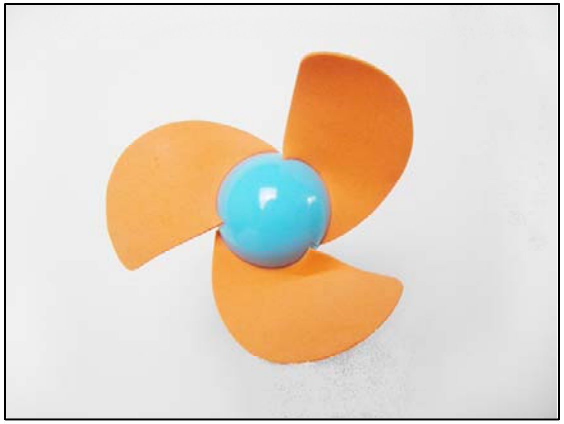
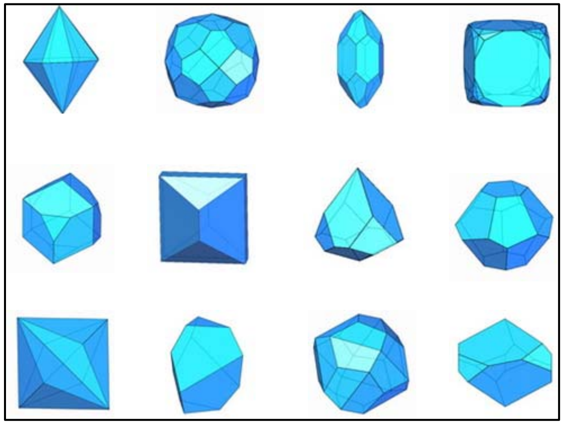
第三章 晶体的对称性理论

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……

为了清晰对称性理论，我们迫切需要定义“**对称图形**”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

