ГЛАВА XIII

СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

§ 128. Элементы симметрии кристаллической решетки

Наиболее распространенные свойства симметрии макроскопических тел заключаются в симметрии расположения частиц в них.

Движущиеся атомы и молекулы не занимают точно определенных мест в теле, и для строгого статистического описания их расположения нужно ввести *функцию плотности* $\rho(x, y, z)$, определяющую вероятности различных положений частиц: $\rho\, dV$ есть вероятность отдельной частице находиться в элементе объема dV. Свойства симметрии расположения частиц определяются теми преобразованиями координат (переносами, поворотами, отражениями), которые оставляют функцию $\rho(x, y, z)$ неизменной. Совокупность всех таких *преобразований симметрии* данного тела составляет его *группу симметрии*.

Если тело состоит из различных атомов, то функция ρ должна быть определена для каждого сорта атомов в отдельности; это обстоятельство, однако, для нас не имеет значения, так как все эти функции в реальном теле будут фактически иметь одинаковую симметрию. Для этой же цели могла бы служить также функция ρ, определенная как полная электронная плотность, создаваемая всеми атомами в каждой точке тела[1]).

Наиболее высокой симметрией обладают *изотропные тела* — тела, свойства которых по всем направлениям одинаковы; сюда относятся газы и жидкости (и аморфные твердые тела). Очевидно, у такого тела для каждой частицы все ее положения в пространстве во всяком случае должны быть равновероятными, т. е. должно быть $\rho = \text{const}$.

Напротив, в *анизотропных твердых кристаллах* функция плотности отнюдь не сводится к постоянной. Она представляет собой в этом случае трояко-периодическую функцию (с перио-

---

[1]) Движущиеся электроны могут создавать не только среднюю плотность зарядов ($e\rho$), но и среднюю плотность тока $\mathbf{j}(x, y, z)$. Тела с отличными от нуля токами — это тела, обладающие «магнитной структурой», и симметрия векторной функции $\mathbf{j}(x, y, z)$ определяет симметрию этой структуры. Она рассмотрена в другом томе этого курса (VIII).

дами, равными периодам кристаллической решетки) и имеет резкие максимумы в точках, соответствующих узлам решетки. Наряду с трансляционной симметрией решетка (т. е. функция $\rho(x, y, z)$) обладает, вообще говоря, симметрией также и по отношению к различным поворотам и отражениям. Узлы, которые могут быть совмещены друг с другом путем какого-либо преобразования симметрии, называют *эквивалентными*.

Приступая к изучению симметрии кристаллической решетки, следует начать с выяснения того, из каких элементов эта симметрия может складываться.

Основу симметрии кристаллической решетки составляет ее пространственная периодичность — свойство совмещаться сама с собой при параллельных переносах (или, как говорят, *трансляциях*) на определенные расстояния в определенных направлениях[1]); о трансляционной симметрии подробно будет идти речь в следующем параграфе.

Наряду с трансляционной симметрией решетка может обладать также и симметрией по отношению к различным поворотам и отражениям; соответствующие элементы симметрии (*оси* и *плоскости симметрии*, *зеркально-поворотные оси*) — те же, которыми могут обладать и симметричные тела конечных размеров (см. III, § 91).

Сверх того, однако, кристаллическая решетка может обладать еще и особого рода элементами симметрии, представляющими собой комбинации параллельных переносов с поворотами и отражениями. Рассмотрим сначала комбинацию трансляций с осями симметрии. Комбинирование оси симметрии с параллельным переносом вдоль направления, перпендикулярного к оси, не приводит к новым типам элементов симметрии. Легко убедиться в том, что поворот на некоторый угол с последующим переносом в перпендикулярном к оси направлении равносилен простому повороту на тот же угол вокруг другой оси, параллельной первой. Комбинирование же поворота вокруг оси с параллельным переносом вдоль этой же оси приводит к элементам симметрии нового типа — *винтовым осям*. Решетка обладает винтовой осью n-го порядка, если она совмещается сама с собой при повороте вокруг оси на угол $2\pi/n$ и одновременном переносе на определенное расстояние d вдоль этой же оси.

Производя n раз поворот с переносом вокруг винтовой оси n-го порядка, мы в результате просто сдвинем решетку вдоль оси на расстояние, равное nd. Таким образом, при наличии винтовой оси решетка во всяком случае должна обладать и простой периодичностью вдоль этой оси с периодом, не большим

---

[1]) Кристаллическую решетку надо при этом представлять как бесконечную, отвлекаясь от наличия у кристалла внешней огранки.

чем nd. Это значит, что винтовая ось n-го порядка может быть связана только с переносами на расстояния

$$d=\frac{p}{n}a \qquad (p=1,\,2,\,\ldots,\,n-1),$$

где a—наименьший период решетки в направлении оси. Так, винтовая ось 2-го порядка может быть только одного типа — с переносом на половину периода; винтовые оси 3-го порядка могут быть связаны с переносом на $^1/_3$ и $^2/_3$ периода и т. д.

Аналогично можно скомбинировать трансляции с плоскостью симметрии. Отражение в плоскости вместе с трансляцией вдоль направления, перпендикулярного к плоскости, не приводит к новым элементам симметрии, так как такое преобразование, как легко убедиться, равносильно простому отражению в другой плоскости, параллельной первой. Комбинирование же отражения с переносом вдоль направления, лежащего в самой плоскости отражения, приводит к новому типу элементов симметрии—так называемым *плоскостям зеркального скольжения*. Решетка обладает плоскостью зеркального скольжения, если она совмещается сама с собой при отражении в этой плоскости и одновременном переносе на определенное расстояние d в определенном направлении, лежащем в этой же плоскости. Двукратное отражение в плоскости зеркального скольжения приводит к простому переносу на расстояние $2d$. Поэтому ясно, что решетка может обладать только такими плоскостями зеркального скольжения, в которых величина трансляции равна $d=a/2$, где a—длина наименьшего периода решетки в направлении этой трансляции.

Что касается зеркально-поворотных осей, то их комбинирование с трансляциями не приводит к новым типам элементов симметрии. Действительно, всякий перенос в этом случае можно разложить на две части, из которых одна перпендикулярна к оси, а другая параллельна ей, т. е. перпендикулярна к плоскости отражения. Поэтому зеркально-поворотное преобразование с последующим переносом всегда эквивалентно такому же простому преобразованию вокруг другой зеркально-поворотной оси, параллельной первой.

§ 129. Решетка Бравэ

Трансляционные периоды решетки можно изображать векторами **a**, направленными вдоль соответствующего параллельного переноса и по величине равными длине переноса. Кристаллическая решетка обладает бесконечным множеством различных трансляционных периодов. Однако не все эти периоды независимы друг от друга. Всегда можно выбрать в качестве основ-