

Группы симметрии преобразований пространства классифицируют: по числу n измерений пространства, в к-рых они определены; по числу m измерений пространства, в к-рых объект периодичен (их соответственно обозначают G_m^n), и по нек-рым др. признакам. Для описания кристаллов используют различные группы симметрии, из к-рых важнейшими являются точечные группы симметрии G_0^3 , описывающие внеш. форму кристаллов; их наз. также кристаллографич. классами; пространственные группы симметрии G_3^3 , описывающие атомную структуру кристаллов.

Точечные группы симметрии. Операциями точечной симметрии являются: повороты вокруг оси симметрии порядка N на угол, равный $360^\circ/N$ (рис. 2, а); отражение в плоскости симметрии m (зеркальное отражение, рис. 2, б); инверсия $\bar{1}$ (симметрия относительно точки, рис. 2, в); инверсионные повороты \bar{N} (комбинация поворота на угол $360^\circ/N$ с одноврем. инверсией, рис. 2, г). Вместо

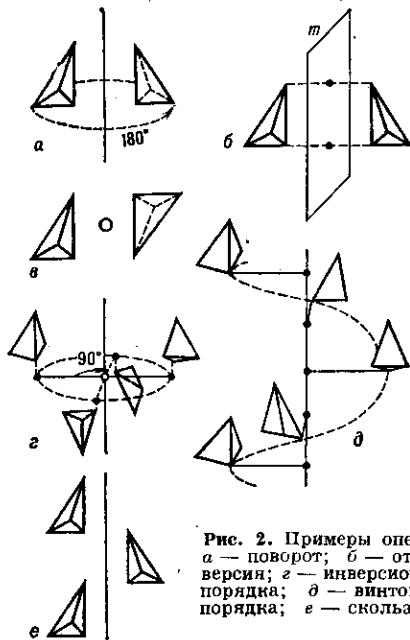


Рис. 2. Примеры операций симметрии:
а — поворот; б — отражение; в — инверсия; г — инверсионный поворот 4-го порядка; д — винтовой поворот 4-го порядка; е — скользящее отражение.

инверсионных поворотов иногда рассматриваются эквивалентные им зеркальные повороты \bar{N} . Геометрически возможные сочетания операций точечной симметрии определяют ту или иную точечную группу симметрии, к-рая изображается обычно в стереографич. проекции. При преобразованиях точечной симметрии по крайней мере одна точка объекта остаётся неподвижной — преобразуется сама в себя. В ней пересекаются все элементы симметрии, и она является центром стереографич. проекции. Примеры кристаллов, относящихся к различным точечным группам, даны на рис. 3.

Точечные преобразования симметрии $g[x_1, x_2, x_3] = x'_1, x'_2, x'_3$ описываются линейными ур-ниями

$$x'_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3,$$

$$x'_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3,$$

$$x'_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3$$

(2a)

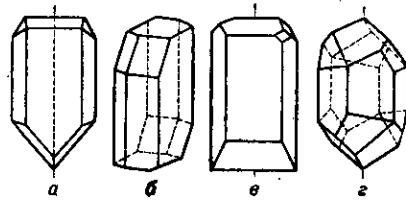


Рис. 3. Примеры кристаллов, принадлежащих к разным точечным группам (кристаллографическим классам): а — к классу т (одна плоскость симметрии); б — к классу 1 (центр симметрии или центр инверсии); в — к классу 2 (одна ось симметрии 2-го порядка); г — к классу 6 (одна инверсионно-поворотная ось 6-го порядка).

или матрицей коэффициентов

$$D = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = (a_{ij}). \quad (3)$$

Напр., при повороте вокруг оси x_1 на угол $\alpha = 360^\circ/N$ матрица D имеет вид:

$$\begin{vmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix},$$

а при отражении в плоскости x_1x_2 D имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

Число точечных групп G_0^3 бесконечно. Однако в кристаллах ввиду наличия кристаллич. решётки возможны только операции и соответственно оси симметрии до 6-го порядка (кроме 5-го; в кристаллич. решётке не может быть оси симметрии 5-го порядка, т. к. с помощью пятиугольных фигур нельзя заполнить пространство без промежутков). Операции точечной симметрии и соответствующие им элементы симметрии обозначаются символами: оси 1, 2, 3, 4, 6, инверсионные оси $\bar{1}$ (центр симметрии или центр инверсии), $\bar{2}$ (она же — плоскость симметрии m), $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ (рис. 4).

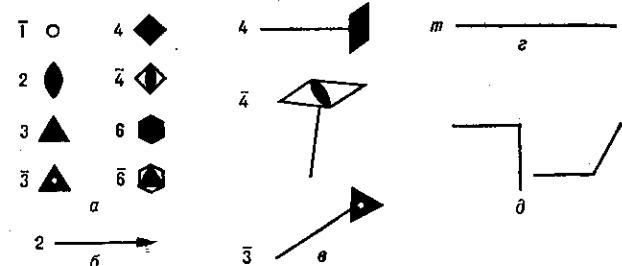


Рис. 4. Графические обозначения элементов точечной симметрии: а — кружок — центр симметрии, оси симметрии, перпендикулярные плоскости чертежа; б — ось 2, параллельная плоскости чертежа; в — оси симметрии, параллельные или косо расположенные к плоскости чертежа; г — плоскость симметрии, перпендикулярная плоскости чертежа; д — плоскости симметрии, параллельные плоскости чертежа.

Для описания точечной группы симметрии достаточно задать одну или неск. порождающих её операций симметрии, остальные её операции (если они есть) возникнут в результате взаимодействия порождающих. Напр., для кварца (рис. 1, а) порождающими операциями являются 3 и одна из операций 2, а всего операций в этой группе 6. В международные обозначения групп входят символы порождающих операций симметрии. Точечные