

## § 20. Кристаллографические группы и конечные подгруппы групп вращений плоскости и пространства. Примеры инвариантных тензоров

В этом параграфе мы познакомимся с кристаллографическими группами. Затем мы классифицируем конечные подгруппы в ортогональных группах  $O(2)$  и  $O(3)$ .

Мы будем рассматривать кристаллическую структуру, целиком заполняющую все трехмерное евклидово пространство, или же евклидову плоскость (плоская структура). Одна из стандартных моделей кристалла следующая: считается, что кристалл состоит из нескольких сортов атомов, жестко закрепленных в пространстве (или на плоскости) и расположенных друг относительно друга строго определенным образом.

**О п р е д е л е н и е 1.** *Решеткой кристалла* называется совокупность всех атомов кристалла.

Мы резко сузим класс рассматриваемых решеток и ограничимся трансляционно инвариантными решетками, к определению которых мы сейчас перейдем. Именно такие решетки соответствуют большинству реальных физических кристаллов (в некотором приближении). Мы будем считать, что решетка кристалла всегда содержит некоторое подмножество, определяемое так: это все точки (атомы), являющиеся концами векторов  $\alpha = n_1\alpha_1 + n_2\alpha_2 + n_3\alpha_3$  (или на плоскости:  $\alpha = n_1\alpha_1 + n_2\alpha_2$ ). Здесь  $n_1, n_2, n_3$  — произвольные целые числа, векторы  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  называются векторами основных трансляций. Векторы  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  иногда называются примитивными векторами решетки и всегда предполагаются линейно независимыми.

Важное требование: обычно считается, что решетка  $R$  кристалла переходит в себя при всех основных трансляциях вдоль векторов  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , а значит, и при всех целочисленных линейных комбинациях этих основных трансляций; т. е. требуется, чтобы кристаллическая структура оставалась инвариантной при всех трансляциях, порожденных векторами  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ . Это — одно из основных свойств реальных («бесконечных») кристаллов.

Обозначим трансляции вдоль векторов  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  через  $\tau_1, \tau_2, \tau_3$  соответственно. Тогда любая из рассматриваемых нами трансляций может быть записана в виде

$$T = n_1\tau_1 + n_2\tau_2 + n_3\tau_3.$$

**О п р е д е л е н и е 2.** Решетка  $R$  называется *трансляционно инвариантной*, если она переходит в себя при произвольной трансляции вида  $T = n_1\tau_1 + n_2\tau_2 + n_3\tau_3$ . Аналогичное определение формулируется и в случае плоской решетки.

Итак, в дальнейшем мы будем рассматривать только трансляционно инвариантные решетки (на плоскости или в пространстве).

**З а м е ч а н и е.** Обычно начинают изложение математической теории кристаллов с понятия такой дискретной подгруппы  $\Gamma$  группы  $G_3$  движений пространства  $\mathbb{R}^3$ , что  $G_3/\Gamma$  компактно. Это и называют кристаллографической группой  $\Gamma$ . Доказывается, что подгруппа трансляций имеет конечный индекс в  $\Gamma$ . Атомы располагаются в точках какой-либо орбиты группы  $\Gamma$ . Обычно это одна из наиболее симметричных орбит. Подробное изложение читатель может найти в книге [46].

**О п р е д е л е н и е 3.** Параллелепипед, построенный на векторах  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , называется *примитивной ячейкой* решетки (кристалла).

**З а м е ч а н и е.** Пусть нам задана некоторая решетка  $R$ . Мы всегда будем считать, что векторы  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  ( $\alpha_1, \alpha_2$  на плоскости) таковы, что объем параллелепипеда, построенного на них, является минимально возможным.

На рис. 18 изображена простейшая двумерная решетка; показана также ее примитивная ячейка. Ясно, что в силу трансляционной инвариантности кристалла весь кристалл (решетка) состоит из объединения сдвинутых (трансляциями) примитивных ячеек. Простейшая плоская решетка, изображенная на рис. 18, обладает тем свойством, что каждый атом (т. е. каждая точка решетки) получается из какого-то одного атома (произвольного) путем применения некоторой трансляции  $T = n_1\tau_1 + n_2\tau_2 + n_3\tau_3$ .

Это обстоятельство выражают в следующих терминах: множество всех основных трансляций *транзитивно* на решетке. Однако это выполнено далеко не для всех решеток. В частности, это может происходить и по следующей причине: решетка, вообще говоря, состоит из нескольких типов атомов, а потому (в рамках нашей модели) естественно требовать, чтобы при основной трансляции атомы одного сорта переходили снова в атомы этого же сорта и не переходили в те точки решетки, которые заняты атомами другого сорта. Таким образом, множество основных трансляций может быть не транзитивно на решетке. Пример такой решетки показан на рис. 19.

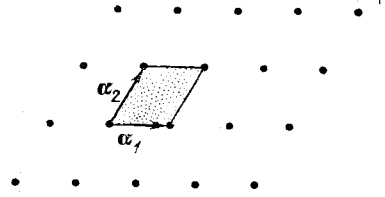


Рис. 18

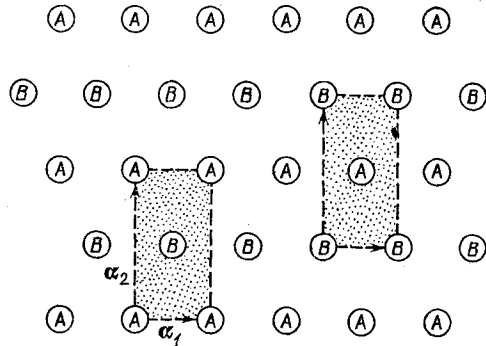


Рис. 19

Здесь атомы типа А не могут быть переведены основными трансляциями в атомы типа В (аналогично, атомы типа В не переводятся в атомы типа А). В то же время основные трансляции транзитивны на атомах типа А и на атомах типа В (по отдельности): любой атом типа А (соответственно В) может быть получен из какого-то одного атома типа А (соответственно В) путем применения некоторой основной трансляции.

Таким образом, видим, что в общем случае для полного задания решетки кристалла недостаточно задать совокупность основных трансляций. С другой стороны, ясно, что поскольку вся решетка является объединением примитивных ячеек, то для полного описания решетки, наряду с совокупностью всех основных трансляций, достаточно задать расположение атомов в какой-нибудь одной примитивной ячейке. Конечно, среди множества всех решеток естественно выделен такой класс решеток, у которых все атомы примитивной ячейки получаются из одного атома этой ячейки применением основных трансляций (двух трансляций на плоскости и трех — в пространстве).

**Определение 4.** Решетка  $R$  (двумерная или трехмерная), все атомы которой расположены в точках вида  $n_1\alpha_1 + n_2\alpha_2 + n_3\alpha_3$  ( $n_1\alpha_1 + n_2\alpha_2$  для плоскости), где  $n_1, n_2, n_3$  — произвольные целые числа, называется *решеткой Браве*.

Можно сказать, что совокупность основных трансляций транзитивна на решетке Браве. Из определения видно, что различные решетки Браве отличаются друг от друга только формой примитивной ячейки. В частности, аффинным преобразованием любые две решетки Браве могут быть переведены друг в друга, т. е. с аффинной точки зрения имеется только одна решетка Браве. Метрически различные решетки Браве (т. е. решетки, не совмещаемые друг с другом ортогональными преобразованиями и параллельными переносами) разнятся углами и длинами векторов основных трансляций.

**Определение 5.** Пусть  $X_1, \dots, X_n$  — атомы, расположенные внутри примитивной ячейки; тогда векторы  $X_1, \dots, X_n$  (идущие из начала координат — вершины примитивной ячейки — в точки  $X_1, \dots, X_n$ ) образуют *базис решетки* (рис. 20).

**Утверждение 1.** *Задание векторов основных трансляций и базиса решетки  $R$  полностью определяет всю решетку  $R$ .*

Это утверждение очевидным образом следует из наших определений базиса, трансляций и из свойства инвариантности (трансляционной) решетки. Более детальные рассуждения мы оставляем читателю как элементарное упражнение на перечисленные определения.

