов

$$mm2 = I(I, 2_z) + m_x(I, 2_z) = (I, 2_z) + (m_x, m_y).$$

По другой подгруппе (I, m_x) данная группа может быть разложена, например, следующим образом:

$$mm2 = I(I, m_x) + 2_z(I, m_x) = (I, m_x) + (2_z, m_y).$$

В группе 32 порядка 6 (3.4) левыми смежными классами по подгруппе $2_x = (I, 2x)$ порядка 2 являются $3^I(I, 2x) = 3^I, 2y$; $3^2(I, 2x) = 3^2, 2_i$; $2y(I, 2x) = 2y, 3^I$; $2_i(I, 2x) = 2_i, 3^2$, т.е. четыре попарно равные множества, разложение имеет вид $32 = I, 2x + 2y, 3^I + 2_i, 3^2$; правыми смежными классами являются $(I, 2x)3^I = 3^I, 2_i$; $(I, 2x)3^2 = 3^2, 2y$; $(I, 2x)2y = 2y, 3^2$; $(I, 2x)\, 2_i = 2_i, 3^I$, разложение $32 = I, 2x + 2y, 3^2 + 2_i, 3^I$ не совпадает с разложением по левым смежным классам.

Задание. Разложить каждую из следующих групп по каждой ее подгруппе: $2/m$, mmm , $4/mmm$, $3m$, $\bar{6}$, 23.

3.6. Сопряженные элементы и подгруппы, нормальный делитель, фактор-группа

Два элемента g_1 и g_1' группы G называются **сопряженными элементами**, если

$$g_1 = g^{-1} g_1' g \quad (\text{или } g_1' = g\, g_1 g^{-1}), \qquad (3.6)$$

где g – некоторый элемент группы G [22-27 и др.]. В частности, каждый элемент g сопряжен самому себе. Сопряженность определяет разбиение группы G на **классы сопряженных элементов**.

Преобразование (3.6) переводит каждую подгруппу H группы G в **сопряженную подгруппу** $H' = g^{-1} H g$. Подгруппа H отображается сама на себя ($H' \equiv H$) для любого элемента g из G в том и только том случае, если: I) элементы h подгруппы H перестановочны с любым элементом g группы G ($gH = Hg$) или 2) подгруппа H содержит все элементы, сопряженные с ее элементами. Подгруппа, отличающаяся этими свойствами, называется **нормальной подгруппой** (**нормальным делителем**, **инвариантной подгруппой**) группы G.

Любая подгруппа индекса 2 является нормальным делителем группы G.

Левые смежные классы по нормальному делителю совпадают с соответствующими правыми смежными классами и образуют группу по отношению к операции умножения, определяемой следующим образом: произведение $H_1 H_2$ двух подмножеств H_1 и H_2 есть множество, состоящее из всех (различных) произведений $h_1 h_2$ элементов h_1 из H_1 и элементов h_2 из H_2; эта группа называется **фактор-группой** G/H группы G по нормальному делителю H. Если G – группа конечного порядка, то порядок фактор-группы G/H равен индексу j подгруппы H.

В группе 32 (3.4) элементы $2x$ и $2y$ являются сопряженными: $3^{-I} 2x 3^{I} = 2y$. Также сопряженными являются подгруппы (I, $2x$) и (I, $2y$): $3^{-I}(I, 2x)3^{I} = (I, 2y)$. Подгруппа (I, $2x$) не является нормальным делителем, поскольку ее элемент $2x$ не коммутирует, например, с элементом 3^{I} группы 32 или поскольку эта подгруппа не содержит элемента $2y$, сопряженного с элементом $2x$ данной подгруппы. Подгруппа $3 = (I, 3^{I}, 3^{-I})$ индекса 2 является нормальным делителем группы 32: элементу I сопряженным является он сам $I = 3^{-I}\, I\, 3^{I}$, элементу 3^{I} – элемент $3^{-I} = 2x 3^{I} 2x$, т.е. подгруппа содержит все элементы, сопряженные с ее элементами. Левые смежные

