

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

плоскости. Такие совокупности элементов симметрии называются *кристаллическими классами*.

Как мы уже знаем, реальный кристалл можно рассматривать как совокупность нескольких решеток Бравэ одинакового типа, вдвинутых друг в друга. Благодаря такому наложению решеток Бравэ симметрия реального кристалла, вообще говоря, отличается от симметрии соответствующей решетки Бравэ.

В частности, совокупность элементов симметрии класса данного кристалла отличается, вообще говоря, от его системы. Очевидно, что присоединение к решетке Бравэ новых узлов может привести только к исчезновению некоторых из осей или плоскостей симметрии, но не к появлению новых. Поэтому кристаллический класс содержит меньше—или в крайнем случае столько же—элементов симметрии, чем соответствующая ему система, т. е. совокупность осей и плоскостей симметрии решетки Бравэ данного кристалла.

Из сказанного вытекает способ нахождения всех классов, относящихся к данной системе. Для этого надо найти все точечные группы, содержащие все или только некоторые из элементов симметрии системы. При этом, однако, может оказаться, что какая-либо из получающихся таким образом точечных групп состоит из элементов симметрии, содержащихся не только в одной, но в нескольких системах. Так, мы видели в предыдущем параграфе, что центром симметрии обладают все решетки Бравэ. Поэтому точечная группа C_i содержится во всех системах. Тем не менее распределение кристаллических классов по системам оказывается обычно с физической точки зрения однозначным. Именно, каждый класс должен быть отнесен к наименее симметричной из всех тех систем, в которых он содержится. Так, класс C_i должен быть отнесен к триклинной системе, не обладающей никакими другими элементами симметрии, кроме центра инверсии. При таком способе распределения классов кристалл, обладающий некоторой решеткой Бравэ, никогда не будет относиться к классу, для осуществления которого достаточной была бы решетка Бравэ более низкой системы (за одним только исключением—см. ниже).

Необходимость выполнения этого условия очевидна с физической точки зрения. Действительно, физически крайне невероятно, чтобы атомы кристалла, относящиеся к его решетке Бравэ, расположились более симметричным образом, чем этого требует симметрия кристалла. Более того, если бы даже такое расположение случайно осуществилось, то достаточно было бы любого, даже слабого, внешнего воздействия (скажем, нагревания), чтобы это расположение, как не связанное необходимым образом с симметрией кристалла, нарушилось бы. Например, если бы кристалл, относящийся к классу, для осуществления кото-

рого была бы достаточна тетрагональная система, обладал кубической решеткой Бравэ, то уже незначительное воздействие оказалось бы способным удлинить или укоротить одно из ребер кубической ячейки, превратив ее в прямую призму с квадратным основанием.

Из этого примера видно, что существенную роль играет то обстоятельство, что решетка Бравэ высшей системы может быть переведена в решетку низшей системы уже посредством сколь угодно малой ее деформации. Есть, однако, одно исключение, когда такое превращение невозможно. Именно, гексагональная решетка Бравэ никакой бесконечно малой деформацией не может быть переведена в решетку более низкой по симметрии ромбоэдрической системы; действительно, из рис. 58 видно, что для превращения гексагональной решетки в ромбоэдрическую необходимо переместить узлы в чередующихся слоях на конечную величину — из вершин в центры треугольников. Это приводит к тому, что все классы ромбоэдрической системы осуществляются как с гексагональной, так и с ромбоэдрической решетками Бравэ¹⁾.

Таким образом, для нахождения всех кристаллических классов надо начать с отыскания точечных групп наименее симметричной системы — триклинной, переходя затем поочередно к системам более высокой симметрии и пропуская при этом те из содержащихся в них точечных групп, т. е. классов, которые уже были отнесены к низшим системам. Оказывается, что существует всего 32 класса; приводим список этих классов, распределенных по системам:

Система	Классы
Триклинная	C_1, C_i
Моноклинная	C_s, C_2, C_{2h}
Ромбическая	C_{2v}, D_2, D_{2h}
Тетрагональная	$S_4, D_{2d}, C_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{4h}$
Ромбоэдрическая	$C_3, S_6, C_{3v}, D_3, D_{3d}$
Гексагональная	$C_{3h}, D_{3h}, C_6, C_{6h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}$
Кубическая	T, T_h, T_d, O, O_h

В каждом из написанных здесь рядов классов последний является наиболее симметричным и содержит все элементы симметрии соответствующей системы. Классы, симметрия которых совпадает с симметрией системы, называются *голоэдрическими*. Классы, обладающие числом различных преобразований симметрии (поворотов и отражений, включая в их число тождественное

¹⁾ Кристаллы ромбоэдрических классов с гексагональной решеткой Бравэ принято относить к ромбоэдрической системе.

преобразование), вдвое и вчетверо меньшим, чем у голоэдрического класса, называются соответственно *геми-* и *тетартэдрическими*. Так, в кубической системе класс O_h является голоэдрическим, классы O , T_h , T_d — гемиэдрическими, а класс T — тетартэдрическим.

§ 132. Пространственные группы

Изучив симметрию решеток Бравэ и симметрию направлений в кристалле, мы можем, наконец, перейти к рассмотрению полной истинной симметрии кристаллических решеток. Эту симметрию можно назвать микроскопической в отличие от макроскопической симметрии кристаллов, рассмотренной в предыдущем параграфе. Микроскопическая симметрия определяет те свойства кристалла, которые зависят от расположения атомов в его решетке (таким свойством является, например, рассеяние рентгеновских лучей кристаллом).

Совокупность всех элементов симметрии (истинной) кристаллической решетки называется ее *пространственной группой*. Решетка всегда обладает определенной трансляционной симметрией и, кроме того, может обладать простыми и винтовыми осями симметрии, зеркально-поворотными осями и плоскостями симметрии — простыми и зеркального скольжения. Что касается трансляционной симметрии решетки, то она вполне определяется ее решеткой Бравэ, так как по самому определению последней кристаллическая решетка не может иметь никаких трансляционных периодов, кроме периодов ее решетки Бравэ. Поэтому для определения пространственной группы кристалла достаточно, кроме указания решетки Бравэ, перечислить элементы симметрии связанные с поворотами и отражениями. При этом, конечно, должно быть указано также и расположение этих плоскостей и осей симметрии друг относительно друга. Далее надо иметь в виду, что трансляционная симметрия кристаллической решетки приводит к тому, что если решетка имеет какую-нибудь ось или плоскость симметрии, то имеется бесконечное множество таких параллельных друг другу осей или плоскостей, совмещающихся друг с другом при параллельных переносах на трансляционные периоды решетки. Наконец, кроме этих осей (или плоскостей) симметрии, отделенных друг от друга периодами решетки, одновременно наличие трансляционной симметрии и осей (плоскостей) симметрии приводит к появлению других осей (плоскостей), которые не могут быть совмещены с первоначальными параллельным переносом на какой-нибудь период. Например, наличие плоскости симметрии приводит к появлению не только параллельных ей плоскостей, находящихся на расстоянии периода друг от друга, но еще плоскостей симметрии, делящих эти пе-