

тых друг в друга» решётку Браве. Такое представление эквивалентно тому, что пространственная группа содержит в себе как подгруппу трансляц. группу Браве.

Подгруппы групп симметрии кристаллов. Если часть операции к.-л. группы G_j (g_1, \dots, g_n) сама образует группу G_k (g_1, \dots, g_m), $m < n$, $G_j \in G_k$, то последняя наз. подгруппой первой. Напр., подгруппами точечной группы 32 (рис. 1, а) являются группа 3 и группа 2. Также и среди пространств. групп существует иерархия подгрупп. Пространственные группы могут иметь в качестве подгрупп точечные группы (таких пространственных групп 217) и подгруппы, к-рые являются пространственными группами более низкого порядка. Соответственно существует иерархия подгрупп.

Большинство пространственных групп симметрии кристаллов различны между собой и как абстрактные группы; число абстрактных групп изоморфных 230 пространственным группам равно 219. Абстрактно равными оказываются 11 зеркально-равных (энантиоморфных) пространственных групп — одна лишь с правыми, другие с левыми винтовыми осями. Таковы, напр., $P3_121$ и $P3_221$. Обе эти пространственные группы гомоморфно отображаются на точечную группу 32, к к-рой принадлежит кварц, но кварц соответственно бывает правый и левый: симметрия пространственной структуры в этом случае выражается микроскопически, но точечная группа в обоих случаях та же.

Роль пространственных групп симметрии кристаллов. Пространственные группы симметрии кристаллов — основа теоретич. кристаллографии, дифракционных и иных методов определения атомной структуры кристаллов и описания кристаллич. структур.

Дифракционная картина, получаемая методом рентгенографии, нейтрографии или электрографии, позволяет установить симметричные и геом. характеристики *обратной решётки* кристалла, а следовательно и самой структуры кристалла. Так определяют точечную группу кристалла и элементарную ячейку; по характерным погасаниям (отсутствие определённых дифракционных рефлексов) определяют тип решётки Браве и принадлежность к той или иной пространственной группе. Размещение атомов в элементарной ячейке находят по совокупности интенсивностей дифракционных рефлексов.

Большую роль играют пространственные группы в кристаллохимии. Определено более 100 тыс. кристаллич. структур неорганич., органич. и биол. соединений. Любой кристалл относится к одной из 230 пространственных групп. Оказалось, что почти все пространственные группы реализованы в мире кристаллов, хотя одни из них встречаются чаще, другие реже. Имеется статистика распространённости пространственных групп по различным видам хим. соединений. Пока не найдены среди исследованных структур лишь 4 группы: $Pcc2$, $P4_2cm$, $P4nc1$, $P6mm$. Теория, объясняющая распространённость тех или иных пространственных групп, учитывает размеры составляющих структуру атомов, понятия плотной упаковки атомов или молекул, роль «упаковочных» элементов симметрии — плоскостей скольжения и винтовых осей.

В физике твёрдого тела используется теория представлений групп с помощью матриц и спец. ф-ций, для пространственных групп эти ф-ции периодичны. Так, в теории *структурных фазовых переходов* 2-го рода пространственная группа симметрии менее симметричной (низкотемпературной) фазы является подгруппой пространственной группы более симметричной фазы и фазовый переход связан с одним из неприводимых представлений пространственной группы высокосимметричной фазы. Теория представлений позволяет также решать задачи динамики *кристаллической решётки*, её электронной и магн. структур, ряда физ. свойств.

В теоретич. кристаллографии пространственные группы позволяют развить теорию разбиения пространства на равные области, в частности полиэдрические.

Симметрия проекций, слоёв и цепей. Проекция кристаллич. структур на плоскость описываются плоскими группами G_2 , их число — 17. Для описания трёхмерных объектов, периодических в 1 или 2 направлениях, в частности фрагментов структуры кристаллов, могут быть использованы группы G_2 — двумерно периодические и G_1 — одномерно периодические. Эти группы играют важную роль в изучении биол. структур и молекул. Напр., группы G_2 описывают строение биол. мембран, группы G_1 — цепных молекул (рис. 8, а), палочкообразных вирусов, трубчатых кристаллов

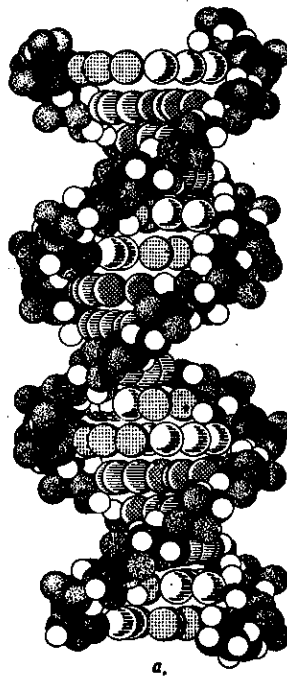


Рис. 8. Объекты со спиральной симметрией: а — молекула ДНК; б — трубчатый кристалл белка фосфорилазы (электронно-микроскопический снимок, увеличение 220 000).



глобулярных белков (рис. 8, б), в к-рых молекулы уложены согласно спиральной (винтовой) симметрии, возможной в группах G_1 (см. *Биологический кристалл*).

Структура квазикристаллов. *Квазикристаллы* (напр., $Al_{88}Mn_{14}$) имеют икосаэдрич. точечную симметрию (рис. 5), к-рая невозможна в кристаллич. решётке. Дальний порядок в квазикристаллах — квазипериодический, описываемый на основе теории почти периодич. ф-ций. Структура квазикристаллов может быть представлена как проекция на трёхмерное пространство шестимерной периодич. кубич. решётки с осями 5-го порядка. Квазикристаллы с пятимерной симметрией в высшем измерении могут иметь 3 типа решёток Браве (примитивную, объёмноцентрированную и гранецентрированную) и 11 пространственных групп. Др. возможные типы квазикристаллов — укладки в стопку двумерных сеток атомов с осями 5-, 7-, 8-, 10-, 12-го ... порядков, с периодичностью вдоль третьего перпендикулярного сеткам направления.

Обобщённая симметрия. В основе определения симметрии лежит понятие равенства (1,6) при преобразовании (1,а). Однако физически (и математически) объ-