

第三章 晶体的对称性理论

3.1 对称性概念，对称动作和对称要素

3.2 晶体的宏观对称性及32个点群

3.3 晶体的微观对称性及230个空间群

什么是对称性?

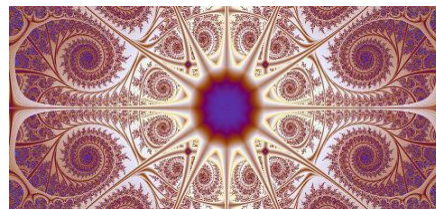
自然界中的对称性



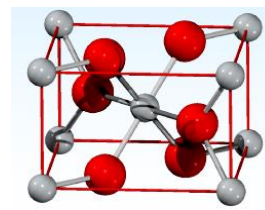
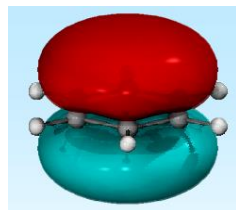
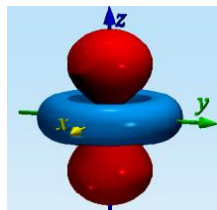
建筑中的对称性



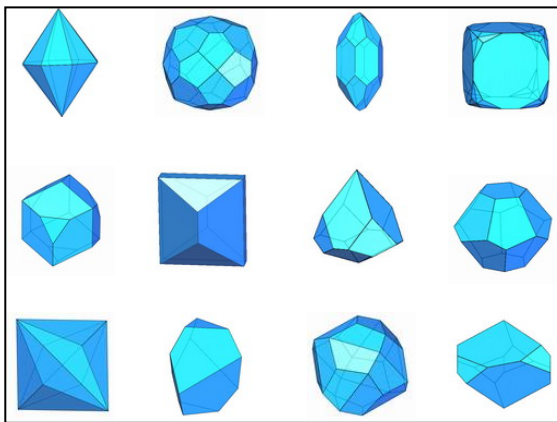
生活中的对称性



微观世界中的对称性



什么是对称性？



生活当中许多物品具有一定的对称性；

◆晶体的外形和各种性质常具有一定的对称性；

◆选取单位的外形对称性（宏观对称性）应能充分反应空间点阵的对称性……

如何定义“**对称**”这一概念？

3.1 对称性概念，对称动作和对称要素

3.1.1 基本概念

1、等同图形：几何学上，将具有对称形象的物体的各部分称为等同图形。

等同图形分为相等图形和不相等图形

2、相等图形：完全迭合的等同图形，或称全等图形。

例如：花瓣、雪花

3、不相等图形：互成镜像的等同而不相等图形。

例如：左右手

4、对称图形：由两个或两个以上的等同图形构成，并且很有规律地重复着。对称图形中既包括相等图形又包括不相等图形。

5、对称动作：将对称图形中某一部分中的任意点带到一个等同部分中的相应点上去，使新图形与原图形重合的动作。

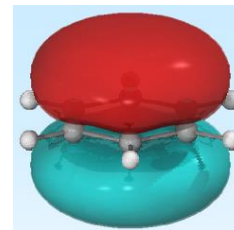
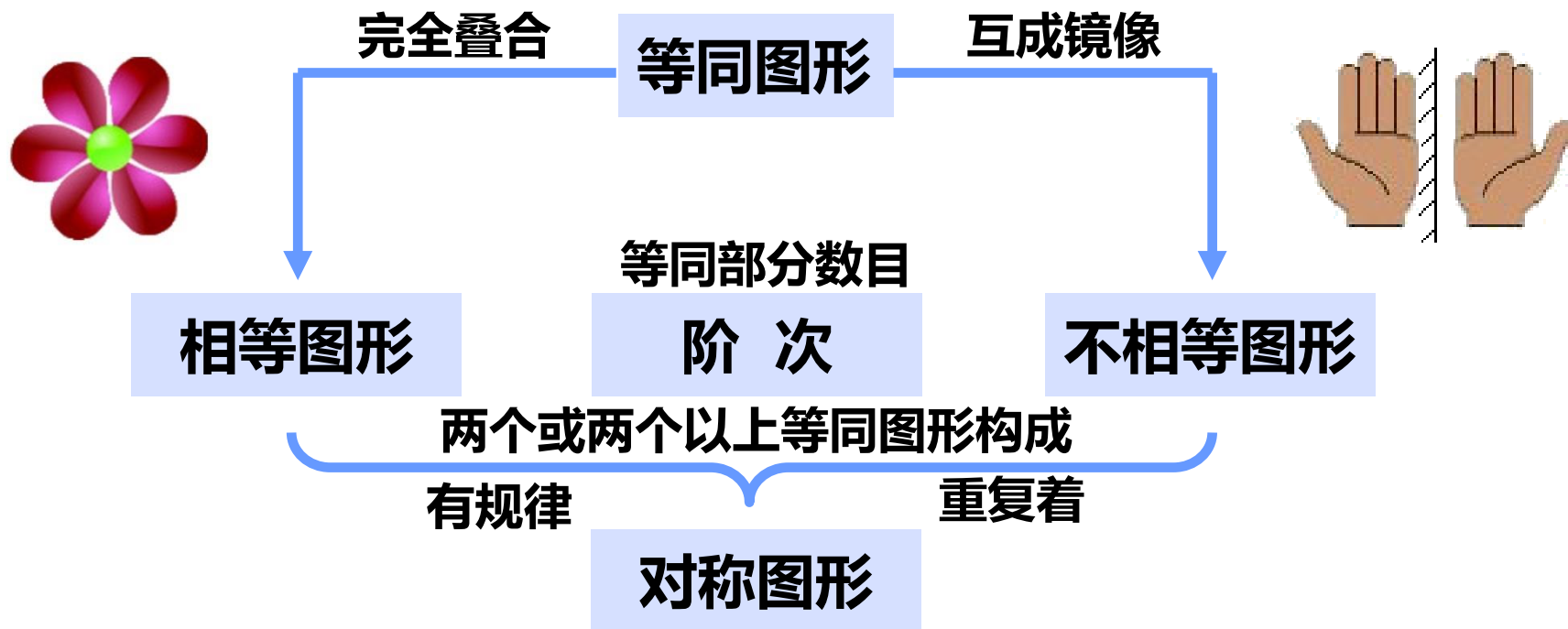
如：旋转、反映、倒反、平移.....

6、对称要素：进行对称动作时，必须依据的几何元素，如点、线、面等。

7、对称性：物体中各等同部分在空间排列的特殊规律性。

8、阶 次：对称图形中所包括的等同部分的数目，它代表着对称程度的高低。

3.1 对称性概念，对称动作和对称要素



3.1 对称性概念，对称动作和对称要素

举例：三叶小风扇

1、是否对称图形？

是

2、等同图形？

如图分割

3、对称动作？

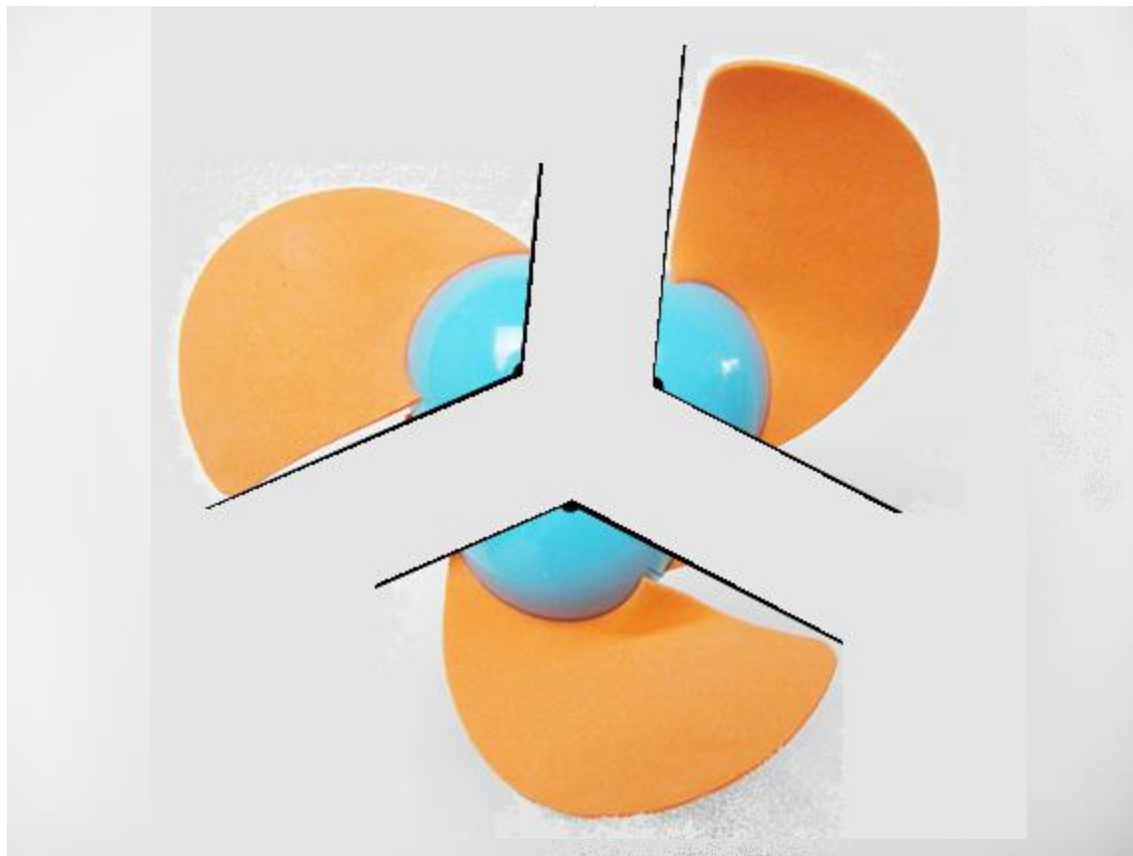
旋转 120°

4、对称要素？

旋转轴（直线）

3、对称图形阶次？

3

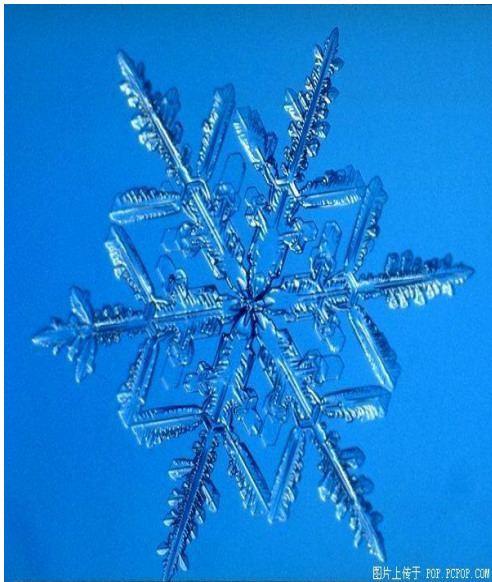
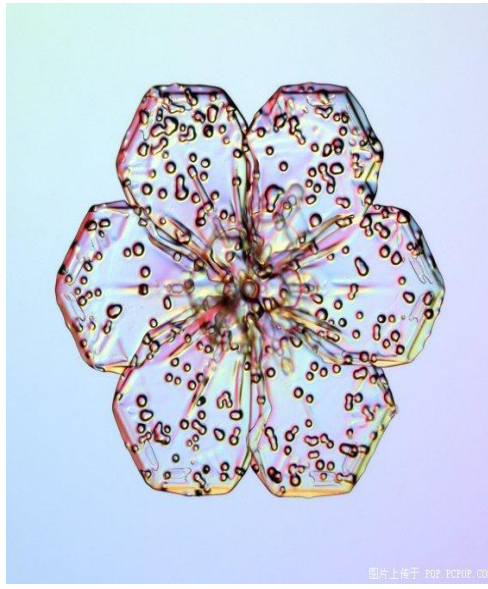


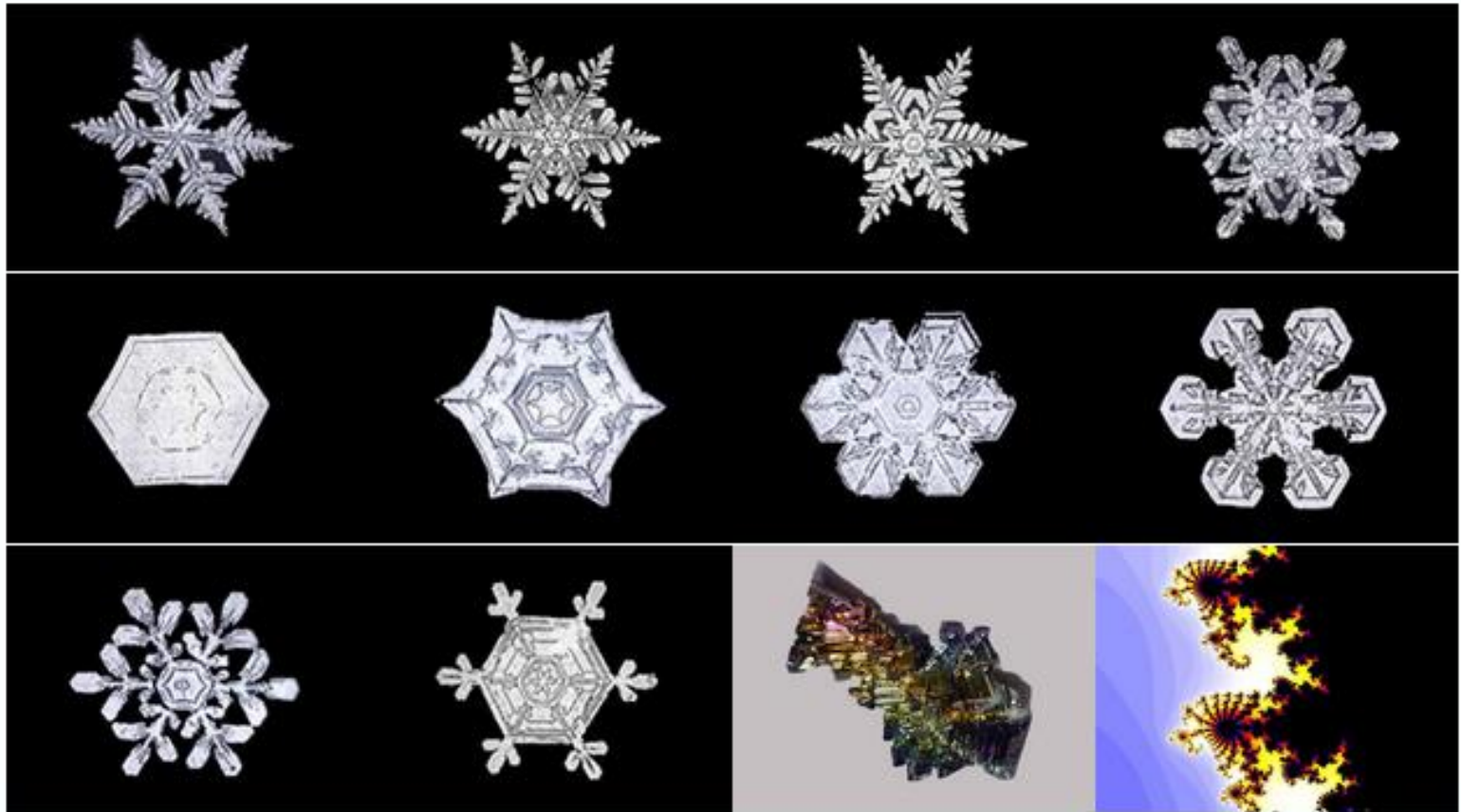
3.1 对称性概念，对称动作和对称要素

举例：吉大唐敖庆楼

- 1、是否对称图形？
是
- 2、等同图形？
如图分割
- 3、对称图形阶次？
2
- 4、对称动作？
反映
- 5、对称要素？
反映面







雪花

雪花

枝晶

分形

天然晶体，是在大自然中自发结晶形成的，一提起天然晶体，您是否会想到雪花？雪花晶体就像是“仙女散花”般地从天而落，给人们带来无限的遐想。可以说，雪花是人们最熟悉的天然晶体之一，有着变化万千的美丽的形态。而雪花作为晶体，则是枝晶枝晶的典型例子。1611年开普勒