Окончательно установим соответствие между свойствами идеального бесконечного кристалла и реального кристалла, имеющего границу. На рис. 21 изображен (идеализированно) реальный трехмерный кристалл без дефектов, имеющий границу. Здесь

числа  $N_1, N_2, N_3$  обозначают число примитивных ячеек, укладываемых в соответствующих ребрах нашего параллелепипеда (кристалла), т. е.  $AB = N_1\alpha_1, BC = N_2\alpha_2, AD = N_3\alpha_3$ .

Будем разрезать трансляции реального кристалла на произвольные векторы, кратные векторам  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , но при этом будем

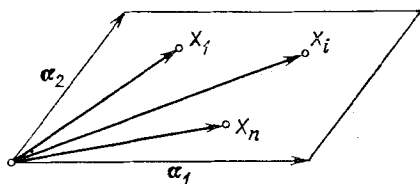


Рис. 20

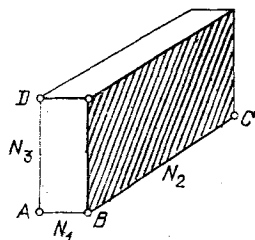


Рис. 21

поступать следующим образом: сдвинув, например, решетку на вектор  $\alpha_1$ , мы срежем слой, вышедший за правую грань (границу) кристалла и приклеим его к левой грани, которая ровно на вектор  $\alpha_1$  углубилась внутрь параллелепипеда. Оказывается, что использование такой формальной модели оправдано: большинство физических конструкций и вычислений не меняется при такой процедуре «периодизации». Ясно, что такая точка зрения в точности эквивалентна рассмотрению бесконечного идеального кристалла. Введение описанных выше условий периодичности на гранях кристалла можно пояснить на наглядном геометрическом языке. Так как граница кристалла (например, рассмотрим для простоты одномерный кристалл) состоит из двух атомов с номерами 1 и  $N$ , то любая трансляция такого «склеенного» кристалла (т. е. одномерного кристалла с условием периодичности на его концах) сводится к вращению окружности на угол, кратный  $2\pi/N$ . В случае плоских кристаллов введение условия периодичности эквивалентно тому, что мы вводим тор  $T^2$ . Трехмерный кристалл с условием периодичности склеивается в тор  $T^3$ .

С каждой решеткой естественно связано понятие симметричной ячейки (не путать с примитивной ячейкой!). Симметричная ячейка содержит в себе некоторый выделенный атом, являющийся ее центром.

Определение 6. Фиксируем атом решетки  $R$ . *Симметричной ячейкой* (с центром в данном атоме) называется множество точек пространства (соответственно плоскости в случае плоской решетки), расположенных ближе к фиксированному нами атому, чем к любому другому атому решетки. Симметричная ячейка иногда называется *ячейкой Вигнера — Зейтца* (в теории дискретных групп — «областью Дирихле»).

На рис. 22 изображена так называемая гексагональная двумерная (плоская) решетка, на которой указаны примитивная и симметричная ячейки (эти ячейки различны!). Границами (двумерной) симметричной ячейки являются перпендикуляры, восстановленные к серединам всех ребер решетки, соединяющих фиксированный атом со всеми ближайшими соседними атомами.

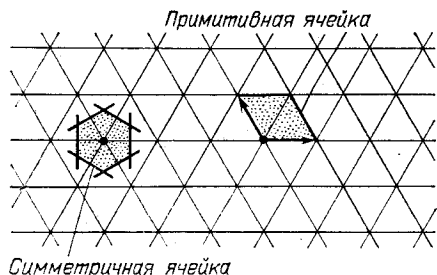


Рис. 22

Теперь мы перейдем к изучению преобразований, сохраняющих решетку (т. е. преобразующих ее в себя). Рассмотрим группу движений пространства (соответственно плоскости), т. е. совокупности всех линейных преобразований (неоднородных), сохраняющих квадратичную форму  $ds^2 = (dx^1)^2 + (dx^2)^2 + (dx^3)^2$  (соответственно  $ds^2 = (dx^1)^2 + (dx^2)^2$ ). Обозначим эту группу через  $G_3$  (в случае плоскости — через  $G_2$ ).

**Утверждение 2.** *Любой элемент  $g$  группы  $G_3$  (соответственно  $G_2$ ) единственным образом представляется в виде композиции двух преобразований:  $g = T \circ \alpha$ , где  $T$  — трансляция, а  $\alpha$  — вращение (собственное или несобственное, т. е. с определителем  $+1$  или  $-1$ ).*

**Доказательство.** Как было показано в § 4, любое движение  $g$  трехмерного пространства принадлежит к одному из двух типов: 1) винтовое движение  $g = T\alpha$ , где  $\alpha$  — вращение,  $\det \alpha = +1$ ,  $T$  — трансляция вдоль оси вращения; 2)  $g = \alpha$ , где  $\alpha \in O(3)$  и  $\det \alpha = -1$  (зеркальное вращение). В каждом из этих двух типов описанное представление вида  $g = T\alpha$  или  $g = \alpha$  однозначно. Утверждение доказано.

**Замечание.** Так как трансляции и вращения не коммутируют между собой (вообще говоря), то  $T\alpha \neq \alpha T$  (постройте пример!).

Совокупность трансляций  $\{T\}$  образует, очевидно, подгруппу в  $G_3$  (соответственно  $G_2$ ), которая является нормальным делителем в  $G_3$  (соответственно  $G_2$ ). В самом деле, преобразование  $gTg^{-1}$  снова является трансляцией для любого вращения  $g \in O(3)$ , где  $O(3)$ , как и выше, обозначает группу вращений вокруг точки  $O$  ( $g \in O(2)$  для случая плоскости). Отметим, что группа  $O(3)$  (соответственно  $O(2)$ ) не является нормальным делителем в группе  $G_3$  (соответственно  $G_2$ ).

Среди всех преобразований группы  $G_3$  (группы  $G_2$ ) мы выделим теперь все те преобразования, которые переводят в себя некоторую фиксированную решетку  $R$ .

**Определение 7.** Множество преобразований (движений) из группы  $G_3$  (соответственно  $G_2$ ), переводящих решетку  $R$  в себя, называется *пространственной группой* этой решетки и будет обозначаться нами через  $G_3(R)$  (соответственно  $G_2(R)$ ).

Ясно, что множество  $G_3(R)$  (соответственно  $G_2(R)$ ) является группой в обычном алгебраическом смысле.

Все дальнейшие определения мы сформулируем для случая трехмерного евклидова пространства, имея в виду, что аналогичные определения и факты имеют место и в плоском случае.

Группа  $G_3(R)$  содержит в себе подгруппу  $T_3(R)$  — группу трансляций решетки.

**Определение 8.** *Группой трансляций кристалла* (т. е. решетки  $R$ ) называется подгруппа  $T_3(R)$  группы  $G_3(R)$ , состоящая из всевозможных трансляций  $T$  (напомним, что любая трансляция решетки  $R$  имеет вид  $T = n_1\tau_1 + n_2\tau_2 + n_3\tau_3$ , где  $\tau_1, \tau_2, \tau_3$  — трансляции, порожденные примитивными векторами решетки  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ ).

Напомним также, что мы все время рассматриваем трансляционно инвариантные решетки  $R$ .

Легко показать, что подгруппа  $T_3(R)$  является нормальным делителем в группе  $G_3(R)$ . В самом деле, нужно доказать, что если  $g \in G_3(R)$  и  $t \in T_3(R)$ , то  $gtg^{-1} \in T_3(R)$  для любых  $g$  и  $t$ . Иными словами, нужно убедиться в том, что преобразование  $gtg^{-1}$  снова является трансляцией решетки. Но это следует из трансляционной инвариантности решетки.

В дальнейшем изложении мы будем предполагать, что фиксирована некоторая точка  $O$  пространства, принадлежащая нашей решетке, — «начало координат»; например, вершина примитивной ячейки — начало векторов основных трансляций. Всевозможные вращения решетки (с определителем  $\pm 1$ ) мы будем рассматривать относительно этой точки  $O$ .