举例：三叶小风扇

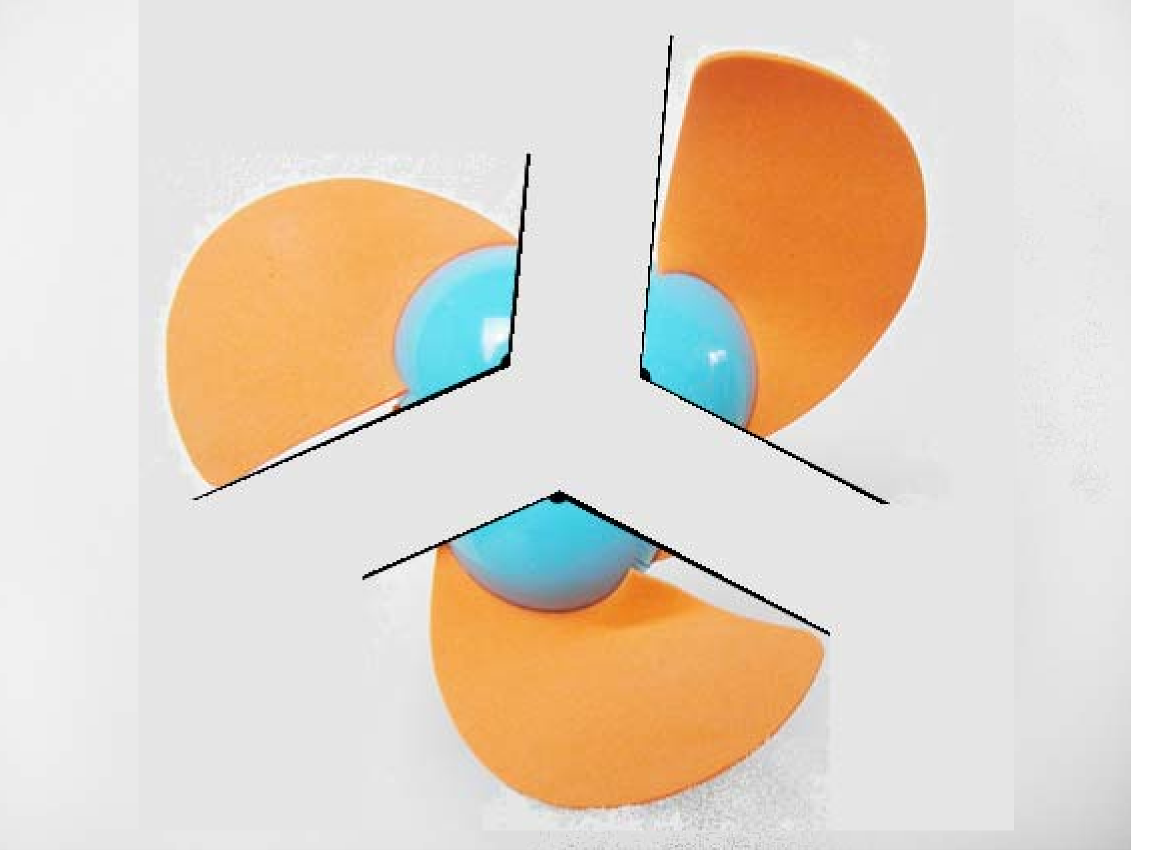
1、是否对称图形？
是

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

举例：一朵花，有五个花瓣

对称图形： 花

等同图形：一个花瓣，是相等图形

阶　次： 5

对称动作：旋 转

对称要素：直线

举例：一只蝴蝶
两片翅膀

对称图形：蝴蝶

等同图形：一片翅膀

不相等图形

阶　次：2

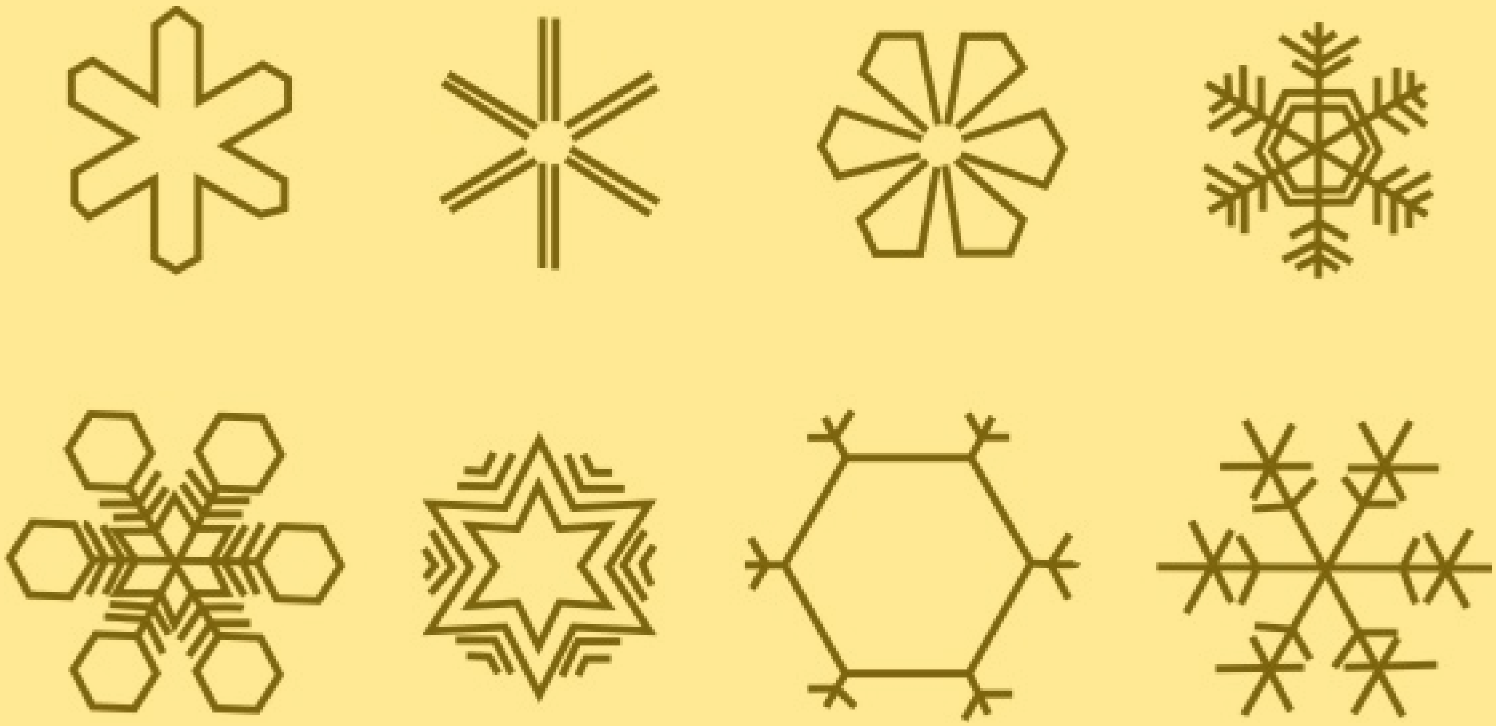
对称动作：反映

对称要素：平面

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

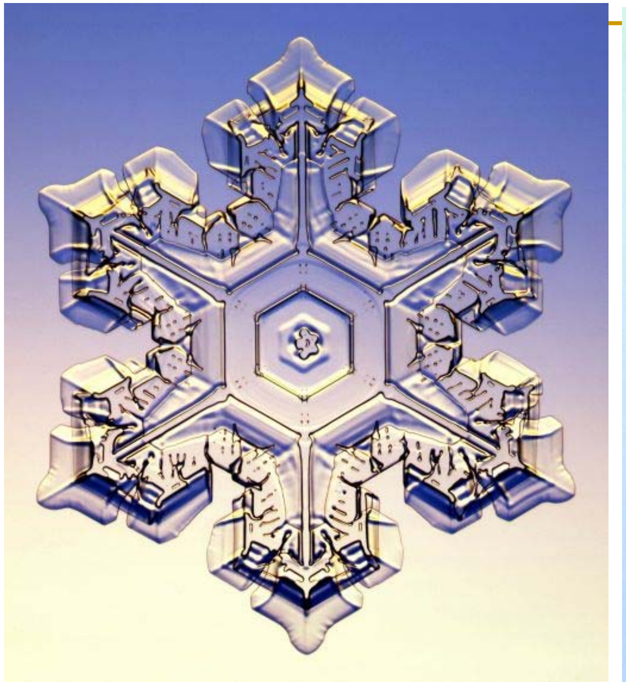


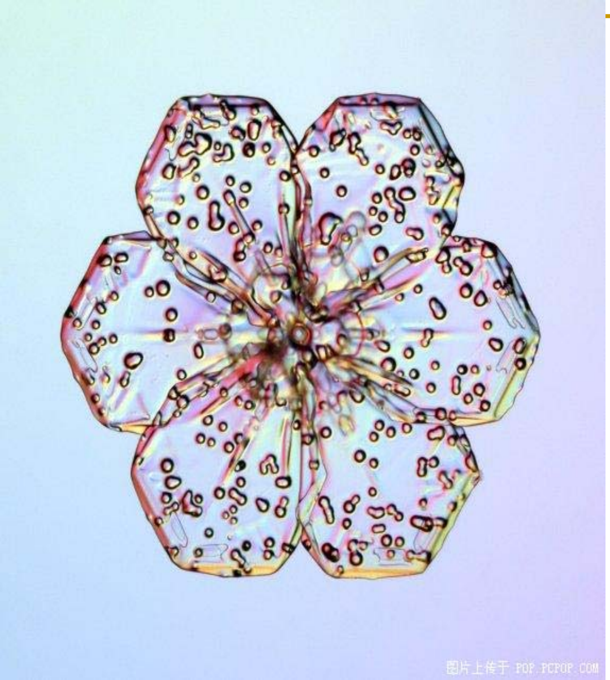
自然界八种雪花的图案

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)

