Весці БДПУ. Серыя 3. 2020. № 4. С. 11–18.

УДК 538.9

СИММЕТРИЯ R-РЕШЕТКИ ТРИГОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ГРУПП ПОДСТАНОВОК

И. А. Лявшук,
магистр природоведческих наук, старший преподаватель кафедры информационных систем и технологий Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

Поступила в редакцию 1.07.20.

UDC 538.9

SYMMETRY OF R-LATTICE OF TRIGONAL CRYSTALS IN PRESENTATION OF THE GROUPS OF SUBSTITUTIONS

I. Liaushuk,
Master of Natural Sciences, Senior Teacher of the Department of Information Systems and Technologies, GrSU named after Yanka Kupala

Received on 1.07.20.

Целью исследования является описание точечной симметрии тригональных кристаллов в представлении групп подстановок. Объектом исследования – точечные группы симметрии тригональных решеток. Предметом исследования – точечные группы кристаллов и их представление группами подстановок. В основной части работы рассмотрены свойства групп подстановок при описании точечных симметрий. Утверждается, что при использовании групп подстановок упрощается расчет последовательности выполнения операций точечной симметрии, а также расчет форм тензоров любого ранга в зависимости от точечной симметрии. Приведена матрица Кэли голоэдрии тригональной решетки. На основе матрицы Кэли группы получены группы гемиэдрии и тетартоэдрии для точечной симметрии тригональных решеток в представлении групп подстановок. Материалы, изложенные в статье, могут быть использованы в области кристаллофизики и материаловедения.

Ключевые слова: кристаллофизическая *(кф)* и кристаллографическая *(кг)* системы, тригональные решетки, точечные группы, метрический тензор.

The objective of the research is the description of pointed symmetry of trigonal crystals in presentation of the groups of substitutions. The object of the research are the pointed groups of symmentry of trigonal lattices. The subject of the research are the pointed groups of crystals and their presentation by the groups of substitutions. The main part of the work considers the properties of the groups of substitutions in description of pointed symmetries. It is stated that in using the groups of substitutes the calculation of the succession of conducting the operations of pointed symmetry as well as the calculation of forms of tensors of any range depending on the pointed symmetry. The article presents Cayley matrix of holohedry of trigonal lattice. On the base of Cayley matrix the groups of hemihedry and tetrartohedry for the pointed symmetry of trigonal lattices in presentation of the groups of substitutes are obtained. The materials presented in the article can be used in the sphere of crystallography and material studies.

Keywords: crystallophysical and crystallographical systems, trigonal lattices, pointed groups, metric tensor.

Введение. Тригональные кристаллы могут описываться решетками с ячейками двух типов. Двумя кристаллографическими базисами: *R*- и *H*-установки. *R*-базис определен ячейкой с параметрами $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma$, то есть ячейка имеет форму ромбоэдра, следовательно, говорится об *R*-установке координатных осей. Для *H*-базиса ячейка описывается параметрами $a = b$, c, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, такие же как в гексагональных решетках. В любом случае в тригональных решетках возможны точечные группы $3(3), \bar{3}(6), 32(6), 3m(6), \bar{3}m(12)$ [1, 2]. В скобках указаны порядки групп.

Положение атомов в ячейке кристалла можно описать в двух координатных системах: кристаллографической (*кг*) и кристаллофизической (*кф*). Связь между (*кг*) и (*кф*) системами осуществляется по правилу [3]:

$$\left|X\right|_{кф} = \left|M\right|\left|X\right|_{кг};\ \left|X\right|_{кг} = \left|M\right|^{-1}\left|X\right|_{кф}, \qquad (1)$$

где $|M|_{кф}$ и $\left|M\right|^{-1}_{кг}$ – прямой и обратный метрические тензоры соответственно.