Как было доказано выше, любое преобразование  $g \in G_3$  допускает однозначное представление в виде  $g = T\alpha$ , где  $T$  — трансляция, а  $\alpha$  — вращение с определителем  $\pm 1$ . Иногда для вычислительных целей полезно представлять это разложение в матричном виде. Отметим, что любое движение  $g$  евклидова пространства  $\mathbb{R}^n$  можно (однозначно) представить в виде  $y = Ax + b$ , где  $y, x$  — векторы из  $\mathbb{R}^n$ ,  $A \in O(n)$ ,  $b$  — фиксированный вектор из  $\mathbb{R}^n$ , — вектор, определяющий трансляцию. Неоднородному преобразованию  $g$  пространства  $\mathbb{R}^n$ , можно однозначно сопоставить следующее однородное преобразование пространства  $\mathbb{R}^{n+1}$ :

$$\hat{g} = \begin{array}{c|c} & \begin{array}{c} b^1 \\ \vdots \\ b^n \end{array} \\ \hline A & 1 \\ \hline 0 \dots 0 & 1 \end{array}$$

При этом оператор  $\hat{g}$ , действуя в  $\mathbb{R}^{n+1}$ , порождает на плоскости  $\mathbb{R}^n$ , проходящей через точку с координатами  $(0, \dots, 0, 1)$  параллельно координатной плоскости  $\mathbb{R}^n$   $(x^1, \dots, x^n)$  (рис. 23), линейное неоднородное преобразование, совпадающее с действием

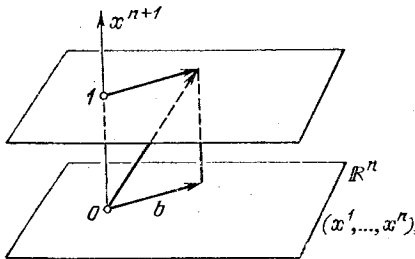


Рис. 23

оператора  $g$  в пространстве  $\mathbb{R}^n$ . В частности, из явной записи оператора  $\hat{g}$ , очевидно, следует, что группа движений пространства  $\mathbb{R}^{n+1}$  распадается в полупрямое произведение подгруппы вращений

	0
A	⋮
	0
0 ... 0	1

и подгруппы трансляций

	$b^1$
0	⋮
	$b^n$
0 ... 0	1

Вернемся теперь к группе преобразований некоторой решетки  $R$ . Поскольку  $G_3(R) \subset G_3$ , то и любой элемент  $g \in G_3(R)$  допускает однозначное представление в виде  $g = T\alpha$ , где  $T$  — трансляция,  $\alpha$  — вращение ( $T\alpha \neq \alpha T$ , вообще говоря). Подчеркнем важное обстоятельство: преобразования  $T$  и  $\alpha$  не обязаны принадлежать группе  $G_3(R)$ ; в частности, преобразование  $T$  вовсе не обязано быть элементом группы трансляций кристалла (тем не менее композиция  $T\alpha$  уже является преобразованием решетки, переводя ее в себя).

Группа  $O(3)$  (группа всех трехмерных ортогональных матриц) состоит из двух компонент связности, а именно: одна компонента (подгруппа собственных вращений  $SO(3)$ ) состоит из матриц  $\alpha$  с определителем  $+1$ , а вторая компонента (несобственные вращения) состоит из матриц  $\alpha$  с определителем  $-1$ . Группа всех параллельных переносов в  $\mathbb{R}^3$  связна (она описывается тремя параметрами и не отличается от самого трехмерного пространства). В то же время группа  $G_3(R)$  дискретна; дискретность группы  $G_3(R)$  означает, что в группе  $G_3(R)$  не существует преобразований, сколь угодно близких к единице группы (кроме, конечно, самого тождественного преобразования).

Итак, любой элемент  $g \in G_3(R)$  имеет вид  $g = T\alpha$ , где преобразования  $T$  и  $\alpha$  восстанавливаются по преобразованию  $g$  однозначно, т. е. из равенства  $T\alpha = T'\alpha'$  следует, что  $T = T'$  и

$\alpha = \alpha'$  (см. доказательство выше). Однако группа  $G_3(R)$  не распадается в прямое произведение двух своих подгрупп, поскольку, вообще говоря,  $T\alpha \neq \alpha T$ .

Определение 9. Совокупность всех вращений  $\alpha \in O(3)$  таких, что для некоторого  $T$  (трансляции) преобразование  $T\alpha$  принадлежит группе  $G_3(R)$ , называется *точечной группой* кристалла (или решетки  $R$ ).

Иными словами, вращение  $\alpha$  принадлежит точечной группе кристалла  $R$  в том и только в том случае, когда существует такая трансляция  $T$  (не обязательно принадлежащая группе  $T_3(R)$  трансляций решетки), что композиция преобразований  $T\alpha$  есть элемент пространственной группы кристалла, т. е. группы  $G_3(R)$ . Точечную группу мы будем обозначать через  $S_3(R)$ . Эту группу часто называют также *группой симметрий* кристалла (решетки), а ее элементы — *операциями симметрии* кристалла (решетки).

Утверждение 3. Множество преобразований  $S_3(R)$  образует группу в обычном алгебраическом смысле.

Доказательство. Так как подгруппа  $T_3$  (группа трансляций) группы  $G_3$  является ее нормальным делителем, то можно рассмотреть проекцию  $\pi$  группы  $G_3$  на факторгруппу  $G_3/T_3$ . При этом группа  $G_3(R)$  перейдет в некоторую подгруппу  $\pi G_3(R)$  группы  $G_3/T_3$ . Из доказанного ранее следует, что факторгруппа  $G_3/T_3$  изоморфна группе  $O(3)$ , таким образом,  $\pi G_3(R)$  является подгруппой группы  $O(3)$ . Элементами этой подгруппы являются те и только те вращения  $\alpha$ , для которых существует такой элемент  $T \in T_3$ , что композиция  $T\alpha$  принадлежит  $G_3(R)$ . Поскольку это совпадает с определением множества  $S_3(R)$ , то тем самым доказано, что множество  $S_3(R)$  совпадает с  $\pi G_3(R)$ , в частности оно является группой. Утверждение доказано.

Замечание. Так как группа  $\pi G_3(R)$  изоморфна факторгруппе  $G_3(R)/G_3(R) \cap \text{Ker}(\pi)$ , где  $\pi: G_3 \rightarrow O(3)$ , и так как  $\text{Ker}(\pi) = T_3^*$ , то окончательно  $\pi G_3(R) \approx S_3(R) \approx G_3(R)/G_3(R) \cap T_3$ . С другой стороны, пересечение  $G_3(R) \cap T_3$  совпадает с группой  $T_3(R)$ , т. е. точечная группа кристалла  $S_3(R)$  изоморфна факторгруппе  $G_3(R)/T_3(R)$ .

Иногда бывает полезно явное вычисление операции умножения в точечной группе кристалла и вычисление трансляции, отвечающей композиции двух симметрий. Пусть  $\alpha_1, \alpha_2 \in S_3(R)$ . Рассмотрим  $\alpha_3 = \alpha_1\alpha_2 \in S_3(R)$ . По определению  $S_3(R)$  существуют такие  $T_1$  и  $T_2$ , что  $T_1\alpha_1 \in G_3(R)$ ,  $T_2\alpha_2 \in G_3(R)$ ; тогда  $(T_1\alpha_1)(T_2\alpha_2) \in G_3(R)$ . Пусть трансляции  $T_1, T_2$  определяются векторами  $x_1, x_2$ , а вращения  $\alpha_1, \alpha_2$  — матрицами  $A_1, A_2$  соответственно. Тогда, если  $r$  — вектор в пространстве  $\mathbb{R}^3$ , то  $(T_1\alpha_1)r = A_1r + x_1$ ,  $(T_2\alpha_2)r = A_2r + x_2$  (сначала применяется вращение,

\*) Для гомоморфизма  $\pi$  через  $\text{Ker}(\pi)$  обозначается совокупность элементов группы таких, что  $\pi(g) = 1$ .



а потом трансляция). Отсюда  $(T_1\alpha_1)(T_2\alpha_2)r = (T_1\alpha_1T_2\alpha_2)r = (A_1A_2)r + (A_1x_2 + x_1)$ . Итак, вращение  $\alpha_3 = \alpha_1\alpha_2$ , определяемое матрицей  $A_1A_2$ , входит в преобразование  $g = T_3\alpha_3$ , где трансляция  $T_3$  задается вектором  $x_3 = A_1x_2 + x_1$ .