(Kepler) 发表 **《论六角形雪花》** 时，对雪花形态进行科学思考。他通过观察与对比，发现所有雪花形态总体上都是六方对称的，但每片雪花形态细节变化多样。他企图弄清为什么雪花会成六方对称的，但由于当时没有测试晶体结构的手段，这个秘密没有被解开。

雪花的六角对称的形态有多种多样的不同图案形状，雪花的枝晶具有一些非平衡系统都具有分维特点。仪态万千的雪花是纯粹天然的杰作，**每一朵雪花内，都有一粒灰尘作为其晶体生长的种子。它们的生长，有着非平衡态生长的印记。**

举例：雪花图案：六个角。

对称图形：雪花 等同图形：一个角，相等图形

阶次：6 对称要素：直线 对称动作：旋转



早在公元前的西汉时代，《韩诗外传》中就指出：
“凡草木花多五出，雪花独六出。” 雪的基本形状是六角形。但在不同的环境下，却可表现出各种样的形态。

世界上有不少雪花图案收集者，他们收集了各种雪花图案。有人花了毕生精力拍摄了成千上万张雪花照片，发现将近有六千种彼此不同的雪花，但他死前认为这不过是大自然落到他手中的少部分雪花而已。以致于有人说没有两朵大小和形状完全相同的雪花。

([http://news.xinhuanet.com/forum/2005-01/30/content_2519823. htm](http://news.xinhuanet.com/forum/2005-01/30/content_2519823.htm))

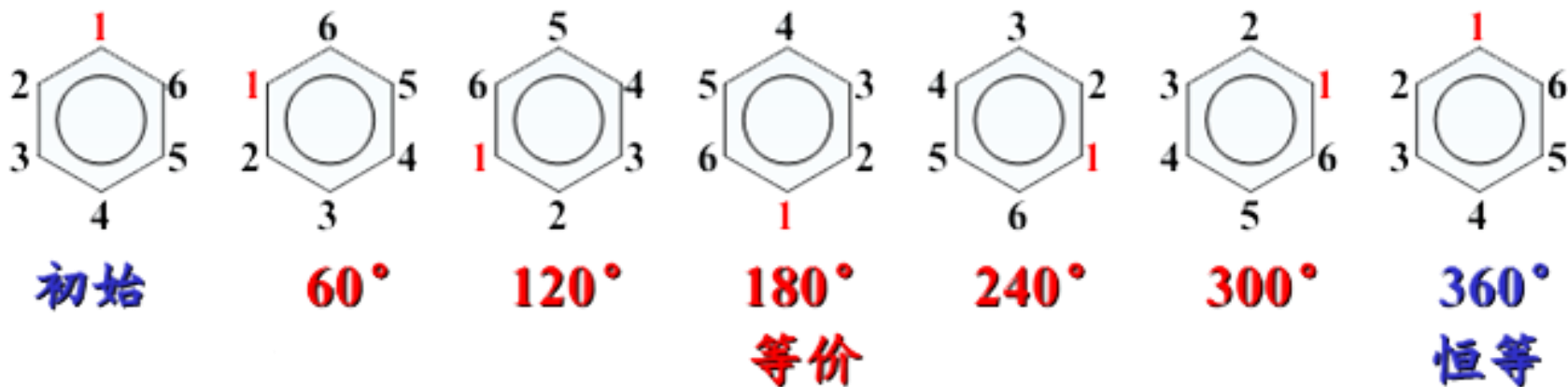
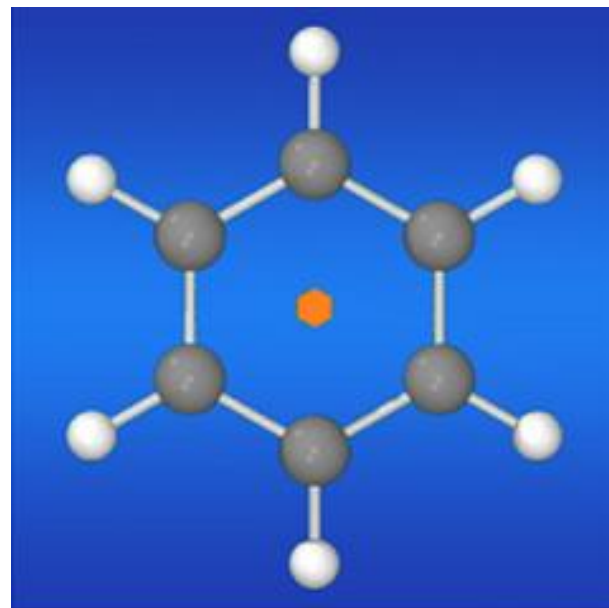
§3.1 对称性概念、对称动作和对称要素

3.1.2 对称动作和对称要素

(1) 对称动作

将对称图形中某一部分中的任意点带到一个等同部分中的相应点上去，**使新图形与原图形重合的动作**

动作结果：旋转、反映、倒反、平移.....



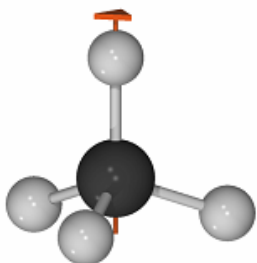
§3.1 对称性概念、对称动作和对称要素

(2) 对称要素

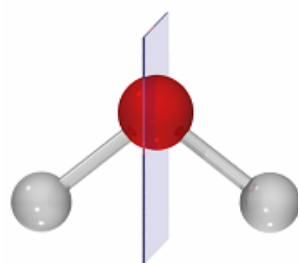
进行对称动作时，必须依据的几何元素，如：点、线、面等称为对称要素

对称要素和对称动作可以分为七类：

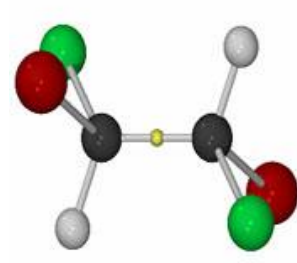
(i) 旋转轴 n



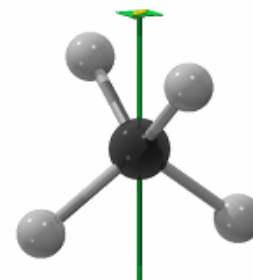
(ii) 反映面 m



(iii) 对称中心 i



(iv) 反轴 n

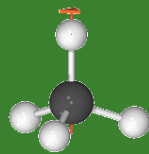


(v) 点阵 T_{mnp}

(vi) 螺旋轴 n_m

(vii) 滑移面 MT

(i) 旋转轴——绕轴旋转 α 角度



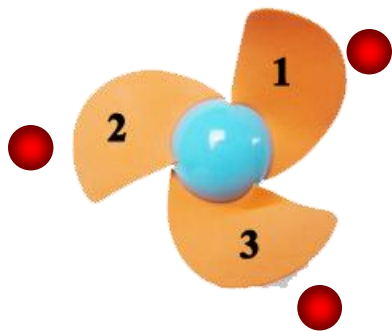
对称动作：旋转， 符号： $L(a)$ ， a 为基转角；

对称要素：旋转轴，符号： $\underline{n}$ （轴次，旋转一周重复次数）；

规律：轴次与阶次相等 $\alpha = \frac{2\pi}{n}$

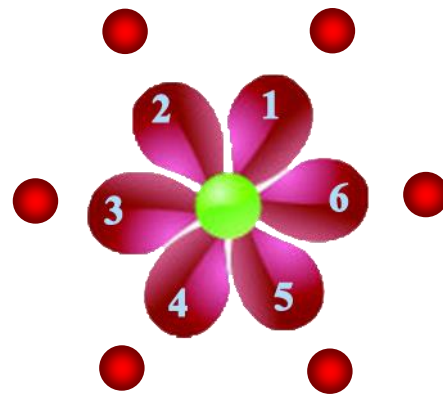
阶 次： n ；

等同图形：旋转只能使相等图形重合



三叶小风扇中有3

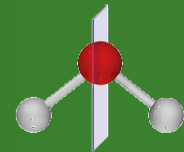
对应的对称动作有： $L(\frac{2\pi}{3})$ 。



小花中有6

对应的对称动作有： $L(\frac{2\pi}{6})$ 。

(ii) 反映面——以此面为镜面，两侧互为镜像



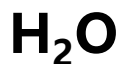
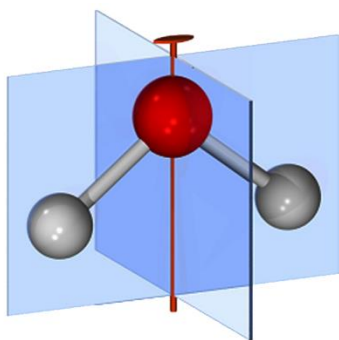
对称动作：反映，符号： M ；

对称要素：反映面，符号： m ；

规律：两个等同部分的对应点之间连线中点必在反映面上。

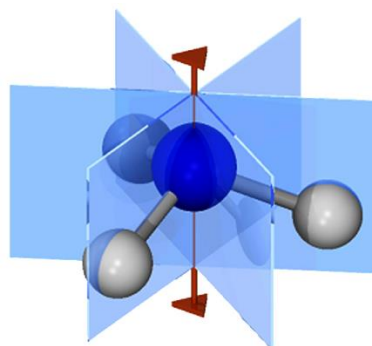
阶 次： 2 ；

等同图形：一次反映只能使左右手图形重合。



水分子有2个 m

对应的对称动作为 M

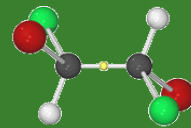


氨分子有3个 m

对应的对称动作为 M

请大家思考：
具有二重旋转轴和具有对称面的对称图形有何区别？

(iii) 对称中心—小孔成像



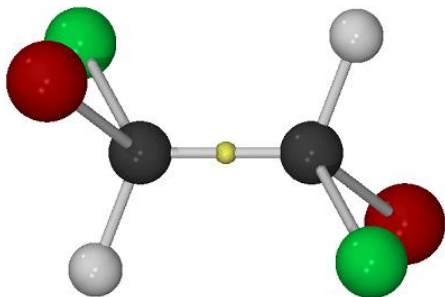
对称动作：倒反，符号： i ;

对称要素：对称中心，符号： i ;

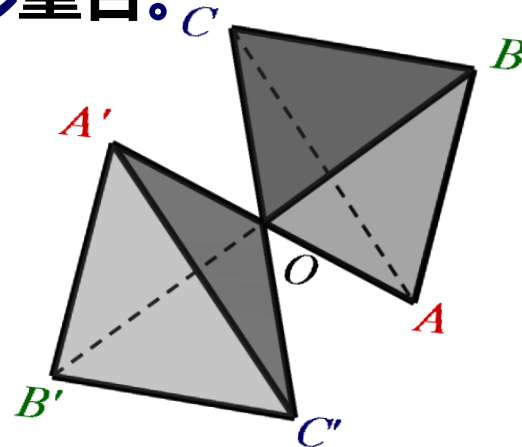
规律：两个等同部分的对应点之间连线的中点必在对称中心上。

阶 次： 2 ;

等同图形：一次倒反只能使左右手图形重合。



具有一个 i
对应的对称动作为 L



具有一个 i
对应的对称动作为 L

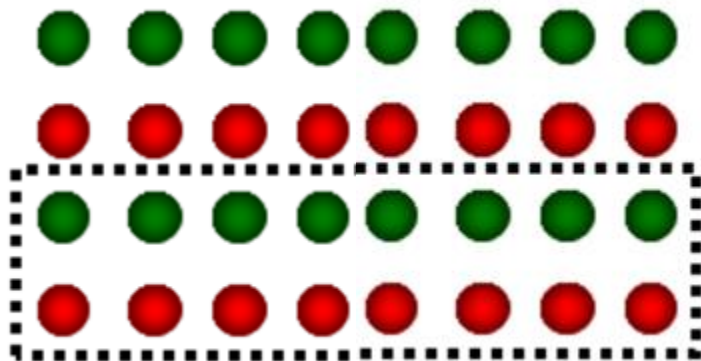
(iv) 点阵——按照点阵中的平移向量移动

对称动作：平移， 符号： T ;
对称要素：点阵， 符号： T_{mnp} ;

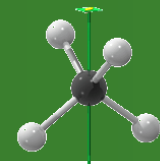
阶 次： ∞ ;

等同图形：平移可使相等图形重合。

例如：每一种三维晶体都有一个 T_{mnp} 。

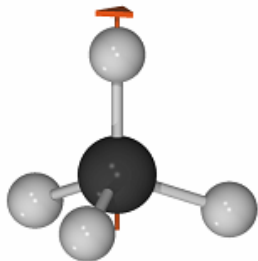


总结



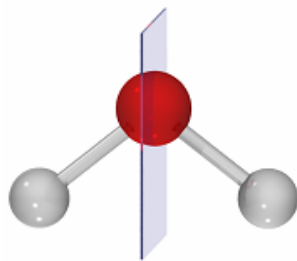
(i) 旋转轴

n



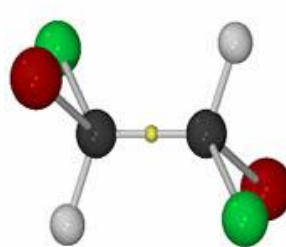
对称动作：**旋转**

(ii) 反映面 m



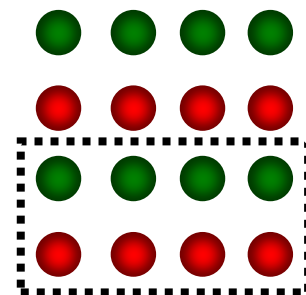
对称动作：**反映**

(iii) 对称中心 i



对称动作：**倒反**

(iv) 点阵 T_{mnp}



对称动作：**平移**

(v) 反轴 $\bar{n}$



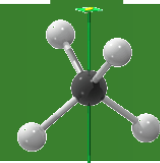
(vi) 螺旋轴 n_m



(vii) 滑移面 MT



(v) 反轴——按轴旋转 α 角，再按轴上某一点倒反

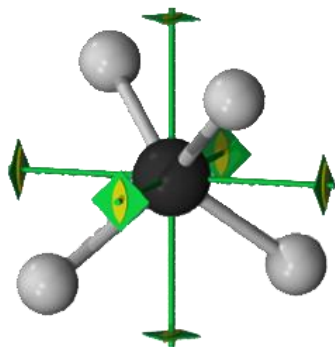


复合动作：通常我们可以理解为是两个或者两个以上的对称动作的一个组合。

旋转轴的轴次与基转角的关系为： $\alpha = \frac{2\pi}{n}$

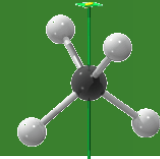
阶 次：如果 n 是偶数，反轴的阶次为 n ；
如果 n 是奇数，反轴的阶次为 $2n$ 。

