n = normale unité à la surface de dispersion (61).
ñ = normale unité intérieure à la surface du cristal (70).
r_h = coefficient de résonance [I, (16), (28)]; (4′), (15).
$\mathbf{S}_h$ = moment électrique effectif de la maille [I, (22″), (29)], (1).
S = vecteur flux d'énergie (Poynting) (69).
$\mathbf{s}_h$ = vecteur unité du rayon d'ordre h.
s_{ik} = produit scalaire $(\mathbf{s}_i\mathbf{s}_k)$; s, s' pour Ge $111/1\bar{1}1$ (155); $111/\bar{1}\bar{1}1$ (192).
T = 'tie point', point caractéristique.
TLa = **T** → **La** = **La** − **T**
méme convention pour: **LoT**, **LoLa**, ...
T'_h, T''_h, T_i Coordonnées réduites remplaçant les τ_i (17), (89), (103), (119) *etc.*
$T_{12}, T_{13} \ldots = T_1T_2, T_1T_3 \ldots$ (188).
T $= \mathbf{t}_3 - \mathbf{t}_2$ [I, (49)].
$\mathbf{t}_h$ = vecteurs réciproques aux $\mathbf{s}_h$ [I, (10)], (43).
v = vecteur **Lo** → **T** à un facteur près [I, (14)], (43).
v_a, v_s Volumes supportés par les $\mathbf{a}_i$ et $\mathbf{s}_i$, respectivement.
α^s = polarisibilité de l'atome s [I, (24)].
$\alpha_{h'-h}$ $= \alpha_{h'h}$ coefficient de couplage [I, (27)]; (2), (26).
α_h^d, α_h^a Parties de α_h dépendantes surtout de la diffusion et de l'absorption (7).
α_{1223} $= \alpha_{12}\alpha_{13}$ [I, (39)], (137); $\alpha_{123} = \alpha_{12}\alpha_{23}\alpha_{31}$ [I, (38)], (137).
β $= \lambda/a$ [I, (69)], (154).
β_i = axes réciproques réduits [I, (57)].
$\beta_{h'-h}$ Variable générale dans $D = 0$ (20).
γ_h $= \cos \angle(\mathbf{K}'_h, \mathbf{N})$ (14); appelé γ pour une 'découpure symétrique'.
η_1, η_2, η_3 [I, (8), (57′)].
μ Dans I: indice de réfraction; dans II: coefficient d'absorption:
μ_0 d'un seul rayon 'coefficient ordinaire' (18), (51).
$\mu \ldots$ rapport d'un coefficient d'absorption au 'coefficient ordinaire' (52).
$\mu_n, \bar{\mu}_n$ pris dans les directions de **n** ou de **ñ** (67), (71).
$\mu)_{\rm sym}$ pour une 'découpure symétrique' du cristal.
$\mu)_{\rm eff}$ pris selon la direction du rayon primaire (71).
τ_i = composantes du vecteur **v** [I, (19)]; τ_h (15).
τ_{12}, τ_{123} produits [I, (38)] (137).

Références

BATTERMAN, B. W. & COLE, H. (1964). *Rev. Mod. Phys.* **36**, 681.
BORRMANN, G. (1951). *Naturwissenschaften*, **38**, 330.
BORRMANN, G. & HARTWIG, W. (1965). *Z. Kristallogr.* **121**, 401.
EWALD, P. P. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 888.
EWALD, P. P. & HÉNO, Y. (1968). *Acta Cryst.* A**24**, 5.
FREEMAN, A. J. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 929.
HILDEBRANDT, G. (1966). *Physica Stat. Sol.* **15**, K 131.
JAMES, R. W. (1950). *The Optical Principles of the Diffraction of X-rays*, chap. 4. London: Bell.
KATO, N. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 885.

Acta Cryst. (1968). A**24**, 42

Геометрическая интерпретация точечных элементов симметрии и решеток Бравэ в четырехмерном пространстве

Т. С. Кунцевич и Н. В. Белов

Горьковский Государственный Университет имени Н. И. Добачевского, Горький, СССР

(*Поступило* 20 *июня* 1967 *г.*)

Twenty-four operations of symmetry in {4} are considered as being generated by a primordial (on Wulff's lines) operation of a mirror reflexion in the hyper-plane; the Bravais lattices in {4} are derived from 14 three-dimensional lattices by a synthetic method, account being taken of the new (24) elements of symmetry. A new Bravais lattice is added to Mackay & Pawley's list revised by A. M. Zamorzaev and B. V. Cekinovskij.

1. Операции симметрии в {4}

Выведенные Гурса (Goursat, 1889), Германом (Hermann, 1949), Харли (Hurley, 1951) методами теории групп 24 операции симметрии (кристаллографические) в четырехмерном пространстве можно получить геометрически, приняв в качестве основной, порождающей операции симметрии зеркальное отражение в гиперплоскости.* В пространстве 4-х измерений (обозначаемом для краткости {4}) через любую точку A (рис. 1) вне гиперплоскости про-

* Согласно 'принципу Вульфа' (Белов, 1951*a*); геометрические термины взяты преимущественно из книги Мэннинга (Manning, 1956).

ходит одна и только одна линия AB, перпендикулярная к данной гиперплоскости и пересекающая ее в точке O; зеркальным отражением точки A будет точка B, лежащая на полулинии OB, противоположной OA, при условии равенства $OB = OA$. Если одну координатную ось X_1 направить по линии AB, не лежащей в гиперплоскости, а три другие X_2, X_3 и X_4 вдоль трех некомпланарных в гиперплоскости направлений, проходящих через точку O и перпендикулярных к AB*, то операцию отражения в гиперплоскости можно выразить подстановкой (Шубников, 1951)

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_1 & X_2 & X_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (2)$$

* Прямые углы между осями на всех рисунках обозначаются дугами с поперечной штриховкой.