Решетки тригональных кристаллов. Если ось $x_{кг}$ совпадает по направлению с осью $x_{кф}$, ось $y_{кг}$ лежит в плоскости $(xy)_{кф}$, где *(кф)* – индекс кристаллофизической (декартовой) системы координат [4], то: $|M| = \begin{vmatrix} a & b\cdot\cos\gamma & c\cdot\cos\beta \\ 0 & b\cdot\sin\gamma & c\cdot\dfrac{\cos\alpha-\cos\beta\cdot\cos\gamma}{\sin\gamma} \\ 0 & 0 & \dfrac{c\cdot r}{\sin\gamma} \end{vmatrix}$.

В этом случае для гексагональной решетки и *H*-установки тригональной ячейки прямой и обратный метрические тензоры примут вид:

$$|M|_H = \begin{vmatrix} a & -\dfrac{a}{2} & 0 \\ 0 & \dfrac{a\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix},\quad |M|_H^{-1} = \begin{vmatrix} \dfrac{1}{a} & \dfrac{\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & \dfrac{2\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{c} \end{vmatrix}. \tag{2}$$

Для *R*-решетки: ось $z_{кф}$ совпадает с осью 3 в тригональном кристалле, ось $x_{кф}$ лежит в плоскости $(xz)_{кф}$. Метрический тензор *R*-установки примет вид:

$$M_R = \begin{vmatrix} \dfrac{2\sqrt{3}}{3}a\sin{}^{\alpha}\!/_{2} & -\dfrac{\sqrt{3}}{3}a\sin{}^{\alpha}\!/_{2} & -\dfrac{\sqrt{3}}{3}a\sin{}^{\alpha}\!/_{2} \\ 0 & a\sin{}^{\alpha}\!/_{2} & -a\sin{}^{\alpha}\!/_{2} \\ a\left[1-\dfrac{4}{3}\sin^2{}^{\alpha}\!/_{2}\right]^{1/2} & a\left[1-\dfrac{4}{3}\sin^2{}^{\alpha}\!/_{2}\right]^{1/2} & a\left[1-\dfrac{4}{3}\sin^2{}^{\alpha}\!/_{2}\right]^{1/2} \end{vmatrix}. \tag{3}$$

Обратный метрический тензор:

$$M_R^{-1} = \begin{vmatrix} \dfrac{\sqrt{3}}{3a\sin{}^{\alpha}\!/_{2}} & 0 & \dfrac{1}{3a\left[1-\dfrac{4}{3}\sin^2{}^{\alpha}\!/_{2}\right]^{1/2}} \\ -\dfrac{\sqrt{3}}{6a\sin{}^{\alpha}\!/_{2}} & \dfrac{1}{2a\sin{}^{\alpha}\!/_{2}} & \dfrac{1}{3a\left[1-\dfrac{4}{3}\sin^2{}^{\alpha}\!/_{2}\right]^{1/2}} \\ -\dfrac{\sqrt{3}}{6a\sin{}^{\alpha}\!/_{2}} & -\dfrac{1}{2a\sin{}^{\alpha}\!/_{2}} & \dfrac{1}{3a\left[1-\dfrac{4}{3}\sin^2{}^{\alpha}\!/_{2}\right]^{1/2}} \end{vmatrix}. \tag{4}$$

Матричное представление операции точечной симметрии в *кф*-системе [3]:

$$|C| = \begin{vmatrix} \cos xx' & \cos xy' & \cos xz' \\ \cos yx' & \cos yy' & \cos yz' \\ \cos zx' & \cos zy' & \cos zz' \end{vmatrix} = \left|C_{ij}\right|, \tag{5}$$

