УДК 538.9

В. А. Лиопо[1], И. А. Лявшук[2], С. С. Секержицкий[3]
[1]*д-р физ.-мат. наук, проф., проф. каф. теоретической физики и теплотехники Гродненского государственного университета имени Янки Купалы*
[2]*магистр естеств. наук, ст. преподаватель каф. информационных систем и технологий Гродненского государственного университета имени Янки Купалы*
[3]*канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. общей и теоретической физики Брестского государственного университета имени А. С. Пушкина*
e-mail: sekerzhitsky@rambler.ru

ТОЧЕЧНАЯ СИММЕТРИЯ ПРЯМОЙ И ОБРАТНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ГРУПП ПОДСТАНОВОК

Построены таблицы групп подстановок точечных симметрий кристаллов. Разработана методика перехода от матричного представления точечных симметрий кристалла к представлению группами подстановок. Проанализирована применимость представления точечных симметрий кристаллов для R-тригональной решетки, а также тождественность представлений точечных групп в кристаллическом и обратном пространствах.

LIOPO V. A., LIAUSHUK I. A., SEKERZHITSKY S. S.
POINT SYMMETRY OF THE FORWARD AND REVERSE CRYSTAL LATTICES IN THE REPRESENTATION OF PERMUTATION GROUPS

The tables of groups of substitutions of point symmetries of crystals are constructed. A technique has been developed for the transition from the matrix representation of the point symmetries of the crystal to the representation by permutation groups. The applicability of the representation of point symmetries of crystals for the R-trigonal lattice, as well as the identity of the representations of point groups in crystalline and inverse spaces, is analyzed.

Введение

Точечная симметрия описывает объекты (например, различные геометрические фигуры), которые при изменении своего положения относительно исходного (начального) совпадают с этим начальным состоянием. При этом, обязательно хотя бы одна точка этого объекта при его движении остается неподвижной. С этой точкой совмещается начало координат декартовой системы, оси которой фиксируются с положением объекта. Для кристаллов такая система называется кристаллофизической (КФ), и ее оси при точечном движении займут положение (x', y', z'), которое относительно начального положения (x, y, z) описывается матрицей Эйлера:

$$[M] = \lfloor C_{jk} \rfloor, \tag{1}$$

где $C_{jk} = cos(x_j, x'_k)$, при этом x и x' определяются по одному правилу, например, против (или по) часовой стрелке. Если выполняется несколько движений, описываемых матрицами $M_{V(1,2,\ldots,n)}$, то результат определяется матрицей:

$$M_R = \Pi_V M_V . \tag{2}$$

При этом условие коммутативности может не выполняться, а может и выполняться.

Матричное представление совокупности всех возможных точечных движений формирует точечную группу объекта (кристалла, его решетки и структуры).

Кристаллографический и кристаллофизический базисы

В кристаллах, наряду с точечной симметрией, имеется симметрия пространственная, когда объект совмещается с первоначальным положением при движении всех его точек [1]. Такое симметричное преобразование называется трансляцией и описывается условием:

$$\hat{T}\varphi(\vec{r}) = \varphi\left(\vec{r} + \vec{R}\right) \equiv \varphi(\vec{r}), \tag{3}$$

где $\varphi(\vec{r})$ – структурно-химические параметры, $\left(\vec{R}\right)$ – вектор трансляции, равный:

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}\,, \tag{4}$$

здесь m, n, p – целые числа.

Векторы $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ – некомпланарные, связывают три гомологичные точки с такой же в начале координат и называются базисными векторами в кристаллографической координатной системе.