классы в группе 32 по подгруппе 3 $2x(I, 3^{I}, 3^{-I}) = 2x, 2i, 2y$; $2y(I, 3^{I}, 3^{-I}) = 2y, 2x, 2i$; $2i(I, 3^{I}, 3^{-I}) = 2i, 2y, 2x$ совпадают между собой и равны правым смежным классам $(I, 3^{I}, 3^{-I})2x = 2x, 2y, 2i$; $(I, 3^{I}, 3^{-I})2y = 2y, 2i, 2x$ и $(I, 3^{I}, 3^{-I})2i = 2i, 2x, 2y$ и вместе с самой подгруппой $I\ (I, 3^{I}, 3^{-I}) = I, 3^{I}, 3^{-I}$ образуют фактор-группу 32/3 порядка $6/3 = 2$: $\{(I, 3^{I}, 3^{-I}), (2x, 2y, 2i)\}$.

Задание. Найти нормальные делители в каждой голоэдрии.

3.7. Системы образующих, определяющие отношения

Группа полностью определяется своим квадратом Кейли. В нем содержатся все элементы группы и отношения (произведения) между каждой парой элементов. Такое определение избыточно.

В действительности для генерирования группы достаточно знать лишь некоторые ее элементы и их взаимоотношения. Выбор таких элементов в общем случае неоднозначен. Дадим соответствующие определения.

Множество $S = \{t_1, t_2, \ldots, t_m\}$ элементов группы G называется **системой образующих** или **генераторами** группы G, если всякий элемент $g \in G$ может быть представлен хотя бы единственным способом в виде произведения конечного числа степеней элементов множества S: $g = t_1^{k_1} \cdot t_2^{k_2} \cdot \ldots \cdot t_m^{k_m}$, где $k_1, k_2, \ldots, k_m$ – некоторые целые числа, включая отрицательные числа и ноль.

В качестве системы образующих можно взять, например, всю группу G. Удаляя из G "лишние" элементы, которые записываются в виде произведения оставшихся (и им обратных), получим **минимальную систему образующих** M группы G.

Генерировать группу по минимальной системе образующих не всегда удобно. Поэтому нередко используют **неминимальную** или **сверхопределяющую систему образующих**.

Но чтобы группа была задана абстрактно, образующих еще недостаточно. Нужны определяющие отношения.

Отношения между генераторами группы G, полностью определяющие группу G, называются **определяющими отношениями**; каждое определяющее отношение можно записать в виде $t_1^{k_1} \cdot t_2^{k_2} \cdot \ldots \cdot t_m^{k_m} = e$, где $k_1, k_2, \ldots, k_m$ – целые числа, включая отрицательные числа и ноль.

В группе $mm2$ (3.2) минимальной системой образующих является, например, система 2_z, m_x. В качестве определяющих отношений укажем порядок этих элементов $2_z^2 = I$ (I), $m_x^2 = I$ (2) (откуда $2_z^{-I} = 2_z^{I}$ и $m_x^{-1} = m_x^{1}$), и условие коммутативности $m_x 2_z = 2_z m_x$, которое можно переписать в виде $2_z^{-I} m_x 2_z m_x^{-1} = 2_z^{-I} 2_z m_x m_x^{-1}$; $2_z m_x 2_z m_x = I$ или $(2_z m_x)^2 = I$ (3). Строим таблицу умножения на генераторах и единице:

I	2_z	m_x
2_z	2_z^2	$2_z m_x$
m_x	$m_x 2_z$	m_x^2

Согласно (I) и (2) $2_z^2 = m_x^2 = I$, согласно (3) $2_z m_x = m_x 2_z$. Таким образом, получили один новый элемент $2_z m_x$. Строим таблицу для расширенного множества

1	2_z	m_x	$2_z m_x$
2_z	1	$2_z m_x$	$2_z^2 m_x$
m_x	$m_x 2_z$	1	$m_x 2_z m_x$
$2_z m_x$	$2_z m_x 2_z$	$2_z m_x 2$	$2_z m_x 2_z m_x$

Из отношения (3) следует, что $2_z m_x 2_z = 2_z^2 m_x$; $m_x 2_z m_x = m_x^2 2_z$ и $2_z m_x 2_z m_x = 2_z^2 m_x^2$, из (I) $2_z^2 m_x = m_x$, из (2) $m_x^2 2_z = 2_z$, из (I) и (2) $2_z^2 m_x^2 = 1$. То есть данное множество замкнуто по умножению. Переписав таблицу в принятых обозначениях $2_z m_x = m_y$, получим квадрат Кейли группы $mm2$ (3.2).