где x_i, x_j – направление координатных осей до и после выполнения точечной операции симметричного преобразования. Если исходная точка задана в *кг*-системе и требуется найти ей гомологичную также в *кг*-системе, то необходимо использовать условие [3]:

$$|X_i|_{кг} = |M|^{-1}|C||M||X_j|_{кг}, \tag{6}$$

где *i*, *j* = 1, 2, 3
или

$$|X|_{кг} = |K||X|_{кг}, \tag{7}$$

где |*K*| – матричное представление операции симметрии в *кг*-системе.
Рассмотрим группу вращения 3. Поворот вокруг этой оси в *H*-установке:

$$|3| = \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \tag{8}$$

Так как условия (3) и (4) приемлемы для любого α, то перейдем от матрицы 3 в *H*-системе к матрице 3 в *R*-системе: $|3|_R = |M|_R^{-1}|3|_{кф}|M|_R$,

$$\begin{vmatrix} \frac{2\sqrt{3}}{3a} & 0 & \frac{\sqrt{6}}{6a} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3a} & 1 & \frac{\sqrt{6}}{6a} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3a} & -1 & \frac{\sqrt{6}}{6a} \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \frac{\sqrt{3}a}{3} & -\frac{\sqrt{3}a}{6} & -\frac{\sqrt{3}a}{6} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{6}a}{3} & \frac{\sqrt{6}a}{3} & \frac{\sqrt{6}a}{3} \end{vmatrix} =$$

$$= |M|_R^{-1} \times \begin{vmatrix} -\frac{\sqrt{3}a}{6} & -\frac{\sqrt{3}a}{3} & \frac{\sqrt{3}a}{3} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}a & \sqrt{\frac{2}{3}}a & \sqrt{\frac{2}{3}}a \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = K_R. \tag{9}$$

В этом случае матрица-генератор группы (3_R) в *кг*-базисе имеет вид:

$$|K|_R = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Плоскость отражения в *кг*-базисе должна проходить через ось 3, то есть через ось $z_{кг}$, совпадающей с $z_{кф}$. В *кф*-базисе эта плоскость имеет в матричном представлении вид:

$$m_{xz} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

При переходе к *кг*-базису используется условие (9). То есть:

$$m_{кг} = |M|^{-1} m_{xz} |M| = \begin{vmatrix} \frac{2\sqrt{3}}{3} & 0 & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & 1 & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & -1 & \frac{\sqrt{6}}{6} \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \frac{\sqrt{3}}{3} & -\frac{\sqrt{3}}{6} & -\frac{\sqrt{3}}{6} \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{6}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{3} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}. \qquad (10)$$

Плоскость m взята как плоскость, проходящая через оси $x_{кф}$, $z_{кф}$. При анализе ориентации оси 2 в тригональной решетке необходимо учитывать, что она должна быть нормальной к m. То есть, необходимо брать ось $2_{кф}$, идущей вдоль оси $y_{кф}$. Матрица этого симметричного преобразования в *кф*-системе имеет вид: $|2y|_{кф} = \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{vmatrix}$. Следовательно, матричное представление поворота вокруг оси $y_{кф}$ в *кг*-базисе имеет вид: $|2|_{кг} = |M|^{-1} |2|_{кф} |M|$. При a = 1.

$$2_{кг} = \begin{vmatrix} \frac{2\sqrt{3}}{3} & 0 & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & 1 & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & -1 & \frac{\sqrt{6}}{6} \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{\sqrt{3}}{6} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{6}}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{3} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{vmatrix}. \qquad (11)$$

Очевидно, что матрица поворота вокруг инверсионной оси $\bar{3}$ имеет вид :

$$\bar{3}_{кг} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{vmatrix}. \qquad (12)$$

Таким образом, генераторы групп тригональных решеток в матричном представлении и в представлении групп подстановок имеют вид (таблица 1):

Таблица 1 – Генераторы точечных групп тригональных кристаллов в матричном представлении (*М*) и в представлении групп подстановок (*П*)

Точечная группа	М	П
3	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{vmatrix}$
$\bar{3}$	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \bar{3} & \bar{1} & \bar{2} \\ 1 & 2 & 3 \end{vmatrix}$