На векторах базиса строится параллелепипед с ребрами a, b, c, который в общем случае косоугольный и который называется ячейкой кристалла. Ячейка описывается шестью параметрами: a, b, c (линейные) и α, β, γ (угловые) параметры. Если координатные оси совпадают с ребрами ячейки и координаты точек приведены в единицах базиса, то условие (3) в этой системе координат, называемой кристаллографической (КГ), примет вид:

$$\hat{T}\varphi(x, y, z)_{КГ} = \varphi(x_{КГ} + m, y_{КГ} + n, z_{КГ} + p) \equiv \varphi(x, y, z)_{КГ}\,. \tag{5}$$

Дифракционный эксперимент определяет положение атомов в КГ-системе, но эта система не позволяет определять межатомные ориентации. Если КГ- и КФ-системы имеют общее начало координат и определенную взаимоориентацию координатных осей, то переход от координат точки в КГ-системе к ее координатам в КФ-системе определяется условием:

$$\begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix}_{КФ} = \begin{vmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix}_{КГ} \tag{6}$$

или $|x|_{КФ} = |M||x|_{КГ}$, где $|M|$ – метрический тензор решетки кристалла.

Для перехода от КФ-системы к КГ-системе координат требуется условие:

$$|x|_{КГ} = |M|^{-1}|x|_{КФ}\,, \tag{7}$$

где $|M|^{-1}$ – обратный метрический тензор.

Очевидно, что

$$|M||M|^{-1} = |M|^{-1}|M| = |I|, \tag{8}$$

здесь $|I|$ – единичная матрица.

Метрические тензоры $|M|$ и $|M|^{-1}$ в том случае, когда $x_{КГ}$ совпадает с $x_{КФ}$, $Y_{КГ}$ – лежит в плоскости $(xy)_{КФ}$, имеют вид [2]:

$$M = \begin{vmatrix} a & b\cos\gamma & c\cos\beta \\ 0 & b\sin\gamma & c\dfrac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma} \\ 0 & 0 & \dfrac{c\cdot r}{\sin\gamma} \end{vmatrix}, \qquad (9)$$

$$M^{-1} = \begin{vmatrix} \dfrac{1}{a} & -\dfrac{ctg\,\gamma}{a} & \dfrac{\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta}{a\cdot r\sin\gamma} \\ 0 & \dfrac{1}{b\sin\gamma} & \dfrac{\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha}{b\cdot r\sin\gamma} \\ 0 & 0 & \dfrac{\sin\gamma}{c\cdot r} \end{vmatrix}. \qquad (9^*)$$

Если необходимо построить систему связанных точечной симметрией гомологичных точек (орбиту), то матрица-генератор точечной (C) группы требует записи координат атомов начальной точки в КФ-базисе:

$$|x|_{КФ}^{ОРБ} = C|x|_{КФ}^{1}. \qquad (10)$$

Если же начальная точка записана в КГ-базисе, а точечная симметрия приведена в матричном представлении КФ-базиса, то $|x|_{КГ}$ необходимо перевести в КФ-базис, подействовать на эту точку группой C (КФ-базис) и совершить обратный переход от КФ- к КГ-базису.

Т. е. КГ-базис при $|x|_{КГ}^{1}$ определяется условием:

$$|x|_{КГ}^{ОРБ} = |M|^{-1} C_{КФ} |M| |x|_{КГ}^{1} \qquad (11)$$

или

$$|x|_{КГ}^{ОРБ} = |K| |x|_{КГ}^{1}, \qquad (12)$$

где K – матричное представление точечной группы в КГ-базисе.

В литературе [3] показано, что если в матрицах C имеются элементы $0,\pm 1$, причем ± 1 встречается в каждой строке и в каждом столбце только по одному разу, то группы C и K совпадают. Именно это свойство матриц точечных групп позволяет записать их в терминах групп подстановок.

Из анализа групп подстановок следует, что для построения кристаллографических орбит в КГ-базисе или в КФ-базисе необходимо записать координаты исходной точки в виде $\begin{pmatrix} x\,y\,z \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ и перемножить элементы группы на эту матрицу. Другими словами, необходимо взять группу в представлении групп подстановок и во всех ее элементах в верхней строке заменить $1 \to x$, $2 \to y$, $3 \to z$. Если исходная (начальная) точка взята в КГ-базисе, то получим орбиту в КГ-базисе, то же самое и для КФ-базиса.

