Таким образом, звезда может содержать две, четыре или шесть проекций, откуда вытекает, что возможны вращения лишь на углы 60°, 90° и кратные им. Симметрия третьего порядка (вращение на 120°) может встречаться без симметрии шестого порядка (вращение на 60°). Пусть, например, проекции трансляций τ_1, τ_2 и τ_3, расположенных над плоскостью (фиг. 10), составляют углы 120°; тогда трансляции $-\tau_1$, $-\tau_2$ и $-\tau_3$ расположены ниже плоскости и их проекции вместе с предыдущими образуют полную шестиконечную звезду. Вращение на 60°, очевидно, не переводит векторы трансляций друг в друга — для этого необходимо вращение на 120°. Симметрия третьего порядка такого типа реализуется для вращений вокруг оси [111] в кубических кристаллах. Как показано выше, симметрией вращения пятого порядка кристалл обладать не может.

Подобные ограничения понижают число возможных точечных групп симметрии кристаллов до 32. Какой бы кристалл мы ни взяли, допускаемая им точечная группа совпадает с одной из этих групп. Более подробная классификация кристаллов станет возможной, если мы воспользуемся более широким набором операций симметрии, образующих пространственную группу кристалла. Существует всего 230 пространственных групп. Классификацией кристаллов по их свойствам симметрии занимается один из разделов кристаллографии.

Зная симметрию кристалла, можно довольно хорошо предсказать поведение кристалла. Мы можем извлечь такую информацию систематическим путем, используя математические методы теории групп, элементы которой мы изложим в виде, удобном для этой цели. Поскольку теория групп сама по себе составляет весьма обширный предмет, мы предпочтем начать с использования следствий симметрии и затем покажем, как при этом естественно возникают понятия теории групп. Для начала мы изучим физические тензоры, связанные с кристаллами.

§ 3. ФИЗИЧЕСКИЕ ТЕНЗОРЫ

Здесь мы приведем краткую сводку результатов, подробное изложение которых можно найти в книге Ная [2].

Многие макроскопические свойства кристаллов можно описать с помощью тензоров. К числу таких свойств относится, например, электропроводность, которая связывает вектор напряженности электрического поля с вектором плотности тока. В случае изотропного вещества (такого, как металл, т. е. состоящего из многих зерен) электропроводность задается скаляром, или, что то же самое, произведением скаляра на единичный тензор. Для более сложных систем величина тока все еще пропорциональна величине приложенного поля (для достаточно слабых полей), но его направление может не совпадать с направлением поля, иными словами, коэффициент пропорциональности может зависеть от направления поля. В этом случае выберем некую лабораторную систему координат и зафиксируем по отношению к ней ориентацию кристалла. Тогда в этой системе компоненты тока будут связаны с компонентами электрического поля соотношением

$$j_i = \sum_j \sigma_{ij} \mathscr{E}_j.$$

Величины σ_{ij} — это элементы матрицы, которая представляет собой тензор электропроводности кристалла. Если известна группа преобразований симметрии, оставляющих кристалл инвариантным, то эта группа преобразований также должна оставлять тензор электропроводности инвариантным; таким образом, мы получаем определенную информацию о свойствах тензора электропроводности. Для получения наиболее полной информации можно пользоваться всеми преобразованиями точечной группы.

Рассмотрим, например, кристалл с кубической симметрией. В таком кристалле все вращения и отражения, переводящие куб в себя, отображают также и весь кристалл в себя. Направим кубические оси (ребра кубической ячейки) кристалла параллельно осям лабораторной системы координат. Разумеется, оси вращений и плоскости отражений необходимо определенным образом ориентировать относительно заданной системы координат, точно так же, как это делалось по отношению к кубической ячейке. Для определенности *будем рассматривать операцию симметрии как реальный поворот кристалла*, приводящий к соответствующему преобразованию тензора электропроводности. Преобразованный тензор электропроводности, выраженный в той же самой лабораторной системе координат, обозначим через σ'_{ij}.