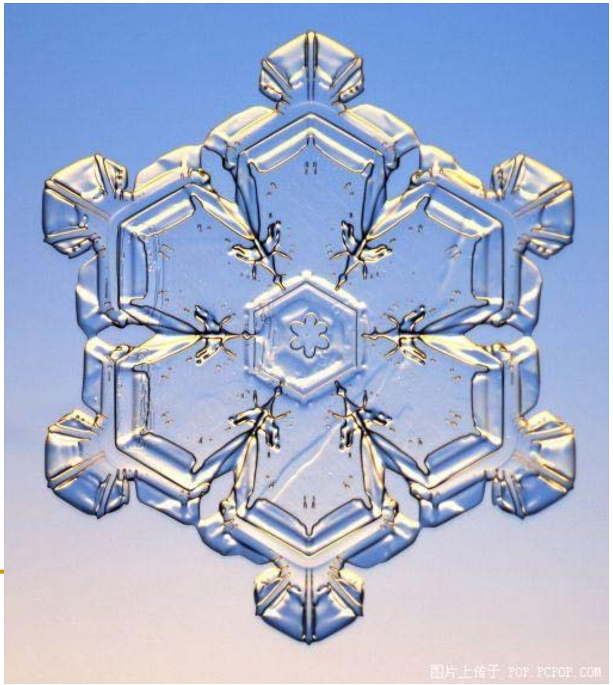


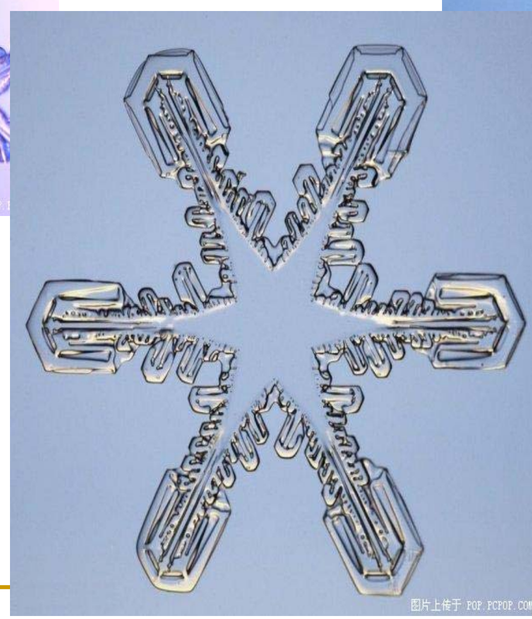

图片上传于 POP.PCPOP.COM

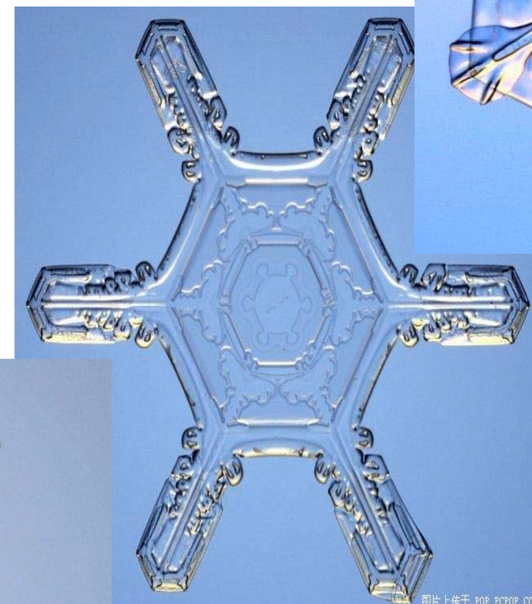

图片上传于 POP.PCPOP.COM

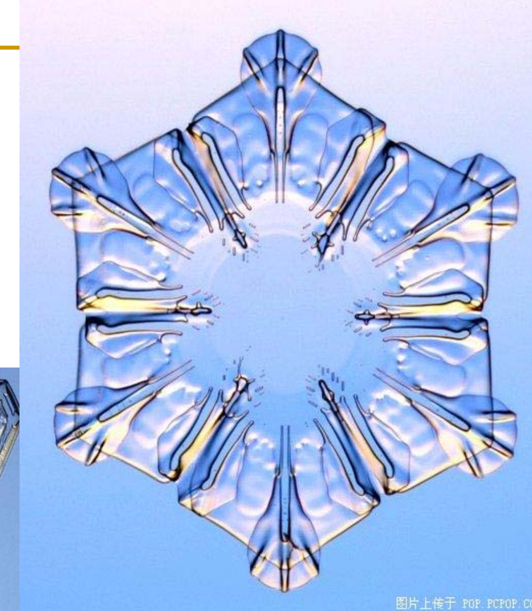

图片上传于 POP.PCPOP.COM


图片上传于 POP.PCPOP.COM


图片上传于 POP.PCPOP.COM


图片上传于 POP.PCPOP.COM


图片上传于 POP.PCPOP.COM


图片上传于 POP.PCPOP.COM

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）

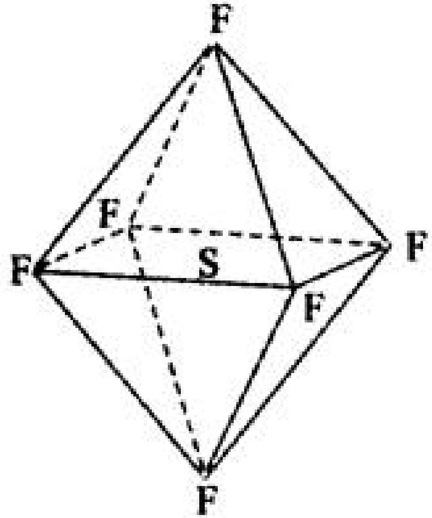
1、是否对称图形？

2、等同图形？

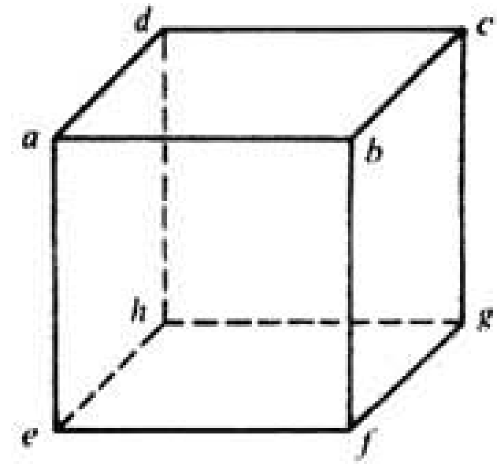
3、对称图形阶次？

4、对称动作？

5、对称要素？



正八面体



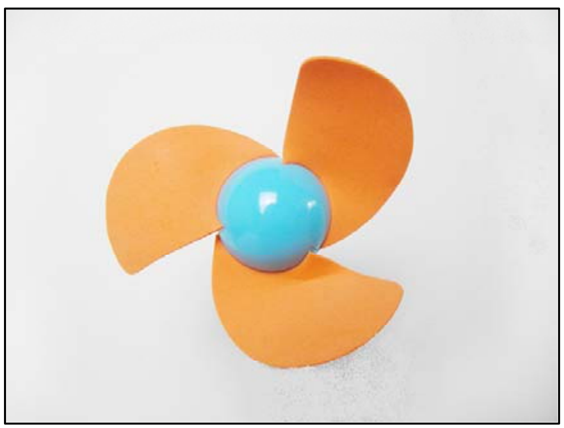
正六面体

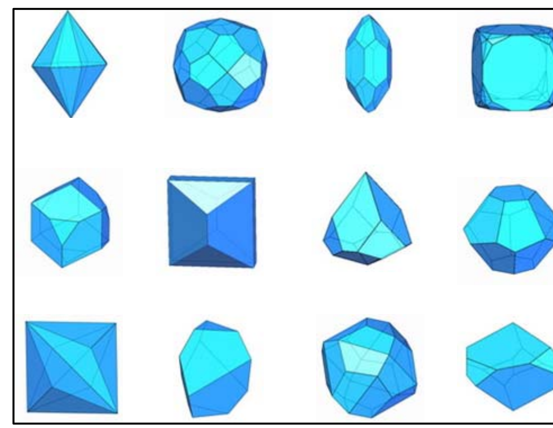
研究图形的对称性，就是要研究图形的等同部分的空间排布规律。复杂的对称图形，常常含有多种对称要素，这些对称要素的数量和分布就决定了各等同部分的数量和分布规律。

