МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ
СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

Учебное пособие для вузов

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2016

СОДЕРЖАНИЕ

ŋqdpyeY bE debEbYze d eɔɑbɔy ʇqdpYqyè

соотносятся между собой как предмет и его зеркальное отражение. В системе Шенфлиса различают три типа плоскостей симметрии:

а) *вертикальные* плоскости симметрии, содержащие главную ось (по установке Шенфлиса сонаправлена с осью *OZ*) – σ_v;

б) *горизонтальные* плоскости, перпендикулярные к главной оси – σ_h;

в) *диэдральные* плоскости, содержат главную ось и делят пополам угол между двумя осями 2-го порядка, которые расположены перпендикулярно к главной оси – σ_d.

3. ***Центр инверсии*** (***симметрии***) – точка, расположенная на пересечении всех отрезков, соединяющих равноудаленные от нее точки объекта.

4. ***Зеркально-поворотная ось*** порядка *n* совмещает в себе действие поворотной оси порядка *n* и перпендикулярной ей плоскости симметрии.

5. ***Инверсионная ось*** порядка *n* совмещает в себе действие поворотной оси порядка *n* и находящегося на ней центра симметрии.

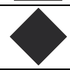
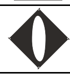
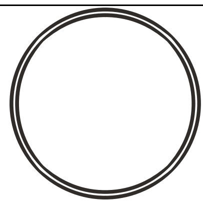
В таблице 1 приведены элементы точечной симметрии кристаллов в трех системах обозначений – Браве, Шенфлиса, Германа-Могена (международная система), а также их графическое изображение.

На самом деле приведенный ниже набор элементов симметрии является избыточным для описания точечной симметрии кристаллов, т.к. каждую инверсионную ось можно заменить на соответствующую зеркально-поворотную. Кроме того, плоскости симметрии эквивалентны S_1 или $\bar{2}$, а центр симметрии эквивалентен S_2 или $\bar{1}$. Итак, можно показать, что $S_1 = \bar{2} = m$, $S_2 = \bar{1} = i$, $S_3 = \bar{6}$, $S_4 = \bar{4}$, $S_6 = \bar{3}$.

Следует различать *элементы симметрии* и соответствующие им *операции симметрии*. Элемент симметрии, как уже было сказано, это геометрический образ, относительно которого производятся операции симметрии.

В таблице 2 приведены элементы симметрии и соответствующие им операции. Например, элементам симметрии – поворотным осям C_n – соответствуют повороты на углы $2\pi p/n$, причем *p* принимает целые

Таблица 1. Элементы симметрии в различных системах обозначений.

Элемент симметрии	**Символика Браве**	**Символика Шенфлиса**	**Символика Германа-Могена**	**Графическое обозначение**
		Центр симметрии (инверсии)		
	C	i	$\bar{1}$	C
		Поворотные оси:		
2-го порядка	L_2	C_2	2	
3-го порядка	L_3	C_3	3	
4-го порядка	L_4	C_4	4	
6-го порядка	L_6	C_6	6	
		Инверсионные оси:		
1-го порядка	L_{i1}		$\bar{1}$	
2-го порядка	L_{i2}		$\bar{2}$	
3-го порядка	L_{i3}		$\bar{3}$	
4-го порядка	L_{i4}		$\bar{4}$	
6-го порядка	L_{i6}		$\bar{6}$	
		***Зеркально-поворотные оси*:**		
1-го порядка		S_1		
2-го порядка		S_2		
3-го порядка		S_3		
4-го порядка		S_4		
6-го порядка		S_6		
		Плоскости		
	P	$\sigma_h, \sigma_v, \sigma_d$	m	 *Расположение в плоскости рисунка*
				 *Расположение перпендикулярно плоскости рисунка*
				 *Расположение под некоторым углом к плоскости рисунка*

ŋ̧qdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ȼɔɑbɔɏ Ɉqddɏqɏè

значения от 1 до n. Соответствующие операции симметрии обозначают C_n^p (по Шенфлису) или n^p (по Герману-Могену). Очевидно, что $C_n^n = C_1$, т.е. это полный поворот фигуры вокруг своей оси, что равносильно отсутствию поворота. Такую операцию обозначают символом e (тождественная операция). Следует иметь в виду, что для зеркально-поворотных и инверсионных осей при равенстве $p = n$ полный поворот происходит не во всех случаях (см. табл. 2).

Таблица 2. Взаимозаменяемость точечных операций симметрии.