Приведем теперь пример плоской (двумерной) решетки  $R$ , для которой существует элемент  $g \in G_3(R)$ , разложение которого

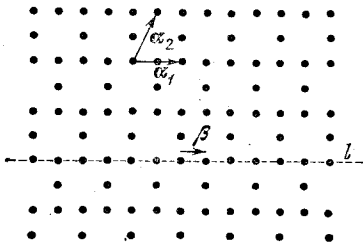


Рис. 24

в композицию вида  $g = T\alpha$  обладает тем свойством, что  $T \notin G_3(R)$  и  $\alpha \notin G_3(R)$ . Решетка изображена на рис. 24. Отражение  $\alpha \in O(2)$  в прямой  $l$ , очевидно, не сохраняет решетку  $R$ ; далее, трансляция  $T$  вдоль вектора  $\beta$  (заметим, что эта трансляция не является примитивной трансляцией решетки), также не сохраняет решетку  $R$ , т. е. два преобразования  $T$  и  $\alpha$  не принадлежат группе  $G_2(R)$ .

Однако преобразование  $g = T\alpha$ , очевидно, переводит решетку  $R$  в себя. Эта операция (преобразование)  $g = T\alpha$  является скользящим отражением. Подчеркнем еще раз, что элементы точечной группы (преобразования) кристалла (решетки), вообще говоря, не переводят в себя кристалл (решетку), т. е. точечная группа кристалла не является подгруппой группы движений кристалла. Точечная группа имеет большое значение в теории кристаллических структур и недаром называется группой симметрий решетки, поскольку она содержит в себе не только «настоящие» симметрии решетки, но и такие преобразования, которые переводят в себя решетку только после применения некоторой трансляции, также не являющейся движением решетки. Ясно, что решетка, изображенная на рис. 24, обладает симметрией скользящего отражения. Кроме кристаллов с симметрией такого типа, часто встречаются кристаллы, обладающие винтовой (или аксиально-винтовой) симметрией. Эта симметрия является композицией вращения  $\alpha \in O(3)$  и трансляции  $T$  вдоль оси этого вращения. Рекомендуем читателю построить пример трехмерной решетки, обладающей аксиально-винтовой симметрией.

В теории кристаллических структур часто рассматривают еще одну группу преобразований, естественно связанную с каждой решеткой.

**Определение 10.** *Стационарной группой  $H_3(R)$  решетки называется подгруппа группы  $G_3(R)$ , состоящая из всех преобразований, сохраняющих решетку и оставляющих неподвижной точку  $O$  — центр вращений.*

Напомним, что точка  $O$  предполагается фиксированной. Ясно, что  $H_3(R) = G_3(R) \cap O(3)$ , поскольку любое преобразование решетки, оставляющее точку  $O$  на месте, является ортогональным

преобразованием, т. е. вращением вокруг точки  $O$ , причем определитель этого преобразования может равняться как  $+1$ , так и  $-1$ . Группа  $H_3(R)$  не является, вообще говоря, факторгруппой группы  $G_3(R)$  по нормальному делителю  $T_3(R)$ , т. е.  $H_3(R) \not\cong G_3(R)/T_3(R)$ . См. пример на рис. 24.

**Утверждение 4.** Группы  $H_3(R)$  (стационарная группа),  $S_3(R)$  (точечная группа или группа симметрий) и  $G_3(R)$  (группа движений решетки), рассматриваемые как подгруппы в группе  $G$ , связаны между собой соотношением  $H_3(R) = S_3(R) \cap G_3(R)$ .

**Доказательство.** Докажем сначала, что  $H_3(R) \subset S_3(R) \cap G_3(R)$ . Пусть  $\alpha \in H_3(R)$ . Тогда  $\alpha$ , в частности, является вращением (и принадлежит  $G_3(R)$ ), а потому можно положить  $g = T\alpha$ , где  $T = E$  — тождественное преобразование (сдвиг на нулевой вектор), т. е.  $g = \alpha = E\alpha$ ; отсюда, по определению  $S_3(R)$ , получаем, что  $\alpha \in S_3(R)$ . Обратное: докажем, что  $H_3(R) \supset S_3(R) \cap G_3(R)$ . Пусть  $\alpha \in S_3(R)$  и  $\alpha \in G_3(R)$ . Это означает, что  $\alpha$  сохраняет решетку  $R$  и, кроме того, является вращением, т. е.  $\alpha \in O(3) \cap G_3(R) = H_3(R)$ . Тот факт, что  $\alpha$  входит в некоторое разложение  $g = T\alpha$ , в данный момент для нас несуществен. Утверждение доказано.

**Замечание.** Если решетка  $R$  является решеткой Браве, то группы  $S_3(R)$  и  $H_3(R)$  совпадают. Это непосредственно следует из определения решетки Браве (см. выше).

Далеко не каждая подгруппа ортогональной группы  $O(3)$  может являться точечной группой (т. е. группой симметрий) некоторой решетки  $R$ . Оказывается, что трансляционная инвариантность решетки накладывает весьма жесткие ограничения на группы  $S_3(R)$ ,  $G_3(R)$  и  $H_3(R)$ . Обозначим через  $H_3(R)_{(0)}$  подгруппу стационарной группы  $H_3(R)$ , состоящую только из собственных вращений, т. е.  $H_3(R)_{(0)} = SO(3) \cap G_3(R)$ ; каждое вращение из подгруппы  $H_3(R)_{(0)}$  имеет определитель  $+1$  и оставляет точку  $O$  неподвижной. В теории кристаллических структур большое значение имеет следующая теорема.

**Теорема 1.** Пусть  $R$  — трансляционно инвариантная решетка. Тогда группа  $H_3(R)_{(0)}$  состоит из конечного числа преобразований, каждое из которых является поворотом вокруг некоторой оси, проходящей через точку  $O$ , на угол  $\varphi$ , кратный либо  $\pi/3$ , либо  $\pi/2$ .

**Доказательство.** Рассмотрим сначала частный случай, когда решетка  $R$  является решеткой Браве, т. е. все атомы ее примитивной ячейки получаются из точки  $O$  путем применений к точке  $O$  основных трансляций решетки. Пусть  $\alpha \in H_3(R)_{(0)}$  — собственное вращение; тогда, как нам известно из § 4, преобразование  $\alpha$  является поворотом на некоторый угол  $\varphi$  вокруг некоторой оси  $l$ , проходящей через неподвижную точку  $O$  (напомним, что мы вычисляем группу  $H_3(R)_{(0)}$  относительно точки  $O$ , совпадающей с одним из атомов решетки). Пусть  $\Pi$  — плоскость, орто-

гональная  $l$  и проходящая через точку  $O$ . Решетка Браве состоит из точек, определяемых векторами  $\alpha = n_1\alpha_1 + n_2\alpha_2 + n_3\alpha_3$ . Спроектируем все атомы решетки  $R$  параллельно прямой  $l$  на плоскость  $\Pi$  и рассмотрим проекции точек, которые расположены ближе всего к точке  $O$ , но не совпадают с ней. Фиксируем одну из таких точек  $A_1$  (их может оказаться несколько, находящихся на

