

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Член-корреспондент АН СССР А. В. ШУБНИКОВ

О ТАК НАЗЫВАЕМОЙ ГОМОЛОГИИ КРИСТАЛЛОВ

К понятию гомологии фигур мы приходим, развивая определенным образом понятие симметрии. Напомним, что симметричной мы называем всякую фигуру, которая может преобразовываться в себя движениями и зеркальными движениями.

Для конечных фигур все движения сводятся к поворотам, а зеркальные движения — к простому отражению в плоскости и к зеркальным поворотам. Поворот можно рассматривать так же как последовательное отражение в двух плоскостях, а зеркальный поворот — как последовательное отражение в трех плоскостях.

Операции симметрии с математической точки зрения являются линейными ортогональными преобразованиями, а именно, для конечных фигур — преобразованиями прямоугольной системы координат в прямоугольную с тем же началом. При этом предполагается, что правая система может переходить как в правую, так и в левую, и наоборот. В общем виде всякая операция симметрии конечных фигур или, точнее, фигур с особенной точкой выражается системой линейных уравнений

$$\begin{aligned}x_1 &= c_{11}x'_1 + c_{12}x'_2 + c_{13}x'_3, \\x_2 &= c_{21}x'_1 + c_{22}x'_2 + c_{23}x'_3, \\x_3 &= c_{31}x'_1 + c_{32}x'_2 + c_{33}x'_3,\end{aligned}\tag{1}$$

где x_i ($i = 1, 2, 3$) — старые координаты любой точки фигуры, x'_k ($k = 1, 2, 3$) — новые координаты, а c_{ik} — косинусы углов между старой осью X_i и новой осью X'_k , например $c_{23} = \cos(X_2X'_3)$.

Из девяти косинусов вполне независимыми являются только три, так как всегда имеют место следующие две группы соотношений.

1. Сумма квадратов косинусов строки или столбца уравнений (1) равна единице. Например:

$$\begin{aligned}c_{11}^2 + c_{21}^2 + c_{31}^2 &= 1 \quad (\text{выделен первый столбец}), \\c_{21}^2 + c_{22}^2 + c_{23}^2 &= 1 \quad (\text{выделена вторая строка}).\end{aligned}\tag{2}$$

2. Для пары строк или столбцов сумма произведений сходственно расположенных косинусов равна нулю. Например:

$$\begin{aligned}c_{11}c_{12} + c_{21}c_{22} + c_{31}c_{32} &= 0 \quad (\text{выделены два первых столбца}), \\c_{11}c_{31} + c_{12}c_{32} + c_{13}c_{33} &= 0 \quad (\text{выделены первая и третья строки}).\end{aligned}\tag{3}$$

Важно отметить, что понятие симметрии мы относим не только к чисто геометрическим фигурам, но и к фигурам, наделенным определенными физическими свойствами, например к многогранникам с гранями

разного цвета. Имея это в виду, мы требуем от всякой симметрической операции, чтобы она преобразовывала фигуру в себя полностью, т. е. чтобы в новом положении фигура ничем не отличалась от себя в старом положении. Применительно к многогранникам с физически различными гранями и к кристаллам с физическими свойствами, изменяющимися с изменением направления, это означает, что при преобразовании фигуры в себя обмениваться местами могут только физически равноценные грани и направления.

Совокупность всех неэквивалентных по результату операций симметрии образует группу. Это означает, что любые две последовательно произведенные операции симметрии данной фигуры эквивалентны некоторой операции из числа входящих в группу.

Операции гомологии математически выражаются теми же уравнениями (1), только коэффициенты c_{ik} в них не обязательно являются косинусами углов между старыми и новыми осями прямоугольной системы, а представляют собою некоторые действительные числа. Это озна-

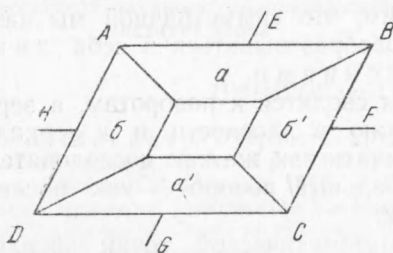


Рис. 1

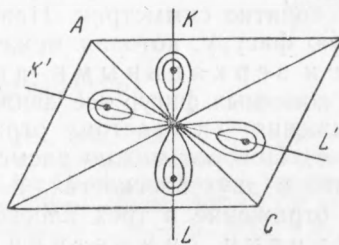


Рис. 2

чает, что свойство ортогональности линейных преобразований, математически выражаемое соотношениями (2) и (3), для операций гомологии не является обязательным.

