§ 5. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ

Одна из основных областей применения теории точечных групп — кристаллические твердые тела, в которых расположение атомов может быть инвариантным относительно операций точечной группы. Лишь немногие из групп, перечисленных в § 3, могут быть привлечены к исследованию таких тел, и целью данного параграфа как раз и является отыскание так называемых «кристаллографических точечных групп». Кристалл представляет собой периодическое повторение в пространстве одного или нескольких атомов. Для математического описания кристалла введем некую пространственную решетку как совокупность точек

$$\mathbf{n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \tag{9.6}$$

где n_1, n_2, n_3 — целые числа, а $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ — фиксированные векторы элементарных частиц из данной точки решетки в соседнюю. Тогда в кристалле с каждой точкой введенной нами решетки будет связана некая система атомов с определенной взаимной ориентацией, называемая его базисом. Рассмотрим сначала все возможные элементы симметрии пространственной решетки и убедимся в том, что реально возможны лишь некоторые точечные группы. Затем мы перейдем к вопросу о связи между группами симметрии решетки и кристаллографическими точечными группами.

Чтобы вращение R оставляло решетку инвариантной, оно должно переводить каждую точку решетки $\mathbf{n}$ в другую точку той же решетки $\mathbf{m}$; покажем, что это налагает ограничения на возможные углы поворота. Напишем

$$\mathsf{R}\mathbf{n} = \mathbf{m} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3.$$

Очевидно, что можно записать трехмерное матричное представление операции вращения R, переводящей точку $\mathbf{n}$ в точку m:

$$\begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим частный случай, когда $n_2 = n_3 = 0$, $n_1 = 1$. Мы видим, что $m_p = R_{p_1}$, т. е. R_{p_1} — целое число. Анало-

гично, полагая $n_1=n_3=0$, $n_2=1$ и т. п., получим, что R_{p_2} и R_{p_3} также являются целыми числами. Следовательно, след матрицы R также должен быть целым числом. Производя затем преобразование подобия к декартову набору базисных векторов, мы оставляем след инвариантным и по-прежнему целочисленным. Однако в декартовом базисе оператор поворота вектора на угол φ имеет след, равный $1+2\cos\varphi$ [формула (4.6)]. Стало быть, единственно возможные значения углов φ таковы: 0°, 60°, 90°, 120° и 180°, так что оси симметрии пятого порядка и более шестого порядка исключаются. Аналогично для несобственного вращения $\mathsf{S}(\varphi)$ след равен $2\cos\varphi-1$ и тоже должен быть целым числом, так что угол φ принимает те же возможные значения. Пространственная решетка, определенная равенством (9.6), очевидно, обладает инверсионной симметрией; если она содержит при этом ось вращения n-го порядка с $n>2$, то для нее будут существовать также n «вертикальных» осей зеркального отражения. Если совместить эти условия, то они, очевидно, приведут к ограничению числа возможных точечных групп пространственных решеток следующими семью: S_2, C_{2h}, D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h}, O. Эти семь различных решеточных симметрий, или сингоний, носят названия триклинной, моноклинной, орторомбической, ромбоэдрической, тетрагональной, гексагональной и кубической.

Для простых одноатомных кристаллов (с одним атомом в элементарной ячейке) указанные семь групп являются единственно возможными кристаллическими точечными группами. Для более сложных кристаллов, у которых с каждой точкой решетки связана молекула или несколько атомов, симметрия понизится до той подгруппы, которая оставляет все эти объекты инвариантными. Таким образом, полный набор всех возможных кристаллографических точечных групп будет включать в себя указанные семь групп совместно со всеми их подгруппами. Таких групп всего 32, именно: C_1, C_{1h}, C_n, C_{nv}, C_{nh}, D_n, D_{nh} с $n=2$, 3, 4, 6; S_2, S_4, S_6, D_{2d}, D_{3d}, T, T_d, T_h, O, O_h. В этом списке нет символов C_{1v}, D_1, D_{1h}, S_1 и S_3, но обозначаемые ими группы совпадают с группами C_{1h}, C_2, C_{2v}, C_{1h} и C_{3h}.