Группы подстановок точечных симметрий кристаллов

Матрица с элементами $0,\pm 1$ (± 1 не повторяется ни в строке, ни в столбце) описывается выражением:

$$\begin{pmatrix} u & \bar{v} & w \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Это означает, что под номером u стоит $(+1)$, под номером v стоит (-1), $(+1)$ имеет номер w $(u \neq v, u \neq w, v \neq w)$. Очевидно, что запись (11) легко трансформируется в матрицу Эйлера.

Правило взаимодействия (бинарной операции) элементов групп подстановок иллюстрирует пример:

$$\begin{pmatrix} 3 & \bar{1} & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{2} & \bar{3} & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Элемент над цифрой 1 результата определяется следующим образом: над 1 в первом «множителе» стоит 3, а над 3 во втором – 1, т. е. в результате над 1 надо поставить 1. Таким же образом определяются элементы результата над цифрами 2 и 3. Если знак «минус» (над числом) встречается дважды, то это число берется со знаком «плюс», который не указывается. Если же один раз, то со знаком «минус». Единичным элементом в группе подстановок является элемент $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 3 \end{pmatrix} = e$.

Порождающие элементы групп подстановок для сингоний, кроме гекса- и тригональной, имеют одинаковую запись как в кристаллографическом, так и в кристаллофизическом базисах и в прямой, и в обратной решетках.

Генераторы групп и сами группы подстановок приведены в таблице 1.

Таблица 1. – Сингонии (*С*), точечные группы (*ТГ*), генераторы (*ГЕН*) и группы подстановок (*ГП*) для простейших точечных симметрий в *КГ*- и *КФ*-базисах прямой и обратной решеток

С	№	*ТГ*	*ГЕН*	*ГП*
Триклинная	1	1	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
	2	$\bar{1}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
Моноклинная	3	2	$\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
	4	m	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
	5	$2/m$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
Ромбическая	6	222	$\begin{pmatrix} 1 & \bar{2} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \bar{2} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
	7	$mm2$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$

Продолжение таблицы 1

	8	mmm	$\begin{pmatrix}\bar{1}23\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}12\bar{3}\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{1}23\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}12\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}2\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix}$
Тетрагональная	9	4	$\begin{pmatrix}1\bar{2}3\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}13\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix}$
	10	$\bar{4}$	$\begin{pmatrix}\bar{2}1\bar{3}\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{2}1\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\bar{1}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix}$
	11	422	$\begin{pmatrix}2\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}13\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}\bar{1}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}2\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}21\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix}$
	12	$4mm$	$\begin{pmatrix}2\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}23\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}13\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}23\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}213\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix}$
	13	$4/m$	$\begin{pmatrix}2\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}12\bar{3}\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}13\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}12\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\bar{1}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}1\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix}$
	14	$\bar{4}2m$	$\begin{pmatrix}\bar{2}1\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{2}1\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\bar{1}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}213\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}2\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix}$
	15	$4/mmm$	$\begin{pmatrix}\bar{2}13\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}23\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}12\bar{3}\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}13\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}23\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}213\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}\bar{1}3\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}12\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\bar{1}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}1\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}2\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}21\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\bar{2}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}\bar{1}\bar{3}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix}$
Кубическая	16	$23*$	$\begin{pmatrix}312\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3\bar{1}\bar{2}\\123\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}312\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}231\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3\bar{1}\bar{2}\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}\bar{3}1\\123\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}3\bar{1}\\123\end{pmatrix}$