3.1 对称性概念，对称动作和对称要素

我们不难发现有两类等同图形：

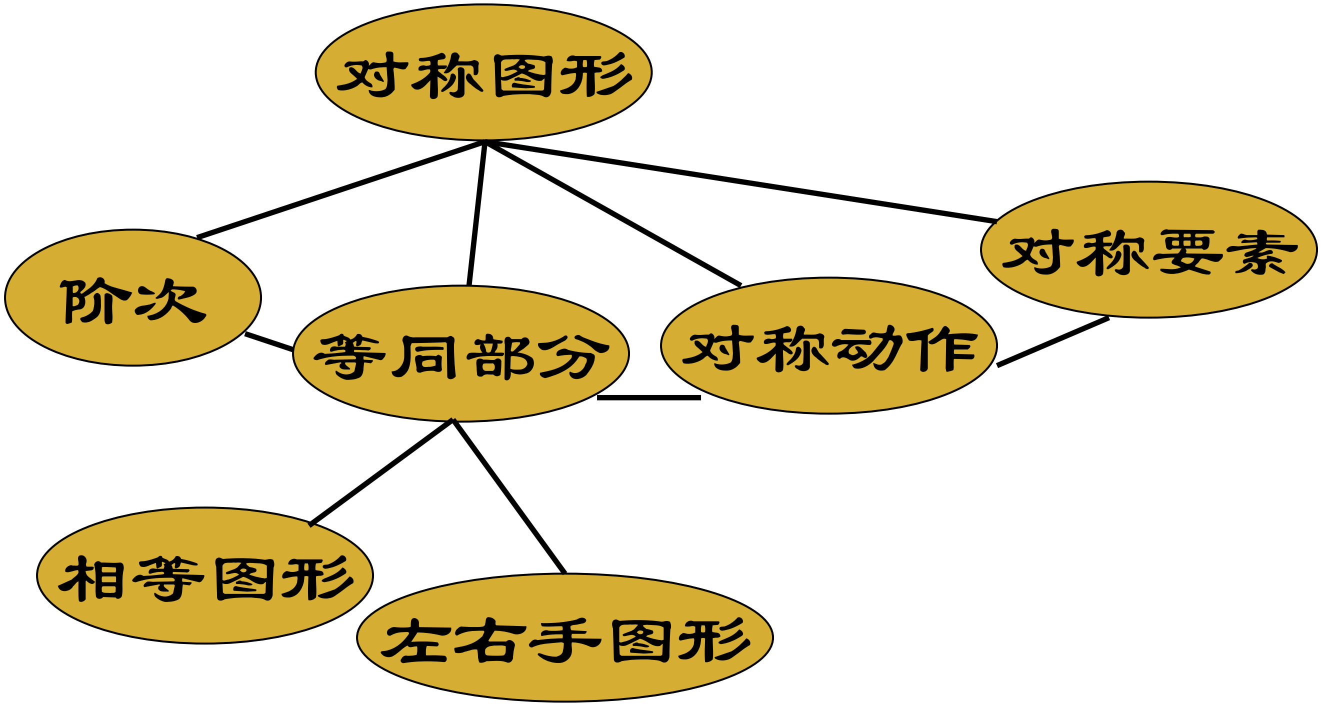
等同图形中包括可以完全迭合的图形叫做相等图形，以及互成镜像的等同而不相等图形，（又称左右手图形）





小结：

图形被均匀分割成几个部分，依据一定的几何元素(点、线、面等)将整个图形进行一定的变换动作后，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。



一、 旋转（绕轴旋转a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：$\alpha = \dfrac{2\pi}{n}$

阶 次：n；

等同图形：旋转只能使相等图形重合。

例如：三叶小风扇中有$\underline{3}$。对应的对称动作有： $L(\frac{2\pi}{3})$。

例如：正八面体中有$\underline{2}$、$\underline{3}$、$\underline{4}$。对应的对称动作有： $L(\frac{2\pi}{2})$、$L(\frac{2\pi}{3})$、 $L(\frac{2\pi}{4})$。

二、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的中点必在反映面上。

阶 次：2;

等同图形：一次反映只能使左右手图形重合。

例如：理化楼建筑有m，对应的对称动作为M。

例如：正八面体中有许多m，对应的对称动作为M。

三、对称中心（如照相）

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。

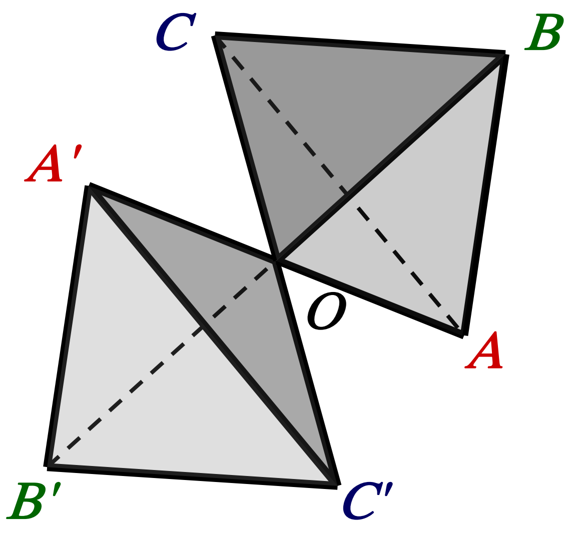


图3.1.2

阶　次：2;