Точечная группа	М	П
$3m$	$\begin{vmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1&3&2\\1&2&3\end{vmatrix}$
32	$\begin{vmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}\\0&\bar{1}&0\end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\bar{1}&\bar{3}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix}$
$\bar{3}m$	$\begin{vmatrix}0&0&\bar{1}\\\bar{1}&0&0\\0&\bar{1}&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix}\bar{3}&\bar{1}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1&3&2\\1&2&3\end{vmatrix}$

Голоэдрическая группа $\bar{3}m$ имеет порядок 12. Гемиэдрические группы $\bar{3}, 32, 3m$ характеризуются порядком 6. Тетартоэдрическая группа 3 с порядком 3. Как показано в работе [5], матрицы точечных групп всех решеток, кроме *H*-решетки три- и гексагональной, описываются матрицами, у которых элементами являются 0 и ± 1, причем ± 1 встречается в каждой строке и в каждом столбце только один раз. Например, группа 3 в матричном представлении для *кг*-базиса имеет вид:

$$\begin{vmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{vmatrix}. \tag{13}$$

Если записать номера элементов, равных единице, то получим группу подстановок: $\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix}$.

Бинарную операцию «перемножение» элементов проиллюстрируем на примере группы 3: $\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}\times\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}$.

Над элементом (1) нижней строки в левой матрице стоит число – 3. В правой матрице над цифрой (3) стоит – 1, ее надо записать в матрице, разместив над цифрой 1. Аналогично рассчитываются остальные элементы строки: $\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}\times\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix}$. Эти три матрицы являются отражением, или группами подстановок, симметрии точечной группы 3.

Группа подстановок и матрица Кэли (тригональная сингония).

Группа 3 имеет вид: $\underset{e}{\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix}}, \underset{2}{\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}}, \underset{3}{\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}},$

где *e* – единичный элемент группы.

Таблица 2 – Матрица Кэли группы 3 (I, II – «сомножители»)

II / I	**e**	**2**	**3**
E	e	2	3
2	2	3	e
3	3	e	2

Группа $\bar{3}$. Матричное представление этой группы и ее группа подстановок получается, если элементы группы 3, которая является подгруппой группы $\bar{3}$, перемножить на матрицу «отражения» в центре симметрии: $\left|C_{ij}\right| = \delta_{ij}$ – «дельта-функция», то есть:

$$\begin{matrix} \begin{vmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\bar{1}&0&0\\0&\bar{1}&0\\0&0&\bar{1}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&\bar{1}\\\bar{1}&0&0\\0&\bar{1}&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&\bar{1}&0\\0&0&\bar{1}\\\bar{1}&0&0\end{vmatrix} \\ \underset{e}{\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{2}{\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{3}{\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{4}{\begin{vmatrix}\bar{1}&\bar{2}&\bar{3}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{5}{\begin{vmatrix}\bar{3}&\bar{1}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{6}{\begin{vmatrix}\bar{2}&\bar{3}&\bar{1}\\1&2&3\end{vmatrix}} \end{matrix}. \quad (14)$$

Если при взаимодействии элементов групп подстановок знак «минус» встречается один раз, то в результате этот знак сохраняется, если встречается знак «минус дважды», то необходимо брать знак «плюс», который не указывается, например:

$$2\cdot 5 = \begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\bar{3}&\bar{1}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix} = \begin{vmatrix}\bar{2}&\bar{3}&\bar{1}\\1&2&3\end{vmatrix}; 5\cdot 6 = \begin{vmatrix}\bar{3}&\bar{1}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\bar{2}&\bar{3}&\bar{1}\\1&2&3\end{vmatrix} = \begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix}. \quad (15)$$

Таблица 3 – Матрица Кэли группы $\bar{3}$

I \ II	e	2	3	4	5	6
e	e	2	3	4	5	6
2	2	3	e	5	6	4
3	3	e	2	6	4	5
4	4	5	6	e	2	3
5	5	6	4	2	3	e
6	6	4	5	3	e	2