				$\begin{pmatrix}1&\bar2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&\bar2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&\bar3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&\bar1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$
	17	$432*$	$\begin{pmatrix}\bar1&3&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&\bar1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&\bar1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&\bar3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&\bar2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&\bar2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&\bar3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&\bar1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&3&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&2&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&1&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&\bar2&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&1&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&\bar1&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&\bar2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&3&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&\bar2&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&\bar1&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&\bar3&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&2&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$
	18	$\bar43m*$	$\begin{pmatrix}2&\bar1&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&\bar1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&\bar1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&\bar3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&\bar2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&\bar2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&1&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&\bar3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&\bar1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&3&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&2&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&1&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&\bar2&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&1&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&\bar1&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&\bar3&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&3&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&\bar2&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&\bar3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&\bar3&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&2&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$
	19	$m3*$	$\begin{pmatrix}\bar1&\bar2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&\bar2&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&\bar3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&\bar2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&\bar2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&\bar3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&\bar1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&\bar2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&\bar1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&\bar3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar3&2&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&3&\bar1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}2&\bar3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&2&\bar3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&\bar1&2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}\bar2&3&1\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&\bar2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}3&1&\bar2\\1&2&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}$

	20	$m3m*$	$\begin{pmatrix} 3\,1\,2 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1\,2\,\bar{3} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} \bar{2}\,\bar{3}\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 3\,1\,2 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2\,3\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3\,\bar{1}\,\bar{2} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{2}\,\bar{3}\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{2}\,3\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 1\,\bar{2}\,\bar{3} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1}\,\bar{2}\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{3}\,1\,\bar{2} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2\,\bar{3}\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1}\,2\,\bar{3} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} \bar{3}\,\bar{1}\,2 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1}\,3\,2 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{3}\,2\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{2}\,1\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{3}\,\bar{2}\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 2\,1\,\bar{3} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{2}\,\bar{1}\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1}\,\bar{2}\,\bar{3} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1\,3\,\bar{2} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3\,\bar{2}\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} \bar{2}\,\bar{1}\,\bar{3} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1\,\bar{3}\,2 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3\,2\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1\,2\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3\,2\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 2\,1\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3\,\bar{2}\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{2}\,1\,\bar{3} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2\,\bar{1}\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1\,\bar{3}\,\bar{2} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} \bar{1}\,3\,\bar{2} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{3}\,\bar{2}\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2\,\bar{3}\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1}\,\bar{3}\,2 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{3}\,2\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 1\,2\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{3}\,\bar{1}\,\bar{2} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{2}\,\bar{3}\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{3}\,2\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2\,3\,\bar{1} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 2\,\bar{3}\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1}\,2\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1\,2\,\bar{3} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3\,\bar{1}\,2 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{2}\,3\,1 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 1\,\bar{2}\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3\,1\,\bar{2} \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1\,2\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$

Тригональные и гексагональные решетки в качестве таксона (определяющий признак) описываются матрицей-генератором групп 3 и 6:

$$|M| = \begin{vmatrix} S\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & S\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \tag{15}$$

где $S = +1$ для гексагональной и $S = -1$ для тригональной ячеек.

Параметры ячеек этих решеток следующие: $a = b$, с $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$ (для гексагональной часто берут $\gamma = 60°$).

Расчет метрических тензоров (9) и переход к кристаллографической системе (12) приводят к значениям:

$$|3| = \begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, 6_{120} = \begin{vmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, 6_{60} = \begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \tag{16}$$

т. е. для этих решеток в трехмерном пространстве представление их симметрий группами подстановок неприемлемо. Это означает, что, строго говоря, эти решетки не соответствуют самому понятию решетка и ее ячейка в виде параллелепипеда, так как полиэдр с осями 6 и 3 при указанных $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ построить невозможно. Но для тригональной решетки возможен так называемый ромбический базис (R -решетка) с параметрами: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma$. Ячейка в этом случае представляет собой ромбоэдр. Биссектриса трехгранного угла, ограниченного плоскостями (001), (010) и (100), определяет направление оси 3.

Очевидно, эта ось в КГ-системе имеет вид:

$$3 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

Плоскости m_{XZ} и 2_y имеют вид:

$$m_{XZ} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \; 2_Y = \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{vmatrix}.$$

Точечные группы тригональной сингонии для R-базиса (КГ-базис) и гексагональной сингонии рассмотрены в [4].

В таблице 2 приведена матрица Кэли, которая является таблицей взаимодействия («перемножения») для группы 23.