等同图形：一次倒反只能使左右手图形重合。

例如：如图3.1.2的图形具有一个i。对应的对称动作为L。

例如：正八面体中有一个i。对应的对称动作为L。

四、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}。

五、反轴（按轴旋转a角，再按轴上点倒反）

对称动作：旋转倒反(复合)，　　　符号：$L(a)I$，a为基转角；

对称要素：反轴，　　　符号：$\bar{n}$（轴次）；

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

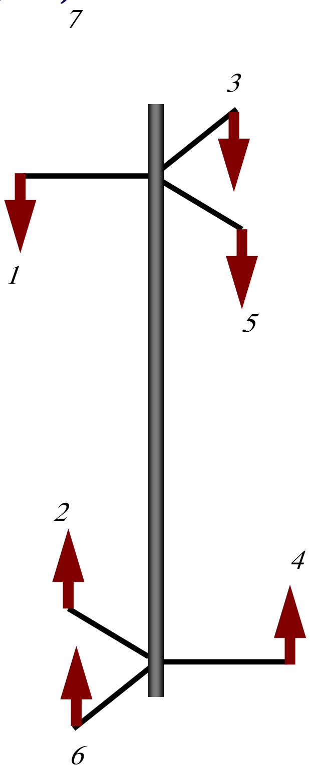
阶　次：如果n是偶数，反轴的阶次为n；

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。

