А. М. Заморзаев, А. Ф. Палистрант, Геометрическая классификация P-симметрий, *Докл. АН СССР*, 1981, том 256, номер 4, 856–859

Доклады Академии наук СССР
1981. Том 256, № 4

УДК 548.12 КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

А.М. ЗАМОРЗАЕВ, А.Ф. ПАЛИСТРАНТ

ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ P-СИММЕТРИЙ

(Представлено академиком Н.В. Беловым 29 IX 1980)

1. Теория симметрии, логически завершенная в трудах ее классиков Е.С. Федорова и А. Шёнфлиса, к настоящему времени глубоко проникла в разные отрасли современного естествознания. Потребности расширявшихся областей применения фёдоровского учения породили бурный поток его обобщений.

Среди новых теорий в математической кристаллографии видное место занимает учение об антисимметрии ([1]), цветной симметрии ([2]), антисимметрии различного рода ([3]), цветной антисимметрии, по-разному разработанной в ([4]) и ([5], [6]), простой и кратной криптосимметрии в разных трактовках ([7], [8]) и с разной методикой вывода цветных групп ([7], [9]) и др.

Все обобщения симметрии, в которых закон изменения конечного числа качеств, приписанных точкам фигуры, комбинируется прямо с изометрическим преобразованием, действующим только на точки, и не связан с выбором частей фигуры*, подробно описаны в монографиях ([3], [10]) и охвачены понятием P-симметрии.

Метод вывода всех групп P-симметрии из классических подробно изложен в ([10], [11]). В этих же работах наряду с общей теорией P-симметрии ставился вопрос о классификации самих P-симметрий; для случая так называемых кристаллографических P-симметрий эта задача получила окончательное решение в работах ([11], [12]).

Однако существующие способы классификации кристаллографических P-симметрий ([11], [12]), навеянные результатами работ ([8], [9]), не лишены определенных недостатков, так как отождествляют некоторые хорошо изученные P-симметрии (например, двукратную антисимметрию ([3]) и двуцветную антисимметрию Поли ([4])), которые по существу не одинаковы. Для устранения отмеченных недостатков предлагается новый способ классификации P-симметрий, навеянный работами В.Е. Найша по описанию симметрии неколлинеарных магнитных структур ([13]), математический аппарат которых очень близок к P-симметрии.

Характеристике существующих способов классификации P-симметрий и построению полной схемы кристаллографических P-симметрий в их новой классификации и посвящается настоящая статья.

2. Напомним сущность P-симметрии: приписывая всем точкам фигуры хотя бы по одному из индексов $1, 2, \ldots, p$, называем преобразованием P-симметрии фигуры ее изометрическое преобразование, переводящее каждую точку с индексом i в точку с индексом k_i так, что подстановка индексов $\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 2 \ldots & p \\ k_1 & k_2 \ldots & k_p \end{pmatrix}$ принадлежит наперед заданной группе P. Всякое преобразование P-симметрии g есть коммутативное произведение преобразования симметрии s и подстановки индексов ϵ. Преобразования P-симметрии фигуры образуют группу G, входящие в них преобразования симметрии — ее порождающую группу S, а подстановки индексов — группу P_1; при $P_1 = P$ называем G группой полной P-симметрии, при $e \subset P_1 \subset P$ — неполной (тогда ее можно считать группой P_1-симметрии).

* К ним относятся все перечисленные выше обобщения симметрии.

Пусть G – группа полной P-симметрии; тогда $H = G \cap S$ – ее подгруппа симметрии, а $Q = G \cap P$ – подгруппа подстановок индексов; группу G называем старшей при $Q = P$ (тогда $H = S$ и $G = S \times P$), младшей при $Q = e$ (тогда $G \simeq S$) и средней при $e \subset Q \subset P$. В случае $Q = e$ фактор-группа $S/H \simeq P$, и младшую группу G можно задать копциковым двучленным символом S/H ([10], [11]).

3. Охарактеризуем имеющиеся подходы к классификации P-симметрий.

