

# Просторові групи

Андрій Жугаєвич (zhugayevych@iop.kiev.ua)

19 вересня 2011 р.

1	Кристалографічні групи . . . . .	1
1.1	Елементи симетрії кристалографічних груп . . . . .	1
1.2	Гратка Браве . . . . .	2
1.3	Обернена гратка . . . . .	3
1.4	Класифікація кристалографічних груп . . . . .	3
1.5	Структура кристалографічних груп . . . . .	4
2	Інші дискретні групи просторових симетрій . . . . .	5
3	Елементи математичної теорії симетрії кристалів . . . . .	5
4	Таблиці і схеми . . . . .	7

## §1. Кристалографічні групи

### 1.1. Елементи симетрії кристалографічних груп

Просторові елементи симетрії (тобто елементи групи  $IO(n)$ ) тривимірного простору являють собою комбінацію точкового перетворення і трансляції:  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}\mathbf{r} + \mathbf{t}$ . До базових неточкових елементів просторової симетрії належать трансляція, гвинтова вісь (screw axis) і площина ковзання (glide plane).

Елементи кристалографічної групи можна подати у вигляді

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}\mathbf{r} + \mathbf{v}(\mathbf{R}) + \mathbf{t}, \quad (1.1)$$

де  $\mathbf{R}$  – так звана лінійна частина перетворення (елемент точкової симетрії),  $\mathbf{t}$  – власна (цілочислова) трансляція (тобто трансляція на цілочислові лінійні комбінації постійних ґратки),  $\mathbf{v}(\mathbf{R})$  – залежна від  $\mathbf{R}$  невласна (дробова) трансляція. Позначення елементів симетрії див. на рис. 1, невласні елементи симетрії позначаються таким чином:

- гвинтова вісь  $\{n_k\}$  – поворот на кут  $2\pi/n$  разом зі зсувом уздовж осі на  $k/n$ ;
- площина ковзання  $\{a,b,c,n,d\} - \{a,b,c\}$  означає зсув на  $1/2$  вздовж осі  $a$ ,  $b$  чи  $c$  разом із відбиттям в площині, що проходить через цю вісь,  $\{n\}$  означає зсув на  $1/2$  по  $a$  і по  $c$ ,  $\{d\}$  означає зсув на  $1/4$  по  $a$  і по  $c$  (див. приклад на рис. 3).

Поворотні і інверсійні осі можуть мати лише порядок 1, 2, 3, 4, 6 (відбиття включаються). В базисі примітивної комірки матриця  $\mathbf{R}$  і вектор  $\mathbf{t}$  цілочислові, а компоненти вектора  $\mathbf{v}(\mathbf{R})$  є правильними дробами з можливими значеннями знаменника 2, 3, 4, 6.

Axes								Planes	
	n	-n	n <sub>1</sub>	n <sub>2</sub>	n <sub>3</sub>	n <sub>4</sub>	n <sub>5</sub>		
1	○							m	—
2	●		●					a,b	----
3	▲	△	▲	▲				c	-----
4	◆	◇	◆	◆	◆			n	-----
6	⬢	⬡	⬢	⬢	⬢	⬢	⬢	d	--->---

Рис. 1: Графічні позначення елементів симетрії