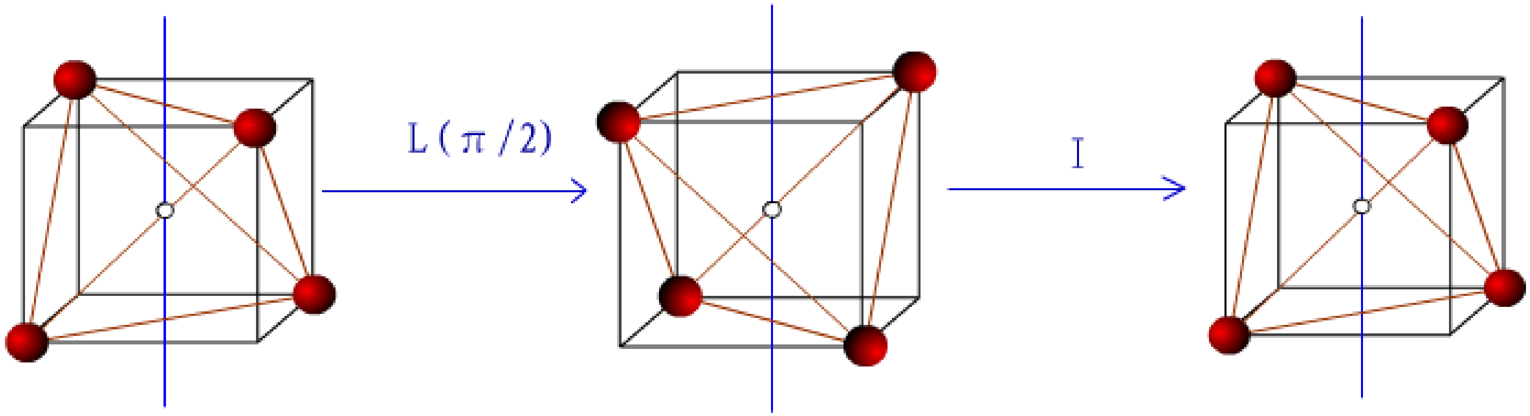
例如：

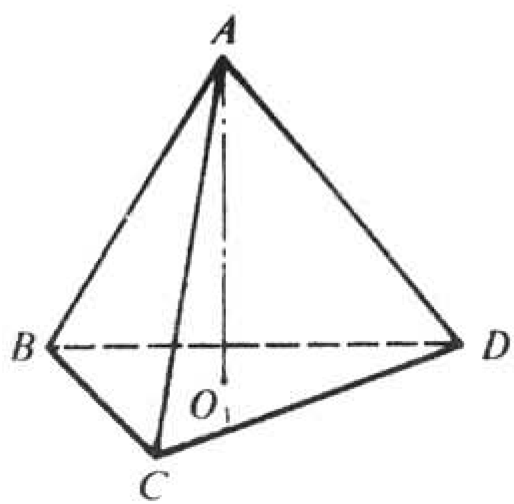
1、右图图形具有$\bar{3}$



▲ $\bar{3}$

2、正四面体有 $\bar{4}$





六、螺旋轴（先绕轴旋转a角，沿轴向平移T）

对称动作：螺旋旋转(复合)，　　符号：$L(a)T$，a为基转角；

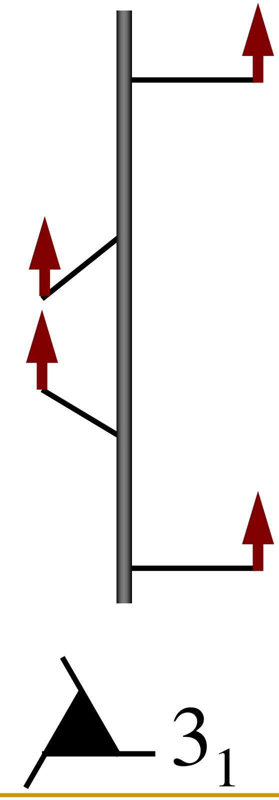
对称要素：螺旋轴，　　符号：n_{m}，m为小于n的整数；

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

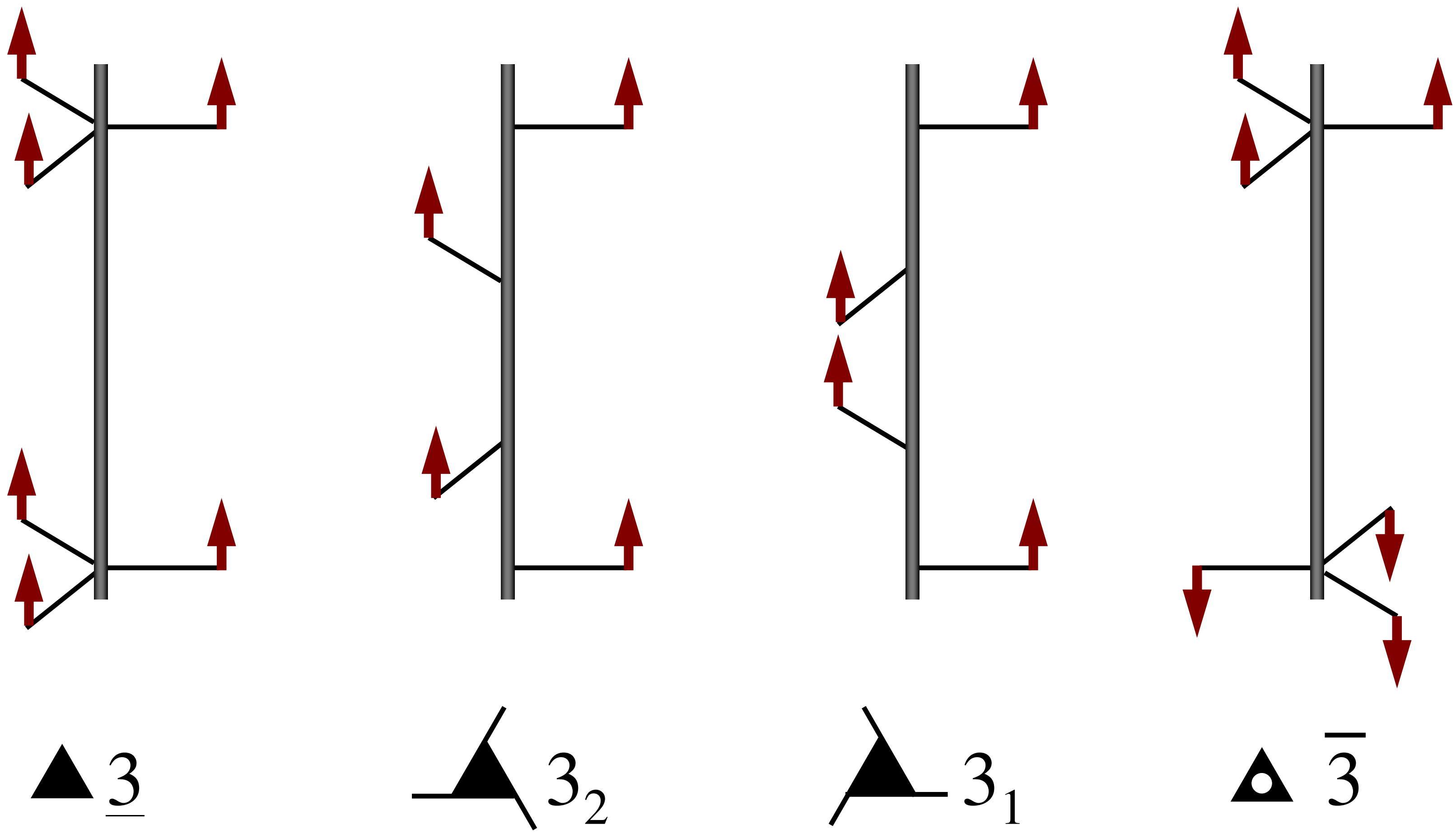
阶　次：∞；

