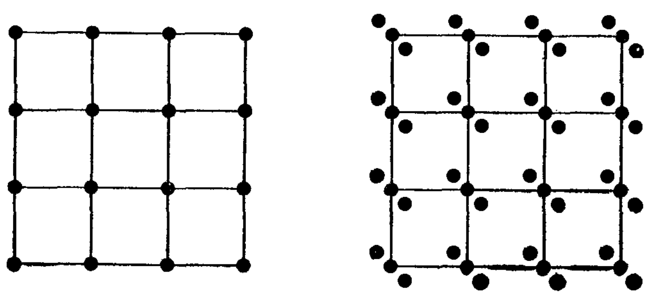
Системы	Число осей симметрии				Общее число осей симметрии
	2-го порядка	3-го порядка	4-го порядка	6-го порядка	
Кубическая	6	4	3	—	13
Тетрагональная	4	—	1	—	5
Гексагональная	6	—	—	1	7
Ромбоэдрическая	3	1	—	—	4
Ромбическая	3	—	—	—	3
Моноклинная	1	—	—	—	1
Триклинная	—	—	—	—	—

Все 14 типов решеток Браве были найдены им из геометрических соображений без использования каких бы то ни было физических принципов. Поэтому они могут быть охарактеризованы как *геометрически возможные*. Все они действительно встречаются в природе. Но в этом мы убеждаемся в *результате наблюдений*, а не путем геометрических рассуждений. Это замечание полностью относится и к последующему изложению, где говорится о пространственных группах и кристаллических классах.

§ 132. Пространственные группы и кристаллические классы

1. Примитивные пространственные решетки, из которых состоит сложная кристаллическая решетка, могут существенно отличаться от нее своей симметрией. Рассмотрим, например, тетрагональную



а) б)

Рис. 167.

примитивную решетку, основание которой изображено на рис. 167, *а*. Через каждый узел проходит поворотная ось симметрии четвертого порядка, перпендикулярная к плоскости рисунка. Вдвинем в эту решетку две такие же примитивные решетки, как показано на рис. 167, *б*. Если узлы исходной примитивной решетки окажутся посередине между узлами вновь вдвинутых примитивных решеток, то прежняя ось симметрии 4-го порядка в сложной решетке станет осью симметрии 2-го порядка. Если же этого не будет, то она вообще перестанет быть поворотной осью симметрии. В обоих случаях симметрия решетки понижается.

2. К этому надо добавить, что в сложной решетке возможны новые элементы симметрии: *винтовая ось* и *плоскость зеркального скольжения*. Винтовой осью n-го порядка называется прямая, при повороте вокруг которой на угол $2\pi/n$ и одновременном параллельном смещении вдоль нее решетка совмещается сама с собой. В качестве примера на рис. 168 изображены три винтовые оси 4-го

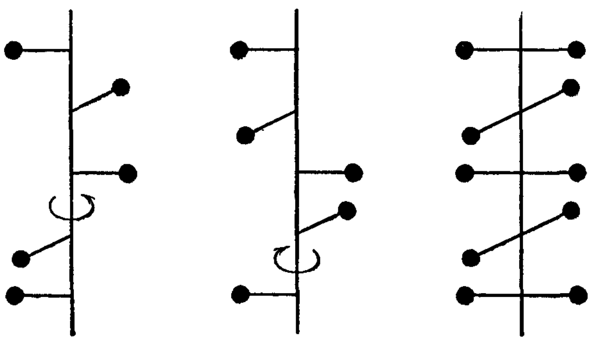


Рис. 168.

порядка. Из них первая является «*правой*», а вторая — «*левой*». Если смотреть вдоль винтовой оси в направлении смещения, то в первом случае для совмещения самой с собой решетку надо поворачивать на 90° вправо, а во втором — влево. В третьем случае вращение может происходить и вправо, и влево. Так, кварц встречается в двух модификациях, одна из которых имеет правую, а другая — левую винтовую ось. Это явление есть частный случай так называемого *энантиоморфизма кристаллов*. Энантиоморфизм аналогичен явлению зеркальной изомерии молекул, описанному в § 129. Он состоит в том, что существуют кристаллические решетки, являющиеся зеркальными изображениями одна другой и притом такие, что они не могут быть совмещены друг с другом никакими поворотами в пространстве. Как и у молекул, энантиоморфизм возможен лишь для решеток, не содержащих плоскостей, центров и зеркально-поворотных осей симметрии.

