

чает в себя всех вообще узлов кристаллической решетки. Больше того, она даже не включает в себя, вообще говоря, всех эквивалентных узлов, так как в решетке могут существовать такие эквивалентные узлы, которые совмещаются друг с другом только при преобразованиях, содержащих повороты или отражения.

Решетку Бравэ можно построить, выделив какой-нибудь из узлов кристаллической решетки и производя все возможные параллельные переносы. Выбрав в качестве исходного другой узел (не входящий в первую решетку Бравэ), мы получили бы решетку Бравэ, смещенную относительно первой. Поэтому ясно, что кристаллическая решетка представляет собой, вообще говоря, несколько решеток Бравэ, вдвинутых одна в другую; каждая из них соответствует определенному сорту и расположению атомов, причем все эти решетки, рассматриваемые как системы точек, т. е. чисто геометрически, совершенно тождественны.

Вернемся снова к элементарным ячейкам. Соответственно произвольности в выборе основных периодов неоднозначным является также и выбор элементарной ячейки. Элементарная ячейка может быть построена на любых основных периодах. Получающиеся таким образом ячейки обладают, конечно, различной формой; объем же всех их оказывается одинаковым. В этом проще всего убедиться следующим образом. Из предыдущего ясно, что каждая элементарная ячейка содержит по одному из узлов, принадлежащих к каждой из решеток Бравэ, которые можно построить в данном кристалле. Следовательно, число элементарных ячеек в данном объеме всегда равно числу атомов какого-либо определенного сорта и расположения, т. е. не зависит от выбора ячейки. Поэтому не зависит от выбора ячейки и объем каждой из них, равный общему объему, деленному на число ячеек.

§ 130. Кристаллические системы

Займемся теперь рассмотрением всех возможных типов симметрии решеток Бравэ.

Предварительно докажем общую теорему, касающуюся симметрии кристаллических решеток по отношению к поворотам. Выясним, какими осями симметрии может обладать решетка. Пусть A (рис. 55) есть один из узлов решетки Бравэ, через который проходит (перпендикулярно к плоскости рисунка) ось симметрии. Если B — другой узел, отстоящий от A на один из трансляционных периодов, то через B должна проходить другая такая же ось симметрии.

Произведем теперь поворот вокруг оси, проходящей через A на угол $\varphi = 2\pi/n$ (n — порядок оси). Тогда точка B вместе с проходящей через нее осью займет положение B' . Аналогично поворот вокруг B переводит точку A в A' . По условиям построения

точки A' и B' относятся к той же решетке Бравэ и потому могут быть совмещены друг с другом посредством параллельного переноса. Поэтому расстояние $A'B'$ тоже должно быть трансляционным периодом решетки. Если a есть кратчайший период в данном направлении, то расстояние $A'B'$ должно быть, следовательно, равно ap с целым p . Из рисунка мы видим, что это приводит к уравнению

$$a + 2a \sin \left(\varphi - \frac{\pi}{2} \right) = a - 2a \cos \varphi = ap$$

или

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

Поскольку $|\cos \varphi| \leq 1$, то p может быть здесь равным 3, 2, 1, 0. Эти значения приводят соответственно к $\varphi = 2\pi/n$ с $n = 2, 3, 4, 6$. Таким образом, кристаллическая решетка может обладать осями симметрии только 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков.

Перейдем теперь к изучению возможных типов симметрии решетки Бравэ по отношению к поворотам и отражениям. Эти типы симметрии носят название *кристаллических систем* или *сингоний*. Каждая из них представляет собой определенную совокупность осей и плоскостей симметрии, т. е. является одной из точечных групп.