С геометрической точки зрения все операции гомологии, преобразующие фигуру в себя, могут быть сведены к косым отражениям в плоскостях. При косом отражении все точки фигуры переносятся на другую сторону некоторой плоскости вдоль заданного направления, образующего с ней косой угол, на расстояния, равные их расстояниям от этой плоскости по указанному косому направлению. Операцию, эквивалентную двум последовательно произведенным операциям косого отражения, если они преобразуют фигуру в себя, всегда можно рассматривать как косой поворот, а операцию, эквивалентную тройному косому отражению, как косой зеркальный поворот. Совокупность всех различных между собой операций гомологии образует группу или вид гомологии.

Возьмем идеальный моноклинный кристалл, принадлежащий к группе симметрии L_2 (одна ось второго порядка) (см. рис. 1). В нем грань a совместно равна грани a' ; грань b совместно равна грани b' . Равные между собой геометрически и одинаковые по физическим свойствам грани a и a' физически отличны от равных между собой по геометрическим и физическим признакам граней b и b' . Каждая взятая отдельно грань асимметрична.

Если рассматривать наш кристалл как чисто геометрическую фигуру, то нетрудно обнаружить в ней существование четырех плоскостей гомологии AC , BD , EG , HF и в их пересечении — ось гомологии четвертого порядка. Плоскость AC является плоскостью гомологии нашей фигуры при условии, что отражение в ней происходит вдоль направления BD . Легко видеть, что при таком отражении точки A, C остаются на своих местах; точки B, D обмениваются местами. Обмениваются местами также точки E и H , точки F и G и т. д. В целом, после ко-

сого отражения всех точек фигуры в плоскости AC , фигура приходит в совмещение сама с собой. Отражение в плоскостях гомологии BD , EG , HF совершается, соответственно, по направлениям AC , HF , EG . То, что в пересечении указанных плоскостей лежит ось гомологии четвертого порядка, является простым следствием существования двух смежных плоскостей гомологии — таких, как AC и EG . Из изложенного видно, что наша фигура должна принадлежать к группе гомологии $\lambda_4 4П$ (одна четвертая ось гомологии λ_4 и четыре плоскости гомологии $П$).

Выше было отмечено, что понятие симметрии мы относим не только к чисто геометрическим фигурам, но и к фигурам, наделенным некоторыми физическими свойствами, например к многогранникам с раскрашенными гранями, к кристаллам. Для таких материальных фигур операциями симметрии могут быть лишь те из операций соответствующих геометрических фигур, которые приводят к перестановке мест только физически одинаковых частей фигуры. Например, для куба с одной черной и пятью белыми гранями операциями симметрии являются не все 48 операций чисто геометрического куба, а лишь 8 из них, а именно 4 поворота на углы в 0 , 90 , 180 , 270° вокруг оси, нормальной к черной грани, и 4 отражения в плоскостях симметрии, пересекающихся по этой оси.

После изложенного вполне законным представляется вопрос, относится ли понятие гомологии только к чисто геометрическим фигурам или его можно распространить также и на фигуры материальные и, в частности, на идеальные кристаллы. Покажем, что ответ на этот вопрос может быть только отрицательным.

Легко убедиться, что плоскость AC нашего кристалла не может быть его плоскостью гомологии.