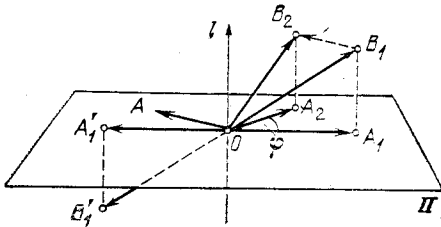


Рис. 25

одинаковом расстоянии от точки  $O$ ; см. рис. 25). Поскольку решетка  $R$  симметрична относительно точки  $O$ , то наряду с каждой точкой  $B_1 \in R$  противоположная ей точка  $B_1$  (относительно точки  $O$ ) также принадлежит  $R$ . При повороте вокруг  $l$  на угол  $\varphi$  точка  $B_1$  перейдет в точку решетки  $B_2$  (так как преобразование  $\alpha$  сохраняет решетку  $R$ ), т. е. проекция  $OA_1$  перейдет в проекцию  $OA_2$ , составляющую с ней угол  $\varphi$ . Так как векторы  $OB_1$  и  $OB_2$  принадлежат решетке, то их разность — вектор  $B_1B_2$  — также принадлежит решетке  $R$ . Так как вектор  $B_1B_2$  параллелен плоскости  $\Pi$ , то, следовательно, после трансляции он определит вектор  $OA$  в плоскости  $\Pi$ , конец которого — точка  $A$  — снова принадлежит решетке. Отсюда следует, что длина вектора  $OA_2$  не меньше длины вектора  $OA_1$  ( $|OA_1| = |OA_2|$ ), так как точки  $A_1$  и  $A_2$  находятся на минимально возможном расстоянии от точки  $O$ . Итак, в треугольнике  $OA_1A_2$  сторона  $A_1A_2$  не меньше, чем  $|OA_1| = |OA_2|$ , т. е. угол  $\varphi$  не меньше  $\pi/3$ . Применяя последовательно преобразование  $\alpha$ , получаем в плоскости  $\Pi$  правильный многоугольник с вершинами  $A_1, A_2, \dots, A_m$  ( $A_{m+1} = A_1$ ), и так как  $\varphi \geq \pi/3$ , то  $1 \leq m \leq 6$ . Однако в силу симметричности решетки  $R$  многоугольник  $A_1 \dots A_m$  также симметричен относительно точки  $O$ . Следовательно,  $m$  может принимать только следующие значения: 2, 4, 6. Итак, угол  $\varphi$  может равняться только следующим числам:  $k\pi, k\pi/2, k\pi/3$ , т. е.  $\varphi = (\pi/3, 2\pi/3, \pi/2, \pi)$ . Таким образом, для решеток Браве теорема доказана.

Для того чтобы провести доказательство теоремы в общем случае, осталось доказать, что в любой решетке содержится подрешетка Браве, переходящая в себя при повороте на угол  $\varphi$ . Однако мы не будем здесь доказывать это, а предпочтем дать другое доказательство, продемонстрировав еще одну важную идею, играющую немалую роль при исследовании кристаллических структур. Рассмотрим сначала случай плоской решетки. Обозначим через  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  векторы основных трансляций решетки  $R$ . Пусть  $\varphi$  — поворот вокруг точки  $O$ , переводящий решетку в себя. Рассмотрим вектор  $\alpha_1$  и применим к нему итерации поворота  $\varphi$ .

При этом мы получим последовательность векторов  $\alpha_1, \varphi\alpha_1, \varphi^2\alpha_1$ . Так как примитивная ячейка содержит только конечное число атомов, то после конечного числа применений поворота  $\varphi$  точка должна вернуться в прежнее положение, следовательно, угол  $\varphi$  имеет вид  $2m\pi/n$  для некоторых целых  $m$  и  $n$  (рис. 26). Так как вектор  $\alpha_1$  был вектором трансляции и так как подгруппа трансляций является нормальным делителем группы движений решетки, то и все векторы  $\alpha_1, \varphi\alpha_1, \varphi^2\alpha_1, \dots$  являются трансляциями решетки. Рассмотрим три вектора  $\alpha_1, \varphi\alpha_1$  и  $\varphi^2\alpha_1$ . Если векторы

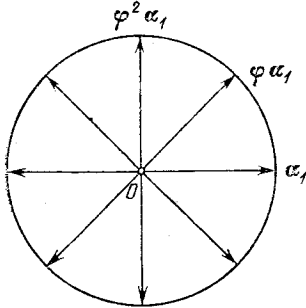


Рис. 26

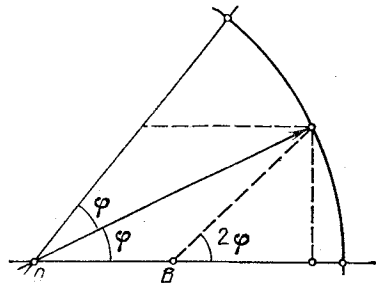


Рис. 27

$\alpha_1$  и  $\varphi^2\alpha_1$  линейно зависимы, то  $\varphi$  есть поворот на угол, кратный  $\pi/2$ . Рассмотрим случай, когда  $\alpha_1, \varphi^2\alpha_1$  — базис. В этом случае, для того чтобы группа движения решетки была дискретна, необходимо и достаточно, чтобы вектор  $\varphi\alpha_1$  разлагался по векторам  $\alpha_1$  и  $\varphi^2\alpha_1$  с рациональными координатами. Действительно, если вектор  $\varphi\alpha_1$  имеет в базисе  $\alpha_1, \varphi^2\alpha_1$  иррациональные координаты, то, применяя последовательные трансляции решетки вдоль вектора  $\varphi\alpha_1$ , получим, что в примитивной ячейке решетки содержится бесконечное число точек (атомов), что противоречит нашему определению решетки. Таким образом, осталось получить аналитическое выражение для координат вектора  $\varphi\alpha_1$  в базисе  $\alpha_1, \varphi^2\alpha_1$ . Из рис. 27 получаем следующее выражение:

$$OB = \cos \varphi - \frac{\cos 2\varphi}{2 \cos \varphi} = \frac{1}{2 \cos \varphi}.$$

(Здесь  $\varphi$  обозначает также угол, поворотом на который является  $\varphi$ .) Таким образом, рациональность координат вектора  $\varphi\alpha_1$  эквивалентна рациональности  $\cos \varphi$ . Отсюда снова получаем, что угол  $\varphi$  может принимать только следующие значения:  $\pi/3, 2\pi/3, \pi/2, \pi$ .

Рассмотрим теперь произвольную трансляционно инвариантную решетку в трехмерном пространстве. Пусть  $\varphi$  — произвольный поворот решетки вокруг точки  $O$ , переводящий решетку в себя. Рассмотрим ось  $l$ , вокруг которой совершается этот поворот, и рассмотрим плоскость  $\Pi$ , ортогональную оси  $l$  и проходящую

через точку  $O$ . Рассмотрим вектор  $\alpha_1$  — вектор основной трансляции (два других вектора основных трансляций нас сейчас не интересуют). В том случае, когда вектор  $\alpha_1$  лежит в плоскости  $\Pi$ , дословно повторяются предыдущие рассуждения. В том случае, когда вектор  $\alpha_1$  не лежит в плоскости  $\Pi$ , он движется по конусу с вершиной в точке  $O$  и осью — прямой  $l$ . Спроектировав этот конус на плоскость  $\Pi$ , мы можем снова повторить предыдущие рассуждения применительно к проекции вектора на плоскость  $\Pi$ . Тем самым теорема полностью доказана.

Теперь рассмотрим плоскую решетку  $R$  и группу  $H_2(R)$ . Доказанная выше теорема позволяет полностью описать набор групп  $H_2(R)_{(0)}$  для произвольных плоских (трансляционно инвариантных) решеток; иными словами, сейчас мы укажем список из пяти групп таких, что любая группа  $H_2(R)_{(0)}$  совпадает с одной из этих групп.

**Теорема 2** (теорема классификации групп  $H_2(R)_{(0)}$ ). Пусть  $C_n$  (где  $n = 1, 2, 3, 4, 6$ ) обозначает группу из  $n$  элементов следующего вида:

$$\left( \begin{array}{cc} \cos \frac{2\pi k}{n} & \sin \frac{2\pi k}{n} \\ -\sin \frac{2\pi k}{n} & \cos \frac{2\pi k}{n} \end{array} \right), \quad 0 \leq k \leq n-1,$$

т. е. группа  $C_n$  состоит из поворотов на угол  $2\pi k/n$  вокруг точки  $O$ . Тогда для любой плоской решетки  $R$  ее группа  $H_2(R)_{(0)}$  совпадает с одной из групп  $C_n$  ( $n = 1, 2, 3, 4, 6$ ).

Это непосредственно следует из доказанной выше теоремы.