Легко видеть, что каждый узел решетки Бравэ представляет собой ее центр симметрии. Действительно, каждому атому в решетке Бравэ соответствует другой атом, расположенный на одной прямой с данным узлом и первым атомом таким образом, что оба атома находятся на равных расстояниях от узла. Если центр симметрии является единственным (кроме трансляций) элементом симметрии решетки Бравэ, имеет место так называемая

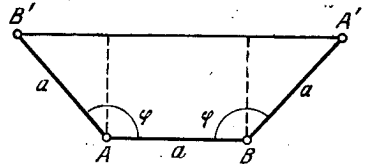


Рис. 55.

1. Триклинная система. Эта система, наименее симметричная из всех, соответствует точечной группе C_i . Узлы триклинной решетки Бравэ расположены в вершинах одинаковых параллелепипедов с произвольными длинами ребер и углами между ними; такой параллелепипед изображен на рис. 56. Решетки Бравэ принято обозначать особыми символами; решетка триклинной системы обозначается как Γ_1 .

2. Моноклинная система является следующей по степени симметричности. Ее элементы симметрии — ось второго порядка и перпендикулярная к ней плоскость симметрии, т. е. эта система представляет собой точечную группу C_{2h} . Это есть симметрия, которой обладает прямой параллелепипед с произвольным

основанием. Решетка Бравэ этой системы может осуществляться двумя способами. В первом случае—так называемая простая моноклинная решетка Бравэ (Γ_m)—узлы расположены в вершинах прямых (в направлении b) параллелепипедов с произвольным параллелограммом в качестве грани ac (рис. 56). Во

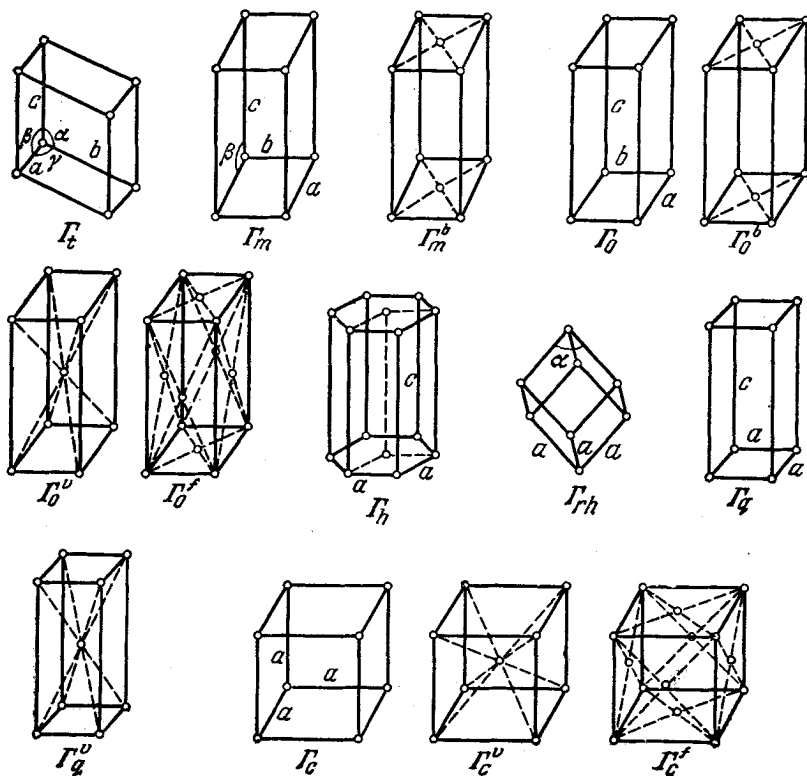


Рис. 56.

втором случае—решетка с центрированными основаниями (Γ_m^b)—узлы расположены не только в вершинах, но и в центрах противоположных прямоугольных граней параллелепипедов.