В качестве минимальной системы образующих данной группы можно взять также 2_z, m_y с определяющими отношениями $2_z^2 = m_y^2 = (2_z m_y)^2 = I$ или систему m_x, m_y с отношениями $m_x^2 = m_y^2 = (m_x m_y)^2 = I$. Сверхопределяющими генераторами являются 2_z, m_x, m_y с определяющими отношениями $2_z^2 = m_x^2 = m_y^2 = (2_z m_x)^2 = I$, а также вся группа со всеми отношениями в ней.

В группе 32 (3.4) одной из минимальных систем образующих является система 3^I, 2_x^I с определяющими отношениями $3^3 = 2_x^2 = (3^I 2_x^I)^2 = I$.

Генераторы и определяющие отношения 32 точечных групп будут указаны в табл. 3.3 в абстрактном (безотносительно к природе элементов) виде.

Задание. I. Выбрать системы образующих и определяющие отношения в каждой голоэдрии и генерировать эти группы.

2. Решить задачи № 5I7-5I9 из [8].

3.8. Коммутативные и некоммутативные точечные группы

Из определения группы следует, что каждый элемент группы обязательно коммутирует лишь с обратным элементом и единицей. Вообще преобразования симметрии могут и не коммутировать между собой (см. п. I.2).

Группа G называется коммутативной или а б е л е в о й [x)] группой, если групповое умножение коммутативно на всех элементах группы, т.е. $g_1 g_2 = g_2 g_1$ для любых элементов g_1, g_2 из G.

Квадрат Кейли группы $mm2$ (3.2) симметричен относительно диагонали, в частности, $m_x m_y = m_y m_x$ и т.д. То есть группа коммутативна. Отмеченная симметрия квадрата Кейли коммутативной группы проявляется в том случае, когда последовательность элементов в верхней строке и левом столбце одинакова.

Некоммутативными являются, например, группы кубической сингонии, доказательством чего является некоммутативность произведения преобразований 2_x^I и 3^I, присущих всем кубическим кристаллам:

$$2_x^I 3^I = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \\ I & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & -I \\ -I & 0 & 0 \end{pmatrix} = 3_z^I ,$$

$$3^I 2_x^I = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \\ I & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \\ I & 0 & 0 \end{pmatrix} = 3_y^I .$$

Основываясь на признаке коммутативности преобразований симметрии (см. п. I.2), можно сформулировать **п р и з н а к к о м м у т а т и в н о с т и г р у п п преобразований симметрии: группа преобразований, каждое из которых не размножает инвариантные подпространства других преобразований данной группы, является коммутативной; группа преобразований, хотя бы одно из которых размножает инвариантное подпространство другого преобразования данной группы, является некоммутативной.**

Из 32 точечных групп симметрии кристаллов I6 являются коммутативными и I6 некоммутативными (табл. 3.I).

Задание. Выделить коммутативные и некоммутативные группы среди следующих точечных групп симметрии: 222, mmm, 422, $4/m$, $\bar{3}$, 32, $6mm$, $\bar{6}$, 23, $m3m$.

---

x) В честь норвежского математика Нильса Хенрика Абеля (I802-I829)

3.9. Циклические точечные группы

Группа называется **ц и к л и ч е с к о й**, если все элементы группы являются степенями одного ее элемента. То есть циклическая группа порождается одним своим элементом.

Множество $\mathbb{Z}$ целых чисел (включая ноль) с заданным на нем сложением образует циклическую группу, порожденную обычной I или -I.