Каждая строка, как и каждый столбец, представляют собой элемент группы подстановок точечной группы 23. Легко убедиться, что для 12 подстановок совокупность 12 строк (или 12 столбцов) таблицы Кэли представляет группу подстановок 12-го порядка, так как требование групповых постулатов полностью выполняется.

Подчеркнем, что точечная симметрия решетки кристалла всегда такая же, как и точечная группа симметрии обратной решетки.

Таблица 2. – Матрица Кэли для группы 23

	1 (e)	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\begin{pmatrix} 123 \\ 123 \end{pmatrix}$	e	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\begin{pmatrix} 312 \\ 123 \end{pmatrix}$	2	3	e	10	8	11	4	12	6	7	9	5
$\begin{pmatrix} 231 \\ 123 \end{pmatrix}$	3	e	2	7	12	9	10	5	11	4	6	8
$\begin{pmatrix} 3\bar{1}\bar{2} \\ 123 \end{pmatrix}$	4	6	8	5	e	7	2	9	3	11	12	10
$\begin{pmatrix} \bar{2}\bar{3}1 \\ 123 \end{pmatrix}$	5	7	9	e	4	2	6	3	8	12	10	11

$\begin{pmatrix} \bar{2}3\bar{1} \\ 123 \end{pmatrix}$	6	8	4	11	9	12	5	10	7	2	3	e
$\begin{pmatrix} 1\bar{2}\bar{3} \\ 123 \end{pmatrix}$	7	9	5	12	3	10	e	11	2	6	8	4
$\begin{pmatrix} \bar{1}\bar{2}3 \\ 123 \end{pmatrix}$	8	4	6	2	10	3	11	e	12	5	7	9
$\begin{pmatrix} \bar{3}1\bar{2} \\ 123 \end{pmatrix}$	9	5	7	6	11	8	12	4	10	e	2	3
$\begin{pmatrix} 2\bar{3}\bar{1} \\ 123 \end{pmatrix}$	10	11	12	8	2	4	3	6	e	9	5	7
$\begin{pmatrix} \bar{1}2\bar{3} \\ 123 \end{pmatrix}$	11	12	10	9	6	5	8	7	4	3	e	2
$\begin{pmatrix} \bar{3}\bar{1}2 \\ 123 \end{pmatrix}$	12	10	11	3	7	e	9	2	5	8	4	6

Примеры использования групп подстановок для решения некоторых задач

Физические свойства кристаллов, как и любых объектов, определяются откликом объекта на внешнее воздействие. При этом всегда выполняется принцип Ле-Шателье – Брауна: «На внешнее воздействие любая система откликается так, чтобы это воздействие максимально ослабить». Если воздействие носит векторный характер, то и отклик будет иметь смысл вектора. Каждая компонента вектора воздействия $(\vec{A})$ действует на каждую компоненту вектора отклика $(\vec{B})$.

Связь между ними имеет вид:

$$\vec{B} = [T]\vec{A}, \tag{17}$$

где $[T]$ – тензор физического свойства.

В кристаллах точечная симметрия отражается в записи тензора $[T]$, так как его компоненты должны быть инвариантны по отношению к точечному преобразованию [5; 6]. Если в исходной (начальной) позиции кристалл описывается тензором физических свойств $[T] = [t_{ij}]$, то после точечного преобразования группой (C_{mn}) компоненты тензора примут значения $[T'] = [t'_{ij}]$:

$$[t'_{pq}] \equiv [t_{pq}], \tag{18}$$

в противном случае точечное преобразование не будет инвариантным.

Очевидно, что:

$$t'_{pq} = f(C, T_{pq}), \tag{19}$$

где C – точечная группа кристалла, T – тензор физического свойства кристалла до выполнения точечного движения симметрии.