По Харли это операция T, по Герману – 2111. Классификация всех элементов симметрии, включая и операцию идентичности (I), приводится в табл. 1 вместе с их матричной формой и обозначениями по Харли и Герману.

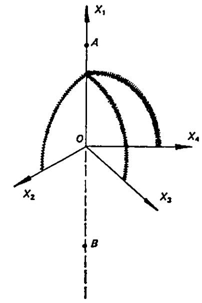

Рис. 1. Зеркальное отражение точки в гиперплоскости.

Таблица 1. *Элементы симметрии в* $\{4\}$

No. п.	Класс операций	Операция (обозначение)	Матрица	Обозначение Харли	Обозначение Германа
1	Идентичности	пп_1	1000 0100 0010 0001	I	1111
2	Порождающая-отражение в гиперплоскости	$\text{зп}_{\bar{1}}$	$\bar{1}000$ 0100 0010 0001	T	2111
3	Поворотные плоскости	пп_2	$\bar{1}000$ $0\bar{1}00$ 0010 0001	E	2211
4		пп_4	0100 $\bar{1}000$ 0010 0001	R	411
5		пп_3	0100 $\bar{1}\bar{1}00$ 0010 0001	K	311
6		пп_6	$0\bar{1}00$ 1100 0010 0001	Z	611
7	Зеркально-поворотные плоскости	$\text{зп}_{\bar{2}}$	$\bar{1}000$ $0\bar{1}00$ $00\bar{1}0$ 0001	T'	–
8		$\text{зп}_{\bar{4}}$	0100 $\bar{1}000$ $00\bar{1}0$ 0001	F	421
9		$\text{зп}_{\bar{3}}$	0100 $\bar{1}\bar{1}00$ $00\bar{1}0$ 0001	N'	–
10		$\text{зп}_{\bar{6}}$	$0\bar{1}00$ 1100 $00\bar{1}0$ 0001	N	621

Таблица 1. (*Продолжение*)

No. п.	Класс операций	Операция (обозначение)	Матрица	Обозначение Харли	Обозначение Германа
11	Двувращения	*дв*$_{22}$	$\begin{matrix}\bar{1}000\\0\bar{1}00\\00\bar{1}0\\000\bar{1}\end{matrix}$	J'	–
12		*дв*$_{42}$	$\begin{matrix}0100\\\bar{1}000\\00\bar{1}0\\000\bar{1}\end{matrix}$	R'	–
13	Двувращения	*дв*$_{32}$	$\begin{matrix}0100\\\bar{1}\bar{1}00\\00\bar{1}0\\000\bar{1}\end{matrix}$	Z'	–
14		*дв*$_{62}$	$\begin{matrix}0\bar{1}00\\1100\\00\bar{1}0\\000\bar{1}\end{matrix}$	K'	–
15		*дв*$_{44}$	$\begin{matrix}0100\\\bar{1}000\\0001\\00\bar{1}0\end{matrix}$	D	44
16		*дв*$_{34}$	$\begin{matrix}0100\\\bar{1}\bar{1}00\\0001\\00\bar{1}0\end{matrix}$	M'	–
17		*дв*$_{64}$	$\begin{matrix}0\bar{1}00\\1100\\000\bar{1}\\0010\end{matrix}$	M	64
18		*дв*$_{33}$	$\begin{matrix}0100\\\bar{1}\bar{1}00\\0001\\00\bar{1}\bar{1}\end{matrix}$	S'	–
19		*дв*$_{63}$	$\begin{matrix}0\bar{1}00\\1100\\0001\\00\bar{1}\bar{1}\end{matrix}$	B	63
20		*дв*$_{66}$	$\begin{matrix}0\bar{1}00\\1100\\000\bar{1}\\0011\end{matrix}$	S	66
21	Тройное вращение	*тв*$_{444}$	$\begin{matrix}0100\\0010\\0001\\\bar{1}000\end{matrix}$	A	8
22	Четверное вращение	*чв*$_{3344}$	$\begin{matrix}0001\\00\bar{1}\bar{1}\\0\bar{1}00\\1100\end{matrix}$	C	T(twelve)
23	Операции правильного пентатопа	5	$\begin{matrix}0100\\0010\\0001\\\bar{1}\bar{1}\bar{1}\bar{1}\end{matrix}$	L	5
24		10	$\begin{matrix}0\bar{1}00\\00\bar{1}0\\000\bar{1}\\1111\end{matrix}$	L'	10

Если две гиперплоскости пересекаются по плоскости (грани), то они образуют 'гиперплоский угол', мерой которого служит его плоский угол, определяемый двумя перпендикулярами, восставленными из любой точки грани в каждую из составляющих гиперплоский угол полугиперплоскостей. Плоскость этого плоского угла будет абсолютно-перпендикулярна* в данной точке к грани гиперплоского угла. Два последовательных отражения некоторой точки† в пересекающихся гиперплоскостях будут лежать в плоскости указанного плоского угла, а суммарный результат этих двух отражений можно рассматривать как вращение по себе вокруг точки O плоскости, абсолютно-перпендикулярной к грани гиперплоского угла в данной точке O. Абсолютно-перпендикулярную плоскость можно провести через любую точку грани гиперплоского угла, так что в целом здесь имеет место вращение в гиперпространстве. В результате приходим к операции вращения относительно плоскости пересечения двух зеркально-отражающих гиперплоскостей. Элемент симметрии, соответствующий этой операции, называют поворотной плоскостью (axis-plane) (Manning, 1956), для краткости обозначаем его символом nn. Поворотная плоскость может быть того или иного порядка в зависимости от величины гиперплоского угла, т.е. в конечном счете от величины его плоского угла. На этот последний решетка накладывает ограничения, свойственные пространству двух измерений, т.е. он может принимать четыре значения: 90, 45, 60 и 30°. Соответственно, поворотные плоскости в $\{4\}$ могут быть лишь четырех порядков: 2-го, 4-го, 3-го и 6-го (см. Табл. 1). Координатные оси в первых двух случаях естественно выбрать как показано на рис. 2(*а*), в оставшихся – как на рис. 2(*б*). Здесь полуоси X_1 и X_2 лежат в плоскости, абсолютно-перпендикулярной в точке O поворотной плоскости X_3X_4.