Итак, плоские решетки могут иметь только те типы собственных симметрий, которые перечислены выше. Отметим, что группа  $C_1$  состоит только из тождественного преобразования. Если мы теперь захотим перечислить не только собственные стационарные группы плоских решеток, но и несобственные группы, т. е. полные группы  $H_2(R)$ , то для этого достаточно воспользоваться тем, что на плоскости имеется отражение, меняющее ориентацию (например, отражение в оси  $x$ ). Компонируя это отражение с элементами группы  $H_2(R)_{(0)}$  и рассматривая новую группу  $H_2(R) = H_2(R)_{(0)} \cup H_2(R)_{(0)}^*$ , мы, очевидно, и получаем полный список всех стационарных групп плоских решеток:  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6; D_1, D_2, D_3, D_4, D_6$ , где  $C_i \subset D_i$ ,  $i = 1, 2, 3, 4, 6$ , и  $D_i/C_i = \mathbb{Z}_2$ .

Легко предъявить для каждой из этих групп соответствующую плоскую решетку, инвариантную относительно действия этой группы. Это мы оставляем читателю в качестве упражнения.

Отметим, что в списке полученных групп симметрий отсутствует группа  $C_5$ . Поскольку плоские трансляционно инвариантные решетки определяют на плоскости различные орнаменты, то их исследованием занимались специалисты по декоративным узо-

рам на протяжении многих столетий. В частности, в арабском искусстве неоднократно предпринимались попытки построить орнамент, основанный на числе 5 (т. е. с группой  $H_2(R)_{(0)}$ , изоморфной  $C_5$ ). Поскольку эти попытки ни к чему не привели, то в арабские орнаменты были введены так называемые «компромиссные варианты», нарушающие кое-где орнаментальную симметрию, основанную на числе 5.

Рассмотрим произвольную плоскую трансляционно инвариантную решетку. Мы описали все возможные варианты для стационарной группы  $H_2(R)$ . Как устроены полные группы  $G_2(R)$  движений решеток? Оказывается, что существуют ровно 17 неизоморфных друг другу групп, дающих полный список всех групп  $G_2(R)$ . Мы не будем здесь это доказывать. Каждой из этих 17 групп отвечает плоская решетка с такой группой  $G_2(R)$ . Интересно отметить, что все эти 17 типов орнаментов также были обнаружены в древности (в основном египетскими декораторами).

Перейдем теперь к трехмерным решеткам. Здесь задача классификации и полного описания всех типов группы  $H_3(R)$  и  $G_3(R)$  значительно усложняется по сравнению с плоским случаем. Мы не будем поэтому подробно проводить эту классификацию, а разберем более простой вопрос: как устроены все конечные группы собственных вращений в трехмерном пространстве. Поскольку для произвольной трансляционно инвариантной трехмерной решетки ее стационарная группа (как и группа симметрий  $S_3(R)$ ) является дискретной (а следовательно, конечной) группой, то, предъявив полный список всех конечных подгрупп группы  $SO(3)$ , мы, тем самым, оценим «сверху» список групп  $H_3(R)_{(0)}$  и  $S_3(R)_{(0)}$  для трехмерных решеток.

Сначала мы приведем некоторый список конечных групп вращений трехмерного пространства. Рассмотрим некоторую прямую  $l$ , проходящую через точку  $O$ , и пусть  $\Pi$  — плоскость, ортогональная прямой  $l$  и также проходящая через точку  $O$ . Рассмотрим в плоскости  $\Pi$  действие группы  $C_n$  (циклическая группа поворотов в плоскости  $\Pi$  вокруг точки  $O$  на угол  $2\pi/n$ ). Ясно, что эта группа превращается в группу вращений всего трехмерного пространства вокруг оси  $l$ . Обозначим эту группу той же буквой  $C_n$ . Здесь  $n = 1, 2, 3, \dots$ , причем  $C_1$  — группа, состоящая только из тождественного преобразования. Кроме группы  $C_n$  на плоскости  $\Pi$  действует еще одна группа  $D_n$ . Отражение плоскости  $\Pi$  относительно некоторой прямой  $q$ , лежащей в плоскости  $\Pi$ , в трехмерном пространстве можно осуществить поворотом вокруг этой прямой  $q$  на угол, равный  $\pi$ . Таким образом, эти несобственные вращения плоскости  $\Pi$  можно дополнить до собственных вращений трехмерного пространства. Обозначим возникающую группу через  $D'_n$ . Таким образом, группа  $D'_n$  состоит из следующих преобразований: всех преобразований из подгруппы  $C_n$  и, кроме того, поворотов на угол  $\pi$  всего трехмерного пространства вокруг  $n$

осей, лежащих в плоскости  $\Pi$  и образующих друг с другом углы, равные  $\frac{2\pi}{2n} = \frac{\pi}{n}$ . Следует отметить, что группа  $D'_1$ , так же как и группа  $C_2$ , состоит только из двух элементов: из тождественного преобразования и поворота вокруг единственной прямой в плоскости  $\Pi$ , поэтому эти две группы изоморфны. Следовательно, если мы хотим составить список различных (неизоморфных) групп, то группу  $D'_1$  следует исключить. Таким образом, получаем следующий список:  $C_n$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ ;  $D'_n$ ,  $n = 2, 3, 4, \dots$

Кроме этих двух бесконечных серий дискретных групп, в трехмерном пространстве существуют еще некоторые более экзотические группы преобразований. В самом деле, рассмотрим пять правильных многогранников в трехмерном пространстве (куб, октаэдр, икосаэдр, тетраэдр, додекаэдр). Каждому из них можно сопоставить конечную группу собственных вращений, переводящих этот многогранник в себя. Этим способом мы получаем еще пять конечных групп. Однако среди этих пяти групп есть совпадающие. В действительности, различными будут только три группы: группы тетраэдра, куба и додекаэдра. Рассмотрим этот вопрос более подробно. Впишем в куб сферу, а в сферу — октаэдр таким образом, чтобы вершины октаэдра совпали с теми точками, в которых грани куба касаются сферы (рис. 28). Ясно, что всякое вращение, переводящее куб в себя, оставляет инвариантным также и октаэдр. Верно и обратное; следовательно, группы симметрий куба и октаэдра совпадают. Точно так же устанавливается,

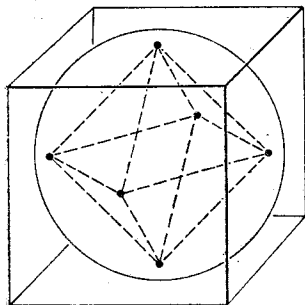


Рис. 28

что совпадают группы симметрий (собственных вращений) додекаэдра и икосаэдра. Обозначим через  $T$ ,  $W$ ,  $P$  группы собственных вращений (соответственно) тетраэдра, куба (и октаэдра), додекаэдра (и икосаэдра). Можно вычислить (мы оставляем это как задачу для читателя), что порядки этих групп равны соответственно 12, 24, 60. Если же рассмотреть полные группы вращений многогранников (т. е. включая и несобственные вращения), то, естественно, полученные группы  $T$ ,  $W$ ,  $P$  имеют порядки 24, 48, 120. Оказыва-

ется, что предъявленные нами группы исчерпывают весь список собственных дискретных групп вращений.

**Теорема 3.** *Полный список конечных групп собственных вращений в трехмерном пространстве имеет вид*

$$\begin{aligned} C_n & \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \\ D'_n & \quad (n = 2, 3, \dots), \\ T, W, P, & \end{aligned}$$

где  $C_n$  — группа (циклическая), состоящая из повторных применений поворота вокруг некоторой оси  $l$  на угол  $\alpha$ , равный  $2\pi/n$ , где  $n$  — целое число;  $D'_n$  — группа тех же вращений, взятых вместе с отражениями относительно  $n$  осей, лежащих в плоскости, перпендикулярной  $l$ , составляющих друг с другом углы  $\alpha/2$ ;  $T$ ,  $W$ ,  $P$  — группы преобразований, оставляющие инвариантными соответственно правильный тетраэдр, куб (или октаэдр) и додекаэдр (или икосаэдр).

Доказательство. Во-первых, известно, что всякое собственное вращение в трехмерном пространстве, не являющееся тождественным, есть вращение вокруг некоторой оси. Поэтому каждое такое вращение оставляет на единичной сфере неподвижными ровно две диаметрально противоположные точки, в которых ось вращения пересекает сферу. Назовем такие точки полюсами вращения.