Плоскостью зеркального скольжения называется такая плоскость, при отражении в которой и одновременном смещении на определенное расстояние в направлении, параллельном этой плоскости, решетка совмещается сама с собой.

3. Таким образом, сложная пространственная решетка обладает трансляционной симметрией, а также может иметь и другие элементы симметрии: простые и винтовые оси симметрии, зеркально-поворотные оси, плоскости симметрии — простые и зеркального скольжения. *Совокупность всех элементов симметрии пространственной решетки называется ее пространственной группой.* Пространственная группа наиболее полно характеризует симметрию внутреннего строения кристаллов. Как показал в 1890 г. на основе геометрических соображений русский кристаллограф и минералог Е. С. Федоров (1853—1919), *может существовать всего* 230 *различных пространственных групп,* которые распределяются по кристаллическим системам следующим образом: кубическая — 36, тетрагональная — 68, гексагональная — 27, ромбоэдрическая — 59, моноклинная — 13, триклинная — 2.

Среди 230 пространственных групп 11 пар отличаются только направлениями вращения винтовых осей. Это — *энантимофорные группы.* По-видимому, не все пространственные группы Федорова реализуются в природе. Подтверждением этого может служить тот факт, что для 53 групп пока не найдено ни одного кристалла.

4. Выясним теперь понятие класса кристаллической решетки. Во многих физических явлениях атомистическая структура вещества непосредственным образом не проявляется. Такие явления, называемые *макроскопическими,* могут быть описаны в рамках представления о теле как о *сплошной среде (континууме),* характеризующейся определенными *макроскопическими параметрами.* Так поступают, например, при рассмотрении теплового расширения или деформаций тел.

В учении о кристаллах *континуум следует рассматривать как предельный случай кристаллической решетки.* Расстояния между соседними узлами решетки не могут входить в число параметров для характеристики свойств континуума. Такие расстояния должны считаться величинами бесконечно малыми, и ими всюду следует пренебрегать. Однако их отношения остаются величинами *конечными* и могут служить макроскопическими параметрами континуума. Возьмем, например, примитивную тетрагональную решетку. Ее микроскопическими параметрами являются длины ребер a и c соответствующего примитивного параллелепипеда (см. рис. 164). За параметры решетки можно взять также, например, длину ребра a и отношение $\varepsilon = c/a$. При переходе к континууму параметр a обращается в нуль и может быть исключен из рассмотрения, как величина фиксированная ($a = 0$). Остается только один (макроскопический) параметр ε, сохраняющий при предельном переходе конечное значение. Ясно, что континуум, полученный в результате такого предельного перехода, будет *однородным,* но, вообще говоря, *анизотропным.*

Однородность означает, что все точки среды совершенно идентичны. При параллельном смещении среды на любое расстояние и в любом направлении она совмещается сама с собой. Поэтому при классификации кристаллов по симметрии их макроскопических свойств параллельные смещения можно совсем исключить из рассмотрения, поскольку они не могут выявить никаких специфических свойств, отличающих один кристалл от другого.

Анизотропия означает, что свойства кристаллов в различных направлениях разные. Но в некоторых направлениях они могут быть и одинаковыми. Тогда говорят о наличии *симметрии кристалла, рассматриваемого как континуум*. Например, если кристаллическая решетка имеет центр, плоскость или поворотную ось симметрии n-го порядка, то эти элементы симметрии сохраняются и для континуума, являющегося ее пределом. *Специфичность континуума состоит в том, что в нем* (ввиду обращения в нуль ребер основного параллелепипеда) *исчезает разница между простыми и винтовыми осями симметрии, а также между простыми плоскостями симметрии и плоскостями зеркального скольжения.* Для континуума остаются только следующие элементы симметрии: центр, плоскость, поворотные и зеркально-поворотные оси симметрии. Совокупность всех этих элементов симметрии кристаллической решетки, как континуума, называется ее *классом*. Ясно, что класс кристаллической решетки можно получить из ее пространственной группы, если игнорировать в ней все трансляции и не различать простые и винтовые оси, простые плоскости симметрии и плоскости зеркального скольжения.