Поворотная плоскость 2-го порядка – nn_2 – вращает плоскость X_1X_2 вокруг точки O на 180°, причем угол между X_1 и X_2 не обязательно прямой, ибо nn_2 может существовать и без порождающих ее зеркальных гиперплоскостей. Эта операция выразится подстановкой:

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_1 & \bar{X}_2 & X_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (3)$$

nn_4 поворачивает плоскость X_1X_2 по себе на 90°, причем оси X_1 и X_2 здесь, как и в двух следующих случаях, эквивалентны и оба направления вращения – правое и левое – равновозможны. Соответствующее преобразование координат будет:

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1 & X_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (4)$$

В случае nn_3 и nn_6 поворот производится на 120° и на 60° соответственно, оси X_1 и X_2 обычно выбираются под углом 120°, но направление вращения одной из этих операций будет обратным направлению вращения другой, поскольку положительным считается вращение в сторону наименьшего угла между эквивалентными осями. Соответствующие подстановки для nn_3 и nn_6 имеют вид:

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1+\bar{X}_2 & X_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (5)$$

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_2 & X_1+X_2 & X_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (6)$$

Если пересекаются три гиперплоскости, нормали к которым не лежат в одной плоскости, то они имеют общую линию, которая называется вершинным ребром (vertex-edge) плоско-триэдрального угла*. Последовательные отражения некоторой точки в этих трех гиперплоскостях описывают n-угольник, лежащий в гиперплоскости, которая перпендикулярна вершинному ребру и называется прямым сечением плоско-триэдрального угла. Результат этих трех отражений можно рассматривать как вращение вокруг общей грани любых двух из исходных гиперплоскостей (общая грань здесь будет поворотной плоскостью) с последующим отражением в третьей. И если две из трех зеркальных гиперплоскостей могут пересекаться под четырьмя выше рассмотренными углами, то третья гиперплоскость должна быть обязательно перпендикулярна к первым двум. В противном случае будем иметь добавочные сверх указанных трех зеркальные гиперплоскости, что требует специального рассмотрения. В итоге имеем четыре новые 'составные' операции симметрии – вращение-отражение –, соответствующие которым элементы симметрии можно назвать зеркально-поворотными плоскостями и обозначать символом $зп$. Три координатные оси (X_1, X_2, X_3) для описания этих операций целесообразно выбрать вдоль линий пере-

* Абсолютно-перпендикулярными называют такие две пересекающиеся в точке плоскости, каждая линия одной из которых, проходящая через общую точку, будет перпендикулярна каждой линии другой, проходящей через эту же точку.

† Отражение фигуры состоит из отражений всех ее точек, поэтому здесь и в дальнейшем фигурирует точка, а не фигура.

* Плоско-триэдральный угол состоит из трех полуплоскостей, пересекающихся по ребру, но не лежащих в одной гиперплоскости.

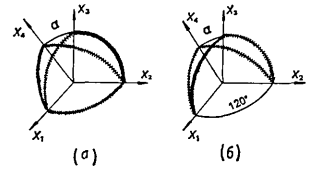

Рис. 2. Рациональные системы координат дпя описания поворотных плоскостей (*а*) nn_2 и nn_4 (для nn_2 угол между X_1 и X_2 в общем случае не равен 90°); (*б*) nn. и nn_6.

сечения нашего плоско-триэдрального угла с прямым сечением (рис. 3), а четвертую ось X_4 – вдоль его вершинного ребра. Пусть для определенности гиперплоскости $X_1X_3X_4$ и $X_2X_3X_4$ пересекаются под одним из возможных углов, образуя поворотную плоскость X_3X_4 того или иного порядка (от чего зависит выбор α), а гиперплоскость $X_1X_2X_4$ им перпендикулярна, тогда согласно теоремам о перпендикулярности (Manning, 1956), во-первых, плоскости X_1X_2 и X_3X_4 будут абсолютно-перпендикулярными, и во-вторых, угол между осями X_3 и X_4 должен быть прямым. При таком выборе осей координат зеркально-поворотные плоскости $зn_2$, $зn_4$, $зn_3$ и $зn_6$ опишутся следующими подстановками:

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_1 & \bar{X}_2 & \bar{X}_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (7)$$

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1 & \bar{X}_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (8)$$

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1+\bar{X}_2 & \bar{X}_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (9)$$

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_2 & X_1+X_2 & \bar{X}_3 & X_4 \end{matrix} \qquad (10)$$

Для перечисленных 10-ти элементов симметрии общим будет то, что все они при переходе к трем измерениям (четвертая координата становится нулевой) дают полный набор трехмерных точечных элементов симметрии. Этого уже нет для тех элементов симметрии в {4}, которые соответствуют результату отражения в четырех пересекающихся в точке гиперплоскостях, нормали к которым образуют так называемый тетраэдроидальный угол*.

* Тетраэдроидальный угол образуют любые четыре гиперплоскости с общей точкой, но не линией; любые четыре полулинии, проведенные из точки и не лежащие в одной гиперплоскости, являются ребрами тетраэдроидального угла.