Пусть теперь задана какая-нибудь конечная группа  $\Gamma$  собственных вращений порядка  $N$ . Тогда в ней ровно  $N - 1$  нетождественных преобразований. Рассмотрим их полюсы. Число  $\nu$  преобразований из  $\Gamma$ , оставляющих полюс  $p$  неподвижным, называется кратностью полюса  $p$ . Очевидно, эти  $\nu$  преобразований являются итерациями вращения вокруг соответствующей оси на угол  $2\pi/\nu$ . Они составляют циклическую подгруппу  $\Gamma_p$  группы  $\Gamma$  порядка  $\nu$ . Число нетождественных преобразований в группе  $\Gamma_p$  равно  $\nu - 1$ .

Рассмотрим теперь орбиту точки  $p$  относительно группы  $\Gamma$ . Покажем, что число элементов орбиты полюса  $p$  кратности  $\nu$  равно в точности  $N/\nu$ . В самом деле, заметим, что все элементы орбиты являются полюсами той же кратности  $\nu$ . Это вытекает из следующих простых рассуждений. Пусть преобразование  $A$  из  $\Gamma$  переводит  $p$  в точку  $q$ , а  $B \in \Gamma_p$ , т. е.  $B$  оставляет  $p$  на месте. Тогда преобразование  $A^{-1}BA$  переводит  $q$  в  $q$ . И обратно, если  $T$  — некоторое преобразование, переводящее  $q$  в себя, то преобразование  $ATA^{-1} = B$  переводит  $p$  в  $p$ ; следовательно, преобразование  $T$  имеет вид  $A^{-1}BA$ . Таким образом, между элементами группы  $\Gamma_p$  и преобразованиями  $T$ , оставляющими на месте точку  $q$ , установлено взаимно однозначное соответствие, которое и доказывает равенство кратностей точек  $p$  и  $q$ . Обозначим через  $S_1, S_2, \dots, S_\nu$  различные преобразования (включая тождественное), оставляющие инвариантной точку  $p$ . Предположим, что в орбите точки  $p$  имеется ровно  $n$  точек (включая  $p$ ). Обозначим эти точки через  $q_1, \dots, q_n$ . Пусть теперь  $L_i$  — одно из преобразований группы  $\Gamma$ , переводящих точку  $p$  в  $q_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Тогда группа  $\Gamma$  исчерпывается набором следующих (различных) преобразований:  $S_1L_1, S_2L_1, \dots, S_\nu L_1, S_1L_2, S_2L_2, \dots, S_\nu L_2, \dots, S_1L_n, S_2L_n, \dots, S_\nu L_n$ .

Итак,  $N = n\nu$ , что в свою очередь означает, что кратность является делителем числа  $N$ . Отсюда, обозначив через  $n_c$  число



полюсов в орбите, содержащей полюс, а через  $v_c$  — кратность каждого из них, получим:  $N = n_c v_c$ .

Подсчитаем теперь число пар  $(S, p)$ , где  $p$  — полюс, а  $S$  — нетождественное преобразование группы  $\Gamma$ , оставляющее этот полюс неподвижным. С одной стороны, это число равно  $2(N-1)$ , поскольку с каждым из  $N-1$  нетождественных преобразований группы  $\Gamma$  связано ровно два полюса. С другой стороны, для каждого полюса  $p$  имеется  $v_p - 1$  нетождественных преобразований, оставляющих этот полюс инвариантным (здесь  $v_p$  — кратность полюса). Следовательно, число таких пар равно  $\sum (v_p - 1)$ , где  $p$  пробегает множество всех полюсов. Из этого следует, что

$$2(N-1) = \sum_c (v_c - 1) n_c, \quad (1)$$

где суммирование в правой части берется по всем орбитам группы  $\Gamma$ , содержащим полюсы. Поскольку  $N = n_c v_c$ , то, поделив равенство (1) на  $N$ , получим соотношение

$$2 - \frac{2}{N} = \sum_c \left(1 - \frac{1}{v_c}\right). \quad (2)$$

Исследуем равенство (2). Если группа  $\Gamma$  состоит только из тождественного преобразования, то  $N=1$  и полюсов нет. Пусть теперь  $N \geq 2$ . Тогда левая часть равенства (2), очевидно, не меньше 1, но меньше 2. Отсюда легко следует, что в правой части равенства не может быть меньше двух слагаемых. Следовательно, имеется по крайней мере две орбиты. При этом число орбит не может быть больше трех, так как иначе сумма в правой части была бы не меньше 2. Таким образом, имеется две или три орбиты. Пусть орбит две. В этом случае равенство (2) принимает вид  $2 = \frac{N}{v_1} + \frac{N}{v_2}$ . Но сумма двух целых положительных чисел равна двум лишь в том случае, когда каждое из них равно единице. Следовательно,  $n_1 = 1 = n_2$ , т. е.  $v_1 = v_2 = N$ . Это значит, что каждая из двух орбит состоит ровно из одного полюса кратности  $N$ . Мы получаем циклическую группу порядка  $N$  поворотов вокруг (вертикальной) оси.

Пусть теперь число орбит равно трем. Тогда

$$\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} + \frac{1}{v_3} = 1 + \frac{2}{N}. \quad (3)$$

Расположим кратности в порядке их возрастания:  $v_1 \leq v_2 \leq v_3$ . Все три числа  $v_1, v_2, v_3$  не могут быть больше двух, иначе мы бы получили:  $\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} + \frac{1}{v_3} \leq \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = 1$ , что противоречит равенству (3). Следовательно,  $v_1 = 2$ . Отсюда  $\frac{1}{v_2} + \frac{1}{v_3} = \frac{1}{2} + \frac{2}{N}$ .

Оба числа  $\nu_2, \nu_3$  не могут быть  $\geq 4$ , так как в этом случае в левой части мы получили бы сумму, не превосходящую  $1/2$ . Поэтому  $\nu_2 = 2$  или 3. Рассмотрим сначала случай, когда  $\nu_1 = \nu_2 = 2$ ,  $N = 2\nu_3$ . Положим  $\nu_3 = n$ . Мы получили два класса полюсов кратности 2, состоящих каждый из  $n$  полюсов, и один класс, состоящий из двух полюсов кратности  $n$ . Очевидно, что полученная группа совпадает с группой  $D_n'$  (см. выше).

Теперь рассмотрим случай  $\nu_1 = 2$ ,  $\nu_2 = 3$ ,  $\frac{1}{\nu_3} = \frac{1}{6} + \frac{2}{N}$ . Поскольку  $\nu_3 \geq \nu_2 \geq 3$ , то возможны следующие три варианта:  $\nu_3 = 3$ ,  $N = 12$ ,  $\nu_3 = 4$ ,  $N = 24$ ,  $\nu_3 = 5$ ,  $N = 60$ , которые мы обозначим соответственно через  $T$ ,  $W$ ,  $P$ . Как мы сейчас увидим, обозначения эти не случайны и порождены обозначениями для соответствующих групп правильных многогранников. В самом деле, рассмотрим случай  $T$ . Здесь мы имеем два класса, состоящих каждый из четырех полюсов 3-го порядка (т. е. кратности 3). Ясно, что полюсы одного класса должны являться вершинами правильного тетраэдра, а полюсы другого класса диаметрально противоположны им. Таким образом, получается группа собственных вращений тетраэдра. Шесть эквивалентных полюсов кратности 2 являются проекциями середин шести его ребер из центра  $O$  на сферу, в которую вписан тетраэдр. Теперь рассмотрим случай  $W$ . Здесь один класс состоит из шести полюсов 4-го порядка, являющихся вершинами правильного октаэдра; следовательно, мы получили группу собственных вращений октаэдра. Один класс состоит из восьми полюсов 3-го порядка (соответствующих центрам его граней); еще один класс состоит из двенадцати полюсов кратности 2 (соответствующих серединам его ребер). И, наконец, рассмотрим последний случай — случай  $P$ . Здесь имеются такие классы: из 12 полюсов кратности 5, являющихся вершинами правильного икосаэдра; из 20 полюсов кратности 3, соответствующих центрам 20 граней; из 30 полюсов кратности 2, соответствующих серединам 30 ребер этого многогранника.