Всякий поворот или отражение кристалла можно записать в виде матрицы, которая переводит любой вектор-столбец в новый (штрихованный) вектор-столбец $x' = Ux$:

$$\begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}.$$

Матрица U соответствует интересующему нас повороту или отражению. Например, поворот на 90° вокруг оси z (переводящий вектор, направленный по оси x, в вектор, направленный по оси y) можно представить матрицей

$$U_1 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Повороту вокруг оси z на 180° соответствует матрица

$$U_2=\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

а последовательному выполнению ряда операций отвечает обычное умножение матриц. Преобразование тензора при «вращении» U записывается в виде

$$\sigma' = U\sigma U^{-1},$$

где U^{-1} — матрица, обратная U. Например, матрица U_1^{-1}, очевидно, имеет вид

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Поворот на 180° — операция симметрии кубической группы, и поэтому интересно применить ее к тензору электропроводности; в результате получим

$$\sigma' = U_2 \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} U_2^{-1} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & -\sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & -\sigma_{23} \\ -\sigma_{31} & -\sigma_{32} & -\sigma_{33} \end{bmatrix}.$$

Эта операция симметрии, однако, не должна изменять тензор электропроводности, что возможно лишь в том случае, если все компоненты σ_{13}, σ_{23}, σ_{31} и σ_{32} обращаются в нуль. Аналогично, выполняя поворот на 180° вокруг оси x, можно показать, что равны нулю и компоненты σ_{12}, σ_{21} и, таким образом, матрица σ диагональна. Производя поворот на 90° вокруг оси z, можно показать, что $\sigma_{11} = \sigma_{22}$, а производя поворот на 90° вокруг оси x, найти $\sigma_{22} = \sigma_{33}$. Таким образом, тензор электропроводности в случае кубической системы можно представить в виде

$$\sigma \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

где теперь σ является скаляром. Электропроводность кубического кристалла оказывается изотропной точно так же, как электропроводность любой изотропной системы. Этот результат, пожалуй, не вполне очевиден. Можно было бы думать, что электропроводность в направлении ребра куба отличается от электропроводности в направлении его диагонали. При доказательстве изотропности электропроводности кубического кристалла существенным моментом было использование предположения о пропорциональности тока электрическому полю.

В менее симметричных кристаллах электропроводность неизотропна, но аналогичные рассуждения позволяют уменьшить число независимых параметров, необходимых для задания тензора электропроводности.

Пьезоэлектрический эффект в кристаллах описывается некоторым тензором третьего ранга. Этот тензор определяет электрическую поляризацию кристалла, появляющуюся при его деформации. Напомним, что состояние деформации кристалла можно охарактеризовать заданием вектора смещения u (**r**) во всех его точках **r**. Производные компонент этого вектора определяют тензор деформации

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}.$$

Вектор поляризации связан с тензором деформации через пьезоэлектрический тензор

$$P_k = \sum_{i,j} c_{kij}\varepsilon_{ij}.$$

Рассмотрим кристалл, в котором есть центр симметрии, т. е. такая точка, что при инверсии относительно нее кристалл остается инвариантным. Однако при инверсии все компоненты пьезоэлектрического тензора меняют знак:

$$c'_{kij} = -c_{kij},$$

откуда вытекает, что они должны равняться нулю. Таким образом, в кристалле с центром симметрии пьезоэлектрического эффекта не может быть. Заметим, что центр симметрии может находиться *между* атомами. В этом случае инверсия смещает все атомы и не принадлежит точечной группе. Тем не менее она оставляет кристалл инвариантным и принадлежит пространственной группе симметрии кристалла. В том случае, если в кристалле нет центра симметрии, он может быть пьезоэлектриком, но это не обязательно.

Тензор упругости кристалла есть тензор четвертого ранга. Он связывает тензоры деформации и напряжения. Применяя соображения симметрии к тензору упругости, можно уменьшить число его независимых компонент, равное в общем случае 81. Так, например, в кубических кристаллах лишь три компоненты этого тензора независимы.

§ 4. СООБРАЖЕНИЯ СИММЕТРИИ И ТЕОРИЯ ГРУПП

В этом параграфе мы выясним, каким образом теория групп позволяет реализовать всю силу соображений симметрии и получить нетривиальные результаты, исходя из симметрии структуры. Мы