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

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

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

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

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

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

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

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

Таким образом, мы определили возможные значения вектора $\mathbf{b}$. Суммирование в (133,2) распространяется по всем целым значениям p_1, p_2, p_3.

Геометрически произведение $v=\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]$ представляет собой объем параллелепипеда, построенного на векторах $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$, т. е. объем элементарной ячейки; произведения же $[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]$ и т. д. изображают площади трех граней этой ячейки. Векторы $\mathbf{b}_i$ имеют, следовательно, размерность обратной длины, а по величине равны умноженным на 2π обратным высотам параллелепипеда, построенного на векторах $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$.

Из (133,4) видно, что между $\mathbf{b}_i$ и $\mathbf{a}_i$ имеют место соотношения

$$\mathbf{a}_i\mathbf{b}_k=\begin{cases}0, & \text{если} \quad i\neq k,\\ 2\pi, & \text{если} \quad i=k.\end{cases} \tag{133,5}$$

Это значит, что вектор $\mathbf{b}_1$ перпендикулярен к векторам $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ и аналогично для $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$.

Определив векторы $\mathbf{b}_i$, мы можем формально построить решетку с основными периодами $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$. Построенная таким образом решетка носит название *обратной*, а векторы $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$ называются периодами (основными) обратной решетки[1]).

Вычислим объем элементарной ячейки обратной решетки. Он равен

$$v'=\mathbf{b}_1[\mathbf{b}_2\mathbf{b}_3].$$

Подставляя сюда выражения (133,4), находим

$$v'=\frac{(2\pi)^3}{v^3}[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3][[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1][\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]]=\frac{(2\pi)^3}{v^3}([\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]\,\mathbf{a}_1)([\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1]\,\mathbf{a}_2),$$

или окончательно:

$$v'=\frac{(2\pi)^3}{v}. \tag{133,6}$$

Очевидно, что ячейка обратной решетки триклинной решетки Бравэ тоже является произвольным параллелепипедом. Аналогично обратные решетки простых решеток Бравэ других систем тоже являются простыми решетками той же системы; например, обратная решетка простой кубической решетки Бравэ тоже имеет простую кубическую ячейку. Легко, далее, убедиться при помощи простого построения в том, что обратная решетка гранецентрированных решеток Бравэ (ромбической, тетрагональной и кубической) представляет собой объемноцентрированную решетку той же системы; при этом объем параллелепипеда Бравэ обратной решетки $v_v'=8(2\pi)^3/v_f$, где v_f—объем параллелепипеда Бравэ

[1]) Определение (133,4), принятое в современной физической литературе, отличается множителями 2π от определения, принятого в чистой кристаллографии.

прямой решетки. Обратно, прямой объемноцентрированной решетке отвечает гранецентрированная обратная решетка, причем снова $v'_f=(2\pi)^3 8/v_v$. Наконец, для прямой решетки с центрированными основаниями обратная решетка тоже имеет ячейки с центрированными основаниями, причем $v'_b=(2\pi)^3 4/v_b$.

Как известно, уравнение вида $\mathbf{br}=\text{const}$, где $\mathbf{b}$ — постоянный вектор, описывает плоскость, перпендикулярную к вектору $\mathbf{b}$ и находящуюся на расстоянии const/b от начала координат. Выберем начало координат в каком-нибудь из узлов решетки Бравэ, и пусть $\mathbf{b}=p_1\mathbf{b}_1+p_2\mathbf{b}_2+p_3\mathbf{b}_3$ есть какой-нибудь вектор обратной решетки (p_1, p_2, p_3 — целые числа). Написав также $\mathbf{r}$ в виде $\mathbf{a}=$ $=n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3$, получаем уравнение плоскости вида

$$\mathbf{ba}/2\pi=n_1p_1+n_2p_2+n_3p_3=m, \tag{133,7}$$

где m — заданная постоянная. Для того чтобы это уравнение представляло собой плоскость, заполненную бесконечным множеством узлов решетки Бравэ (о таких плоскостях говорят, как о *кристаллических*), надо, чтобы оно удовлетворялось набором целых чисел n_1, n_2, n_3. Для этого, очевидно, постоянная m тоже должна быть целой. При заданных p_1, p_2, p_3 и пробегающей различные целые значения постоянной m уравнение (133,7) определяет, следовательно, бесчисленное множество кристаллических плоскостей, которые все параллельны друг другу. Каждому вектору обратной решетки соответствует определенное указанным способом семейство параллельных кристаллических плоскостей.