Итак, описание групп и доказательство теоремы закончено.

Вернемся теперь к описанию стационарных групп трехмерных решеток. Предварительно введем в рассмотрение некоторые новые группы. Пусть  $B$  — отражение трехмерного пространства относительно точки  $O$ , т. е. преобразование  $B$  переводит любую точку  $X$  в точку  $-X$ . Ясно, что ортогональное преобразование  $B$  меняет ориентацию в  $\mathbb{R}^3$ . Кроме того,  $B$  коммутирует с любым вращением, т. е.  $B$  есть образующая центра в группе  $O(3)$ ; в матричной записи  $B = -1$ , где  $1$  — единичная матрица. Следовательно, каждая подгруппа  $H$  в группе  $SO(3)$  порождает подгруппу  $\tilde{H}$  в группе  $O(3)$ , которая получается из  $H$  присоединением всех элементов вида  $Bg$ , где  $g \in H$ . Ясно, что  $H$  содержится в  $\tilde{H}$  как подгруппа индекса 2.

Опишем еще один способ включения зеркальных отражений в конечные группы. Пусть  $\Gamma$  — подгруппа индекса 2 в другой группе  $\Phi$  собственных вращений, причем одна половина элементов группы  $\Phi$  (обозначим их через  $S$ ) принадлежит  $\Gamma$ , а другая половина элементов  $\Phi$  (обозначим их через  $S'$ ) не принадлежит  $\Gamma$ . Заменяем теперь все элементы  $S'$  элементами  $BS'$ . Тогда мы получим новую группу, которую обозначим через  $\Phi\Gamma$ , содержащую  $\Gamma$ , в то время как другую половину элементов этой группы (т. е. элементы, не принадлежащие  $\Gamma$ ) составляют зеркальные отражения. Например, имеется группа  $WT$ , так как группа  $T$  тетраэдра есть подгруппа индекса 2 группы октаэдра  $W$ .

**Теорема 4.** *Все стационарные группы трансляционно инвариантных трехмерных решеток задаются следующим списком (содержащим 32 группы, причем все они попарно неизоморфны):*  
 $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, C_1, C_2, C_3, C_4, C_6; D'_2, D'_3, D'_4, D'_6; \hat{D}_2, \hat{D}_3, \hat{D}_4, \hat{D}_6;$   
 $C_2C_1, C_4C_2, C_6C_3; D'_4D'_2, D'_6D'_3; D'_2C_2, D'_3C_3, D'_4C_4, D'_6C_6;$   
 $T, W, T, \bar{W}, WT.$  *Каждой из этих групп отвечает трансляционно инвариантная трехмерная решетка.*

Доказательство получается комбинированием доказанной ранее теоремы, описывающей все собственные конечные группы вращений, далее, описанной процедуры включения зеркальных операций и, наконец, замечания, согласно которому допустимыми являются только полюсы кратности 2, 3, 4, 6. Мы не будем проводить во всех подробностях все эти сопоставления.

Рассмотрим теперь кристаллографические группы в связи с конкретными тензорными полями. Ограничимся одним простым примером: выделим такое макроскопическое свойство кристалла, как электропроводность, описывающее связь между вектором напряженности  $\varepsilon$  электрического поля и вектором плотности тока  $j$ .

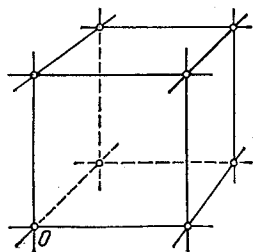


Рис. 29

Эта связь имеет следующий вид:  $j_k = \sigma_k^s \varepsilon_s$ , где  $j = \{j_k\}$ ;  $\varepsilon = \{\varepsilon_s\}$ , а  $\{\sigma_k^s\}$  — тензор электропроводности вещества. Если вещество изотропно, то тогда  $\sigma_k^s = \sigma \delta_k^s$ , где  $\sigma$  — скаляр, т. е. в простейшем случае электропроводность задается только одним скаляром  $\sigma$ . В общем случае  $\{\sigma_k^s\}$  является тензором общего вида. Рассмотрим тензор электропроводности кристалла, описываемого кубической решеткой в  $\mathbb{R}^3$ , т. е. кубического кристалла (рис. 29). Кристалл считается идеальным и решетка  $R$  заполняет все пространство. Ясно, что группа симметрий этого кристалла содержит, в частности, следующие три ортогональных преобразования:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

т. е.  $\alpha_1$  — поворот на угол  $\pi/2$  вокруг оси  $z$ ,  $\alpha_2$  — поворот на угол  $\pi/2$  вокруг оси  $y$ ,  $\alpha_3$  — поворот на угол  $\pi/2$  вокруг оси  $x$ .

Поскольку решетка  $R$  переходит в себя, то, следовательно, эти три операции симметрии сохраняют тензор  $\{\sigma_k^s\}$ . Запишем это обстоятельство в аналитической форме. Обозначим через  $A$  матрицу  $\{\sigma_k^s\}$ ; тогда  $A_i = \alpha_i A \alpha_i^{-1} = A$  для любого  $i = 1, 2, 3$ . Вычисляя матрицу  $A'_1$ , получаем

$$A'_1 = \begin{pmatrix} \sigma_2^2 & -\sigma_1^2 & \sigma_3^2 \\ -\sigma_2^1 & \sigma_1^1 & -\sigma_3^1 \\ \sigma_2^3 & -\sigma_1^3 & \sigma_3^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1^1 & \sigma_2^1 & \sigma_3^1 \\ \sigma_1^2 & \sigma_2^2 & \sigma_3^2 \\ \sigma_1^3 & \sigma_2^3 & \sigma_3^3 \end{pmatrix} = A.$$

Отсюда следует, что  $\sigma_1^1 = \sigma_2^2 = \sigma_3^3$ ; подобным же образом, вычисляя матрицы  $A'_2$  и  $A'_3$ , получаем, что  $\sigma_1^1 = \sigma_2^2 = \sigma_3^3$ . Группа  $S_3(R)$  содержит еще три преобразования:

$$\beta_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \beta_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \beta_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

т. е.  $\beta_1$  — поворот на угол  $\pi$  вокруг оси  $OZ$ ,  $\beta_2$  — поворот на угол  $\pi$  вокруг оси  $OX$ ,  $\beta_3$  — поворот на угол  $\pi$  вокруг оси  $OY$ . Решетка снова переходит в себя, что дает нам соотношение  $A_i = \beta_i A \beta_i^{-1} = A$ ,  $1 \leq i \leq 3$ . Вычисляя матрицу  $\tilde{A}_1$ , получаем

$$\tilde{A}_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1^1 & \sigma_2^1 & -\sigma_3^1 \\ \sigma_1^2 & \sigma_2^2 & -\sigma_3^2 \\ -\sigma_1^3 & -\sigma_2^3 & -\sigma_3^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1^1 & \sigma_2^1 & \sigma_3^1 \\ \sigma_1^2 & \sigma_2^2 & \sigma_3^2 \\ \sigma_1^3 & \sigma_2^3 & \sigma_3^3 \end{pmatrix} = A,$$

откуда следует, что  $\sigma_1^1 = \sigma_2^2 = \sigma_3^3 = \sigma_1^2 = \sigma_2^3 = 0$ . Вычисляя матрицы  $\tilde{A}_2$  и  $\tilde{A}_3$ , аналогично получаем, что  $\sigma_j^i = 0$  при  $i \neq j$ , т. е., окончательно,

$A = \{\sigma_k^s\} = \sigma \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ , т. е.  $\sigma_k^s = \sigma \delta_k^s$ , где  $\sigma$  — скаляр. Тем самым

мы доказали следующее утверждение: электропроводность кубического кристалла изотропна (т. е. не зависит от направления) подобно электропроводности изотропного вещества. Этот результат не является физически очевидным, поскольку в случае кубической решетки можно было бы ожидать, что электропроводность в направлении ребер кубического кристалла иная, чем электропроводность в направлении диагонали. Тем самым мы продемонстрировали важное (хотя и простое) применение свойств группы симметрий  $S_3(R)$ , резко снизив число независимых компонент у тензора  $\{\sigma_k^s\}$ .