Группа 3m:

$$\begin{matrix} \begin{vmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{vmatrix} \\ \underset{e}{\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{2}{\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{3}{\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{4}{\begin{vmatrix}1&3&2\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{5}{\begin{vmatrix}2&1&3\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{6}{\begin{vmatrix}3&2&1\\1&2&3\end{vmatrix}} \end{matrix}. \quad (16)$$

Группа 32:

$$\begin{matrix} \begin{vmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}\\0&\bar{1}&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&\bar{1}&0\\\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&\bar{1}\\0&\bar{1}&0\\\bar{1}&0&0\end{vmatrix} \\ \underset{e}{\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{2}{\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{3}{\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{4}{\begin{vmatrix}\bar{1}&\bar{3}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{5}{\begin{vmatrix}\bar{2}&\bar{1}&\bar{3}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{6}{\begin{vmatrix}\bar{3}&\bar{2}&\bar{1}\\1&2&3\end{vmatrix}} \end{matrix}. \quad (17)$$

Аналогичным образом рассчитывается матрица бинарного взаимодействия элементов групп: 3*m*, 32.

Группа $\bar{3}m$:

$$\begin{vmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\bar{1}&0&0\\0&\bar{1}&0\\0&0&\bar{1}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&\bar{1}\\\bar{1}&0&0\\0&\bar{1}&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&\bar{1}&0\\0&0&\bar{1}\\\bar{1}&0&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{vmatrix}$$

$$\underset{e}{\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{2}{\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{3}{\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{4}{\begin{vmatrix}\bar{1}&\bar{2}&\bar{3}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{5}{\begin{vmatrix}\bar{3}&\bar{1}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{6}{\begin{vmatrix}\bar{2}&\bar{3}&\bar{1}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{7}{\begin{vmatrix}1&3&2\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{8}{\begin{vmatrix}2&1&3\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{9}{\begin{vmatrix}3&2&1\\1&2&3\end{vmatrix}}$$

$$\begin{vmatrix}\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}\\0&\bar{1}&0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&\bar{1}&0\\\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&0&\bar{1}\\0&\bar{1}&0\\\bar{1}&0&0\end{vmatrix}$$

$$\underset{10}{\begin{vmatrix}\bar{1}&\bar{3}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{11}{\begin{vmatrix}\bar{2}&\bar{1}&\bar{3}\\1&2&3\end{vmatrix}}\underset{12}{\begin{vmatrix}\bar{3}&\bar{2}&\bar{1}\\1&2&3\end{vmatrix}}$$

Таблица 4 – Матрица Кэли для группы с наивысшей симметрией $\bar{3}m$

II / I	e	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
e	e	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
2	2	3	e	5	6	4	8	9	7	11	12	10
3	3	e	2	6	4	5	9	7	8	12	10	11
4	4	5	6	e	2	3	10	11	12	7	8	9
5	5	6	4	2	3	e	11	12	10	8	9	7
6	6	4	5	3	e	2	12	10	11	9	7	8
7	7	9	8	10	12	11	e	3	2	4	6	5
8	8	7	9	11	10	12	2	e	3	5	4	6
9	9	8	7	12	11	10	3	2	e	6	5	4
10	10	12	11	7	9	8	4	6	5	e	3	2
11	11	10	12	8	7	9	5	4	6	2	e	3
12	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	e

Из таблицы 4 видны все подгруппы группы $\bar{3}m$.