1) Абстрактно-групповой подход. В этом случае P-симметрия и P'-симметрия не различаются, если сами группы подстановок качеств P и P' изоморфны. Такая классификация P-симметрий по существу отражена в ([8]), где группа P задана абстрактно, а свойства ее подстановок и число преобразуемых ею качеств не учитываются. Действительно, О. Виттке ([8]) осуществил вывод групп криптосимметрии (младших групп P-симметрии) выявлением всех истинных нормальных делителей классических групп, задавая тем самым каждую из 139 точечных групп криптосимметрии ее двучленным символом S/H. Ограничиваясь кристаллографическими P-симметриями, для которых группа P изоморфна одной из точечных кристаллографических групп симметрии, получим 18 различных P-симметрий (включая классическую симметрию), дающих 32 порождающих плюс 139 младших, т.е. 171 точечную группу (ср. ([8])).

Существенным недостатком абстрактно-группового подхода к классификации P-симметрий явилось то, что в нем не различаются многие частные случаи P-симметрий. Так, в число 139 точечных групп криптосимметрии, кроме 58 черно-белых и 18 цветных ([1], [10]), должны войти также 116 и 196 групп двукратной и трехкратной антисимметрии (для которых символ S/H, как отмечено в ([3]), дает недостаточную информацию об их строении) и еще существенно новые группы других P-симметрий – цветной антисимметрии и т.п.

2) Конкретно-групповой подход. При этом способе классификации P-симметрий уже учитываются свойства подстановок группы P и число преобразуемых ее качеств. Идея такого подхода к классификации P-симметрий восходит к работе ([9]), согласно которой метод получения младшей (цветной) группы G сводится при транзитивной группе P к выявлению всех подгрупп порождающей; число цветов p совпадает с индексом подгруппы H' в S, а подгруппы, сопряженные H' в S, пересекаются по нормальному делителю H-подгруппы симметрии в G; на этом строится представление группы S подстановками. При таком методе цветную группу можно задать трехчленным символом $S/H'/H$ по замыслу В.А. Копцика.

Классификация P-симметрий в зависимости от группы P подстановок качеств полностью завершена ([11]). При решении этой задачи P-симметрию и P'-симметрию считаем одинаковыми, если можно согласовать нумерацию преобразуемых ими p и p' качеств индексами i и i' так, что в численном выражении подстановок индексов группы P и P' совпадут. Если группы P и P' транзитивны, то для одинаковости P-симметрии с P'-симметрией необходимо и достаточно выполнения условий: а) $P \simeq P'$ и $p = p'$; б) стационарные подгруппы P_i и P'_i должны одинаково включаться в P и P' (т.е. требуется существование изоморфизма группы P на P', отображающего P_i на P'_i). Для построения полной схемы кристаллографических P-симметрий сперва рассматривалась группа P как абстрактная (таких групп 18), и для любого делителя p порядка n группы P в ней разыскивались все возможные подгруппы P_i с индексом p, а затем из подгрупп P_i выбирались только те, которые в пересечении со всеми сопряженными им в P дают единичную подгруппу. Сама группа подстановок моделируется подстановками левых смежных классов группы P по оставшейся подгруппе P_i, получающимися при умножении этих классов слева на всевозможные элементы из P. Эта методика позволила сразу установить 18 P-симметрий, соответствующих единичной группе P_i (случай $p = n$), т.е. регулярным группам P; при абелевой группе P других P-симметрий нет. Исследование всех возможных случаев дает 45 различных P-симметрий, включая классическую симметрию (ср. ([10-12])).

Обобщение 32 точечных кристаллографических групп с отмеченными 44 нетривиальными P-симметриями приводит к 212 младшим группам P-симметрии, каждую из которых, как указывалось выше, можно однозначно задать трехчленным символом $S/H'/H$ ([11, 12]).

Второй способ классификации P-симметрий также не лишен определенных недостатков. Во-первых, при $P \simeq C_6 (=C_3 \times C_2)$ различались 6-симметрия и (3,2)-симметрия* ([10]), а в предложенной классификации они совпадают. Во-вторых, этот способ классификации не позволяет различать (2, 2)-симметрию (двукратную антисимметрию) ([3, 10]), (2')-симметрию (двуцветную антисимметрию Поли) ([4, 10] и четырехцветную нециклическую симметрию в смысле ([14]), дающие разное количество групп при одной и той же порождающей (ср. ([3, 10, 14])). В-третьих, при рассмотрении магнитной симметрии кристаллов ([13]) различались, например, группы вида $2u2v2w$, $2u2'u2'w$, $2u2'2'u$, где изоморфные абелевой группе D_2 группы изменений вектора спина uvw, $uv'w'$ и $u1'$ геометрически трактуются буквально как 222, $2\bar{2}\bar{2} = 2mm$ и $2\bar{1} = 2/m$ при условной замене аксиального вектора полярным; в схеме же P-симметрий по ([10, 11]) они неразличимы. Как видим, классификация ориентационных групп изменений спина сходна с классификацией точечных групп симметрии.