等同图形：一次旋转倒反只能使左右手图形重合。



甲烷：有1个3

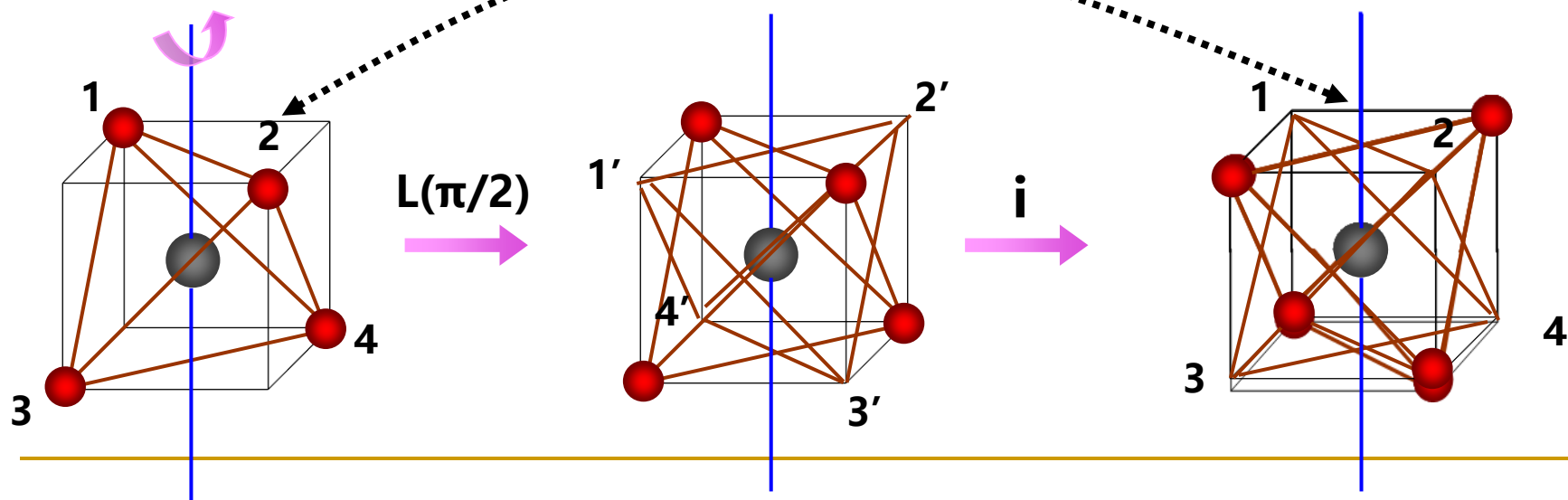
(v) 反轴——按轴旋转 α 角，再按轴上点倒反



例： 甲烷分子：有3个 $\bar{4}$



示例：



(vi) 螺旋轴——先绕轴旋转 α 角，再沿轴向平移 T

对称动作：旋转-平移(复合)， 符号： $L(\alpha)T$ ， α 为基转角；

对称要素：螺旋轴

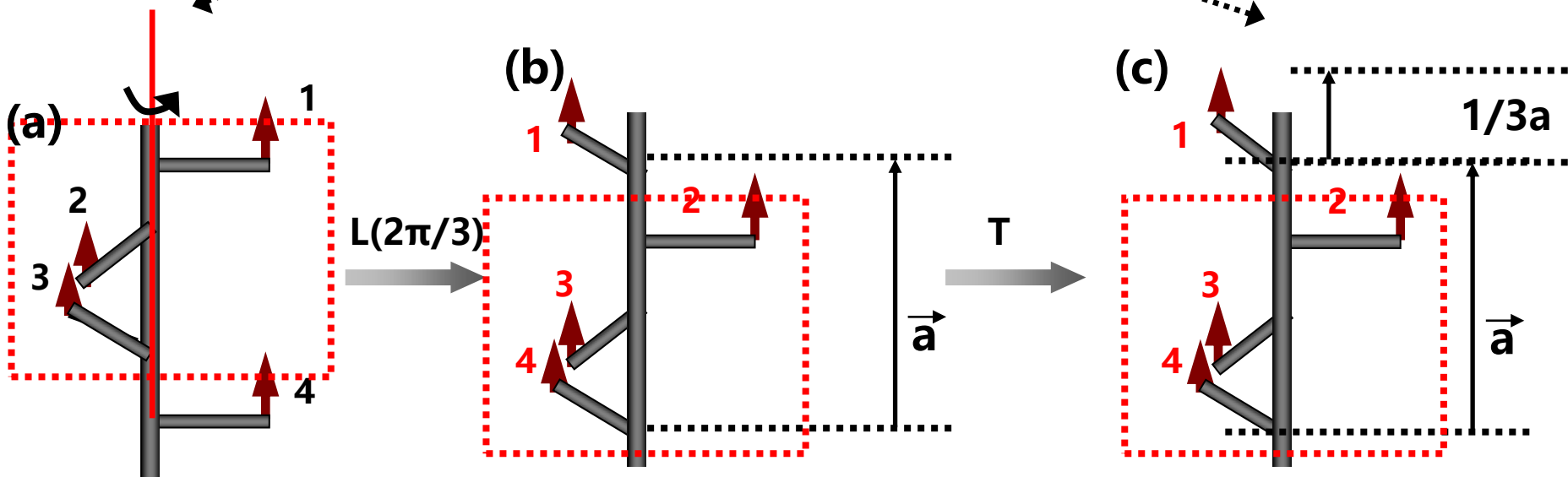
符号： nm ， m 为小于 n 的整数；

旋转轴的轴次与基转角的关系为：

$$\alpha = \frac{2\pi}{n}$$

完全重合

例如：



三重螺旋轴示意图

3_1

(vi) 螺旋轴——先绕轴旋转 α 角，再沿轴向平移 T

示例：三重旋转轴、三重螺旋轴、三重反轴区别

(a)

(b)

(c)

(d)

1. 三重轴(a)是简单的对称动作，三重螺旋轴和三重反轴(b,c,d)都是复合动作。

2. 三重螺旋轴(b)和(c)的区别是平移的距离不同。

3. 三重螺旋轴(b, c)和三重轴(a)都是只能使相等的图形重合，而不能使含左右手的图形重合；而三重反轴是先经过旋转再倒反使图像重合的，只能使不相等(左右手)图形重合，而不能使相等图形重合。

▲ 3

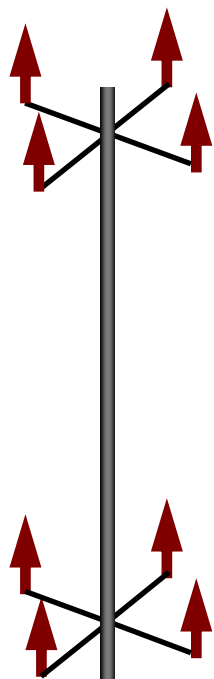
▲ 3_2

▲ 3_1

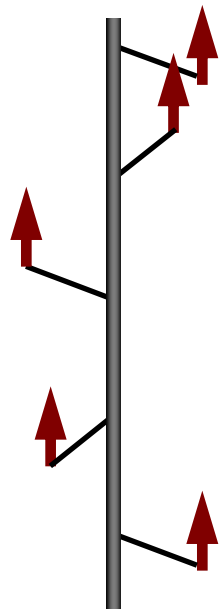
▲ $\bar{3}$

三重旋转轴、三重螺旋轴、三重反轴的示意图

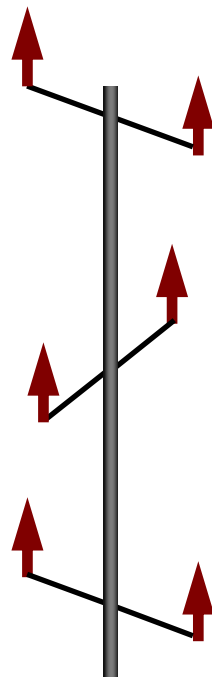
区别 $\underline{4}$ 4_3 4_2 4_1 $\bar{4}$



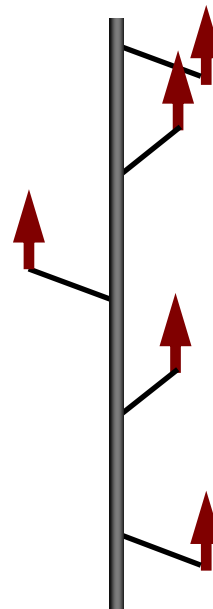
◆ $\underline{4}$



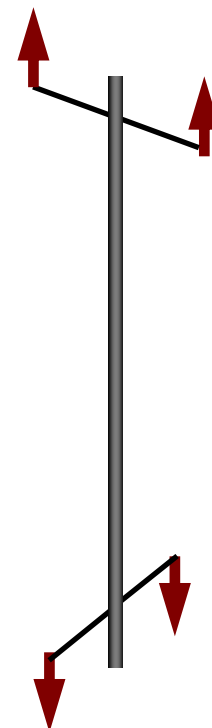
◆ 4_3



◆ 4_2



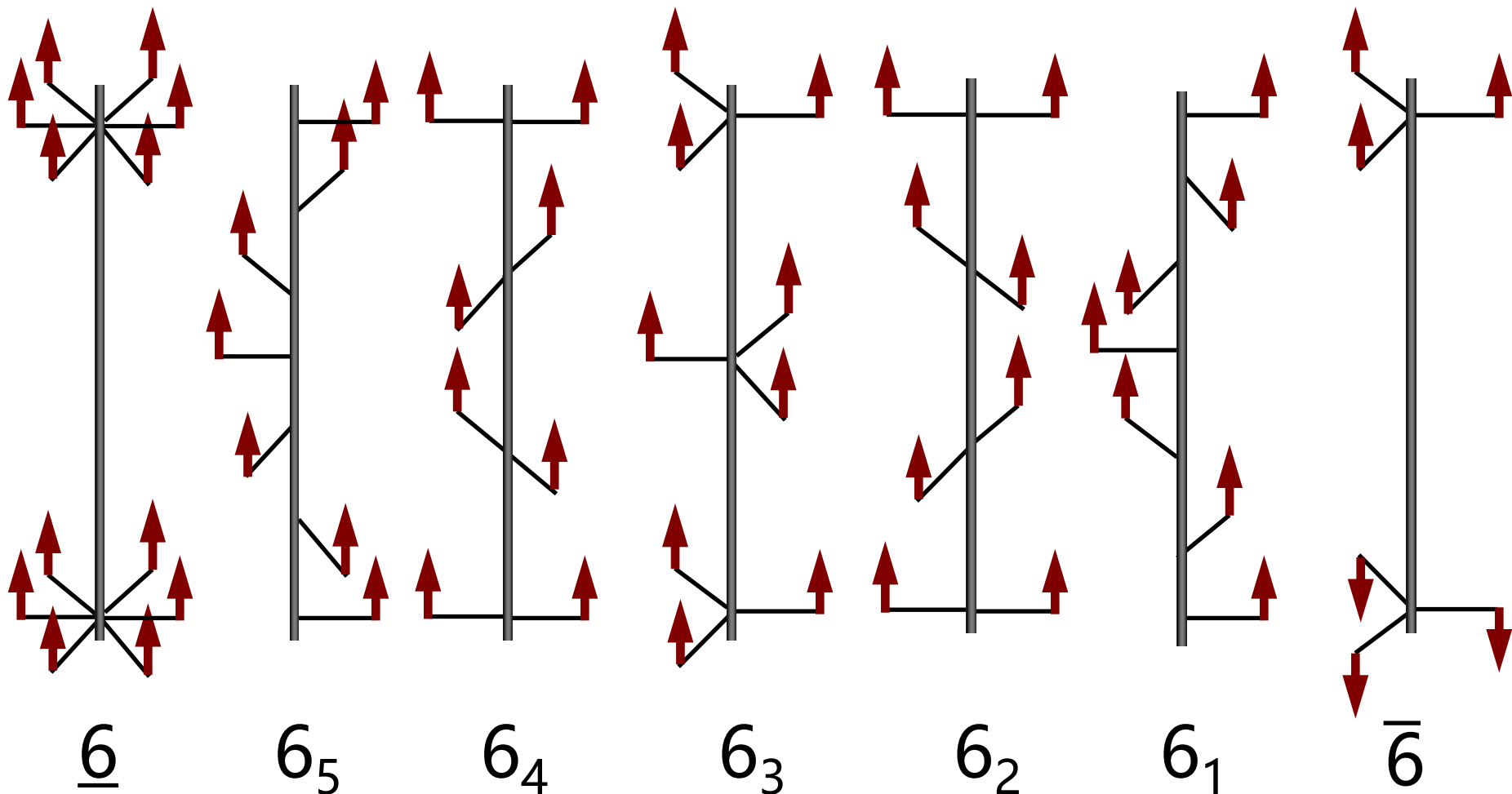
◆ 4_1



◆ $\bar{4}$

四重轴、四重螺旋轴、四重反轴示例

区别 $\underline{6}$ 6_5 6_4 6_3 6_2 6_1 $\bar{6}$



六重轴、六重螺旋轴、六重反轴示例

(vii) 滑移面——先按面反映，再平移

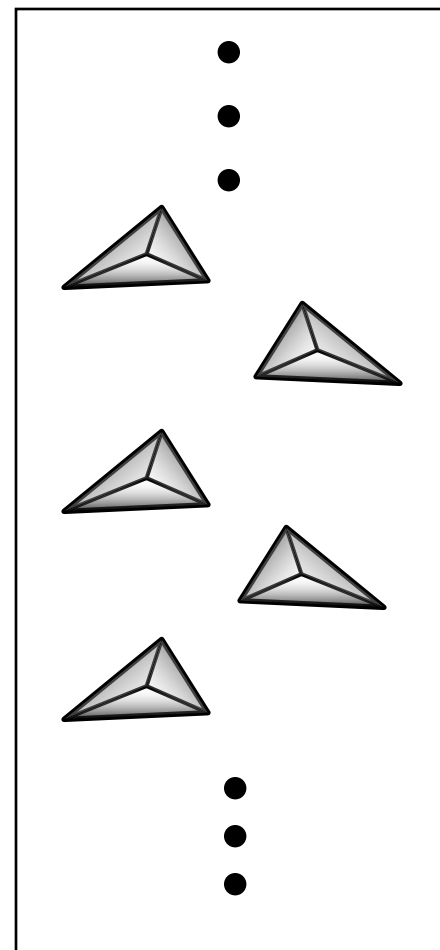
对称动作：反映滑移 (复合)