Таблица 5 – Описание элементов точечных групп тригональных кристаллов в представлении групп подстановок

Элементы точечной группы $\bar{3}m$	Группы подстановок
3	$\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix}$
$\bar{1}$	$\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}\bar{1}&\bar{2}&\bar{3}\\1&2&3\end{vmatrix}$
$\bar{3}$	$\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}\bar{1}&\bar{2}&\bar{3}\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}\bar{3}&\bar{1}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}\bar{2}&\bar{3}&\bar{1}\\1&2&3\end{vmatrix}$
2	$\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}\bar{1}&\bar{3}&\bar{2}\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}\bar{2}&\bar{1}&\bar{3}\\1&2&3\end{vmatrix}$
m	$\begin{vmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}1&3&2\\1&2&3\end{vmatrix},\begin{vmatrix}2&1&3\\1&2&3\end{vmatrix}$

Заключение. Тригональные решетки характеризуются наличием осей 3 и описываются пятью точечными группами: $\bar{3}m$ (голоэдрия), $\bar{3}$, 3*m*, 32 (гемиэдрия), 3 (тетартоэдрия). Ячейка имеет два параметра: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma$. Это *R*-установка (ромбическая). Встречается и *H*-установка (гексагональная). В этом случае $a = b, c$; $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$. Матрица-генератор группы в ортогональных координатах имеет вид $|C| = (\cos x_i x_j)$, где x_i, x_j – координатные оси декартовой системы до и после точечного преобразования операцией симметрии. Показано, что *R*-установка в кристаллографической системе описывается в матричном представлении косинусами углов ± 1, 0. Причем в каждой строке и в каждом столбце ± 1 встречается только один раз. В этом случае предлагается записывать точечные группы тригональных решеток в представлении групп подстановок. Показано, что группы подстановок при описании точечных групп с элементами ± 1 и 0 более компактны, по сравнению с их матричным представлением, позволяют рассчитывать формы тензоров физических свойств (особенно при их высоких рангах), с меньшими затратами времени. *F*-решетки с *H*-установками (гекса- и тригональными) при переходе к *кг*-системе не позволяют получать матрицы с элементами ± 1, 0 по строкам и столбцам. Методика описания точечных симметрий группами подстановок может быть использована в кристаллофизике при анализе объектов с размерностями больше трех.

Литература

1. *Поклонский, Н. А.* Точечные группы симметрии : учеб. пособие / Н. А. Поклонский. – Минск : БГУ, 2003. – 222 с.
2. *Андреев, А. И.* Фундаментальная теория классов симметрии кристаллов / А. И. Андреев // Мир современной науки. – М. : Перо, 2015. – № 1. – С. 10–16.
3. *Лиопо, В. А.* Матричная кристаллография : учеб. пособие / В. А. Лиопо. – Гродно : ГрГУ, 1998. – 78 с.
4. *Лиопо, В. А.* Гексагональная решетка в четырехмерном пространстве / В. А. Лиопо // Весці Нацыянальнай Акадэміі навук Беларусі. Сер. фізіка-матэматычных навук. – 1999. – № 1. – С. 103–106.
5. *Вайнштейн, В. Б.* Современная кристаллография / В. Б. Вайнштейн. – М. : Наука, 1979. – Т. 1. – 384 с.

References

1. *Poklonskij, N. A.* Tochechnye gruppy simmetrii : ucheb. posobie / N. A. Poklonskij. – Minsk : BGU, 2003. – 222 s.
2. *Andreev, A. I.* Fundamental'naya teoriya klassov simmetrii kristallov / A. I. Andreev // Mir sovremennoj nauki. – M. : Pero, 2015. – № 1. – S. 10–16.
3. *Liopo, V. A.* Matrichnaya kristallografiya : ucheb. posobie / V. A. Liopo. – Grodno : GrGU, 1998. – 78 s.
4. *Liopo, V. A.* Geksagonal'naya reshetka v chetyrekhmernom prostranstve / V. A. Liopo // Vesci Nacyyanal'naj Akademii navuk Belarusi. Ser. fizika-matematychnyh navuk. – 1999. – № 1. – S. 103–106.
5. *Vajnshtejn, V. B.* Sovremennaya kristallografiya / V. B. Vajnshtejn. – M. : Nauka, 1979. – T. 1. – 384 s.