Точечная группа 4 циклическая, поскольку образована степенями преобразования 4^{I} (или 4^{-I}): 4^{I}, $4^{2} \equiv 2^{I}$, $4^{3} \equiv 4^{-I}$, $4^{4} \equiv I$. Ее квадрат Кейли представлен выражением (3.7)

$$\begin{array}{|cc|cc|} I & 2^{I} & 4^{I} & 4^{-I} \\ 2^{I} & I & 4^{-I} & 4^{I} \\ \hline 4^{-I} & 4^{I} & I & 2^{I} \\ 4^{I} & 4^{-I} & 2^{I} & 2 \end{array} \qquad (3.7)$$

В полученном квадрате естественным образом проявляется тот факт, что группы I, 2 и 4 (выделены пунктиром) являются подгруппами группы 4. Подгруппа I имеет первый порядок, подгруппа 2 - второй, подгруппа 4 - четвертый. Других подгрупп группа 4 не имеет.

Таблица 3.I

Разделение 32 точечных групп симметрии кристаллов на коммутативные и некоммутативные

Точечные группы	
Коммутативные	Некоммутативные
I	422
$\bar{I}$	4mm
2	$\bar{4}2m$
m	4/mmm
2/m	32
222	3m
mm2	$\bar{3}m$
mmm	622
4	6mm
$\bar{4}$	$\bar{6}m2$
4/m	6/mmm
3	23
$\bar{3}$	m3
6	432
$\bar{6}$	$\bar{4}3m$
6/m	m3m

Преобразования симметрии любой оси симметрии (поворотной или инверсионной) образуют циклическую группу. Всего существует I0 (по количеству осей симметрии) точечных циклических групп симметрии кристаллов: I, 2, 3, 4, 6, $\bar{I}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$. Их квадраты Кейли приведены в табл. 3.2.

Преобразования симметрии в таблице записаны простейшими символами, наиболее благоприятными для составления и анализа квадратов Кейли. Видно, в частности, что при использованной последовательности записи элементов в квадрате каждой циклической группы

Таблица 3.2

Квадраты Кейли циклических точечных групп симметрии кристаллов

Группа	Квадрат Кейли						Группа	Квадрат Кейли					
I	I						$\bar{I}$	I	$\bar{I}$				
								$\bar{I}$	I				
2	I	2					$\bar{2}$	I	$\bar{2}$				
	2	I						$\bar{2}$	I				
3	I	3^{I}	3^{2}				$\bar{3}$	I	$\bar{3}^{I}$	$\bar{3}^{2}$	$\bar{3}^{3}$	$\bar{3}^{4}$	$\bar{3}^{5}$
	3^{2}	I	3^{I}					$\bar{3}^{5}$	I	$\bar{3}^{I}$	$\bar{3}^{2}$	$\bar{3}^{3}$	$\bar{3}^{4}$
	3^{I}	3^{2}	I^{I}					$\bar{3}^{4}$	$\bar{3}^{5}$	I	$\bar{3}^{I}$	$\bar{3}^{2}$	$\bar{3}^{3}$
								$\bar{3}^{3}$	$\bar{3}^{4}$	$\bar{3}^{5}$	I	$\bar{3}^{I}$	$\bar{3}^{2}$
								$\bar{3}^{2}$	$\bar{3}^{3}$	$\bar{3}^{4}$	$\bar{3}^{5}$	I	$\bar{3}^{I}$
								$\bar{3}^{I}$	$\bar{3}^{2}$	$\bar{3}^{3}$	$\bar{3}^{4}$	$\bar{3}^{5}$	I
4	I	4^{I}	4^{2}	4^{3}			$\bar{4}$	I	$\bar{4}^{I}$	$\bar{4}^{2}$	$\bar{4}^{3}$		
	4^{3}	I	4^{I}	4^{2}				$\bar{4}^{3}$	I	$\bar{4}^{I}$	$\bar{4}^{2}$		
	4^{2}	4^{3}	I	4^{I}				$\bar{4}^{2}$	$\bar{4}^{3}$	I	$\bar{4}^{I}$		
	4^{I}	4^{2}	4^{3}	I				$\bar{4}^{I}$	$\bar{4}^{2}$	$\bar{4}^{3}$	I		
6	I	6^{I}	6^{2}	6^{3}	6^{4}	6^{5}	$\bar{6}$	I	$\bar{6}^{I}$	$\bar{6}^{2}$	$\bar{6}^{3}$	$\bar{6}^{4}$	$\bar{6}^{5}$
	6^{5}	I	6^{I}	6^{2}	6^{3}	6^{4}		$\bar{6}^{5}$	I	$\bar{6}^{I}$	$\bar{6}^{2}$	$\bar{6}^{3}$	$\bar{6}^{4}$
	6^{4}	6^{5}	I	6^{I}	6^{2}	6^{3}		$\bar{6}^{4}$	$\bar{6}^{5}$	I	$\bar{6}^{I}$	$\bar{6}^{2}$	$\bar{6}^{3}$
	6^{3}	6^{4}	6^{5}	I	6^{I}	6^{2}		$\bar{6}^{3}$	$\bar{6}^{4}$	$\bar{6}^{5}$	I	$\bar{6}^{I}$	$\bar{6}^{2}$
	6^{2}	6^{3}	6^{4}	6^{5}	I	6^{I}		$\bar{6}^{2}$	$\bar{6}^{3}$	$\bar{6}^{4}$	$\bar{6}^{5}$	I	$\bar{6}^{I}$
	6^{I}	6^{2}	6^{3}	6^{4}	6^{5}	I		$\bar{6}^{I}$	$\bar{6}^{2}$	$\bar{6}^{3}$	$\bar{6}^{4}$	$\bar{6}^{5}$	I