Выделив из всех существенно новых групп магнитной симметрии, приведенных в ([13]), различные группы изменений вектора спина, можно убедиться, что таких групп ровно 32: 11 групп с ориентационными элементами u, v, w, u_3, u_4 и т.п.; 11 групп с теми же ориентационными элементами и операцией инверсии времени R в качестве самостоятельного элемента; 10 групп, где ориентационные элементы u, v, w, u_3, u_4 и т.п. скомбинированы с операцией R, не являющейся самостоятельным элементом. Таким образом, при выводе 598 групп магнитной симметрии кристаллов (32 классических плюс 566 "цветных") В.Е. Найш неявно различал 32 P-симметрии.

Для обозначения этих P-симметрий воспользуемся результатами работ А.В. Шубникова ([15]), в которых среди 32 точечных групп симметрии различались 11 осевых, 11 центральных и 10 планальных. Если 11 осевых групп обобщить с понятием антисимметрии, то получим 11 порождающих (1, 2, 3, 4, 6, 222, 32, 422, 622, 23, 432, реализующих 11 поворотных групп изменений спина), 11 старших ($\underline{1}$, $2\underline{1}$, $3\underline{1}$, $4\underline{1}$, $6\underline{1}$, $222\underline{1}$, $32\underline{1}$, $422\underline{1}$, $622\underline{1}$, $23\underline{1}$, $432\underline{1}$, являющихся реализацией 11 групп изменений спина, в которой элемент R изображается антитождественным преобразованием 1) и 10 младших ($\underline{2}$, $\underline{4}$, $\underline{6}$, $2\underline{2}\underline{2}$, $3\underline{2}$, $4\underline{2}\underline{2}$, $\underline{4}2\underline{2}$, $6\underline{2}\underline{2}$, $\underline{6}2\underline{2}$, $\underline{4}3\underline{2}$, реализующих 10 оставшихся групп изменений спина), а всего 32 осевых группы симметрии и антисимметрии ([15]). Все 11 осевых групп неизоморфны, т.е. различны как абстрактные.

Из всего сказанного следует, что имеющиеся подходы к классификации кристаллографических P-симметрий целесообразно дополнить новым, который назовем г е о м е т р и ч е с к и м. Приписывая точкам как индексы $1, \ldots, p$, так и знаки + или −, различаем: а) $P = P_1 \simeq V$ (осевой точечной кристаллографической группе) – получаем 11 P-симметрий (1-, 2-, 3-, 4-, 6-, (22)-, (32)-, (42)-, (62)-, (23)-, (43)-симметрия); б) $P = P_1 \times \{(+, -)\}$, $P_1 \simeq V$ – получаем еще 11 различных P-симметрий ($\underline{1}$-, $(2\underline{1})$-, $(3\underline{1})$-, $(4\underline{1})$-, $(6\underline{1})$-, $(22\underline{1})$-, $(32\underline{1})$-, $(42\underline{1})$-, $(62\underline{1})$-, $(23\underline{1})$-, $(43\underline{1})$-симметрия); в) $P \simeq V \simeq P_1$, $P \subset P_1 \times \{(+, -)\}$, $P \supset \{(+, -)\}$ – получаем еще 10 новых P-симметрий ($\underline{2}$-, $\underline{4}$-, $\underline{6}$-, $(2\underline{2})$-, $(3\underline{2})$-, $(4\underline{2})$-, $(\underline{4}2)$-, $(6\underline{2})$-, $(\underline{6}2)$-, $(\underline{4}3)$-симметрия). Таким образом, на рассматриваемом пути классификации P-симметрия является $(P_1, 2)$-симметрией – полной или неполной, причем группу P_1 достаточно считать регулярной.