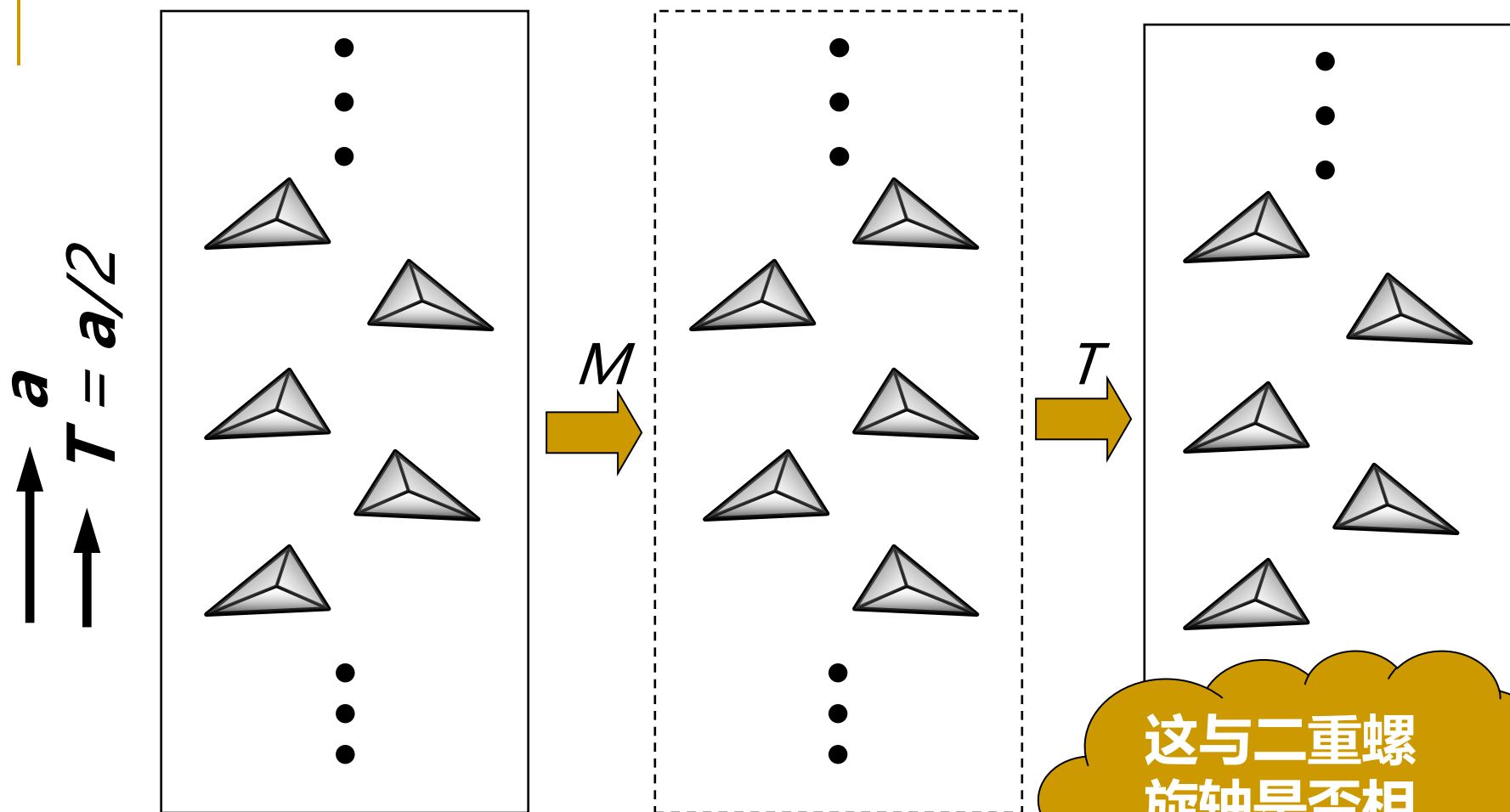
对称要素：滑移面，符号：MT;

阶 次： ∞ ;

等同图形：既有相等图形又有左右手图形

例如：如右图所示图形具有滑移面





这与二重螺旋轴是否相同?

图3.1.5 具有滑移面的对称图形

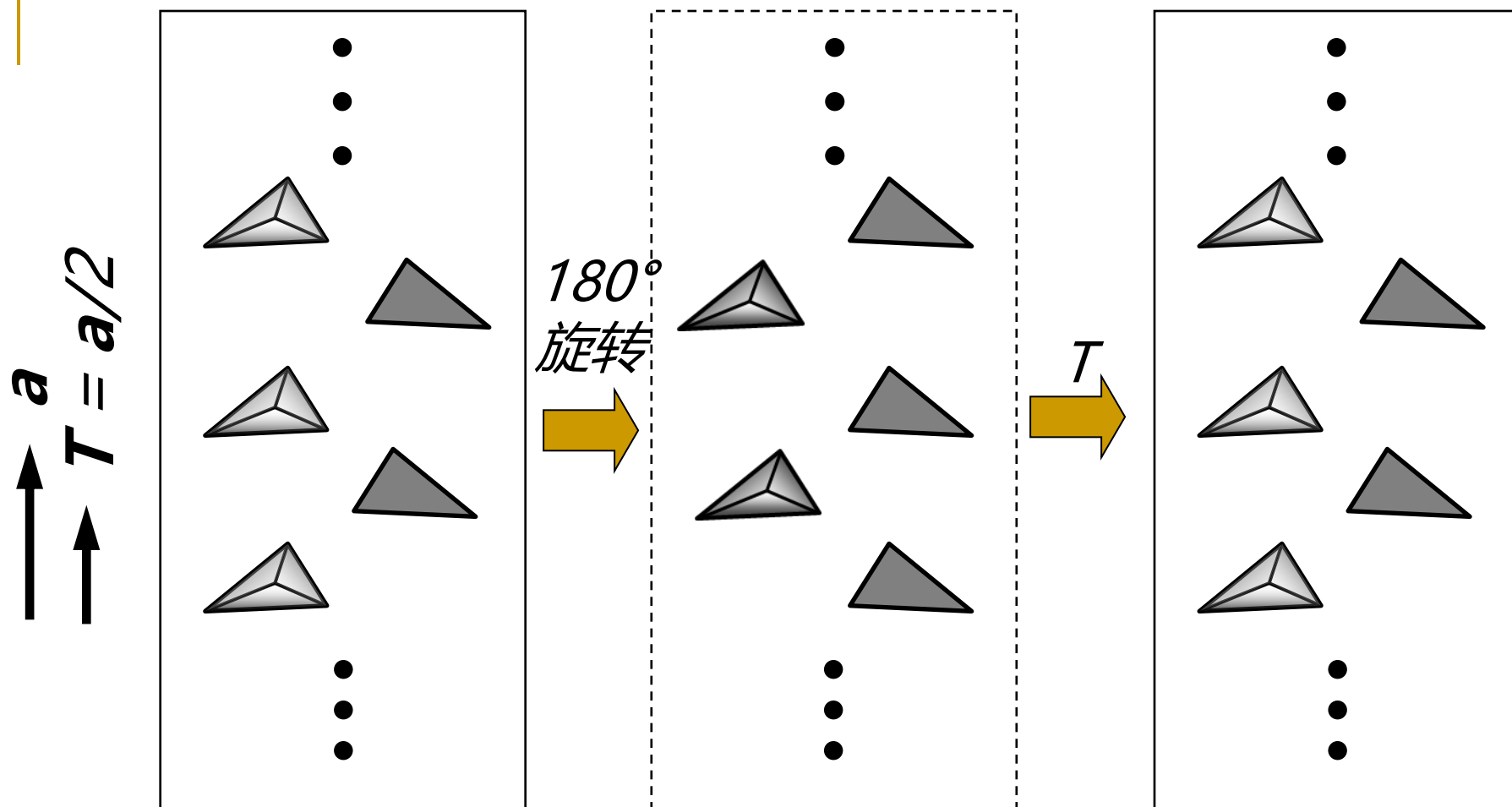
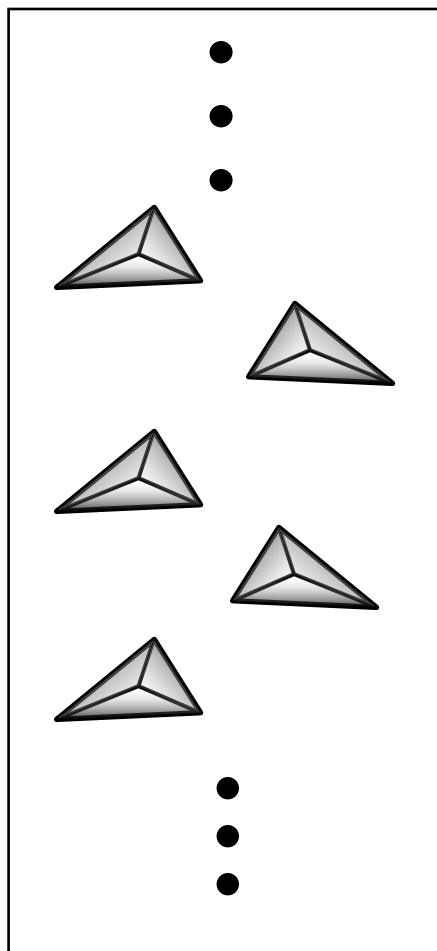
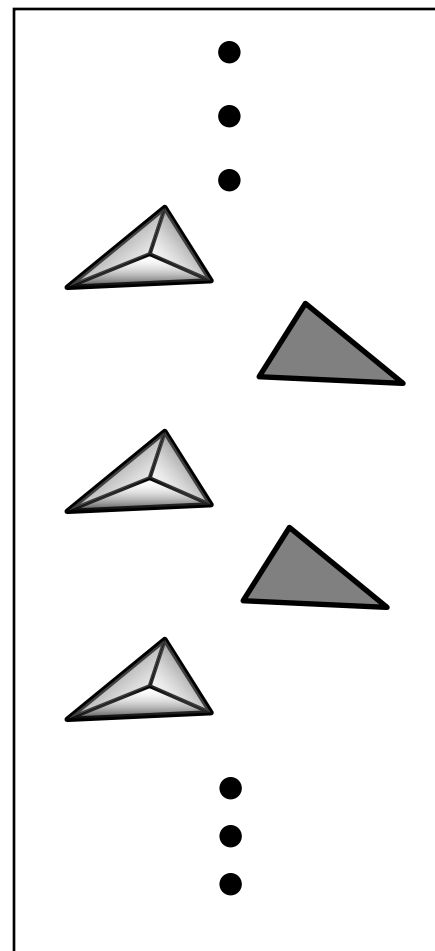


图3.1.5 具有二重螺旋轴的对称图形



有相等图形又有左右手图形

具有滑移面的对称图形

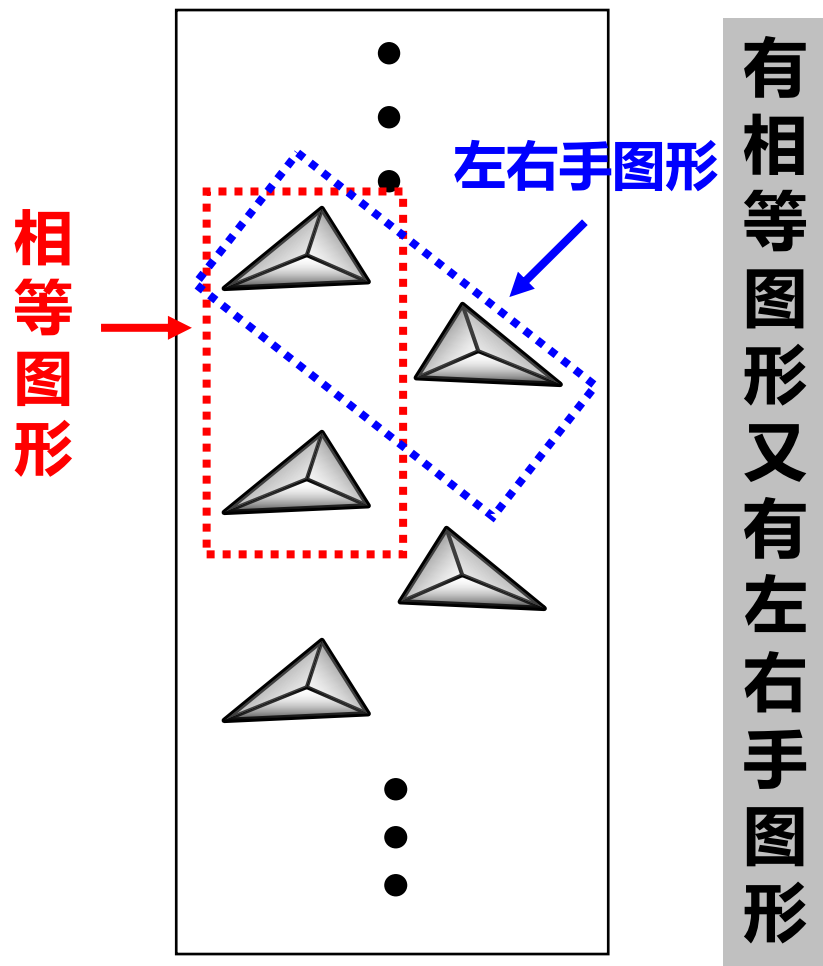


只有相等图形

具有二重螺旋轴的对称图形

(vii) 平移面——先按面反映，再平移

具有平移面的对称图形
先按面反映，再平移



具有二重螺旋轴的对称图形
先旋转，再平移

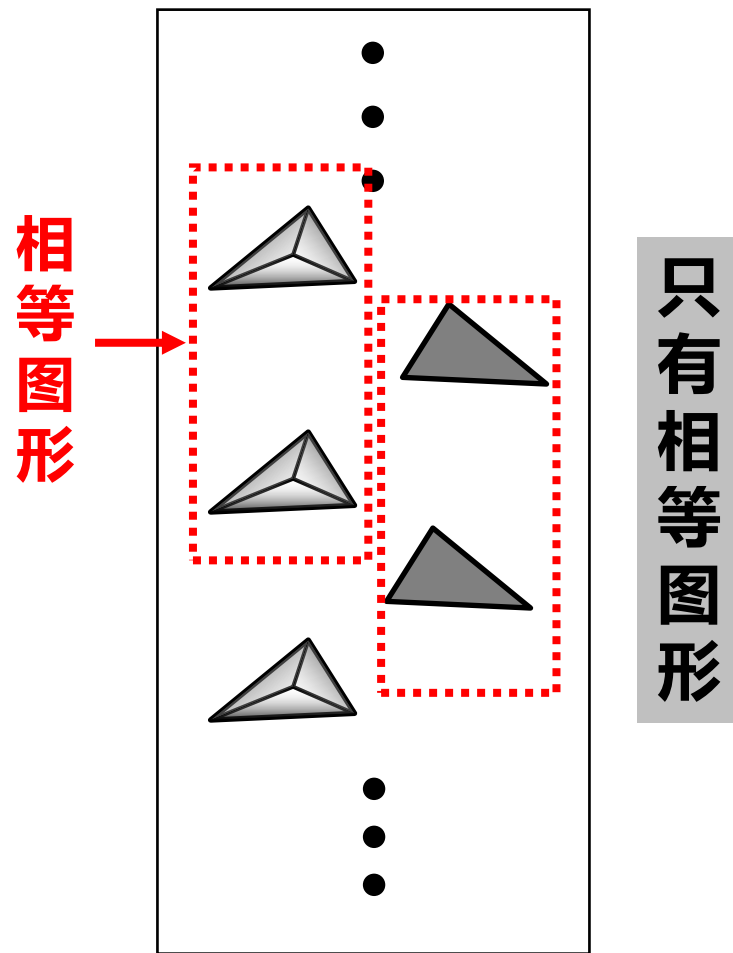
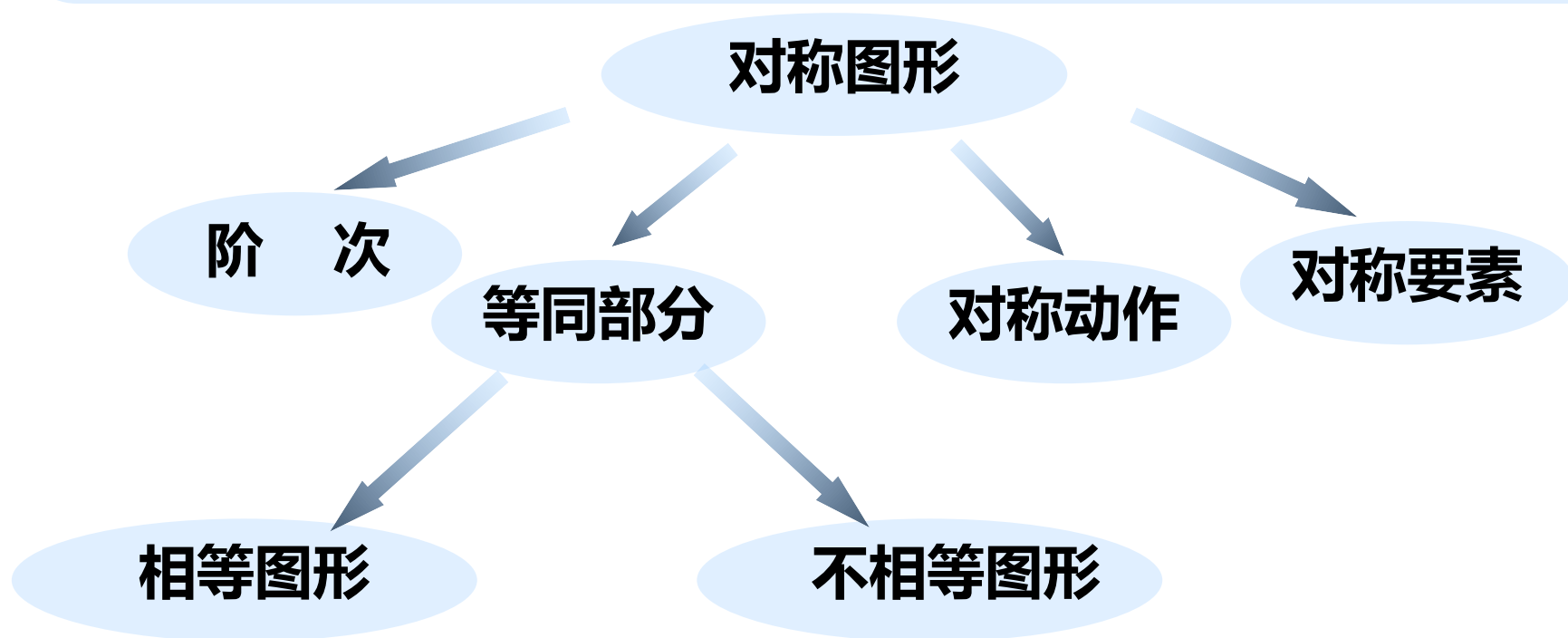