Если векторы $\vec{A}, \vec{B}$ (17) имеют одинаковую полярность, то (19) примет вид:

$$t'_{pq} = \sum_{i,j} C_{pi} C_{qj} t_{ij} \ . \tag{20}$$

Если $\vec{A}, \vec{B}$ разнополярные (один полярный, другой аксиальный), то для операций симметрии первого рода выполняется условие (20). Если же анализируется связь между $[T']$ и $[T]$ для операций симметрии второго рода, то выполняется условие:

$$t'_{pq} = -\sum_{i,j} C_{pi} C_{qj} t_{ij} \ . \tag{21}$$

Естественно, при использовании формул (20, 21) не надо рассматривать влияние на $[t'_{ij}]$ всей группы точечной симметрии. Достаточно взять только матрицу(ы)-генератор(ы). Для примера рассмотрим группу 4. Генератор этой группы в представлении групп подстановок может также иметь вид $\begin{pmatrix} \bar{2}13 \\ 123 \end{pmatrix}$.

Поэтому, для определения элементов тензора $[T']$ надо использовать условие: $t'_{11} = C_{12}C_{12}t_{22}$, $t'_{12} = C_{12}C_{21}t_{21}$, $t'_{13} = C_{12}C_{33}t_{23}$, $t'_{22} = C_{21}C_{21}t_{11}$, $t'_{21} = C_{21}C_{12}t_{12}$, $t'_{23} = C_{21}C_{33}t_{13}$.

Из этого следует: $t'_{11} = t_{22} = t_{11}$, $t'_{22} = t_{11} = t_{22}$, $t'_{12} = t_{21} = t_{12}$, $t'_{21} = -t_{12} = t_{23}$, $t'_{13} = -t_{23} = t_{13}$. Из двух приведенных условий следует, что $t_{13} = -t_{13}$ или $t_{23} = -t_{23}$, т. е. эти компоненты тензора $[T]$ равны нулю.

Т. е. тензор физического свойства представлен в виде:

$$[T] = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & 0 \\ t_{12} & t_{11} & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} \end{bmatrix}. \tag{22}$$

Если точечная группа в матрицах-генераторах имеет дополнительную матрицу, то ее надо учесть. Взяв за исходный тензор, например, для группы $4mm$ плоскости, проходящие через ось 4 с матрицей $\begin{pmatrix} \bar{1}23 \\ 123 \end{pmatrix}$, получаем условие $t_{12} = -t_{21}$, т. е. равны нулю соответствующие компоненты.

Тензор $[T]$ для $4mm$ имеет вид:

$$[T_{4mm}] = \begin{bmatrix} t_{11} & & 0 \\ & t_{11} & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} \end{bmatrix}. \tag{23}$$

Эффективность использования точечных симметрий кристаллов в представлении групп подстановок существенно повышается по сравнению с матричным представлением, если анализируются тензоры третьего или четвертого ранга.

Представление точечных симметрий прямой и обратной решеток группами подстановок

Представленные в таблице 1 подстановки для групп точечной симметрии, как и элементы-генераторы этих групп, проанализированы для решеток кристаллов (или прямых решеток). Вопрос применения этих представлений для обратных решеток требует дополнительного анализа. Сингония прямой решетки определяется не только точечной симметрией, но и соотношениями между параметрами ячейки. У трех ортогональных сингоний $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. Если $(a = b = c)$, то решетка кубическая, $(a = b, c)$ – тетрагональная, (a,b,c) – ромбическая. Но основным фактором отнесения решетки к определенной сингонии является точечная симметрия ее свойств.

В литературе, например, для ромбических кристаллов, указано $a \neq b \neq c$, но это относится к кристалло-химической нетождественности, для ромбической сингонии надо указывать не $a \neq b \neq c$, а (a,b,c) – произвольные параметры. Если в кубическом ферромагнитном кристалле ось намагниченности идет вдоль $[111]$, то это не кубическая, а R-ромбическая ячейка при сохранении геометрического равенства параметров (a,b,c). Ячейка R-тригональной решетки имеет параметры $(a = b = c)$, $(\alpha = \beta = \gamma)$, гексагональной и H-тригональной $(a = b, c, \alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°)$. У моноклинных $(a,b,c,\alpha = \beta = 90°,\gamma)$. У триклинных решеток $(a,b,c,\alpha,\beta,\gamma)$, т. е. параметры не связаны друг с другом.