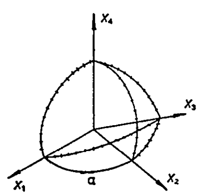

Рис. 3. Рациональная система координат для описания зеркально-поворотных плоскостей; угол α может быть любым для $3n_{\bar{2}}$, равным 90° для $3n_{\bar{4}}$ и равным 120° для $3n_{\bar{3}}$ и $3n_{\bar{6}}$.

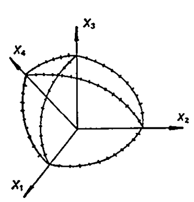

Рис. 4. Прямоугольная система координат в {4}.

У последнего шесть граней можно представить как три пары противоположных, т.е. встречающихся только в вершине угла и, в общем случае, не абсолютно-перпендикулярных плоскостей. Если координатную систему выбрать так, что каждая ось будет нормалью к гиперплоскости, образованной тремя другими осями, то получим прямоугольную систему (rectangular system) (рис. 4), в которой три пары противоположных плоскостей абсолютно-перпендикулярны. Последовательные отражения точки в таких четырех гиперплоскостях создают фигуру в гиперпространстве, и суммарный результат этих отражений можно представить, во-первых, как совокупность одновременных вращений вокруг любой пары абсолютноперпендикулярных плоскостей – такая операция называется двувращением (double rotation); во-вторых, как совокупность двувращения вокруг какой-то одной пары и вращения порядка выше второго вокруг грани, являющейся общей перпендикулярной плоскостью к составляющим эту пару абсолютно-перпендикулярным плоскостям; и наконец, как совокупность двух двувращений порядка выше второго вокруг любых двух пар абсолютно-перпендикулярных плоскостей. Последние два типа операций можно было бы назвать *тройным* и *четверным* вращением. Пяти-и шестивращения порядка выше второго в прямоугольной системе не дают новых элементов симметрии, т.к. в этом случае три поворотные плоскости замыкаются в трехгранный угол, лежащий в гиперплоскости. На элементы симметрии в указанных трех возможных сочетаниях вращения решетка ['состояние решетки' по Белову (1951*б*)] накладывает определенные ограничения. Как указывалось, поворотные плоскости, порождающие операцию двувращения (обозначим ее символом *дв*), могут быть лишь четырех порядков: $пп_2$, $пп_4$, $пп_3$ и $пп_6$; и поскольку в операции двувращения они не связаны друг с другом симметрией более высокой чем второго порядка, то всевозможные сочетания их между собою дадут полный набор операций двувращения, число которых равно десяти:

1. $дв_{22}$	6. $дв_{34}$
2. $дв_{42}$	7. $дв_{64}$
3. $дв_{32}$	8. $дв_{33}$
4. $дв_{62}$	9. $дв_{63}$
5. $дв_{44}$	10. $дв_{66}$

Выбрав систему координат, как показано на рис. 5, где обе плоскости вращения X_1X_2 и X_3X_4 абсолютно-перпендикулярны друг другу, а плоскостные углы α и β принимают значения, зависящие от порядка вращения противоположной плоскости, получаем следующие подстановки для указанных 10-ти операций симметрии:

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_1 & \bar{X}_2 & \bar{X}_3 & \bar{X}_4 \end{matrix} \qquad (11)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1 & \bar{X}_3 & \bar{X}_4 \end{array} \qquad (12)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1+\bar{X}_2 & \bar{X}_3 & \bar{X}_4 \end{array} \qquad (13)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_2 & X_1+X_2 & \bar{X}_3 & \bar{X}_4 \end{array} \qquad (14)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1 & X_4 & \bar{X}_3 \end{array} \qquad (15)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1+\bar{X}_2 & X_4 & \bar{X}_3 \end{array} \qquad (16)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_2 & X_1+X_2 & \bar{X}_4 & X_3 \end{array} \qquad (17)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & \bar{X}_1+\bar{X}_2 & X_4 & \bar{X}_3+\bar{X}_4 \end{array} \qquad (18)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_2 & X_1+X_2 & X_4 & \bar{X}_3+\bar{X}_4 \end{array} \qquad (19)$$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_2 & X_1+X_2 & \bar{X}_4 & X_3+X_4 \end{array} \qquad (20)$$

При тройном вращении – вокруг двух абсолютно-перпендикулярных плоскостей X_1X_2 и X_3X_4 и их общей перпендикулярной плоскости X_1X_3 (рис. 3), выбираемой из четверки 'боковых' в зависимости от направления вращения в первых двух, – порядок обеих двувращающих плоскостей должен быть одинаков, т.к. только при 'боковом' вращении порядка выше второго могут получиться новые элементы симметрии. Таким образом, из 10-ти двувращений используются лишь три: $\partial в_{44}$, $\partial в_{33}$ и $\partial в_{66}$. 'Боковое' вращение может быть только четвертого порядка, т.к. двувращающие плоскости всегда абсолютно-перпендикулярны. Сочетание $\partial в_{44}$ и nn_4 'боковой' создает новый элемент симметрии восьмого порядка, который можно было бы обозначить символом $чв_{444}$. При выборе координат, как на рис. 6, с углом α равным 90° для этой операции имеем преобразование:

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & X_3 & X_4 & \bar{X}_1 \end{array} \qquad (21)$$

Направление вращения для поворотных плоскостей 4-го порядка может быть выбрано произвольным; меняя это направление в двувращающих плоскостях на обратное и перебирая все четыре 'боковые' плоскости в качестве третьей поворотной, получаем при этом неизменно операцию 8-го порядка.