等同图形：螺旋旋转只能使相等图形重合。

例如：三重螺旋轴3_1。

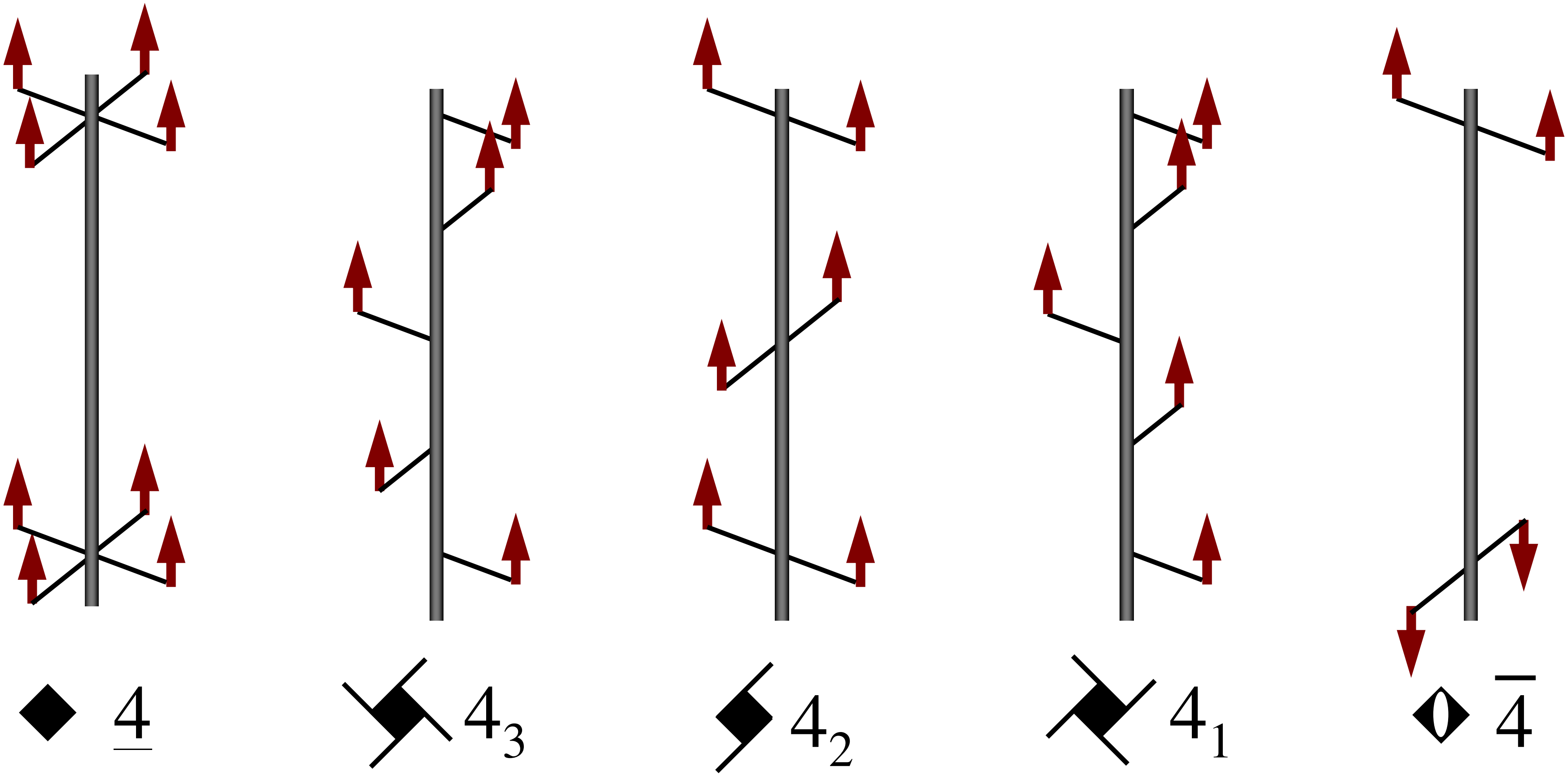


区别 $\underline{3}$ 3_2 3_1 $\bar{3}$

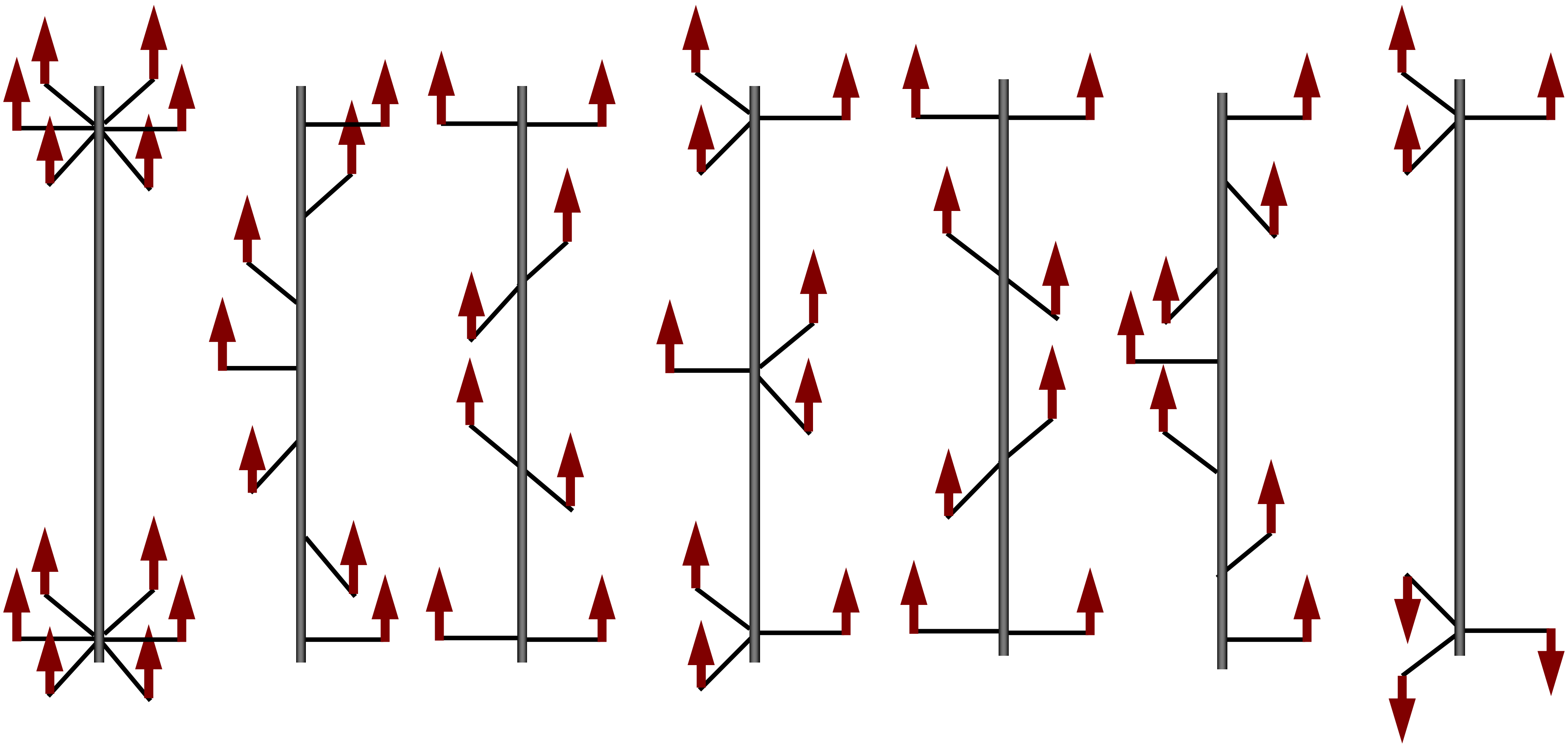


三重轴、三重螺旋轴、三重反轴示例

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



四重轴、四重螺旋轴、四重反轴示例

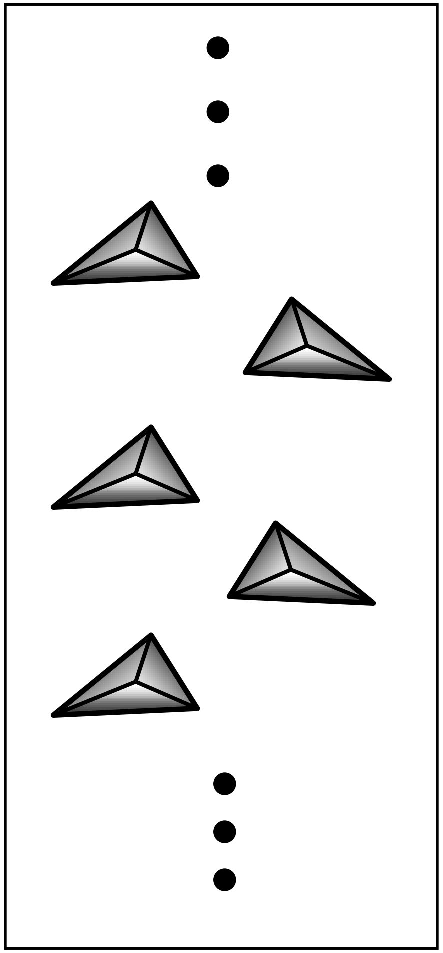


$\underline{6}$ 6_5 6_4 6_3 6_2 6_1 $\bar{6}$

七、滑移面(先按面反映，再平移)

对称动作：滑移反映(复合)符号：*MT*;

