Доклады Академии Наук СССР
1953. Том LXXXVIII, № 1

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Член-корреспондент АН СССР Н. В. БЕЛОВ

О ТАК НАЗЫВАЕМОМ ЗАКОНЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ

Под этим законом в ряде ведущих наших курсов кристаллографии ([1-3]) фигурирует положение о невозможности в кристаллах осей 5-го порядка, 7-го и выше. Это положение в макрокристаллографии является постулатом (обобщением совокупности кристаллографического опыта) или выводится из какого-либо другого равносильного постулата. В микрокристаллографии это одна из первых теорем, устанавливаемых после введения в микрокристаллографию основного ее «элемента симметрии» ([4]) — кристаллической решетки.

Теорему можно вывести при помощи федоровского способа ([5]), приводящего к решению сухого неопределенного уравнения в целых числах, из которого получаются в качестве возможных углов поворота вокруг кристаллографической оси величины ± 60, 90, 120 и 180°. Наиболее изящное доказательство по этому методу приведено в ([6]).

Но в большинстве учебников кристаллографии предпочитают более наглядное геометрическое доказательство, и тогда это доказательство приходится проводить раздельно для оси 5-го порядка и затем сразу для осей 7-го, 8-го и выше порядков ([2], [7]). Между тем, ясно, что доказательство, и в особенности по второму, более наглядному способу, должно включать в себя одновременно и ось 5-го порядка.

Как показывает рис. 1, вторая часть доказательства сводится к тому, что если в кристаллической решетке мы имеем ось 7-го порядка (и выше), то, взявши исходный узел на этой оси и используя теорему о том, что перпендикулярно ко всякой оси существует плоская сетка из узлов, ищем в той же плоскости узел, ближайший к исходному, через который — по определению решетки — должна проходить параллельная ось 7-го (или более высокого) порядка *.

Исходная ось из трансляции, идущей от исходного узла к новому узлу и новой оси, сделает еще шесть трансляций, и в конце каждой из них будут узлы с осями, которые расположатся вокруг исходного в виде правильного семиугольника. Сторона же правильного семиугольника, а тем более правильного многоугольника с бо́льшим числом углов, всегда меньше радиуса. Тем самым мы приходим к расстоянию между узлами (осями), т. е. к трансляции, меньшей той наименьшей, из которой мы исходили.

На первый взгляд кажется очевидным, что это доказательство не проходит для оси 5-го порядка, поскольку сторона правильного пятиуголь-

* Трансляционно идентичная. Это не значит, что в структуре нет других осей n-го порядка (и, вероятно, более близких), но это будут не трансляционно идентичные, а например, производные. Ср. случай тройных осей, когда, при наличии их в узлах решетки, еще по одной — производной — тройной оси возникает в центре каждого треугольника из «узловых» осей.

ника больше его радиуса. И потому, как сказано, в руководствах по кристаллографии и микрокристаллографии, не исключая книги автора ([4], стр. 56), доказательство для невозможности оси 5-го порядка дается отдельно, до некоторой степени, в виде второй части общей теоремы. Легко показать, что это выделение не нужно. Хотя доказательство ведется для пространственной решетки в целом, но рассматриваются в теореме лишь одни плоские сетки, перпендикулярные к оси n-го порядка.

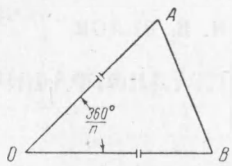

Рис. 1

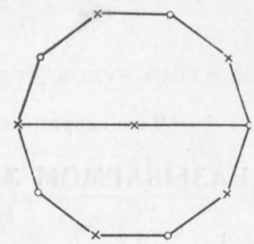

Рис. 2

Построив по предыдущему (см. рис. 2) вокруг исходного узла (оси 5-го порядка) пятиугольник из узлов (крестики), мы можем каждую трансляцию = радиус пятиугольника продолжить по другую сторону от центра пятиугольника и получить еще пять узлов (кружков), которые вместе с пятью только что построенными образуют вокруг исходного узла (оси) правильный десятиугольник со стороной = трансляцией более короткой, чем исходная, самая короткая; таким образом, доказательство невозможности оси 5-го порядка будет вполне равноценно доказательству невозможности оси 10-го порядка.