Рассматривая сочетание $\partial в_{33}$ с nn_4, обращаем внимание на то, что при угле α, равном 120°, 'боковая' nn_4 не будет координатной плоскостью (рис. 7); линии пересечения ее с двувращающими плоскостями X_1X_2 и X_3X_4, которые обозначены X_1' и X_3', образуют с осями X_1 и X_3 соответственно углы в 30°. Изобразивши интересующие нас плоскости по Мэннингу (Manning, 1956) (т.е. оси – точками, плоскости – линиями и т.д.), на отдельном рис. 8 видим, что, поскольку плоскости $X_1'X_3'$ и X_2X_4 абсолютно-перпендикулярны, плоскость X_1X_3 будет изоклинной к ним обеим. Согласно теоремам о так называемом изоклинном вращении (Manning, 1956), ось X_1 сможет совместиться с X_3 только в случае одновременного одинакового вращения вокруг плоскостей $X_1'X_3'$ и X_2X_4. Это означает, что для $\partial в_{33}$, равно как и для $\partial в_{66}$, невозможно тройное вращение, но допускается четверное, т.е. совокупность двух двувращений, а именно: $\partial в_{33}+\partial в_{44}$ и $\partial в_{66}+\partial в_{44}$. В обоих этих случаях появляется новый элемент симметрии 12-го порядка, который можно обозначить символом $чв_{3344}$. Преобразование координат для соответствующей операции будет (рис. 7) в случае $\partial в_{33}+\partial в_{44}$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_4 & \bar{X}_3+\bar{X}_4 & \bar{X}_2 & X_1+X_2 \end{array} \qquad (22)$$

или для $\partial в_{66}+\partial в_{44}$

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_4 & X_3+X_4 & X_2 & \bar{X}_1+\bar{X}_2 \end{array} \qquad (22^*)$$

Для полноты обзора элементов симметрии, соответствующих отражениям в четырех пересекающихся в точке гиперплоскостях, следует рассмотреть сочетание $\partial в_{44}+\partial в_{44}$, но легко показать, что это четверное вращение сводится к двувраще-

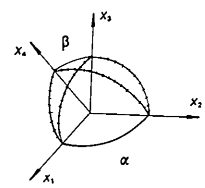

Рис. 5. Рациональная система координат для описания двувращений; α и β могут быть любыми, равными 90° или 120° в зависимости от порядков двувращающих плоскостей.

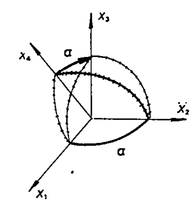

Рис. 6. Иллюстрация к выводу элементов симметрии класса тройных вращений.

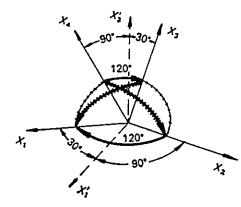

Рис. 7. Рациональная система координат для четверного вращения.

нию $\partial в_{44}$ вокруг третьей пары абсолютно-перпендикулярных плоскостей и, таким образом, не дает новых элементов симметрии.

Далее необходимо рассмотреть отражение точки более чем в четырех пересекающихся в точке гиперплоскостях, имея в виду лишь исходные гиперплоскости, но не производные, возникающие, например, при пересечении гиперплоскостей под углами 45°, 60° и 30°. Строгое рассмотрение всех возможных сочетаний зеркальных гиперплоскостей, пересекающихся в точке, может быть проведено с помощью гиперсферических проекций, что выходит за рамки настоящей работы. Мы ограничимся геометрической интерпретацией получающихся при этом двух новых элементов симметрии 5-го и 10-го порядков (по Харли – L и L'). Существование этих завершающих полый список двух операций тесно связано с четырехмерным аналогом тетраэдра – правильным пентаэдроидом (по Мэннингу, 1956) или, как его называют современные авторы (Mackay & Pawley, 1963; Заморзаев и Цекиновский, 1967) – с правильным пентатопом (regular pentatop). Он получается из 'правильного' тетраэдроидального угла, т.е. такого, у которого все гранные углы равны 60° и ребра – эквивалентны, если на последних отложить одинаковые отрезки (в частности, трансляции) и концы их (узлы решетки) соединить

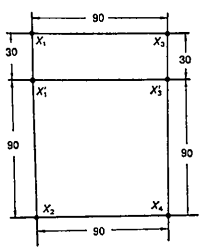

Рис. 8. Иллюстрация к доказательству невозможности тройного вращения 334 и 664.

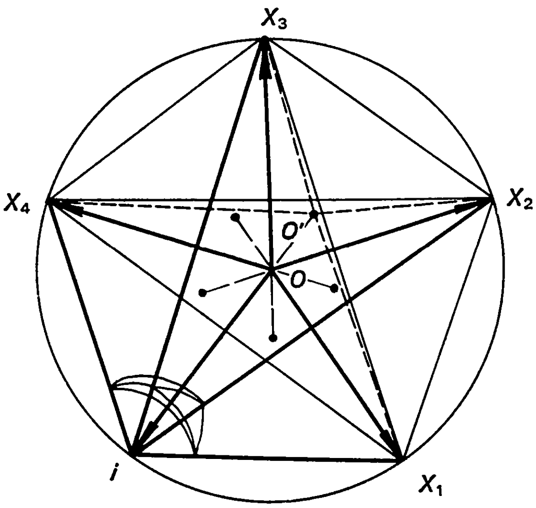

Рис. 9. Плоское изображение правильного пентатопа.