Связи между параметрами прямой и обратной (*) решеток определяются условиями (учитываются только геометрические размеры) и имеют вид:

$$a_j^* = \frac{sin\,\alpha_j}{a_j r}, \tag{24}$$

$$sin\,\alpha_j^* = \frac{r}{sin\,\alpha_{j+1}\, sin\,\alpha_{j+2}}, \tag{25}$$

где $r = \left(1 - cos^2\alpha - cos^2\beta - cos^2\gamma + 2cos\,\alpha\, cos\,\beta\, cos\,\gamma\right)^{\frac{1}{2}}$.

Параметры, необходимые для расчета $(a^*\alpha^*)_j$ для различных сингоний, приведены в таблице 3.

На основании данных таблицы 3 с учетом (25) проанализированы связи между $(a,b,c,\alpha,\beta,\gamma)$ и $(a,b,c,\alpha,\beta,\gamma)^*$ для всех сингоний. В результате анализа установлено, что связи между параметрами в кристаллической и обратной решетках идентичны. Следовательно, точечные группы в прямом и обратном пространствах одинаковы для решеток определенной сингонии.

Но точечная симметрия в решетке кристалла связывает тождественные в структурно-химическом отношении точки, например, с электронной плотностью $\rho(\vec{r})$, и в этой решетке имеется трансляция. В обратной решетке точечная симметрия связывает узлы решетки, так как точки обратной решетки с нецелочисленными кристаллографическими координатами имеют нулевой «вес».

Трансляция в обратной решетке относится только к геометрическому распределению точек. Узлы (hkl) и $\left(\vec{h} + m\vec{a}^*, \vec{k} + n\vec{b}^*, \vec{l} + p\vec{c}^*\right)$ в общем случае нетождественны в структурно-химическом отношении. Закону трансляции «подчиняются» только их радиусы-векторы.

Таблица 3. – Параметры для расчета $(a^*\alpha^*)_j$ для различных сингоний

Сингонии	R	a^*	b^*	c^*
		$sin\,\alpha^*$	$sin\,\beta^*$	$sin\,\gamma^*$
Кубическая	1	$1/a$	$1/a$	$1/a$
		1	1	1

Тетрагональная	1	$1/a$	$1/a$	$1/c$
		1	1	1
Ромбическая	1	$1/a$	$1/b$	$1/c$
		1	1	1
R -тригональная	$\left(1-3cos^2\alpha+2cos^2\beta\right)^{\frac{1}{2}}$	$\dfrac{sin\,\alpha}{r}$	a^*	b^*
		$\dfrac{r}{sin^2\alpha}$	$\dfrac{r}{sin^2\alpha}$	$\dfrac{r}{sin^2\alpha}$
H -решетка	$\dfrac{\sqrt{3}}{2}$	$\dfrac{2\sqrt{3}}{3a}$	$\dfrac{2\sqrt{3}}{3a}$	$1/c$
		1	1	$\dfrac{\sqrt{3}}{2}$
Моноклинная	$\sin\gamma$	$\dfrac{1}{a\sin\gamma}$	$\dfrac{1}{b\sin\gamma}$	$1/c$
		1	1	$sin\,\gamma$
Триклинная	$r=\begin{pmatrix}1-cos^2\alpha- \\ cos^2\beta-cos^2\gamma+ \\ 2cos\,\alpha\,cos\,\beta\,cos\,\gamma\end{pmatrix}^{\frac{1}{2}}$	$\dfrac{sin\,\alpha}{a\,r}$	$\dfrac{sin\,\beta}{b\,r}$	$\dfrac{sin\,\gamma}{c\,r}$
		$\dfrac{r}{sin\,\beta\,sin\,\gamma}$	$\dfrac{r}{sin\,\gamma\,sin\,\alpha}$	$\dfrac{r}{sin\,\alpha\,sin\,\beta}$

Для гексагональных кристаллов (H -решетка) описанная методика представления точечных симметрий группами подстановок неприемлема.