图3.9 平移面对称和二重螺旋轴对称的区别

小结—基本概念

依据一定的几何元素(点、线、面等)将整个图形进行一定的对称操作后，每个部分都能与原图形的某个其它部分重合。这样的图形叫做**对称图形**。



小结:

对称要素	符号	对称动作	符号	等同图形	阶次
旋转轴	$\underline{n}$	旋转	$L(a)$	相等图形	n
反映面	m	反映	M	左右手图形	2
对称中心	i	倒反	I	左右手图形	2
点阵	T	平移	T	相等图形	∞
反轴	$\bar{n}$	旋转倒反	$L(a)I$	左右手图形	n 或 $2n$
螺旋轴	n_p	螺旋旋转	$L(a)T$	相等图形	∞
滑移面	m_p	滑移反映	MT	相等图形和左右手图形	∞

七类对称要素的总结：

- (1) 旋转轴、反映面、对称中心、点阵是简单对称要素，只与一种**简单对称动作**对应；而反轴、螺旋轴、滑移面是复合对称要素，对应的是**复合对称动作**。
- (2) 含倒反、反映的动作只能使不相等（左右手）图形重合，而不能使相等图形重合；不含倒反、反映的对称动作只能使相等的图形重合，而不能使含左右手的图形重合。

七类对称要素的总结：

(3) 反映面、对称中心、反轴，对应的对称动作是点对称动作，在动作中至少有一点不动，既存在于无限结构中，又存在于有限晶体外形的结构中。

(4) 点阵、螺旋轴、滑移面，对应的对称动作是空间动作，每一点都移动了，因此只能存在于无限结构中，而不能存在于有限晶体外形的结构中。

(4) 旋转轴、螺旋轴、反轴统称对称轴；反映面、滑移面统称对称面。

3.1.3 对称要素在点阵中的取向

点阵中的对称要素遵循一些特殊的规律：

在空间点阵结构中，任何旋转轴、螺旋轴、反轴必定和点阵中的一组直线点阵平行，而和一组平面点阵垂直；同理，任何反映面和滑移面必定和点阵中一组平面点阵平行而和一组直线点阵垂直。

例1：空间点阵中的三重旋转轴（3）必定和点阵中一组直线点阵平行，而和一组平面点阵垂直。

证明:

设空间点阵的平移群表示为 T , 满足对称性 $\underline{3}$ 的任意三个向量为 T_1 、 T_2 、 T_3 属于此平移群 T 。

可将这些向量在 $\perp \underline{3}$ 和 $\parallel \underline{3}$ 的两个方向分解:

$$T_1 = a_1 + b_1, \quad T_2 = a_2 + b_2, \quad T_3 = a_3 + b_3$$

由 $\underline{3}$ 的对称性可知:

$$a_1 + a_2 + a_3 = 0, \quad b_1 = b_2 = b_3$$

因此三个平移向量的和向量:

$$T_1 + T_2 + T_3 = a_1 + b_1 + a_2 + b_2 + a_3 + b_3 = 3b_1$$

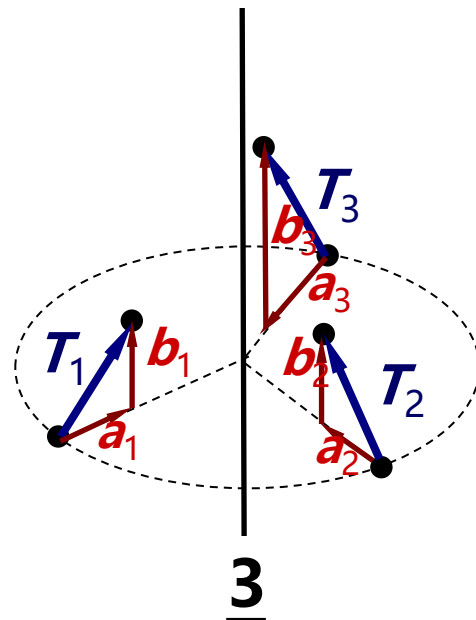
它也属于平移群 T 。此点阵中必存在以 $3b_1$ 为平移矢量的直线点阵 $\parallel \underline{3}$ 。

我们还可以写出属于平移群 T 的另两个向量:

$$T_1 - T_2 = (a_1 + b_1) - (a_2 + b_2) = a_1 - a_2$$

$$T_2 - T_3 = (a_2 + b_2) - (a_3 + b_3) = a_2 - a_3$$

这两个向量都与 $\underline{3}$ 垂直, 且不平行, 可以确定出一个 $\perp \underline{3}$ 的平面点阵。



3.1.3 对称要素在点阵中的取向

在空间点阵结构中的对称要素分布具有一定的规律：

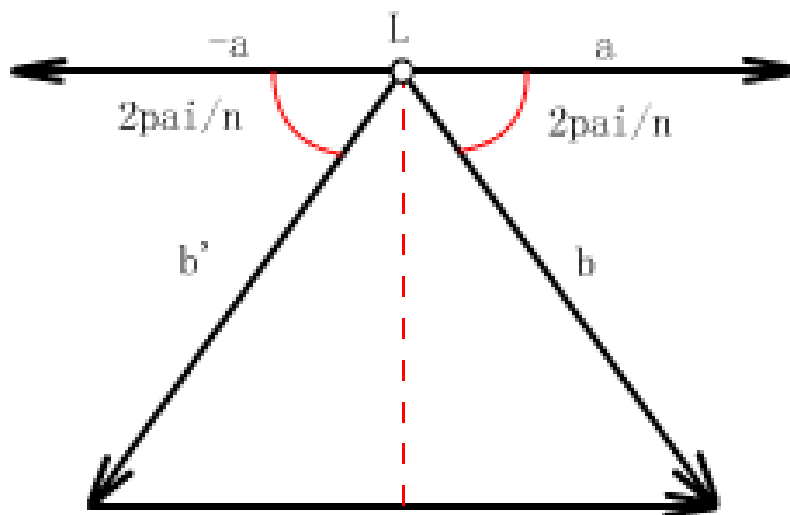
1. 任何对称轴必定和点阵中的一组直线点阵平行，并和一组平面点阵垂直；
2. 任何对称面必定和点阵中一组平面点阵平行，并和一组直线点阵垂直。

同学们可以自己给出其他对称轴、对称面的证明！

3、对称中心的分布可有规律？

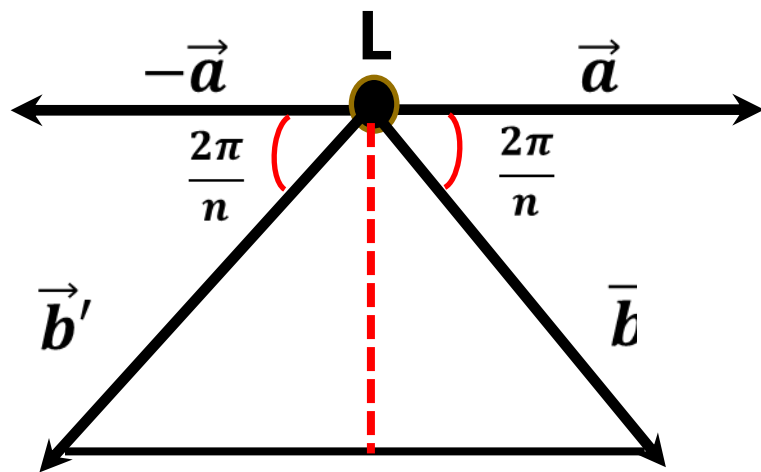
3.1.4 晶体中对称轴和反轴的轴次

晶体内部的结构是以点阵结构为基础的，其结构要受到点阵结构的周期性限制。晶体中的对称轴和反轴的轴次不能是任意的，只能有**1、2、3、4、6**五种轴次。



晶体中不能存在5重轴以及7重轴以上的轴次

由于晶体内部结构是以点阵结构为基础的，因此，晶体中对称轴和反轴的轴次不能是任意的，要受到点阵结构的限制，只取 $n=1, 2, 3, 4, 6$ 。



假设在空间点阵结构中，有一轴次为 n 的旋转轴 L ，则在与其相应的平移群中，一定可以找到一个与 L 垂直的向量。

设它的素向量为 $\vec{a}$

设它的素向量为 $\vec{a}$ ， $\vec{a}$ 旋转到 $\vec{b}$ ， $-\vec{a}$ 旋转到 $\vec{b}'$ ，则向量 $\vec{b}$ 和 $\vec{b}'$ 也属于平移群，向量 $\vec{B} = \vec{b} - \vec{b}'$ 也属于平移群。

因为： $\vec{B}$ 与 $\vec{a}$ 是平行的

$$\therefore \vec{B} = m\vec{a} \quad (m \text{ 为整数})$$

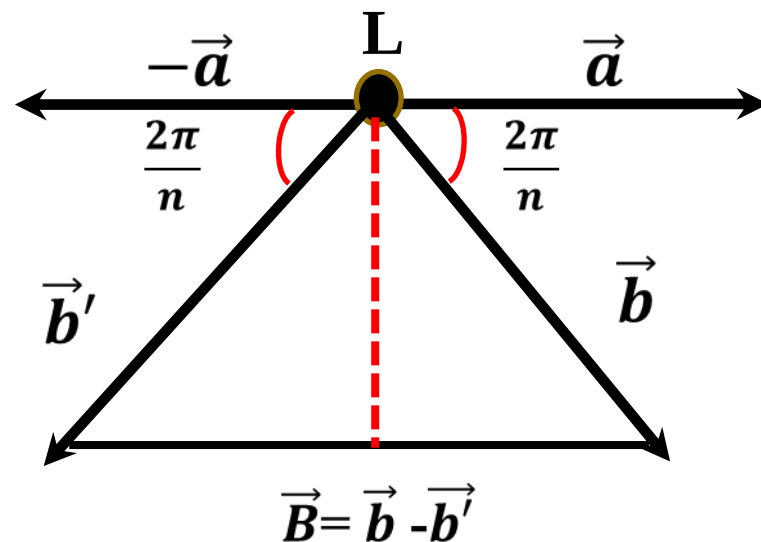
由图中的几何关系可知：

$$ma = B = 2b' \cos \alpha = 2a \cos \alpha$$

$$\therefore \cos \alpha = \frac{m}{2}$$

$$\therefore |\cos \alpha| = \left| \frac{m}{2} \right| \leq 1$$

$$\therefore |m| \leq 2, \quad m=0, \pm 1, \pm 2$$



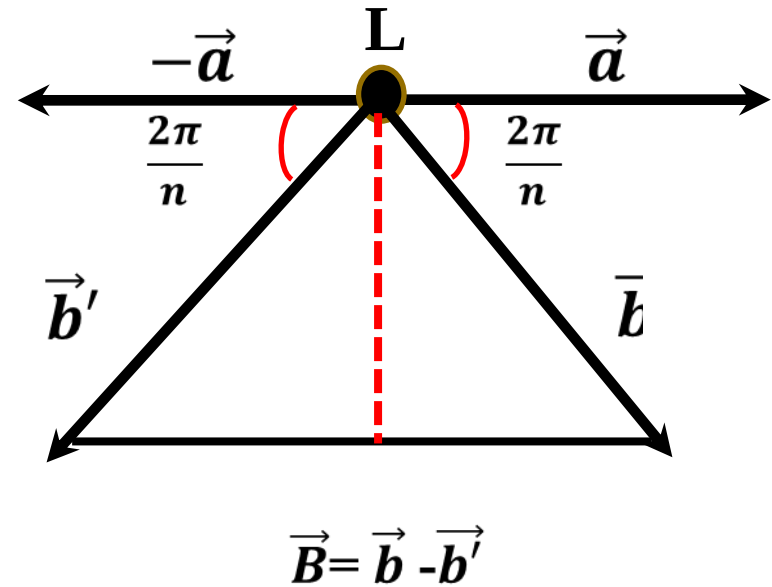
$$\alpha = \frac{2\pi}{n}$$

$$\therefore \cos \alpha = \frac{m}{2}$$

$$\therefore |\cos \alpha| = \left| \frac{m}{2} \right| \leq 1$$

$$\therefore |m| \leq 2, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2$$

m	$\cos \alpha$	α	n
-2	-1	180	2
-1	-1/2	120	3
0	0	90	4
1	1/2	60	6
2	1	360	1



5重对称轴与准晶体

晶体中不存在5重轴，也不能存在7重轴及其以上的轴次！！

五次对称与晶体的平移对称不兼容。

在自然界，五次对称却广泛存在。

例如： 具有五次对称的花朵

具有五次对称的各种病毒分子

具有五次轴的准晶体的发现

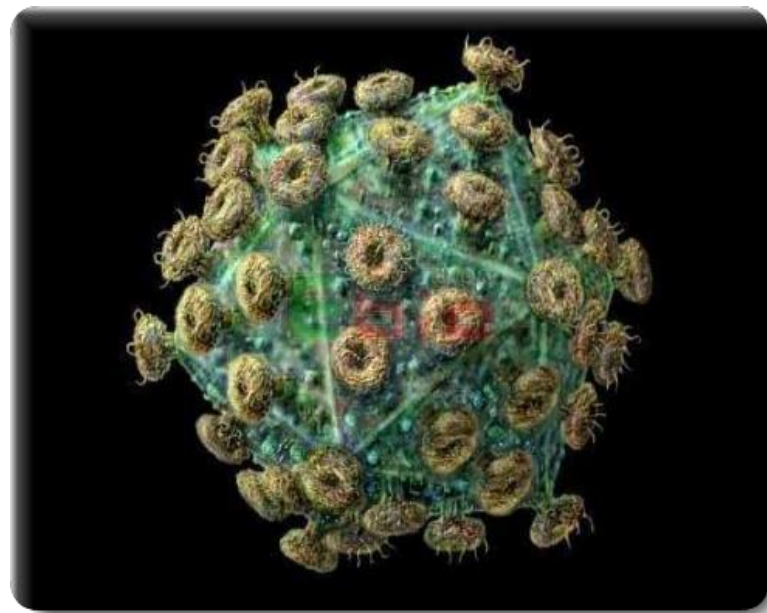
具有5重对称性的花儿 -- 植物体



具有5重对称性的SARS病毒-生物体

病毒是结构简单的生命体，在电镜下观察病毒，会发现病毒有五种形态：球形、丝形、子弹形、砖形和蝌蚪形。

病毒的形状，一般呈立体对称、螺旋对称和复合对称。许多病毒，如脊髓灰质炎病毒、SARS病毒等为立体对称，它们的外壳为**包含有20个等边三角形的形状，有12个顶和30条棱，具有5、3、2重轴旋转对称性。**