линиями (рис. 9). У правильного пентатопа пять вершин, каждая из которых является вершиной 'правильного' тетраэдроидального угла. Высотой пентатопа будет перпендикуляр, опущенный из любой вершины (например i) на противоположную гиперплоскость и пересекающий ее в точке O', центре тяжести определяющего эту гиперплоскость тетраэдра $X_1X_2X_3X_4$. Все пять высот пентатопа пересекаются в одной точке O, которая является центром тяжести пентатопа и центром гиперсферы, описанной вокруг него, причем радиус гиперсферы равен $\frac{4}{5}$ высоты пентатопа. Через центр пентатопа проходят пять эквивалентных направлений – OX_1, OX_2, OX_3, OX_4 и Oi (рис. 9), не лежащих в одной гиперплоскости; любые четыре из них могут быть выбраны в качестве координатных осей. Если положительными считать направления осей от центра к вершине, то пятая ось связана с первыми четырьмя следующим соотношением:

$$i = -(X_1+X_2+X_3+X_4) \ (*)$$

Эквивалентные оси, естественно, должны быть связаны симметричным преобразованием с сохранением определенного циклического порядка, в данном случае это будет следующее:

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & i \\ X_2 & X_3 & X_4 & i & X_1 \end{matrix}$$

Отбросив пятую ось и заменив ее соотношением (*), получим:

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ X_2 & X_3 & X_4 & \bar{X}_1+\bar{X}_2+\bar{X}_3+\bar{X}_4 \end{matrix} \tag{23}$$

Это – операция L (по Харли).

Аналогичная картина характерна для пространств 2-х и 3-х измерений, если исходные эквивалентные оси взяты под углом 60° и образуют в {2} плоский угол, замыкающийся на правильный треугольник (рис. 10*а*) и в {3} – 'правильный' трехгранный угол, замыкающийся на тетраэдр (рис. 10*б*). Центры тяжести обеих фигур являются центрами описанных окружности (*а*) и сферы (*б*), а радиусы последних, направленные от центра к вершинам, образуют в обоих случаях эквивалентные оси, число которых на едниицу больше числа измерений (длина радиуса в (*а*) составляет $\frac{2}{3}$ высоты, а в (*б*) – $\frac{3}{4}$ высоты). 'Лишняя' ось i связана с остальными соотношениями:

в {2} $i = -(X_1+X_2)$

и в {3} $i = -(X_1+X_2+X_3)$

Симметричные операции, связывающие эквивалентные оси, записываются следующими матрицами:

в {2} $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \bar{1} & \bar{1} \end{pmatrix}$

и в {3} $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \bar{1} & \bar{1} & \bar{1} \end{pmatrix}$

Первую можно рассматривать как 3-го порядка вращение плоскости по себе вокруг точки, не обязательно являющейся узлом решетки; вторую – как вращение 4-го порядка гиперплоскости по себе вокруг точки, не обязательно узловой. Если же центр вращения становится узлом решетки, то число эквивалентных осей удваивается, что в $\{2\}$ ведет к появлению удвоенного, 6-го, порядка вращения, но в $\{3\}$ все восемь осей связываются все той же операцией – зеркальным вращением 4-го порядка. В $\{4\}$ Маккаем и Поли (Mackay & Pawley, 1963) открыта решетка, в которой центр правильного пентатопа становится узлом решетки, что, как и в $\{2\}$ ведет к удвоению эквивалентных осей с появлением нового элемента симметрии 10-го порядка (L'), соответствующее преобразование координат будет

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 \\ \bar{X}_2 & \bar{X}_3 & \bar{X}_4 & X_1+X_2+X_3+X_4 \end{matrix} \qquad (24)$$

Операцию симметрии 5-го порядка можно представить как результат действия 20-ти пересекающихся в центре пентатопа поворотных плоскостей третьего порядка. Как кидно из рис. 9, любая высота пентатопа, например iO', пересекающая центр противоположного тетраэдра в т. O' образует с каждой из четырех, проходящих через т. O' тройных осей тетраэдра плоскость, которая для оставшнхся трех тройных осей будет поворотной плоскостью 3-го порядка. Через каждую вершину пентатопа проходит 4 таких поворотных плоскости, а через центр – 20. Поскольку в тетраэдре наряду с тройными осями присутствуют три оси второго порядка, то в пентатопе будем набпюдать еще 15 поворотных плоскостей 2-го порядка. Совокупность всех этих элементов симметрии производит 24 элемента симметрии 5-го порядка (число всевозможных перестановок из четырех независимых координатных осей, или 4!). В зависимости от симметрии тетраэдра и его центрированности, а также от центрированности пентатопа полная группа его элементов симметрии будет различной (Hurley, 1951). Максимальная симметрия решетки правильного центрированного пентатопа приведена у Маккая и Поли.

2. Решетки Бравэ в $\{4\}$

Маккай и Поли (Mackay & Pawley, 1963) основываясь на работах Гурса, Германа, Харли, вывели 52 решетки Бравэ (трансляционные группы) в $\{4\}$, не утверждая, однако, полноты своего списка. Заморзаев и Цекиновский (1967) уточнили этот список, добавив пропущенную центрированную решетку $[(0\tfrac{1}{2}0\tfrac{1}{2})(\tfrac{1}{2}0\tfrac{1}{2}0)(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2})]$ [типа No. 4 (Mackay & Pawley, 1963; Заморзаев и Цекиновский, 1967). Подавляющее большинство решеток Бравэ в $\{4\}$ выводятся, в соответствии с указаниями авторов упрощенныи, так называемым ‘синтетическим’ методом, т.е. к известным 14-ти решеткам Бравэ в $\{3\}$ добавляется четвертая независимая координата и перебираются все возможные варианты взаимного размещения эквивалентных и не эквивалентных осей. Четыре трансляции, не лежащие в одной гиперплоскости, образуют элементарную ячейку в виде гиперпараллелепипеда, ограничивающего некоторый гиперобъем четырьмя парами противоположных равных параллелепипедов. При выводе решеток Бравэ, однако, нет необходимости оперировать полной элементарной ячейкой, а достаточно рассмотреть тетраэдроидальный угол, образованный четырьмя исходными трансляцями, с его шестью гранями и четырьмя гиперплоскостями. Исходные трансляции, образующие координатную систему, выбираются в соответствии с высшей симметрией данной решетки. Наличие в $\{4\}$ сложных элементов симметрии (например, элементов 5-го, 8-го, 12-го порядков) приводит к появлению трансляционных решеток, не имеющих трехмерных аналогов.