Элемент симметрии	Операции симметрии
Поворотные оси	
C_1	$1 = e$
C_2	$2^1 = 4^2 = 6^3$
C_3	$3^1 = 6^2$; $3^2 = 3^{-1} = 6^4$
C_4	4^1; $4^2 = 2^1 = 6^3$; $4^3 = 4^{-1}$
C_6	6^1; $6^2 = 3^1$; $6^3 = 4^2 = 2^1$; $6^4 = 3^2 = 3^{-1}$; $6^5 = 6^{-1}$
Зеркально-поворотные оси	
S_1	$\tilde{1} = m$
S_2	$\tilde{2}^1 = \bar{1}$
S_3	$\tilde{3}^1$; $\tilde{3}^2 = 3^2 = 3^{-1}$; $\tilde{3}^3 = \tilde{1} = m$; $\tilde{3}^4 = 3^1 = 6^2$; $\tilde{3}^5 = \tilde{3}^{-1}$
S_4	$\tilde{4}^1$; $\tilde{4}^2 = 2^1 = 4^2 = 6^3$; $\tilde{4}^3 = \tilde{4}^{-1}$
S_6	$\tilde{6}^1$; $\tilde{6}^2 = 3^1 = 6^2$; $\tilde{6}^3 = \tilde{2}^1 = \bar{1}$; $\tilde{6}^4 = \tilde{3}^2 = 3^2 = 3^{-1} = 6^4$; $\tilde{6}^5 = \tilde{6}^{-1}$

Чтобы различать обозначение точечных групп и *элементов* симметрии от *операций* симметрии, применим следующую символику. Будем использовать символы точечных групп по Шенфлису, выделяя их полужирным курсивом. например ***C*₃**, элемент симметрии - поворотную ось 3-го порядка обозначим обычным курсивом C_3 , либо цифрой 3 (по символике Германа-Могена), а соответствующие операции симметрии обозначим либо символами C_3^1, C_3^2 (по Шенфлису), либо 3^1, 3^2 (по символике Германа-Могена).

Операции p-кратного поворота вокруг зеркально-поворотной оси n-го порядка будем обозначать $\tilde{n}^p$.

Операции отражения в плоскости и в центре инверсии обозначим так же, как и соответствующие элементы симметрии по международной системе: $(m, \bar{1})$ или по Шенфлису (σ_h, σ_v, σ_d, i) соответственно.

Многие точечные операции симметрии можно заменить на эквивалентные. Например, очевидно, что двукратный поворот на угол 90° вокруг оси 4-го порядка равнозначен однократному повороту на 180° вокруг оси 2-го порядка, т.е. $4^2 = 2^1$ (см. табл. 2). Отрицательная степень операции симметрии означает, что поворот производится в противоположную сторону, например $3^2 = 3^{-1}$.

В таблице 2 рассматриваются только поворотные и зеркально-поворотные оси, т.к. в настоящем пособии операции, связанные с инверсионными осями (кроме $\bar{1}$), не используются для описания групповых множеств точечных групп.

<u>Контрольные вопросы и задания</u>

1. Установить, являются ли эквивалентными следующие операции симметрии:

а) двукратный поворот вокруг оси 6-го порядка и однократный поворот вокруг оси 4-го порядка;

б) трехкратный поворот вокруг оси 6-го порядка и однократный поворот вокруг оси 2-го порядка;

в) четырехкратный поворот вокруг оси 6-го порядка и трехкратный поворот вокруг оси 4-го порядка;

г) четырехкратный поворот вокруг оси 6-го порядка и двукратный поворот вокруг оси 3-го порядка.

ГЛАВА 2. СОЧЕТАНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ

Элементы (и операции) симметрии с математической точки зрения являются операторами преобразования координат точек фигуры. Совместное действие двух или более элементов (операций) симметрии принято называть их сочетанием. Часто вместо слова «сочетание» используют термины «сложение» или «произведение». В результате такого сложения возникают новые равнодействующие элементы симметрии.

В данном учебном пособии теоремы о сочетании элементов (операций) симметрии без доказательства. Эти теоремы являются рабочим инструментом при рассмотрении точечных групп симметрии. Строгие доказательства теорем можно найти в учебниках по кристаллографии и кристаллохимии, представленных в списке литературы.

Теорема 1. Линия пересечения двух плоскостей симметрии является осью симметрии, при этом элементарный угол поворота вокруг этой оси вдвое больше, чем наименьший угол между плоскостями.

Следствие 1. Произведение поворота вокруг оси симметрии с элементарным углом поворота 2α и отражение в плоскости симметрии m_1, в которой лежит данная ось, эквивалентно отражению в плоскости симметрии m_2, проходящей через ось и расположенной под углом α к плоскости m_1.

Следствие 2. Поворот на угол α может быть представлен в виде последовательного отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом $\alpha/2$.

Теорема 2.

Произведение двух поворотов вокруг двух пересекающихся осей симметрии эквивалентно повороту вокруг третьей оси, проходящей через точку пересечения первых двух осей.

Теорема 3. Последовательные повороты вокруг двух осей симметрии 2-го порядка, пересекающихся под углом α, эквивалентны повороту вокруг третьей оси симметрии с элементарным углом поворота 2α, которая перпендикулярна плоскости, содержащей две исходные оси, и проходит через точку пересечения этих осей.