Числа p_1, p_2, p_3 в (133,7) можно представлять себе всегда взаимно простыми, т. е. не имеющими общего делителя, за исключением единицы. Если такой делитель имелся бы, то можно было бы разделить на него обе стороны уравнения, причем получилось бы уравнение того же вида. Числа p_1, p_2, p_3 называются *индексами Миллера* данного семейства кристаллических плоскостей и обозначаются как $(p_1p_2p_3)$.

Плоскость (133,7) пересекает оси координат (выбранные вдоль основных периодов $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$) в точках ma_1/p_1, ma_2/p_2, ma_3/p_3. Отношение длин отрезков (измеренных соответственно в единицах a_1, a_2, a_3), отсекаемых плоскостью от осей координат, есть $\frac{1}{p_1}:\frac{1}{p_2}:\frac{1}{p_3}$, т. е. эти длины относятся обратно пропорционально индексам Миллера. Так, индексы Миллера плоскостей, параллельных координатным плоскостям (т. е. отсекающих от осей отрезки, относящиеся как $\infty:\infty:1$), равны (100), (010), (001) — соответственно для трех координатных плоскостей. Плоскости, параллельные диагональной плоскости основного параллелепипеда решетки, имеют индексы (111) и т. д.

Легко определить расстояние между двумя последовательными плоскостями одного и того же семейства. Расстояние плоскости

(133,7) до начала координат есть $2\pi m/b$, где b есть длина данного вектора обратной решетки. Для следующей плоскости это расстояние есть $2\pi(m+1)/b$. Расстояние же d между этими двумя плоскостями есть

$$d = \frac{2\pi}{b}. \tag{133,8}$$

Отметим полезную в применениях формулу

$$\sum_{\mathbf{b}} e^{i\mathbf{br}} = v \sum_{\mathbf{a}} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{a}), \tag{133,9}$$

где суммирования справа и слева производятся соответственно по всем векторам прямой и обратной решеток. Сумма в правой стороне равенства—функция $\mathbf{r}$, периодическая в прямой решетке; выражение слева—ее разложение в ряд Фурье[1]). Аналогичная формула

$$\sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{ka}} = v' \sum_{\mathbf{b}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{b}) \tag{133,10}$$

прямо следует из (133,9) ввиду взаимного характера связи между прямой и обратной решетками.

§ 134. Неприводимые представления пространственных групп

Физические применения теории симметрии обычно связаны с использованием математического аппарата так называемых представлений групп. В этом параграфе мы остановимся на вопросе о классификации и методе построения неприводимых представлений пространственных групп[2]).

Предварительно снова подытожим, в более математических терминах, изложенные в предыдущих параграфах сведения о структуре пространственных групп.

Каждая пространственная группа содержит подгруппу трансляций, заключающую в себе бесконечное множество всех возможных параллельных переносов, совмещающих решетку саму с собой; эта подгруппа и представляет собой с математической точки зрения то, что называется решеткой Бравэ кристалла. Полная пространственная группа получается из этой подгруппы добавлением n элементов симметрии, содержащих вращения и

---

[1]) Расходимость суммы при $\mathbf{r}=\mathbf{a}$ связана с бесконечностью решетки. При рассмотрении решетки большого, но конечного объема значение суммы при $\mathbf{r}=\mathbf{a}$ надо полагать равным числу N ячеек в решетке.

[2]) Предполагается знание читателем теории групп в объеме, содержащемся, например, в III, глава XII.