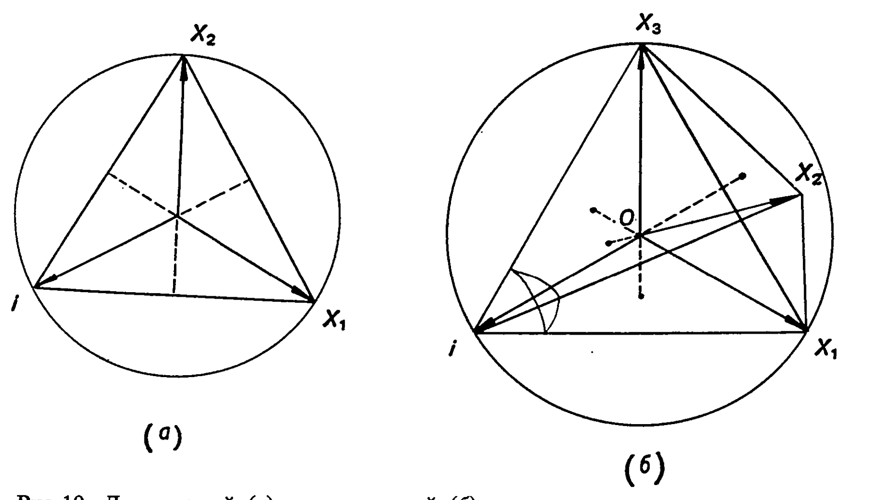

Рис. 10. Двухмерный (*а*) и трехмерный (*б*) аналоги правильного пентатопа.

Исследование допустимой центрированности примитивных решеток в {4} достаточно просто проводится способом, предложенным Беловым (1951*б*), в основе которого лежит учет возможности не полного охвата узлов решетки параллелепипедальной системой с определенным образом фиксированными осями. Удобно при этом пользоваться несколькими теоремами – обобщениями соответствующих теорем трехмерного пространства.

Теорема 1. Центрирование двух граней тетраэдроидального угла, пересекающихся по ребру и, следовательно, лежащих в одной гиперплоскости, имеет результатом центрирование третьей грани, принадлежащей той же гиперплоскости.

Теорема 2. Центрирование двух граней тетраэдроидального угла, пересекающихся только в точке и, следовательно, не лежащих в одной гиперпоскости, определяет гиперпространственное центрирование элементарной ячейки.

Следствие. Если центрированы три не лежащие в одной гиперплоскости грани тетраэдроидального угла, то будут центрированы все шесть граней и, как следствие, гиперобьем.

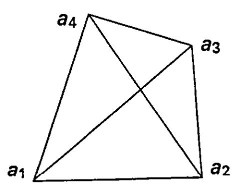

Рис. 11. Метрический тетраэдр.

Теорема 3. Центрирование двух гиперплоскостей тетраэдроидального угла ведет к центрированию грани, противоположной плоскости пересечения этих двух гиперплоскостей.

Примечание. Если пересекающиеся гиперплоскости имеют гексагональный базис, допускающий лишь двойную центрированность гиперплоскости, то грань, противоположная их общей грани, должна быть также дважды центрирована.

Доказательства этих теорем можно провести методом проекций на гиперплоскость вдоль той или иной оси, которую мы принимаем за 'цветную' (Белов и Тархова, 1956), т.е. узлы, расположенные на $\frac{1}{2}$ трансляции вдоль нее, будут проектироваться на гиперплоскость другим цветом по сравнению с узлами, расположенными по 0 и 1 (скажем, белым и черным). В результате мы должны получить одну из 36-ти черно-белых (Белов, Неронова и Смирнова, 1957) трехмерных решеток Бравэ [не считая многоцветных (Mackay & Pawley, 1963)]. Один и тот же узел в {4} может быть в проекции либо белым (нормальным), либо черным (цветным) в зависимости от выбора 'цветной' оси. Так узел в центре грани тетраэдроидального угла даст либо белый узел в центре грани трехмерной решетки, либо черный – в центре ребра; центрированность гиперплоскости в {4} дает в {3} либо нормальную центрированность по объему, либо цветную – по

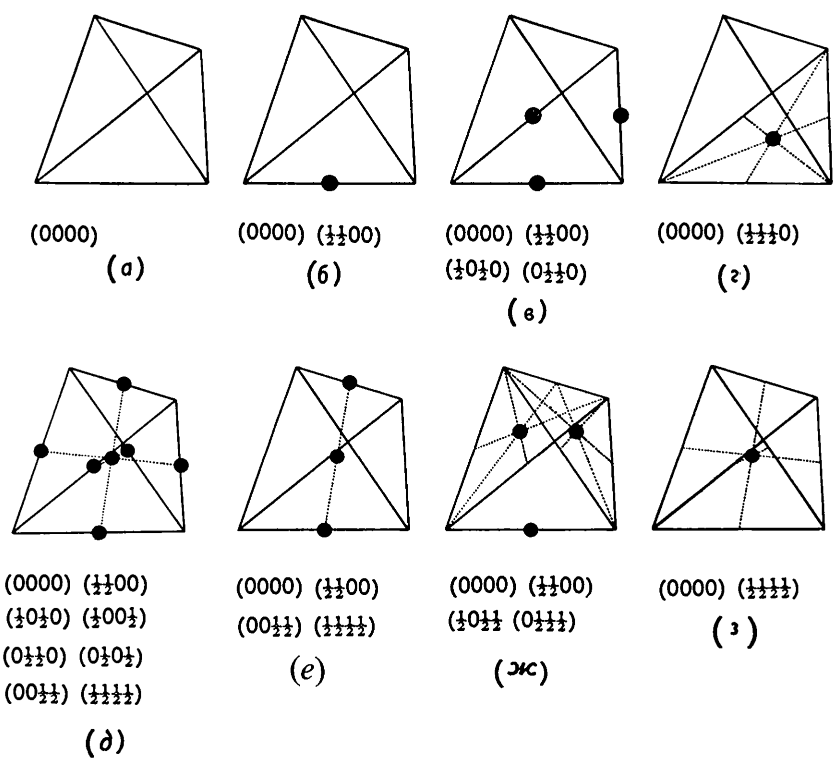

Рис. 12. Восемь ромбических четырёхмерных решеток Бравэ, изображенные посредством метрического тетраэдра.