Действительно, ось 6 при переходе от кристаллографического базиса к кристаллофизическому рассчитывается по формуле:

$$[6]_{КГ}=[M]^{-1}[6]_{КФ}[M]=$$
$$\begin{bmatrix}\dfrac{1}{a} & \dfrac{\sqrt{3}}{3a} & 0\\ 0 & \dfrac{2\sqrt{3}}{3a} & 0\\ 0 & 0 & \dfrac{1}{c}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{1}{2} & -\dfrac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \dfrac{\sqrt{3}}{2} & \dfrac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & -\dfrac{a}{2} & 0\\ 0 & \dfrac{\sqrt{3}}{2}a & 0\\ 0 & 0 & c\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & \bar{1} & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}. \qquad (26)$$

Вся группа $[6]_{КГ}$ в матричном представлении имеет вид:

$$[6]_{КГ}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&\bar{1}&0\\1&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&\bar{1}&0\\1&\bar{1}&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\bar{1}&0&0\\0&\bar{1}&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\bar{1}&1&0\\\bar{1}&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1&0\\\bar{1}&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}. \qquad (27)$$

Т. е. точечные группы H -решеток нельзя представить подстановками по описанной выше методике, так как решетки H -типа, строго говоря, не соответствуют требованию решеток. Построить ромб (ячейки), у которого есть ось 6 , невозможно.

Заключение

Точечные группы кристаллов кубической, тетрагональной, ромбической, моноклинной, триклинной сингоний в матричном представлении описываются матрицами с элементами $0, \pm 1$, причем (1) в каждой строке и в каждом столбце встречается только один раз. При переходе от декартовой (кристаллофизической) системы координат к реперу Браве (кристаллографическая система) таким свойством описываются точечные группы R-тригональной решетки. Приведена методика описания указанных точечных симметрий в представлении групп подстановок. Построены таблицы групп подстановок. Гексагональная решетка в строгом смысле решеткой не является, так как построить ячейку (параллелепипед) с осью шестого порядка невозможно. Если шесть ромбов с углами $60°$ имеют общую вершину, то такой «модуль» имеет ось 6, но он не может выполнить плоскость, то есть не формирует решетку.

Представление точечных симметрий группами подстановок существенно облегчает расчет тензоров физических свойств, особенно в случаях тензоров третьего и четвертого рангов. Построение точечной группы при заданном элементе-генераторе группы подстановок значительно проще, чем при использовании матричных представлений. Показано, что представление точечной симметрии кристаллов группами подстановок одинаковое для решетки кристалла и его обратной решетки. Предложена методика перемножения элементов групп подстановок с учетом знака элемента в матрице преобразований.

Материал может представлять интерес для специалистов, работающих в различных областях кристаллофизики.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Конвей, Дж. Упаковки шаров, решетки и группы : в 2 т. / Дж. Конвей, Н. Слоэн. – М. : Мир, 1990. – Т. 2. – 376 с.

2. Лиопо, В. А. Матричная кристаллография / В. А. Лиопо. – Гродно : Изд-во ГрГУ, 1998. – 78 с.

3. Вайнштейн, В. Б. Современная кристаллография / В. Б. Вайнштейн. – М. : Наука, 1979–1980. – Т. 1. – 1979. – 384 с.

4. Андреев, А. И. Фундаментальная теория классов симметрии кристаллов / А. И. Андреев // Мир соврем. науки. – 2015. – № 1 (29). – С. 10–16.

5. Палистрант, А. Ф. Исследование пятимерных точечных групп симметрии с инвариантной трехмерной плоскостью и неподвижной точкой на ней / А. Ф. Палистрант // Кристаллография. – 2013. – Т. 58, № 3. – С. 357–365.

6. Желудев, И. С. Физика кристаллов и симметрия / И. С. Желудев – М. : Наука, 1987. – 192 с.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 09.06.2020