Могут существовать 32 *кристаллических класса,* распределяющиеся по кристаллическим системам следующим образом: кубическая — 5, тетрагональная — 7, гексагональная — 7, ромбоэдрическая — 5, ромбическая — 3, моноклинная — 3, триклинная — 2. Среди классов, принадлежащих к данной системе, выделяется класс, обладающий *полной симметрией системы* (т. е. симметрией соответствующей ей примитивной решетки).

5. Приведем теперь пример физического явления, в котором проявляется анизотропия кристалла. Если решетка кубическая, то тепловое расширение ее по всем направлениям, параллельным ребрам куба, будет одно и то же. При нагревании кубическая решетка остается кубической. Если же решетка тетрагональная ($a \neq c$), то коэффициенты теплового расширения в направлениях ребер a и c будут разными. При нагревании отношение c/a будет изменяться.

Допустим, что при некоторой температуре длины ребер c и a отличаются незначительно ($a < c$). Допустим далее, что при нагревании расширение кристалла в направлении c идет медленнее, чем в перпендикулярных направлениях. Тогда при некоторой температуре $T = T_c$ длины ребер a и c могут сравняться. Решетка изменяется непрерывно, никаких изменений плотности или выделения тепла при температуре T_c не происходит. Однако при этой температуре *скачкообразно изменяется симметрия решетки:* из тетрагональной решетка становится кубической. Поэтому температура T_c в принципе может быть указана совершенно точно. Если при дальнейшем нагревании решетка продолжает оставаться также кубической, то можно сказать, что в точке $T = T_c$ произошел фазовый переход без изменения плотности и без выделения или поглощения теплоты перехода. Это — *фазовый переход второго рода.* Изменение симметрии решетки может привести к скачкообразному изменению коэффициента объемного расширения решетки, так как кубическая решетка расширяется иначе, чем тетрагональная, из которой она возникла. Точно так же скачкообразно может измениться и теплоемкость решетки. Приведенный воображаемый пример, принадлежащий Л. Д. Ландау (1908—1968), интересен в том отношении, что он может служить для разъяснения физической природы фазовых переходов второго рода. Заметим, что при фазовых переходах первого рода кристаллическая решетка либо разрушается (плавление), либо изменяется скачкообразно (полиморфные превращения). С этим и связано изменение объема тела и выделение тепла при таких превращениях.

§ 133. Миллеровские индексы и индексы направлений

1. Для определения положения атомов в кристаллической решетке пользуются специальными прямолинейными системами координат, называемыми *кристаллографическими.* За начало координат принимается один из узлов решетки, а за координатные оси — ребра соответствующего параллелепипеда Браве. Для моноклинных и триклинных кристаллов выбор параллелепипеда Браве не однозначен. В гексагональных кристаллах за оси X и Y принимают стороны основания основного параллелепипеда, образующие угол 120°, а за ось Z — ребро, перпендикулярное к этому основанию. В моноклинных кристаллах за ось Z принимают ребро, перпендикулярное к основанию параллелепипеда Браве. Мы видим, что в кубических, тетрагональных и ромбических кристаллах системы координат прямоугольные, в остальных кристаллах — косоугольные. Ребра параллелепипеда Браве принимаются за единицы длины в направлениях координатных осей. Такие единицы длины называются *осевыми.* Таким образом, в направлениях различных осей координат единицы длины разные. Так, атом в центре основного параллелепипеда Браве ромбического кристалла имеет координаты ($^1/_2$, $^1/_2$, $^1/_2$), а атом в центре грани XY того же параллелепипеда — координаты ($^1/_2$, $^1/_2$, 0). Кристаллографические координаты применяются и для характеристики направлений кристаллических плоскостей и узловых линий решетки.