грани; и наконец, узел в центре гиперобъема даст при любом выборе 'цветной' оси черный узел в центре объема трехмерной решетки.

Геометрически многие решетки Бравэ удобно изображать в виде тетраэдра (рис. 11), вершины, ребра и грани которого соответствуют осям, граням и гиперплоскостям тетраэдроидального угла данной четырехмерной решетки, лишенным одного измерения. Углы между осями и эквивалентность осей мы выражаем разного вида линиями, соединяющими соответствующие вершины; например, пунктирными линиями произвольные углы, сплошными – прямые, двойные линии могут обозначать эквивалентность осей и т.д. Такой тетраэдр можно было бы назвать *метрическим*, как отражающим метрику решетки. Центрированность граней, гиперплоскостей и гиперобъема отобразятся в *метрическом* тетраэдре центрированием соответствующих ребер, граней и объема. Например, восемь ромбических решеток, изображенных на стр. 16 (Mackay & Pawley, 1963) гиперпараллелепипедами, с помощью метрического тетраэдра будут изображены так, как показано на рис. 12.

С помощью метрического тетраэдра можно выразить и выше рассмотренные теоремы. Как известно, центрированность аналитически записывают в виде компонент-полутрансляций по координатным осям; так, центрирование грани элементарной ячейки в $\{4\}$ дает компоненты по двум осям, что в метрическом тетраэдре выразится вкладом по одной компоненте в каждую из двух вершин, принадлежащих центрированному ребру тетраэдра. Соответственно, центрирование гиперплоскости дает вклады по полутрансляции в три вершины тетраэдра, а центрирование гиперобъема – в четыре вершины. Три рассмотренные теоремы сводятся к одному основному правилу центрирования: сумма полутрансляций в вершинах метрического тетраэдра должна быть одинаковой для всех вершин, получающих вклады; если сумма компонент в каждой из четырех вершин тетраэдра есть число нечетное, то имеет место центрирование по гиперобъему. (В случае двойной центрированности грани или гиперплоскости правило справедливо для пар компонент.)

Описанными приемами нами выведены все решетки Бравэ, фигурирующие у Маккая и Поли (1963) с исправлениями Заморзаева и Цекиновска, за исключением решетки No. 17, которая на наш взгляд требует специального рассмотрения. Кроме того, нами выведена новая решетка типа No. 5, дважды центрированная по гиперплоскости $(X_1X_2X_3)$: $\{(\frac{1}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{3}0)(\frac{2}{3}\frac{2}{3}\frac{2}{3}0)\}$. Симметрия этой решетки, равная (в обозначениях Харли) $4K$, $6T$, ниже, чем симметрия исходной примитивной, поэтому ее следует выделить в самостоятельный вид (ромбоэдрического типа) с метрическим тензором

$$\begin{pmatrix} a_1^2 & a_1\,a_2 & a_1\,a_2 & a_1\,a_2 \\ & a_2^2 & \alpha\,a_2^2 & \alpha\,a_2^2 \\ & & a_2^2 & \alpha\,a_2^2 \\ & & & a_2^2 \end{pmatrix}$$

Если угол между осью X_1 и осями X_2, X_3, X_4 (которые эквивалентны) становится прямым, то данная решетка сводится к решетке No. 9; частные же значения α не увеличивают симметрию решетки.

В заключение заметим, что если решетка No. 17 существует, то должна существовать и решетка, до некоторой степени аналогичная решетке No. 8, с метрическим тензором

$$\begin{pmatrix} a_1^2 & a_1\,a_2 & 0 & \alpha\,a_1\,a_2 \\ & a_2^2 & -\alpha\,a_1\,a_2 & 0 \\ & & a_1^2 & a_1\,a_2 \\ & & & a_2^2 \end{pmatrix}$$

и симметрией (по Харли), равной $2D$.

Литература

Белов, Н. В. (1951*а*). *Труды Института кристаллографии*, **6**, 25.

Белов, Н. В. (1951*б*). *Структурная кристаллография*. Москва: Изд. Акад. Наук СССР.

Белов, Н. В., Неронова, Н. Н. и Смирнова, Т. С. (1957). *Кристаллография*, **2**, 315.

Белов, Н. В. и Тархова, Т. Н. (1956). *Кристаллография*, **1**, 6.

Goursat, M. E. (1889). *Ann. Sci. Éc. norm. sup. Paris*, (3), **6**, 9.

Hermann, C. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 139.

Hurley, A. C. (1951). *Proc. Camb. Phil. Soc.* **47**, 650.

Заморзаев, А. М. и Цекиновский, Б. В. (1967). *Кристаллография*, **12**, 6.

Mackay, A. L. & Pawley, G. S. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 11.

Manning, H. P. (1956). *Geometry of Four Dimensions*. New York: Macmillan.

Шубников, А. В. (1951). *Симметрия и антисимметрия конечных фигур*. Москва: Изд. Акад. Наук СССР.