* Т.е. 6-цветная симметрия и 3-цветная антисимметрия по ([2, 5, 6]),

Геометрический подход к классификации кристаллографических P-симметрий приводит ровно к 32 различным P-симметриям, по которым распределяются 598 групп магнитной симметрии по ([13]) (или спиновых по ([12])), что дает возможность увязать эти группы с имеющимися точечными группами P-симметрии, полученными разными авторами. Так, из 566 "цветных" групп магнитной симметрии кристаллов ([12], [13]) те 58, которые скомбинированы только с операцией R (обозначенной $1'$ в ([13])), являются младшими группами 2-симметрии по ([10]), группами смешанной полярности по ([1]) и младшими группами 1-симметрии у нас, а те 130 классов, которые скомбинированы с 11 ориентационными группами изменений спина, являются P_1-полумладшими группами $(P_1, 2)$-симметрии по ([10]), "цветными порождающими" по ([6]), группами криптосимметрии по ([8]) (ср. ([10]), стр. 32) и младшими группами 11 P-симметрий у нас; остальные 378 из 566 являются младшими и полумладшими группами $(P_1, 2)$-симметрии по ([10]), "цветными младшими" по ([6]), а у нас – младшими группами остальных 20 P-симметрий.

Младшие группы установленных нами 32 кристаллографических P-симметрий задаются многочисленным символом $S/(H_0, H_1)/H$. Именно, рассматриваемую группу G заменяем группами G_0 и G_1, получающимися из G при игнорировании либо перемен знаков, либо изменений индексов. Группы G, G_0, G_1 имеют общую классическую порождающую S, а их подгруппы симметрии H, H_0, H_1 связаны условием $H = H_0 \cap H_1$; двучленные символы S/H, S/H_0 и S/H_1 позволяют получить указанный многочленный символ группы G. Иногда многочленный символ группы G вырождается в двучленный (в случаях $H_1 = S$ и $H_0 = S$, соответствующих P_1- и 1-симметриям (ср. ([3], [10])).

Заметим, что антисимметрия и двуцветная симметрия, совпадающие при втором способе классификации P-симметрий, теперь уже различаются и получают наименование 1- и 2-симметрии; аналогично двукратная антисимметрия, двуцветная антисимметрия Поли и четырехцветная нециклическая симметрия в геометрической классификации P-симметрий различаются как $(2\underline{1})$-, $(2\underline{2})$- и (22)-симметрия.

Предложенная нами новая классификация кристаллографических P-симметрий, по всей вероятности, будет способствовать скорейшему завершению вывода пространственных групп магнитной симметрии кристаллов.

Кишеневский государственный университет им. В.И. Ленина

Поступило 20 X 1980

ЛИТЕРАТУРА

[1] *А.В. Шубников*, Симметрия и антисимметрия конечных фигур, М., Изд-во АН СССР, 1951. [2] *Н.В. Белов, Т.Н. Тархова*, Кристаллография, т. 1, в. 1, 4 (1956). [3] *А.М. Заморзаев*, Теория простой и кратной антисимметрии, Кишинев, "Штиинца", 1976. [4] *Г.С. Поли*, Кристаллография, т. 6, в. 1, 109 (1961). [5] *Н.Н. Неронова, Н.В. Белов*, Кристаллография, т. 6, в. 6, 831 (1961). [6] *А.Ф. Палистрант*, Кристаллография, т. 11, в. 5, 707 (1966). [7] *A. Niggli, H. Wondratschek*, Zs. Kristallogr. v. 114, 215 (1960); v 115, 1 (1961). [8] *O. Wittke*, ibid., v. 117, 153 (1962). [9] *B.L. Van der Waerden, J.J. Burckhardt*, ibid., v 115, 231 (1961). [10] *А.М. Заморзаев, Э.И. Галярский, А.Ф. Палистрант*, Цветная симметрия, ее обобщения и приложения, Кишинев, "Штиинца", 1978. [11] *А.М. Заморзаев, И.С. Гуцул, А.П. Лунгу*, В сб.: Исследования по дискретной геометрии, Кишинев, "Штиинца", 1974, стр. 3. [12] *В.А. Копцик, И.Н. Коцев*, Сообщ. ОИЯИ, Р4-8067, Дубна, 1974; там же, Р4-8466, Дубна, 1974. [13] *В.Е. Найш*, Исследование свойств магнетиков с неколлинеарной магнитной структурой, канд. дисс., Свердловск, 1962; Изв. АН СССР, сер.физ., т. 27, № 12, 1496 (1963). [14] *В.А. Копцик, Ж.-Н.М. Кужукеев*, Кристаллография, т. 14, в. 6, 705 (1975). [15] *А.В. Шубников*, там же, т. 10, в. 6, 775 (1965); т. 11, в. 3, 365 (1966).