

ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ТЕОРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В предшествовавших главах мы уже встречались с несколькими примерами точечных групп, а также с их применением при изучении молекулярных колебаний (гл. 6). В данной главе мы выведем формальные свойства всех точечных групп, являющихся конечными подгруппами группы O_3 , ортогональных преобразований в трехмерном пространстве. Эти группы имеют важное физическое значение, так как они описывают симметрию молекул и геометрических фигур (таких, как правильные многогранники). Некоторые из точечных групп, а именно 32 кристаллографические точечные группы, особенно важны, так как они описывают симметрию идеальных кристаллических решеток и потому широко применяются в физике твердого тела.

В последней части данной главы (§ 9) рассматривается атом в поле с потенциалом, обладающим симметрией точечной группы. Этот случай соответствует кристаллу, где ионы, окружающие атом, расположены в соответствии с симметрией кристалла. Такой пример очень ясно показывает большие возможности симметрийного подхода и хорошо иллюстрирует большую часть методов анализа систем, обладающих симметрией точечной группы.

§ 1. ОПЕРАЦИИ ТОЧЕЧНОЙ ГРУППЫ И ОБОЗНАЧЕНИЯ

К сожалению, существует несколько разных систем принятых обозначений для элементов точечных групп. В данной книге, как и почти во всей литературе по физическим приложениям теории точечных групп, используются обозначения Шенфлиса¹⁾. Другой системой обозна-

¹⁾ В советской литературе также принята эта система, хотя иногда используется так называемая международная система (см., например, книгу Штрайтвольфа, а также И. С. Желудева). — Прим. перев.

чений является так называемая «международная» система. Сводная таблица этих двух систем обозначений приведена в приложении 1 (т. 2).

Элементами точечных групп являются собственные и несобственные вращения, т. е. вращения, включающие и не включающие инверсию. Начало координат остается фиксированным относительно всех преобразований — элементов точечной группы; иными словами, все оси вращения и плоскости отражений содержат начало координат. Если поворот на угол a является элементом точечной группы, то и любая конечная целая степень его также является элементом группы; какая-либо степень его должна быть равной единичному оператору E , поскольку точечная группа конечна. Следовательно, можно написать $[R(a)]^n = R(na) = E = R(2\pi m)$, так что угол a должен иметь вид $2\pi m/n$, где m и n — целые числа. Если для данной оси симметрии наименьший угол поворота равен $2\pi/n$, то ось называется осью симметрии n -го порядка. Поворот на угол $2\pi/n$, согласно Шенфлису, обозначается через C_n .

Ось симметрии максимального порядка обычно считают вертикальной; тогда перпендикулярная плоскость, естественно, оказывается горизонтальной. Отражение в горизонтальной плоскости обозначается через σ_h , а в вертикальной — через σ_v . Произведение поворота C_n на отражение σ в плоскости, перпендикулярной оси вращения C_n , называется зеркальным поворотом и обозначается через S_n . Зеркальный поворот можно выразить через инверсию I и собственное вращение, поскольку произведение σC_2 эквивалентно инверсии всех осей, т. е. $\sigma C_2 = I$, так что $\sigma = IC_2$, и поэтому

$$S_n = \sigma C_n = IC_2 C_n.$$

Теперь мы можем строить точечные группы, начав с простейших и добавляя к ним элементы симметрии. Добавление одного нового элемента симметрии к существующей группе приводит к появлению других элементов. Из простых геометрических соображений можно сформулировать следующие правила:

1) при добавлении операции инверсии (коммутирующей со всеми остальными элементами группы) полное число элементов группы удваивается;

2) при добавлении горизонтальной оси 2-го порядка к вертикальной оси n -го порядка появляются $n-1$ других горизонтальных осей 2-го порядка;

3) при добавлении вертикальной плоскости симметрии σ_v к вертикальной оси n -го порядка появляются $n-1$ других вертикальных плоскостей симметрии.

§ 2. СТЕРЕОПРОЕКЦИЯ

Для описания симметрии точечной группы вращений можно взять сферу с центром в начале координат, выбрать на ее поверхности произвольную точку и затем отмечать все положения, которые она будет занимать в результате операций вращений группы. Чтобы представить результаты в двух измерениях, отмеченные точки следует отобразить на плоскости следующим образом. Всякая точка «северной» полусфера проектируется на экваториальную плоскость прямой линией, проходящей через «южный» полюс; эта проекция отмечается крестиком. Всякая точка «южной» полусфера проектируется на экваториальную плоскость прямой, проходящей через «северный» полюс; эта проекция отмечается кружком. Такой способ отображения характеризуется тем, что точки, лежащие на окружности в одной из полусфер, отображаются в окружность на плоскости, но центры этих окружностей не отображаются друг в друга. Ряд подобных стереопроекций показан на рис. 9.1. На них использованы следующие обозначения. Оси вращения помечены значками, обладающими симметрией n -го порядка: темными эллипсами, треугольниками, квадратами и шестиугольниками обозначены оси C_2 , C_3 , C_4 и C_6 , а светлыми — оси S_2 , S_3 , S_4 и S_6 . Плоскости отражения обозначаются сплошными линиями, а другие линии построения и оси вращения — пунктирными. Такой способ представления особенно удобен в случае простейших групп, обладающих лишь одной осью симметрии n -го порядка с $n > 2$. Другие группы удобнее представлять себе как группы операций симметрии правильных многогранников (например, тетраэдра и куба).