В общем виде теорема будет гласить так. Если структура имеет ось 5-го порядка, вообще говоря, некоторого нечетного порядка — n-го, то все плоские сетки, перпендикулярные к этой оси, будут обладать осями вдвое более высокого порядка — $2n$. Легко видеть, что указанная теорема вытекает из хорошо известного положения, что каждый узел пространственной решетки является центром симметрии, а потому если узел взят на оси 5-го порядка, то для решетки (с начальным узлом на оси 5-го порядка) эта ось будет зеркальной осью 10-го порядка.

Если считать старшими осями кристаллической решетки оси наивысшего порядка, безразлично, будут ли они осями поворотными или зеркальными, то теорема может быть изложена и в том виде, что в пространственной решетке (трансляционной решетке) старшая ось всегда будет четного порядка, L_{2n}, причем $2n$ не может быть больше 6*.

Как известно, в части новых курсов кристаллографии ([2, 3]) вместо весьма наглядного представления о зеркальных осях вводятся так называемые инверсионные оси, мало доступные восприятию начинающего изучение кристаллографии. Введение их оправдывается тем, что якобы с помощью инверсионных осей (но не привычных зеркальных) наиболее четко производится «столь важное для кристаллографа» разделение гексагональной системы на тригональную (ромбоэдрическую) подсистему и собственно гексагональную, а именно, доказывается, что в то время как тройные поворотные оси и шестерные зеркальные допускают в структуру как гексагональную, так и ромбоэдрическую решетку, оси шестерные поворотные и шестерные инверсионные допускают только гексагональную решетку. Как видим, при помощи зеркальных осей становится более четкой одна из самых основных теорем решеточной кристаллографии.

* В частности, всякая решетка обладает центром симметрии, т. е. зеркальной осью 2-го порядка.

Вышеприведенное доказательство сводится к невозможности согласования существующей в кристалле оси 5-го, 7-го и более высокого порядка с пространственной решеткой как с основным элементом симметрии ([4]). В курсах же кристаллографии обычно доказывается невозможность существования указанных осей в том геометрическом образе, каким является пространственная решетка вне кристалла. Но тогда нужно исходить из возможности для соответственной оси прохождения через узел решетки или вне его. Между тем, в курсах обычно доказывается либо одна первая часть теоремы ([6]), либо одна вторая часть ([2,3,7]).

Кроме того, если от рассмотрения вопросов симметрии самой решетки как геометрического образа переходить к структуре, то должно быть доказано положение, что кристалл не может иметь симметрии большей, чем та, которой обладает геометрический образ элемента симметрии или совокупности элементов, имеющихся в структуре. Впервые отчетливо это положение было сформулировано А. Шенфлисом ([8]), см. также ([4]).

Поступило
28 X 1952

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] А. К. Болдырев, Кристаллография, 3-е изд., Л., 1934, стр. 56. [2] О. М. Аншелес, Начала кристаллографии, Л., 1952, стр. 87. [3] Г. М. Попов, И. И. Шафрановский, Кристаллография, 2-е изд., М.— Л., 1948, стр. 42. [4] Н. В. Белов, Структурная кристаллография, М., 1951, стр. 18. [5] Е. С. Федоров. Симметрия правильных систем фигур, СПб, 1890; 2-е изд., М.— Л., 1949, стр. 129. [6] А. И. Китайгородский, Рентгеноструктурный анализ, М.— Л., 1950, стр. 39. [7] А. В. Шубников, Е. Е. Флинт, Г. Б. Бокий, Основы кристаллографии, М.— Л., 1940, стр. 162. [8] A. Schönfliess, Theorie der Kristallstruktur, Berlin, 1923.