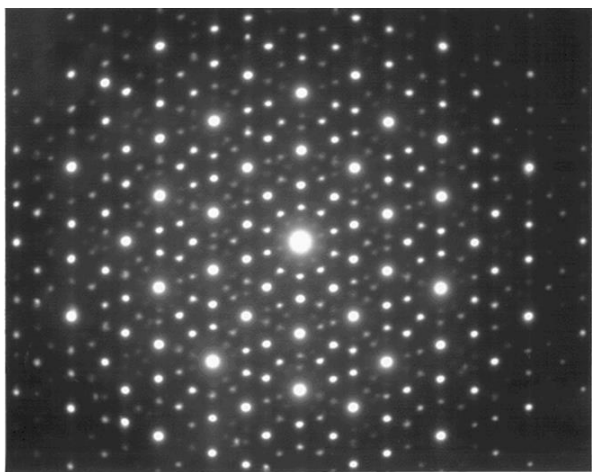
SARS病毒形貌

人们一种思想：无生命的物质（例如晶体）就不能够有五次对称，而有生命的物质才能有五次对称。无生命与有生命是自然界两个截然不同的世界，所以，五次对称成为这两个截然不同世界的分界线。

前苏联晶体学家别洛夫曾经说 **“五次对称是生物为其生存而斗争的特殊武器”**。

因为**生物体中有五次对称**，**生物才不致结晶（固结）**，因而有活力，能生长，能演化，能变异，从而形成纷繁多样的生物界。只要具有五次对称，物体就有生命的活力；而相反，如果没有五次对称，物体就是“死”的。

准晶的发现



在1984年10月，肖特曼 (Shechtman D) 在美国物理评论快报上发表文章，报道了**具有五次对称的金属相**。这一金属相的结构与晶体结构有着明显的区别，它**有长程有序规律，但它没有重复周期**。

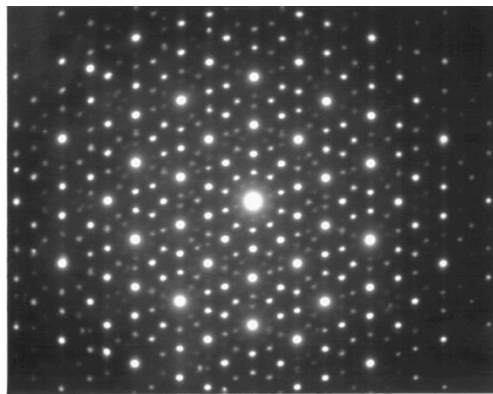
即：它不具有格子构造，它不是晶体。
那它是什么呢？

准晶体的发现，给传统的经典的晶体对称理论带来了猛烈冲击，因为它不能够用传统晶体对称理论来研究了，因此迅速发展起一门晶体学的分支学科----**准晶体学**。

晶体中不可能有五次对称，但准晶体中可以有五次对称。

准晶体是一种特殊的无机物体，是无生命的，为什么它会有五次对称呢？

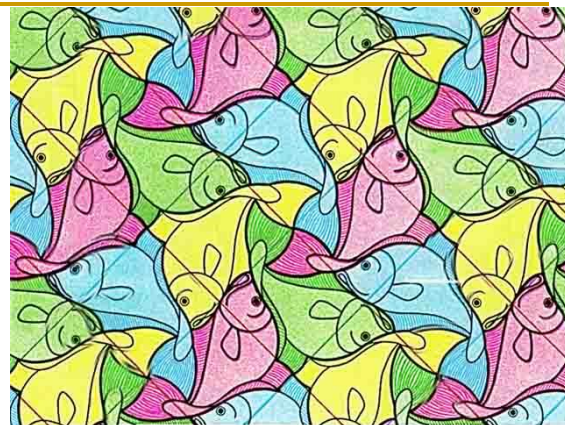
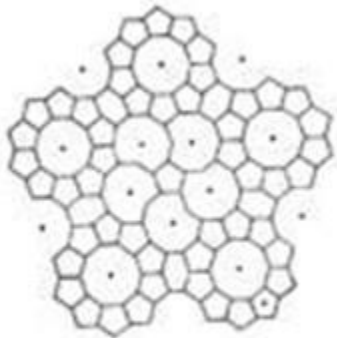
有人提出这么一种思想：准晶体的发现为生物与非生物架起了一座桥梁。



五次对称使物体具有活力。那么，准晶体是具有五次对称的，应该比晶体更具有活力？应该与生物相似？怎么理解与认识“准晶体在生物与非生物之间架起了一座桥梁”？

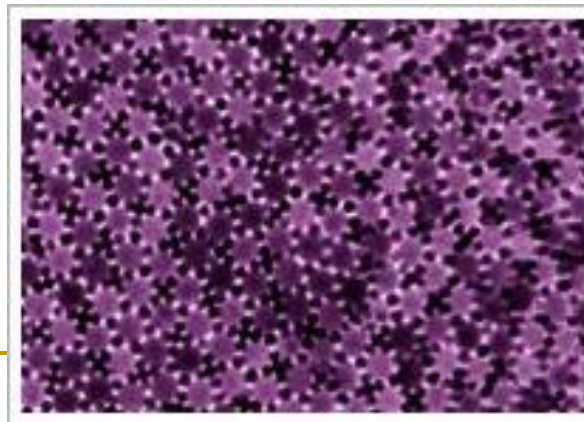
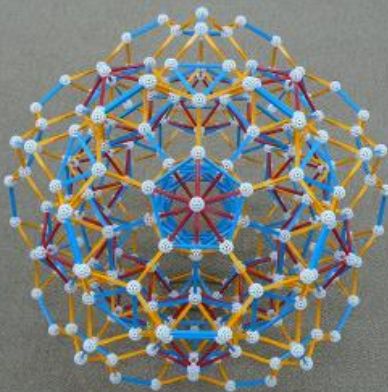
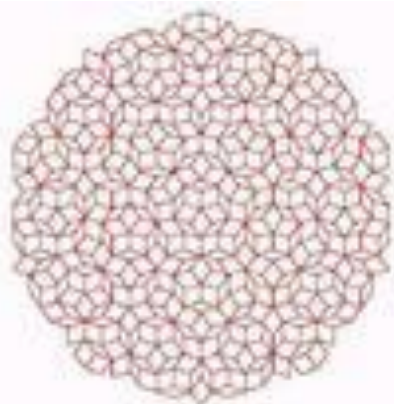
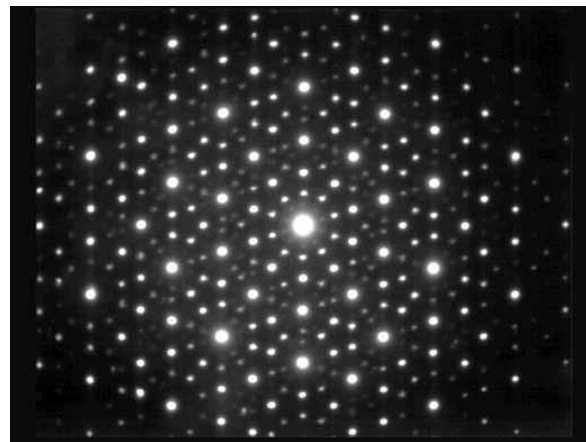
下图用两种“积木”堆积而成整个球面，很好地体现了准晶体的对称性。

具有5、7重轴及以上对称轴的图案



USEFUL
QUASICRYSTALS

Jean-Marie Dubois

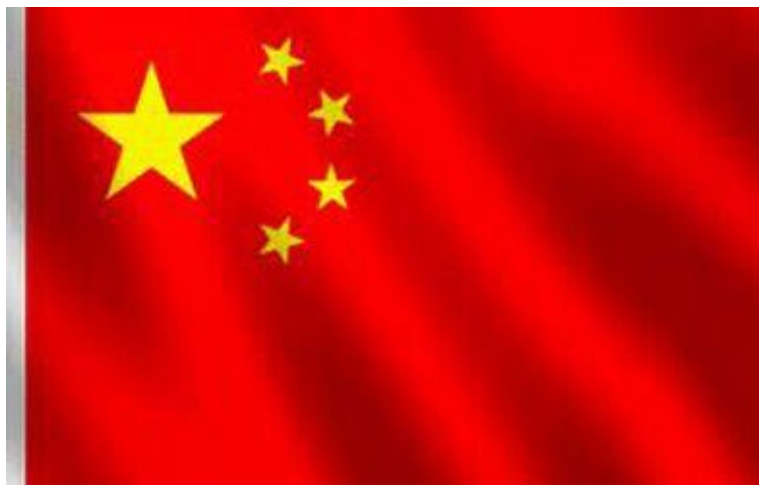
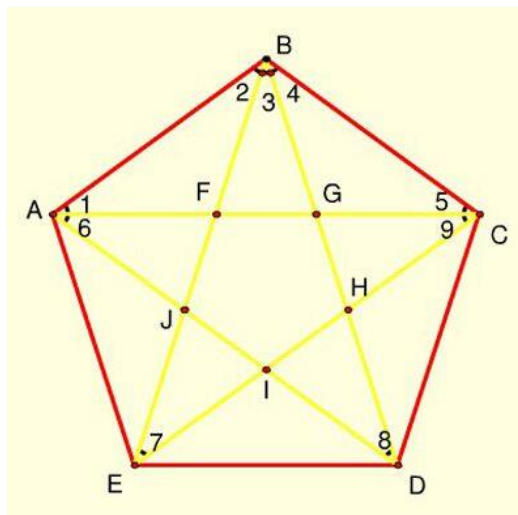


自然界中的准晶体及其用途

- ◆ 中世纪阿拉伯风格马赛克镶嵌装饰艺术中图案
- ◆ 俄罗斯一条河流内获取的矿物样本中发现自然生成的准晶体
- ◆ 在某一种钢质材料中发现准晶体，而准晶体在材料中所起的强化作用，相当于“装甲”。
- ◆ 科学家正尝试将准晶体应用于其他产品，如不粘锅涂层和柴油机制造等。

具有五次对称的图形，往往出现“黄金分割”。

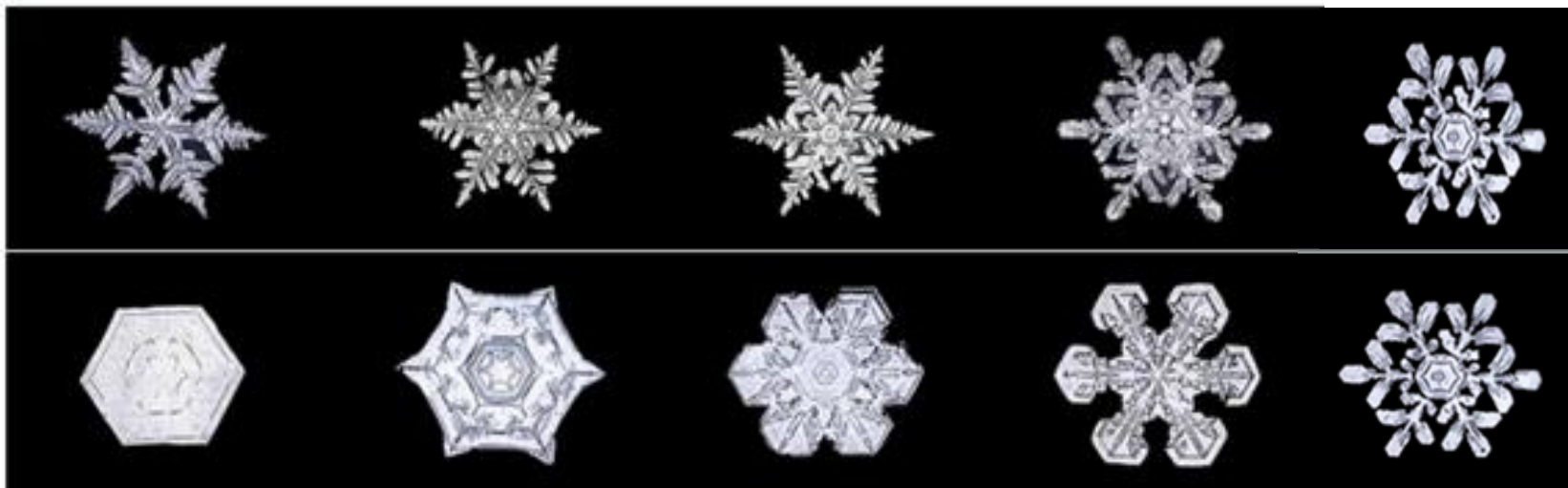
所谓的“黄金分割”指分割的比例是0.618，黄金分割数是自然界的一个合理数。



自然界的和谐、建筑物的美、植物生长、动物繁殖等等，在尺寸大小比、种类数量比、增长数量比等，经常出现黄金分割点。某种物体只要在比例上符合黄金分割，就会非常美丽与和谐。

完美的人体：肚脐到脚底的距离/头顶到脚底的距离=0.618

最漂亮的脸庞：眉毛到脖子的距离/头顶到脖子的距离=0.618



五次对称的图案经常出现“黄金分割”，因此，五次对称也应该是自然界的合理对称形式了。在生物界经常出现五次对称形式，说明了五次对称的合理性。

为什么这种合理性不能延续到无机晶体界？这是从更高的自然观认识晶体的本质。

以色列科学家独享Nobel化学奖

■ **达尼埃尔·谢赫特曼**以发现准晶体赢得2011年度诺贝尔化学奖

- 瑞典皇家科学院在颁奖声明中说，获奖者的发现**改变了科学家对固体物质结构的认识**
- 一人独享1000万瑞典克朗(约合146万美元)奖金
- 1982年，他率先在实验室环境下发现准晶体“现象”
- 获得几乎所有科学奖项，“独缺”诺贝尔奖



Il fisico Dan Shechtman, all'Istituto Tecnológico Technion

什么是准晶体？

准晶是一种介于晶体和非晶体之间的固体。准晶具有完全有序的结构，然而又不具有晶体所应有的平移对称性，因而可以具有晶体所不允许宏观对称性。

准晶体，或称准结晶体，异于常规晶体。准晶体是一类不具备晶格周期性、却显现长程有序性的固体材料。所谓长程有序性，在某个方向上往往以无理数序列的方式表达，而序列则像无理数一样无限不循环。



