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

§ 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, одновременное 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 периоды пополам. Действительно, легко убедиться, в том, что отражение в некоторой плоскости с последующим переносом на какое-нибудь расстояние d в направлении, перпендикулярном к плоскости, эквивалентно простому отражению в плоскости, параллельной первоначальной и находящейся на расстоянии $d/2$ от нее.

Все возможные пространственные группы распределяются по кристаллическим классам. Именно, каждая пространственная группа относится к тому классу, в котором совокупность осей и плоскостей симметрии та же, что и в пространственной группе, если в последней не делать различия между простыми и винтовыми осями и простыми и скользящими плоскостями. Всего оказываются возможными 230 различных пространственных групп [1]). Они были впервые найдены *Е. С. Федоровым* (1895 г.). Пространственные группы распределяются по классам следующим образом (табл. 1):

Таблица 1

Класс	Число групп	Класс	Число групп	Класс	Число групп	Класс	Число групп
C_1	1	S_4	2	S_6	2	C_{6v}	4
C_i	1	C_4	6	C_{3v}	6	D_6	6
C_s	4	C_{4h}	6	D_3	7	D_{6h}	4
C_2	3	D_{2d}	12	D_{3d}	6	T	5
C_{2h}	6	C_{4v}	12	C_{3h}	1	T_h	7
C_{2v}	22	D_4	10	C_6	6	T_d	6
D_2	9	D_{4h}	20	C_{6h}	2	O	8
D_{2h}	28	C_3	4	D_{3h}	4	O_h	10

Мы не станем приводить здесь перечисления элементов симметрии всех пространственных групп, которое было бы весьма громоздким. Его можно найти в специальных кристаллографических справочниках [2]).

Пространственные группы, не содержащие винтовых осей или плоскостей скольжения, называют *симморфными*; всего существует 73 такие группы. Остальные 157 пространственных групп содержат указанные элементы симметрии. Отметим, что кристал-

[1]) В том числе 11 пар пространственных групп, отличающихся друг от друга только направлением вращения вокруг своих винтовых осей.

[2]) Полное описание пространственных групп можно найти, например, в книге: *Г. Я. Любарский*, Теория групп и ее применения в физике (Приложение IV), Физматгиз, 1958 или в «Интернациональных таблицах для определения кристаллических структур» (International tables for X-ray crystallography, Kynoch Press, Birmingham, 1952). В последних перечислены также для каждой пространственной группы все эквивалентные точки.

лические решетки, относящиеся к несимморфным пространственным группам, заведомо должны содержать по крайней мере два одинаковых атома в элементарной ячейке. Действительно, поскольку поворот вокруг винтовой оси, или отражение в плоскости скольжения связаны с переносом на долю основного периода, то такое преобразование не совмещает друг с другом узлы решетки Бравэ; кристаллическая решетка должна поэтому быть построена по крайней мере из двух вдвинутых друг в друга решеток Бравэ, заполненных одинаковыми атомами.

§ 133. Обратная решетка

Все физические величины, характеризующие свойства кристаллической решетки, обладают такой же периодичностью, как и сама решетка. Таковы, например, плотность заряда, создаваемая электронами атомов в решетке, вероятность нахождения атомов в том или ином месте решетки и т. п. Пусть функция $U(\mathbf{r})$ представляет собой какую-либо из таких величин. Ее периодичность означает, что

$$U(\mathbf{r}+n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3)=U(\mathbf{r}) \tag{133,1}$$

при любых целых n_1, n_2, n_3 ($\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ — основные периоды решетки).

Разложим периодическую функцию $U(\mathbf{r})$ в тройной ряд Фурье. Это разложение можно написать в виде

$$U=\sum_{\mathbf{b}} U_{\mathbf{b}} e^{i\mathbf{br}}, \tag{133,2}$$

где суммирование происходит по всем возможным значениям вектора $\mathbf{b}$. Эти возможные значения $\mathbf{b}$ определяются из требования, чтобы функция U, представленная в виде ряда (133,2), удовлетворяла условию периодичности (133,1). Это значит, что все экспоненциальные множители не должны меняться при замене $\mathbf{r}$ на $\mathbf{r}+\mathbf{a}$, где $\mathbf{a}$ — любой из периодов решетки. Для этого необходимо, чтобы скалярное произведение $\mathbf{ab}$ было всегда целым кратным от 2π. Выбирая в качестве $\mathbf{a}$ последовательно основные периоды $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$, мы должны, следовательно, иметь

$$\mathbf{a}_1\mathbf{b}=2\pi p_1, \qquad \mathbf{a}_2\mathbf{b}=2\pi p_2, \qquad \mathbf{a}_3\mathbf{b}=2\pi p_3,$$

где p_1, p_2, p_3 — целые положительные или отрицательные числа (включая нуль). Решение этих трех уравнений имеет вид

$$\mathbf{b}=p_1\mathbf{b}_1+p_2\mathbf{b}_2+p_3\mathbf{b}_3, \tag{133,3}$$

где векторы $\mathbf{b}_i$ определяются через $\mathbf{a}_i$ посредством

$$\mathbf{b}_1=\frac{2\pi}{v}[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3], \quad \mathbf{b}_2=\frac{2\pi}{v}[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1], \quad \mathbf{b}_3=\frac{2\pi}{v}[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2], \quad v=\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]. \tag{133,4}$$