Вырежем из кристалла пластинку перпендикулярно к оси второго порядка. Рассматривая ее в сходящемся поляризованном монохроматическом свете, мы увидим интерференционную картину двуосного кристалла и, если плоскость оптических осей KL проходит в кристалле по оси симметрии второго порядка, увидим также и выходы оптических осей (см. рис. 2). Если плоскость AC есть плоскость гомологии кристалла, то, наряду с плоскостью оптических осей KL , в кристалле должна существовать вторая гомологически равная ей плоскость оптических осей $K'L'$, получающаяся из плоскости KL косым отражением ее в плоскости гомологии AC . В этой плоскости должны располагаться две оптические оси, гомологически равные оптическим осям, лежащим в плоскости KL . Иначе говоря, наш кристалл в этом случае должен быть оптически четырехосным. Таких кристаллов в природе не бывает. Отсюда ясно, что плоскость AC не может быть плоскостью гомологии кристалла. Аналогично доказывается, что и плоскости BD , EG , HF (рис. 1) нашего кристалла не могут быть его плоскостями гомологии.

Совершенно очевидно, что и двойная ось симметрии нашего кристалла не может быть одновременно его четверной осью гомологии, так как это означало бы, что моноклинный кристалл может быть тоже оптически четырехосным только с другим расположением оптических осей, а при наличии всех четырех плоскостей гомологии даже восьмиосным.

Из изложенного видно, что наш кристалл не может иметь никаких элементов гомологии, отличных от присущих ему элементов симметрии.

Этот результат может быть распространен на все кристаллы, так как совершенно очевидно, что чисто геометрическое преобразование одной части кристалла в другую, отвечающее той или иной операции гомологии, никак не может сопровождаться изменением физических свойств обменивающихся местами частей кристалла. Отсюда следует, что никакой гомологии кристаллов не существует.

Гомология кристаллов есть фикция, основанная на неправильном понимании так называемого закона пределов Е. С. Федорова. Этот закон утверждает, что все кристаллы по своей внешней форме мало различают-

ся от кристаллов кубической или гексагональной системы. Иначе говоря, идеальная форма любого кристалла всегда может быть преобразована однородной деформацией в форму кубической или гексагональной системы.

В этом законе под формой разумеется чисто геометрическая форма кристаллов, а под деформацией — воображаемая операция, состоящая из растяжений и сдвигов.

Некоторые лица, использующие этот закон для расчетных целей в кристаллохимическом анализе и других случаях, склонны видеть в нем утверждение, будто однородной деформацией или, шире, операциями гомологии — действительными, а не воображаемыми — можно повышать симметрию кристалла (самого кристалла, а не его формы). На самом деле путем деформации можно лишь понижать симметрию кристалла. Например, сжимая кристалл кубической системы вдоль четверной оси, можно вызвать в нем оптическую одноосность, свойственную тетрагональным кристаллам, но нельзя тетрагональный кристалл лишить присущей ему оптической одноосности никаким сжатием и никаким растяжением вдоль четверной оси. В лучшем случае можно сделать его оптически изотропным только для одной определенной длины волны. Нельзя кристалл ромбической системы превратить растяжением в кристалл тетрагональной системы, кристалл моноклинный превратить сдвигом в кристалл ромбический, а триклинный — в моноклинный.

Из изложенного видно, что свойством гомологии может обладать только форма кристаллов, рассматриваемая абстрактно-геометрически вне всякой связи с физическими свойствами кристаллов. Поэтому нельзя говорить о гомологии кристалла, уподобляя ее симметрии, которая, как известно, относится как к внешней геометрической форме кристалла, так и к его физическим свойствам, точнее, к тем фигурам, коими физические свойства описываются.

Отсюда не следует, однако, что понятие гомологии не может быть использовано для тех или иных практических целей в кристаллографии. Хорошо известно, например, что оно используется, конечно, лишь чисто формально, в кристаллохимическом анализе, подобно тому, как в рентгеноструктурном анализе используется (для расчетных целей) другое не имеющее никакого физического смысла понятие — понятие элементарной ячейки, как в геодезии используется не имеющее физического смысла понятие координатной сетки земли.

Поступило
18 XI 1952

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ Е. С. Федоров, Сокращенный курс кристаллографии, СПб, 1910. ² Е. С. Федоров, Новые идеи в химии, 5, 1 (1914). ³ Б. Орелкин, Б. Пигулевский, Новые идеи в химии, 5, 151 (1914). ⁴ В. И. Михеев, Тр. Федоровской научной сессии 1949 г., М., 1951. ⁵ В. И. Михеев, Зап. Мин. об-ва, 72, 161 (1950). ⁶ В. И. Михеев, ДАН, 71, 667 (1950).