吉林大学首届未来科学论坛- 2018



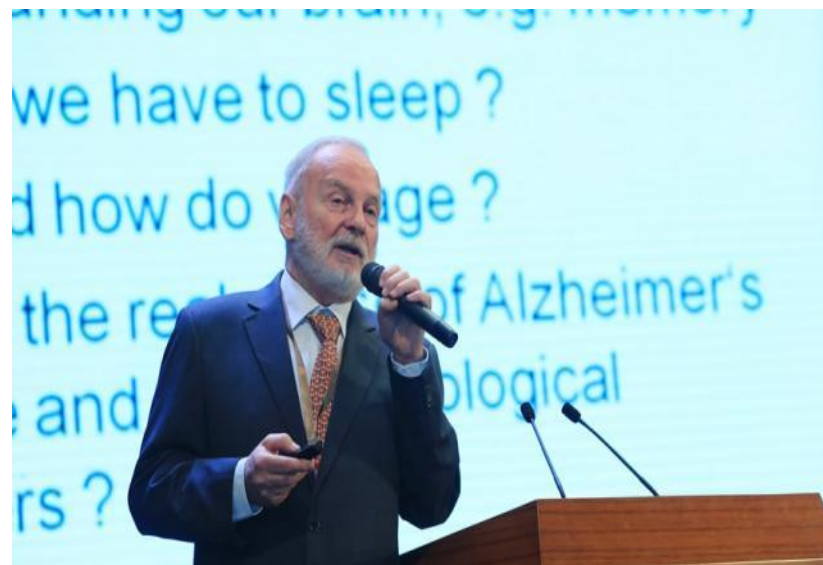
丹·谢赫特曼
(Dan Shechtman)
以色列理工学院工程材料系教授



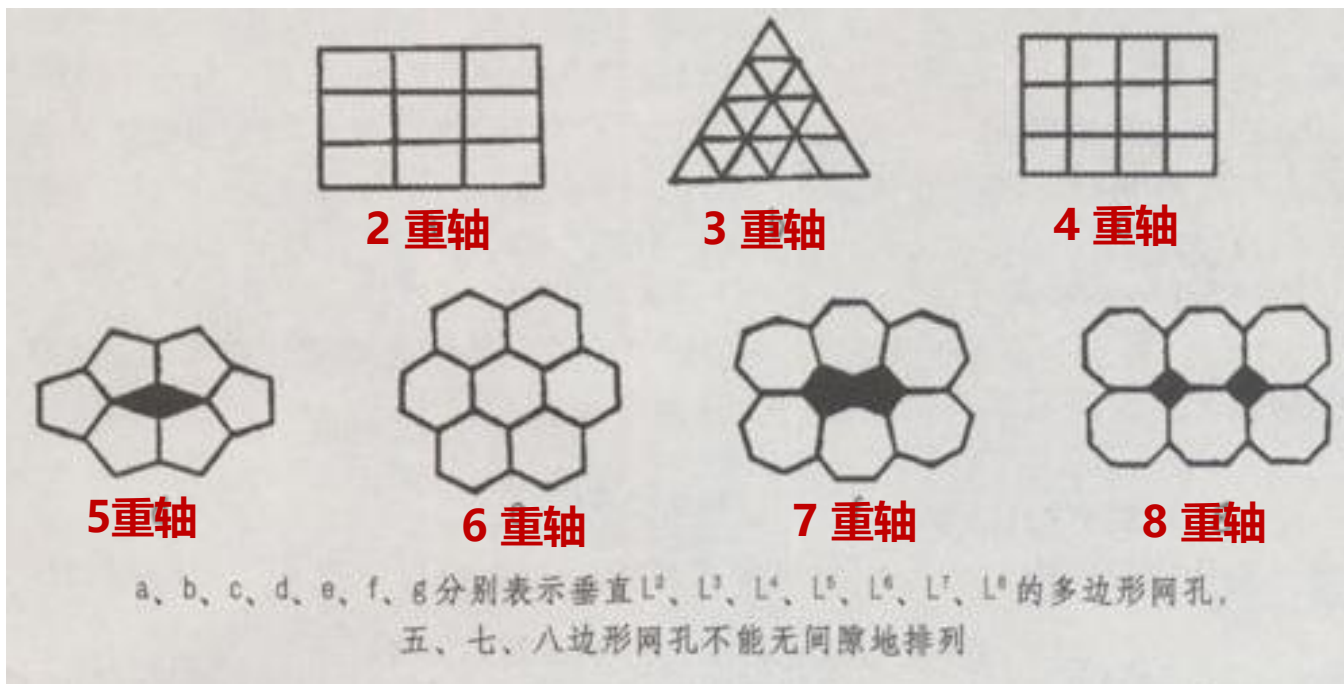
Dan SHECHTMAN (丹·谢赫特曼) 教授曾获得诸多国际奖项，包括沃尔夫物理学奖、瑞典皇家科学院格雷戈里·阿米诺夫奖、EMRS奖等。在世界享有崇高的学术地位，他目前的研究工作主要集中在为各种应用开发强韧的镁合金，曾通过TEM发现了二十面体相，开启了准晶体的新科学。为表彰他发现准晶体的杰出成就，Dan SHECHTMAN教授于2011年独享诺贝尔化学奖。



Hartmut MICHEL (哈特穆特·米歇尔) 教授是中国科学院外籍院士、美国国家科学院外籍院士、德国科学院院士、英国皇家学会外籍院士、荷兰皇家科学院外籍院士。Hartmut MICHEL教授曾获得诸多国际奖项，包括德国研究基金会莱布尼茨奖、奥托拜耳奖和英国生物化学学会科林奖章等。Hartmut MICHEL教授致力于研究生物体的各种膜蛋白的结构与功能，研究还涉及能源、药学等多个领域，在世界享有崇高的学术地位，是生物化学领域的学术权威。他曾成功获取世界上第一个膜蛋白晶体——紫色光合细菌的光合作用反应中心的晶体，并以3埃的高精确度确定该反应中心的三维结构，并因此荣获1988年诺贝尔化学奖。



晶体中不可能出现五次或高于六次的对称轴，这是由空间格子规律控制的，在空间格子中，垂直对称轴一定有面网存在，围绕该对称轴转动所形成的多边形应该符合于该面网上结点所围成的网孔。



垂直对称轴所形成的多边形网孔

围绕对称轴2、3、4和6所形成的多边形，都能毫无间隙地布满平面，都符合空间格子的网孔。但垂直5、7和8所形成的正五边形、正七边形和正八边形却不能毫无间隙地布满平面，不符合空间格子的网孔，所以在晶体中不可能存在五次或高于六次的对称轴，这一规律称为**晶体的对称定律**。

在一个晶体中，可以无也可以有一种或几种对称轴，而每一种对称轴也可以有一个或多个。

小结:

对称要素	符号	对称动作	符号	等同图形	阶次
旋转轴	$\underline{n}$	旋转	$L(a)$	相等图形	n
反映面	m	反映	M	左右手图形	2
对称中心	i	倒反	I	左右手图形	2
点阵	T	平移	T	相等图形	∞
反轴	$\bar{n}$	旋转倒反	$L(a)I$	左右手图形	n 或 $2n$
螺旋轴	n_p	螺旋旋转	$L(a)T$	相等图形	∞
滑移面	m_p	滑移反映	MT	相等图形和左右手图形	∞

3.2 晶体的宏观对称性及32个点群

3.2.1 晶体宏观对称要素

晶体的宏观对称性：晶体在宏观观察中所表现的对称性。

宏观地观察晶体，也就是观察晶体的外形，晶体具有一定的规则整齐的外形，在界面处的界面要素(晶面、晶棱、晶点)之间有一定的对称关系。

由于晶体外形的规则多面体是有限的对称图形。含有“平移”动作(空间对称动作)的对称要素不存在于晶体宏观对称性中。

只有那些与点对称动作相应的对称要素才能存在于晶体的宏观对称性中。

3.2.1 晶体宏观对称要素

与点动作相应的对称要素：

旋转轴 n ，反映面 m ，对称中心 i ，反轴 $\bar{n}$ 。

因为晶体点阵的周期性， n 只能取 **1、2、3、4、6**。

又因为： $\bar{1} = i$ ；

$\bar{2} = m$ ；

$\bar{3} = \underline{3} + i$ ；

$\bar{6} = \underline{3} + m$ 。

晶体的宏观对称性只有以下**八种独立对称要素**：

i 、 m 、 $\underline{1}$ 、 $\underline{2}$ 、 $\underline{3}$ 、 $\underline{4}$ 、 $\underline{6}$ 、 $\bar{4}$

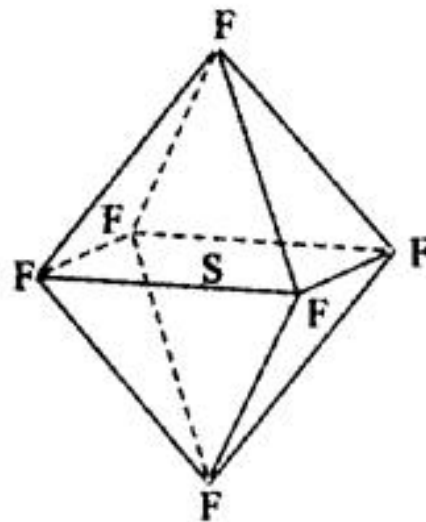
$\bar{6}$ 描述六方晶系的某些晶体的宏观对称性很方便，有时也采用。

3.1 对称性概念，对称动作和对称要素

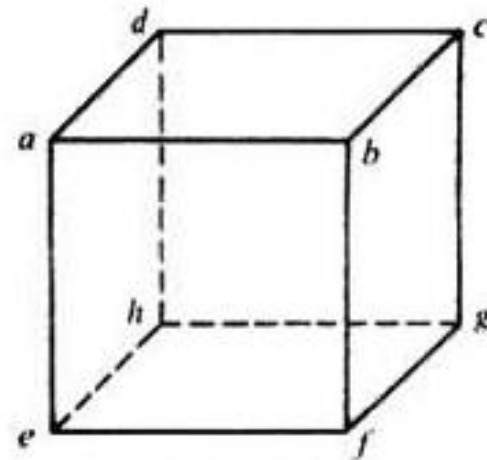
正八面体、正六面体

(观察模型，找出全部对称要素)

- 1、是否对称图形？
- 2、等同图形？
- 3、对称图形阶次？
- 4、对称动作？
- 5、对称要素？



正八面体



正六面体

研究图形的对称性，就是要研究图形的等同部分的空间排布规律。复杂的对称图形，常常含有多种对称要素，这些对称要素的数量和分布就决定了各等同部分的数量和分布规律。

八种独立的对称要素的组合并不是任意的

组合要符合如下条件：

- (1) 对称要素间是相互作用的，两个对称要素相组合，必然产生新的对称要素来；
- (2) 对称要素间的组合不是任意的，需要满足：
 - a、参加组合的对称要素必须至少相交于一点。这是因为晶体的外形是有限的、封闭的多面体。
 - b、晶体是一种点阵结构，对称要素的组合结果不容许产生与点阵结构不相容的对称要素来。(5、7…等)

研究对称要素的组合规律时曾建立起一系列的**公理和定理**。例如

(1)轴与轴的组合

A. 一个 n 次轴及与之**垂直**的一个2次轴存在时，则必存在 n 个2次轴，相邻两轴夹角为 $2\pi/2n$ 。

B. 二次轴和二次轴相交，交角为 α ，则必产生一个与这两个二次轴垂直的 n 次轴，其基转角为 2α 。

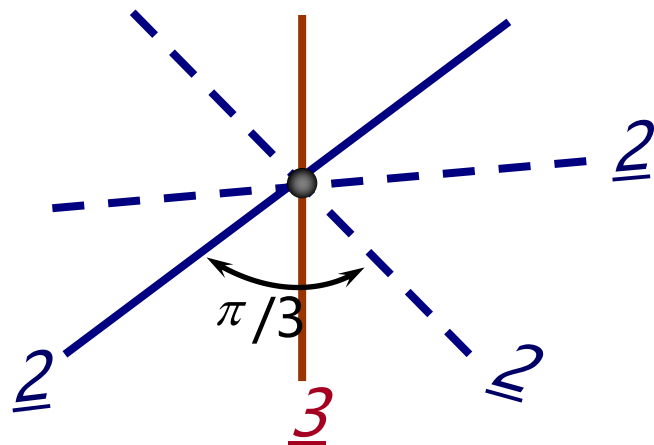
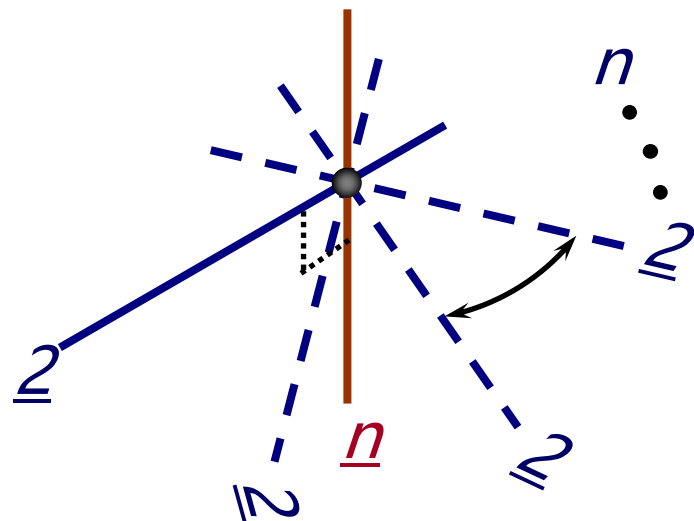