все строки эквивалентны друг другу с точностью до выбора начала, и что каждая последующая строка получается из предыдущей сдвигом начала на один элемент влево.

Задание. I. Вывести все циклические точечные группы симметрии кристаллов.

2. Решить задачу № 516 из [8].

3.10. Изоморфизм

Существуют группы, отличающиеся природой своих элементов, но обладающие одинаковыми групповыми свойствами. Такие группы естественно называть изоморфными [22-27, 5 и др.]. Каждый элемент одной изоморфной группы взаимно однозначно сопоставляется с элементом другой изоморфной группы, а произведение любых двух элементов одной группы сопоставляется с произведением соответствующих им элементов другой группы. Соответствие такого типа называется изоморфизмом, а если оно не является взаимно-однозначным, то гомоморфизмом. Поясним определения этих понятий.

Пусть даны группа G_1 с заданным на ней действием o_1 и группа G_2 с действием o_2. И пусть существует отображение T группы G_1 на группу G_2. Если для любых элементов g и h из G_1 выполняется условие

$$T(g\, o_1\, h) = T(g)\, o_2\, T(h),$$

то отображение T называется г о м о м о р ф и з м о м (обозначим его $G_1 \to G_2$), а G_2 – гомоморфным образом G_1 (далее будем писать без o_1 и o_2). При этом оказывается, что если e_1 – единица группы G_1, а e_2 – единица группы G_2, то $T(e_1) = e_2$. Взаимно однозначный гомоморфизм $G_1 \to G_2$ называется и з о м о р ф и з м о м. Группы G_1 и G_2 в этом случае называются изоморфными.

Примером изоморфизма является логарифм

$$\ln(ab) = \ln a + \ln b.$$

Группы симметрии кристаллов $\bar{1}$, 2 и m изоморфны между собой. Они имеют одинаковые групповые свойства: порядок 2, генератор A, определяющие отношения $A^2 = e$, квадрат Кейли $\begin{matrix} e & A \\ A & e \end{matrix}$ и т.п. Эти группы не будут различаться между собой, если абстрагироваться от природы их элементов. Группы, в которых не учитывается природа элементов, называются а б с т р а к т н ы м и. Точечные группы $\bar{1}$, 2 и m относятся к одной абстрактной группе и обладают всеми ее свойствами. Вообще циклические группы одинакового порядка n изоморфны друг другу и принадлежат к одной абстрактной группе, определяемой отношением $A^n = e$. Примером являются также группы шестого порядка $\bar{3}$, 6 и $\bar{6}$.