3. Ромбическая (или ортогональная) система соответствует точечной группе D_{2h} . Это есть симметрия прямоугольного параллелепипеда с произвольными длинами ребер. К ромбической системе относятся четыре вида решеток Бравэ. В простой ромбической решетке (Γ_0) узлы расположены в вершинах прямоугольных параллелепипедов. В решетке с центрированными основаниями (Γ_0^b) узлы находятся также в центрах двух противоположных граней каждого параллелепипеда. Далее,

в объемноцентрированной решетке (Γ_0^v) узлы находятся в вершинах и центрах параллелепипедов и, наконец, в гранецентрированной решетке (Γ_0^f) узлы находятся, кроме вершин, также и в центрах всех граней.

4. Тетрагональная (или квадратная) система представляет собой точечную группу D_{4h} ; это есть симметрия, которой обладает прямая призма с квадратным основанием. Решетки Бравэ этой системы могут осуществляться двумя способами. Именно, существуют простая и объемноцентрированная тетрагональные решетки Бравэ (обозначаемые соответственно как Γ_q и Γ_q^v) с узлами, расположенными соответственно по вершинам и по вершинам и центрам прямых призм с квадратными основаниями.

5. Ромбоэдрическая (или тригональная) система соответствует точечной группе D_{3d} ; такой симметрией обладает ромбоэдр (фигура, получающаяся при растяжении или сжатии куба вдоль его пространственной диагонали). В единственной возможной в этой системе решетке Бравэ (Γ_{rh}) узлы расположены в вершинах ромбоэдров.

6. Гексагональная система соответствует точечной группе D_{6h} ; такой симметрией обладает правильная шестигранная призма. Решетка Бравэ этой системы (Γ_h) может быть осуществлена только одним способом—ее узлы расположены в вершинах правильных шестигранных призм и в центрах их шестигольных оснований. Полезно указать на следующее различие между ромбоэдрической и гексагональной решетками Бравэ. И в той и в другой узлы расположены в плоскостях, перпендикулярных к оси 6-го (или 3-го) порядка, таким образом, что образуют сетку из равносторонних треугольников. Но в гексагональной решетке в последовательных (вдоль оси C_6) таких плоскостях узлы расположены непосредственно друг над другом (на рис. 57 эти плоскости изображены в плане). В ромбоэдрической же решетке в каждой следующей плоскости узлы расположены над центрами треугольников, образованных узлами предыдущей плоскости (кружки и крестики на рис. 57).

7. Кубическая система соответствует точечной группе O_h ; это есть симметрия куба. К этой системе относятся три типа решеток Бравэ: простая кубическая (Γ_c), объемноцентрированная (Γ_c^v) и гранецентрированная (Γ_c^f).

В последовательности систем триклинной, моноклинной, ромбоэдрической, тетрагональной и кубической каждая обладает большей

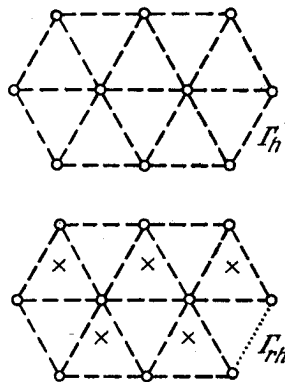


Рис. 57.

симметрией, чем все предыдущие. Другими словами, каждая следующая из них содержит в себе все элементы симметрии, содержащиеся в предыдущих. Ромбоэдрическая система обладает в том же смысле симметрией более высокой, чем моноклинная, и в то же время более низкой, чем симметрия кубической и гексагональной систем: ее элементы симметрии содержатся и в той и в другой. Наиболее симметричными являются именно эти две последние системы.

Укажем еще на следующее обстоятельство. На первый взгляд могло бы показаться, что возможны еще некоторые типы решеток Бравэ, кроме перечисленных четырнадцати. Так, если к простой тетрагональной решетке присоединить еще по узлу в центрах

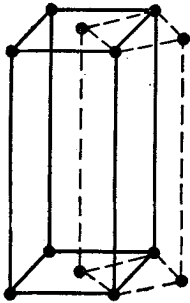


Рис. 58.