图3.2.2 三次轴与二次轴的组合

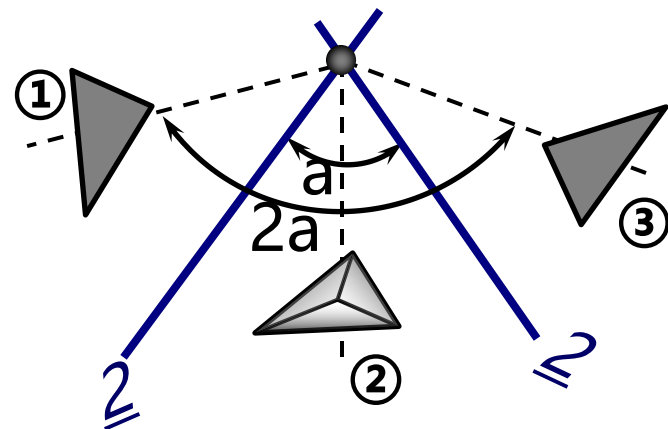


图3.2.3 二次轴与二次轴的组合

(2)面与轴的组合

A. 一个反映面包含着 n 次轴，则必有 n 个反映面都包含着这个 n 次轴，这些反映面的夹角为 $2\pi/2n$ 。

B. 两个反映面交角为 α ，则交线为一个 n 次轴，其基转角为 2α 。

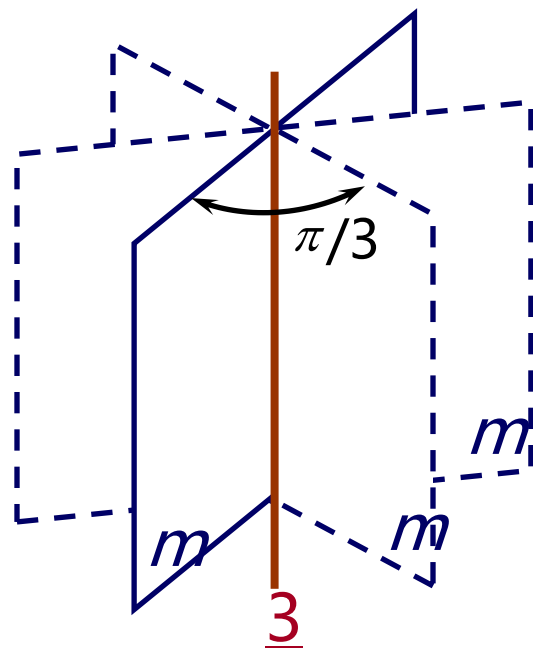


图 3.2.4 包含三次轴的反映面

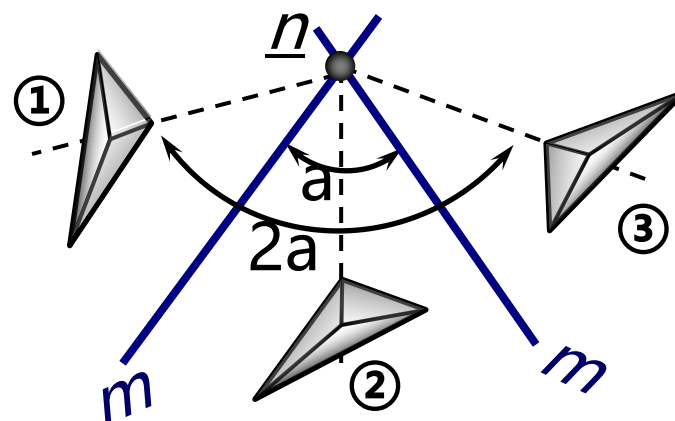
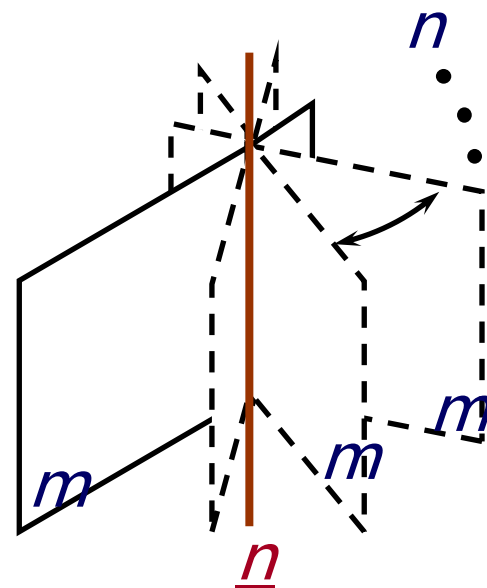
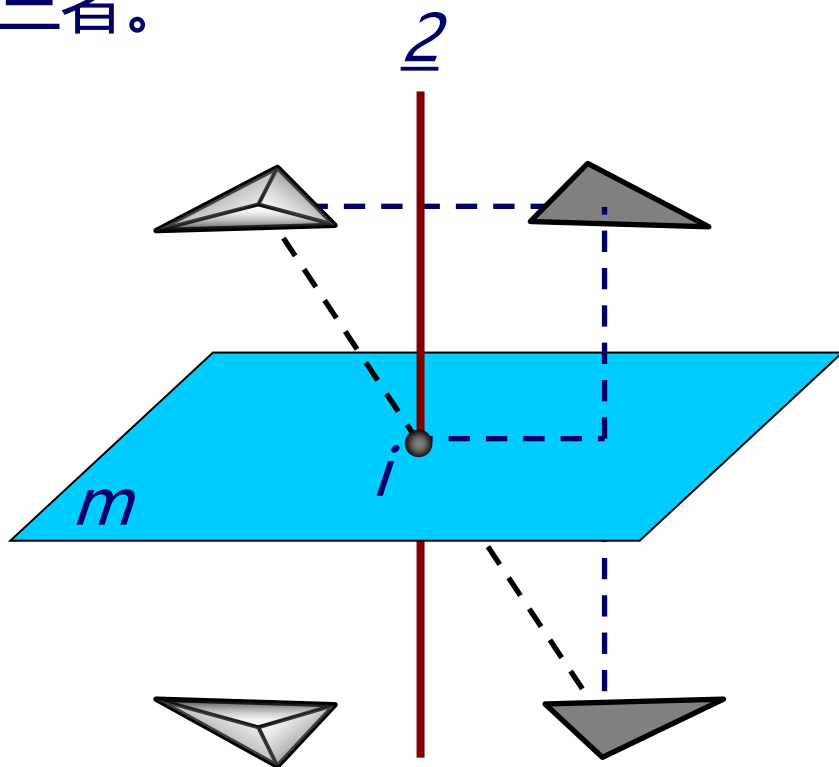


图3.2.5 两个反映面的组合

(3) 轴、面、心的组合

偶次轴、与之垂直的反映面、对称中心，其中二者组合都会产生第三者。



$$\underline{2} + m = i$$

$$m + i = \underline{2}$$

$$\underline{2} + i = m$$

图3.2.6 $\underline{2}$ 、 m & i 组合

按以上的原则，将八种的晶体的宏观基本对称要素 (i 、 m 、 $\underline{1}$ 、 $\underline{2}$ 、 $\underline{3}$ 、 $\underline{4}$ 、 $\underline{6}$ 、 $\bar{4}$)，进行组合，一共能够得到32种组合方式，也叫32个点群。

无论多复杂的晶体外形，它一定定属于32点群中的一个，绝不会找不到它所属的对称类型，也不会再超出32个点群以外的新类型。

32个点群是研究晶体宏观对称性的依据。见表格3.3：

晶系	全部对称要素	对称类型符号		
		熊夫利符号	国际符号(全写)	国际符号(简写)
三斜	$\underline{1}$	C_1	1	1
	i	C_i	$\bar{1}$	$\bar{1}$
单斜	m	C_s	m	m
	$\underline{2}$	C_2	2	2
	$\underline{2}$ 、 m 、 i	C_{2h}	$\frac{2}{m}$	$\frac{2}{m}$
正交	$\underline{2}$ 、 $2\ m$	C_{2v}	$2\ m\ m$	$m\ m$
	$3\ \underline{2}$	D_2	$2\ 2\ 2$	$2\ 2\ 2$
	$3\ \underline{2}$ 、 $3\ m$ 、 i	D_{2h}	$\frac{2}{m}\ \frac{2}{m}\ \frac{2}{m}$	$m\ m\ m$
三方 (三角)	$\underline{3}$	C_3	3	3
	$\bar{3}(3 + i)$	C_{3i}	$\bar{3}$	$\bar{3}$
	$\underline{3}$ 、 $3\ m$	C_{3v}	$3\ m$	$3\ m$
	$\underline{3}$ 、 $3\ \underline{2}$	D_3	$3\ 2$	$3\ 2$
	$\underline{3}$ 、 $3\ \underline{2}$ 、 $3\ m$ 、 i	D_{3d}	$\bar{3}\frac{2}{m}$	$\bar{3}\ m$

晶系	全部对称要素	对称类型符号		
		熊夫利符号	国际符号(全写)	国际符号(简写)
四方	$\bar{4}$	S_4	$\bar{4}$	$\bar{4}$
	$\underline{4}$	C_4	4	4
	$\underline{4}$ 、 m 、 i	C_{4h}	$\frac{4}{m}$	$\frac{4}{m}$
	$\underline{4}$ 、 $4m$	C_{4v}	$4mm$	$4mm$
	$\bar{4}$ 、 $2\underline{2}$ 、 $2m$	D_{2d}	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$
	$\underline{4}$ 、 $4\underline{2}$	D_4	422	42
	$\underline{4}$ 、 $4\underline{2}$ 、 $5m$ 、 i	D_{4h}	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\frac{4}{m}mm$
六方 (六角)	$\bar{6}(\underline{3}+m)$	C_{3h}	$\bar{6}$	$\bar{6}$
	$\underline{6}$	C_6	6	6
	$\underline{6}$ 、 m 、 i	C_{6h}	$\frac{6}{m}$	$\frac{6}{m}$
	$\underline{6}$ 、 $6m$	C_{6v}	$6mm$	$6mm$
	$\bar{6}(\underline{3}+m)$ 、 $3\underline{2}$ 、 $3m$	D_{3h}	$\bar{6}2m$	$\bar{6}2m$
	$\underline{6}$ 、 $6\underline{2}$	D_6	622	62
	$\underline{6}$ 、 $6\underline{2}$ 、 $7m$ 、 i	D_{6h}	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\frac{6}{m}mm$

晶系	全部对称要素	对称类型符号		
		熊夫利符号	国际符号(全写)	国际符号(简写)
立方	$4\bar{3}, 3\bar{2}$	T	$2\bar{3}$	$2\bar{3}$
	$4\bar{3}, 3\bar{2}, 3m, i$	T_h	$\frac{2}{m}\bar{3}$	$m\bar{3}$
	<u>$4\bar{3}, 3\bar{4}, 6m$</u>	<u>T_d</u> 	$\bar{4}\bar{3}m$	$\bar{4}\bar{3}m$
	$4\bar{3}, 3\bar{4}, 6\bar{2}$	O	$4\bar{3}2$	$4\bar{3}$
	<u>$4\bar{3}, 3\bar{4}, 6\bar{2}, 9m, i$</u>	<u>O_h</u> 	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$m\bar{3}m$

点 —— 与点对称动作(至少保持一点不动)对应的宏观对称要素
 群 —— 一种特殊集合 (封闭、组合)

32个点群有两种符号：熊夫利符号和国际符号(了解 3.2.3)

32个点群按其中包含的特征对称要素划分为七个晶系，根据对称性的高低将这七个晶系分为高，中，低三个等级：

表3.4 晶系的特征对称要素

晶 体	晶 系	特征对称要素
高 级	立 方	$4 \quad \bar{3}$
中 级	六 方	$\bar{6}$ 或 $\bar{6}$
	四 方	$\bar{4}$ 或 $\bar{4}$
	三 方	$\bar{3}$ 或 $\bar{3}$
低 级	正 交	$3 \quad \bar{2}$ 或 $2 \quad m$ (都互相垂直)
	单 斜	$\bar{2}$ 或 m
	三 斜	无

3.3 晶体的微观对称性及230个空间群

对称要素	符号	对称动作	符号	等同图形	阶
次旋转轴	$\underline{n}$	旋转	$L(a)$	相等图形	n
反映面	m	反映	M	左右手图形	2
对称中心	i	倒反	I	左右手图形	2
点阵	T	平移	T	相等图形	∞
反轴	$\bar{n}$	旋转倒反	$L(a)I$	左右手图形	n 或 $2n$
螺旋轴	n_p	旋转平移	$L(a)T$	相等图形	∞
滑移面	m_p	反映平移	MT	相等图形和左右手图形	∞

在晶体的微观结构中除了存在八种独立宏观对称要素之外，也存在与空间对称动作相对应的对称要素：点阵、滑移面、螺旋轴。这些在微观无限空间中所特有的对称要素，称为微观对称要素。

3.3 晶体的微观对称性及230个空间群

类似于宏观对称要素组合成32个点群一样。包括晶体的宏观对称要素和微观对称要素在内全部对称要素的一种组合就构成晶体的一种微观对称类型——共**230种组合方式**。

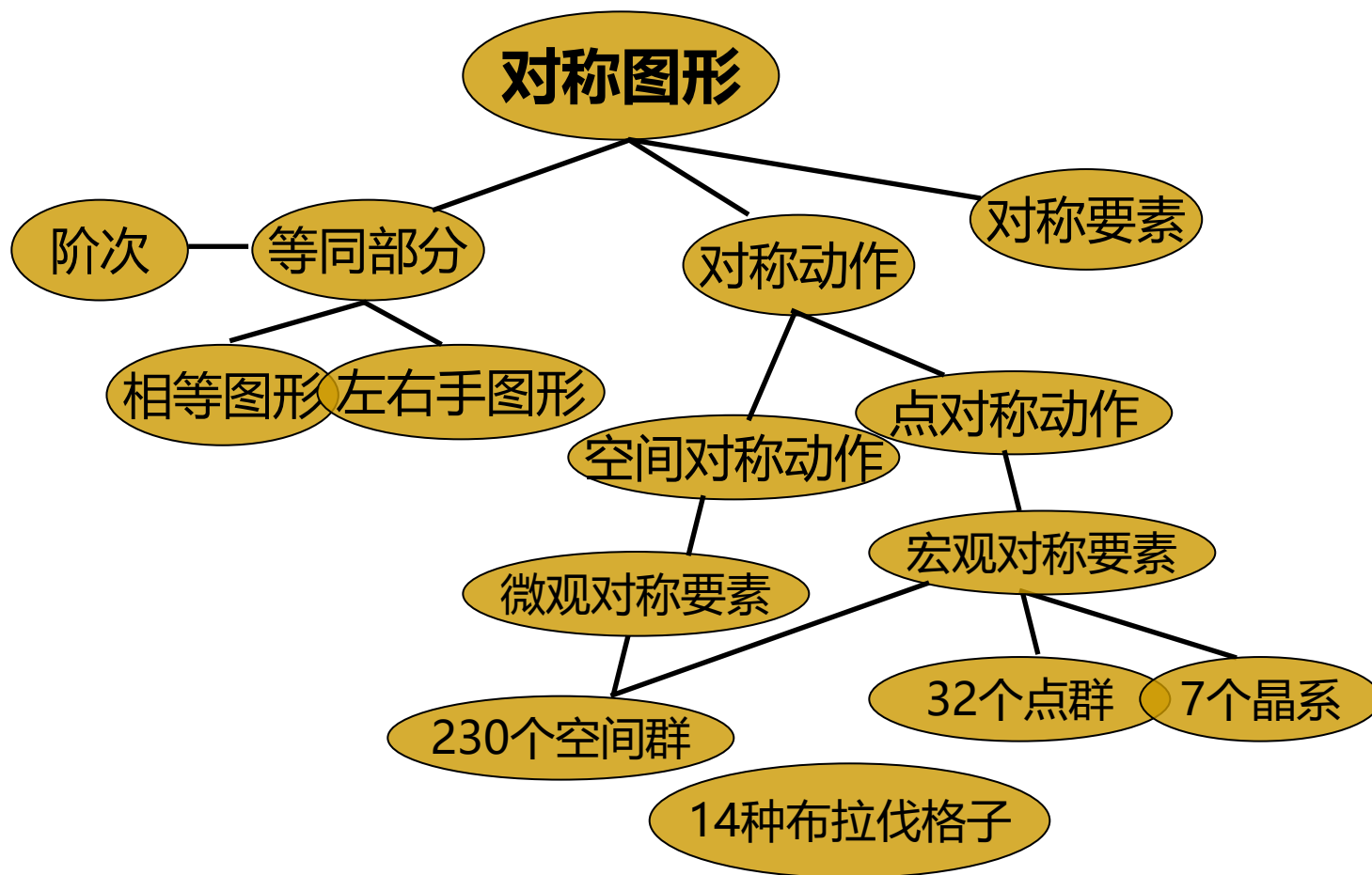
它反映了晶体结构的微观对称性。**230种晶体微观对称性**也称为**230个空间群**。任何一个晶体就其结构而言，必定属于这230种中的一个，不会出现超出之外的新类型，也不会在其中找不到。

晶体的宏观对称性就是晶体微观对称性的宏观表现。

空间 — 每种对称类型都含有空间对称动作对应的微观对称要素。

群 --- 特殊集合 (**封闭、组合**)

本章概念



本章概念

对称要素	符号	对称动作	符号	等同图形	阶
旋转轴	n	旋转	$L(a)$	相等图形	n
反映面	m	反映	M	左右手图形	2
对称中心	i	倒反	I	左右手图形	2
点阵	T	平移	T	相等图形	∞
反轴	$\bar{n}$	旋转倒反	$L(a)I$	左右手图形	n 或 $2n$
螺旋轴	n_p	螺旋旋转	$L(a)T$	相等图形	∞
滑移面	m_p	滑移反映	MT	相等图形和左右手图形	∞

简单对称动作

点对称动作

对称轴

复合对称动作

空间对称动作

对称面

实习三：观察模型的对称结构





17 3:13 PM

本章小结

- 1、点阵中对称要素取向、轴次规律；
- 2、晶体中8种独立的宏观对称要素及其由来；
- 3、晶体中宏观对称要素的组合原则：轴/轴，面/轴，轴/面/心；
- 4、32个点群的详细由来(Td群， Oh群)；
- 5、7个晶系的分类原则；
- 6、230个空间群的简单理解。