Тридцать две точечные группы симметрии кристаллов относятся к 18 абстрактным группам [2], которые приведены в табл. 3.3 вместе с их определяющими отношениями.

3.11. Понятие о выводе групп матриц симметрии

Матрицы точечных преобразований симметрии кристаллов (см. табл. 2.1 и 2.2) группируются в 32 точечные группы (см. табл. 1.3). В предыдущем разделе приведены 10 циклических групп. Добавляя к каждой циклической группе новые из возможных матриц, проверяем аксиомы групп на расширенном множестве матриц. Так выводятся все точечные группы. Познакомимся с выводом на примере групп низшей категории.

В низшей категории возможны лишь оси симметрии первого 1, $\bar{1}$ и второго 2, $\bar{2}$ порядков.

В триклинной сингонии могут быть только оси симметрии первого порядка: поворотные 1 и инверсионные $\bar{1}$ – и соответственно возможны две точечные группы 1 и $\bar{1}$, квадраты Кейли которых приведены в табл. 3.2.

В моноклинной и ромбической сингониях присутствуют как минимум оси второго порядка 2 или $\bar{2}$, квадраты Кейли соответствующих групп представлены в табл. 3.2.

Добавление к группе 2 (1, 2_z) преобразования $\bar{1}$

$$\begin{matrix} 1 & 2_z & \bar{1} \\ 2_z & 1 & m_z \\ \bar{1} & m_z & 1 \end{matrix}$$

приводит к новому преобразованию m_z. Следовательно, множество матриц 1, 2_z, $\bar{1}$ не замкнуто относительно умножения и потому не является группой. Его необходимо дополнить до группы $2/m$ элементом m_z:

$$\begin{matrix} 1 & 2_z & \bar{1} & m_z \\ 2_z & 1 & m_z & \bar{1} \\ \bar{1} & m_z & 1 & 2_z \\ m_z & \bar{1} & 2_z & 1 \end{matrix} \qquad (3.8)$$

Таблица 3.3

Определяющие соотношения 18 абстрактных групп, соответствующих 32-м точечным группам симметрии кристаллов

Порядок группы	Определяющие соотношения	Точечные группы
I	$A = e$	I
2	$A^2 = e$	$\bar{I}$, 2, m
3	$A^3 = e$	3
4	$A^4 = e$	4, $\bar{4}$
4	$A^2 = B^2 = (AB)^2 = e$	$2/m$, $mm2$, 222
6	$A^6 = e$	6, $\bar{6}$, $\bar{3}$
6	$A^3 = B^2 = (AB)^2 = e$	32, $3m$
8	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^2 = e$	mmm
8	$A^4 = B^2 = ABA^3B = e$	$4/m$
8	$A^4 = B^2 = (AB)^2 = e$	$4mm$, 422, $\bar{4}2m$
I2	$A^6 = B^2 = ABA^5B = e$	$6/m$
I2	$A^6 = B^2 = (AB)^2 = e$	$\bar{3}m$, $\bar{6}m2$, $6mm$, 622
I2	$A^3 = B^2 = (AB)^3 = e$	23
I6	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^4 = e$	$4/mmm$
24	$A^4 = B^2 = (AB)^3 = e$	432, $\bar{4}3m$
24	$A^3 = B^2 = (A^2BAB)^2 = e$	$m3$
24	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^6 = e$	$6/mmm$
48	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^3 = (BC)^4 = e$	$m3m$

Добавляя к группе 2(I, 2_z) преобразование 2_x, получим новое преобразование 2_y и группу 222:

$$\begin{array}{cccc} I & 2_x & 2_y & 2_z \\ 2_x & I & 2_z & 2_y \\ 2_y & 2_z & I & 2_x \\ 2_z & 2_y & 2_x & I \end{array} \qquad (3.9)$$