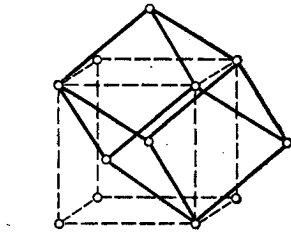
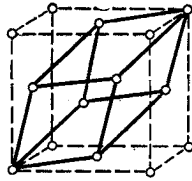


Рис. 59.

противоположных квадратных оснований призм, то решетка имела бы при этом по-прежнему тетрагональную симметрию. Легко, однако, видеть, что мы при этом не получили бы новой решетки Бравэ. Действительно, соединив узлы такой решетки указанным на рис. 58 (пунктирными линиями) способом, мы увидим, что новая решетка является по-прежнему простой тетрагональной. Легко убедиться, что то же самое имеет место и во всех других подобных случаях.

Параллелепипеды решетки Бравэ, изображенные на рис. 56, сами по себе обладают всеми элементами симметрии той системы, к которой они относятся. Необходимо, однако, иметь в виду, что во всех случаях, за исключением только простых решеток Бравэ, эти параллелепипеды не являются элементарными ячейками: периоды, на которых они построены, не являются основными. В качестве основных периодов в гранецентрированных решетках Бравэ можно выбрать векторы из какой-нибудь вершины параллелепипеда к центрам граней; в объемноцентрированной — из вершины в центры параллелепипедов и т. п. На рис. 59 изображены элементарные ячейки для кубических решеток Γ_c^1 и Γ_c^2 ; эти ячейки представляют собой ромбоэдры и отнюдь не обладают сами по себе всеми элементами симметрии кубической системы. Очевидно, что объем v_f гранецентрированного

параллелепипеда Бравэ в 4 раза больше объема элементарной ячейки: $v_f = 4v$; объемы же объемноцентрированного параллелепипеда и параллелепипеда с центрированными основаниями равны удвоенным объемам элементарной ячейки: $v_v = 2v$, $v_b = 2v$.

Для того чтобы полностью определить триклинную решетку Бравэ, необходимо указать шесть величин: длины ребер ее параллелепипедов и углы между ними; в моноклинной достаточно уже четырех величин, так как два из углов между ребрами всегда прямые, и т. д. Аналогичным образом легко найти, что решетки Бравэ различных систем определяются следующим числом величин (длин ребер параллелепипедов или углов между ними):

Триклинная	6	Ромбодрическая	2
Моноклинная	4	Гексагональная	2
Ромбическая	3	Кубическая	1
Тетрагональная	2		

§ 131. Кристаллические классы

В целом ряде явлений, которые можно назвать макроскопическими, кристалл ведет себя как однородное сплошное тело. Макроскопические свойства кристалла зависят только от направления в нем. Так, особенности прохождения света через кристалл зависят только от направления луча света; тепловое расширение кристалла происходит, вообще говоря, различно по разным направлениям; наконец, упругие деформации кристалла под влиянием тех или иных внешних сил также зависят от направлений.

С другой стороны, симметрия кристаллов приводит к эквивалентности различных направлений в нем. Вдоль этих эквивалентных направлений все макроскопические свойства кристалла будут в точности одинаковыми. Мы можем, следовательно, сказать, что макроскопические свойства кристалла определяются симметрией направлений в нем. Если, например, кристалл обладает центром симметрии, то всякому направлению в нем будет эквивалентно прямо противоположное.

Трансляционная симметрия решетки не приводит к эквивалентности каких-либо направлений — параллельные переносы вообще не меняют направлений. По этой же причине для симметрии направлений несущественно различие между винтовыми и простыми осями симметрии или между простыми плоскостями симметрии и плоскостями зеркального скольжения.

Таким образом, симметрия направлений, а потому и макроскопических свойств кристалла определяется совокупностью его осей и плоскостей симметрии, причем винтовые оси и плоскости скольжения надо рассматривать как простые оси и