В свою очередь добавляя к группе 222 центр симметрии $\bar{I}$, получаем группу mmm восьмого порядка:

$$\begin{array}{cccccccc} I & 2_x & 2_y & 2_z & m_x & m_y & m_z & \bar{I} \\ 2_x & I & 2_z & 2_y & \bar{I} & m_z & m_y & m_x \\ 2_y & 2_z & I & 2_x & m_z & \bar{I} & m_x & m_y \\ 2_z & 2_y & 2_x & I & m_y & m_x & \bar{I} & m_z \\ m_x & \bar{I} & m_z & m_y & I & 2_z & 2_y & 2_x \\ m_y & m_z & \bar{I} & m_x & 2_z & I & 2_x & 2_y \\ m_z & m_y & m_x & \bar{I} & 2_y & 2_x & I & 2_z \\ I & m_x & m_y & m_z & 2_x & 2_y & 2_z & I \end{array} \qquad (3.9)$$

Аналогичный результат получим, добавляя к группе $2/m$ (I, 2_z, m_z, $\bar{I}$) преобразование 2_x или 2_y.

Группы I, 2, 222 (выделены пунктиром) являются подгруппами группы mmm.

Таким образом, получены точечные группы триклинных, моноклинных и ромбических кристаллов. Беря за исходные циклические группы более высокого порядка и добавляя к ним новые преобразования симметрии, можно продолжить вывод 32 групп симметрии. Схема вывода может быть, например, такой же, как в п. I.4.

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

По кристаллографии

I. Аншелес О.М. Начала кристаллографии. Л., 1952.

2. Белова Е.Н., Белов Н.В., Шубников А.В. О числе и составе абстрактных групп, отвечающих 32 кристаллографическим классам. - Докл. АН СССР, 1948, т. 63, № 6, с. 669-673.

3. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М., 1971.

4. Большая советская энциклопедия. Т. 7. М., 1972, с. 405.

5. Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография. Т. I, М., 1979.

6. Вустер У. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов. М., 1977.

7. Галиулин Р.В. Матрично-векторный способ вывода федоровских групп. № 1094-69. Деп. ВИНИТИ, 1969.

8. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. Геометрическая кристаллография. М., 1973.

9. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. Геометрическая микрокристаллография. М., 1976.

10. Зоркий П.М., Афонина Н.Н. Симметрия молекул и кристаллов. М., 1979.

11. Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г., Галиулин Р.В., Коваленко В.С. О матричной записи кристаллических классов в репере Бравэ. - В кн.: Проблемы кристаллологии, М., 1971, с. 284-288.

12. Нардов В.В. Практическое руководство по геометрической кристаллографии. Л., 1974.

13. О форме представления кристаллографических данных для публикации. - В кн.: Кристаллохимия и структурная минералогия, Л., 1979, с. 111-127.

14. Попов Г.Б., Шафрановский И.И. Кристаллография. М., 1972.

15. Татарский В.Б. О двух сортах ортогональных поясов и об установке моноклинных кристаллов. - Записки Всесоюзн. минерал. об-ва, 1981, ч. 110, вып. 6, с. 693-698.

16. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. М., 1983.

17. Шаскольская М.П. Кристаллография. М., 1976.

18. Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. Т. I, 2, М., 1983.

19. Buerger M.J. Elementary Crystallography. N.Y.-L., 1956.

20. International Tables for X-ray Crystallography. Vol. I. Birmingham, 1959.

21. Kennard O., Speakman J.C., Donnay J.D.H. Acta Crystallogr., 1967, vol. 22, p. 445-449.

По алгебре

22. Александров П.С. Введение в теорию матриц. М., 1980.

23. Беллман Р. Введение в теорию матриц. М., 1976.

24. Головина Л.И. Линейная алгебра и некоторые ее приложения. М., 1979.

25. Ильин В.А., Позднях Э.Г. Линейная алгебра. М., 1978.

26. Корн Г. и Корн Т. Справочник по математике. М., 1977.

27. Курош А.Г. Курс высшей алгебры. М., 1975.

С О Д Е Р Ж А Н И Е

Подписано в печать 29.04.84. Ф-т 60x90/I6. Печ. л. 3.
Тираж 300 экз. Заказ № 314 . Бесплатно.
РИО ЛГУ. I99I64, Ленинград, Университетская наб., 7/9.
ФОЛ ЛГУ. I99I64, Ленинград, наб. Макарова, 6.