对称要素：滑移面，符号：？？；



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

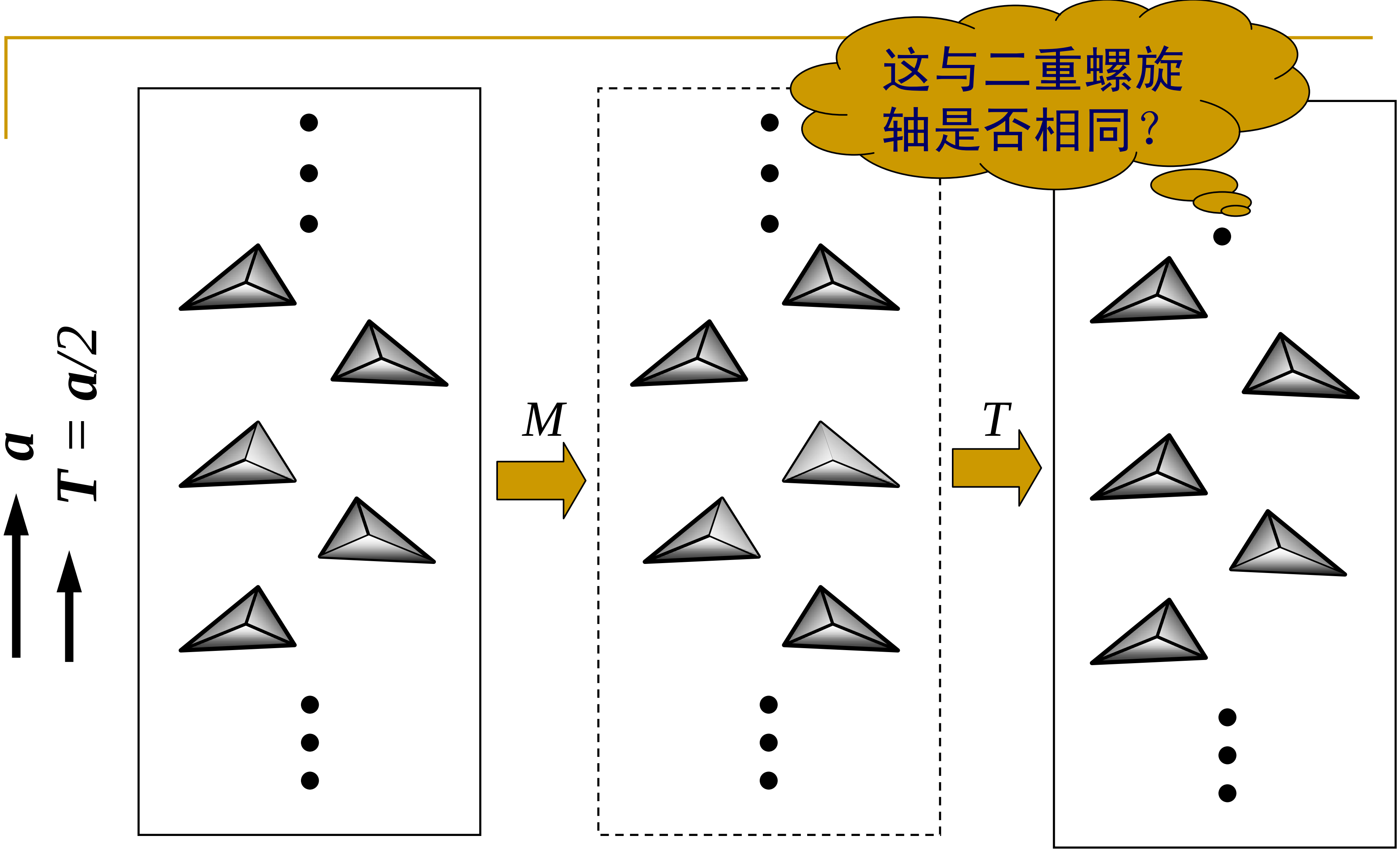


图3.1.5　具有滑移面的对称图形

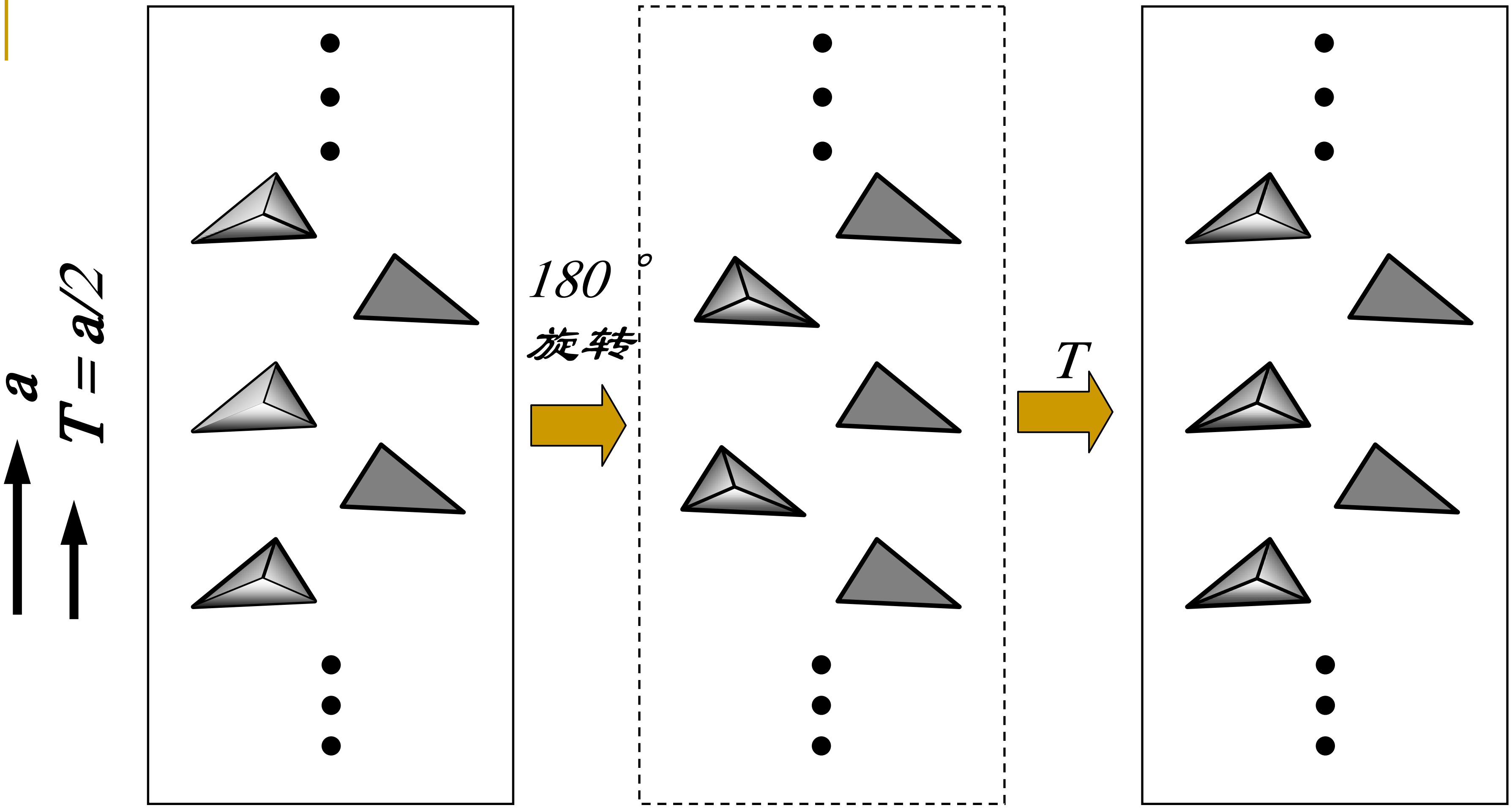
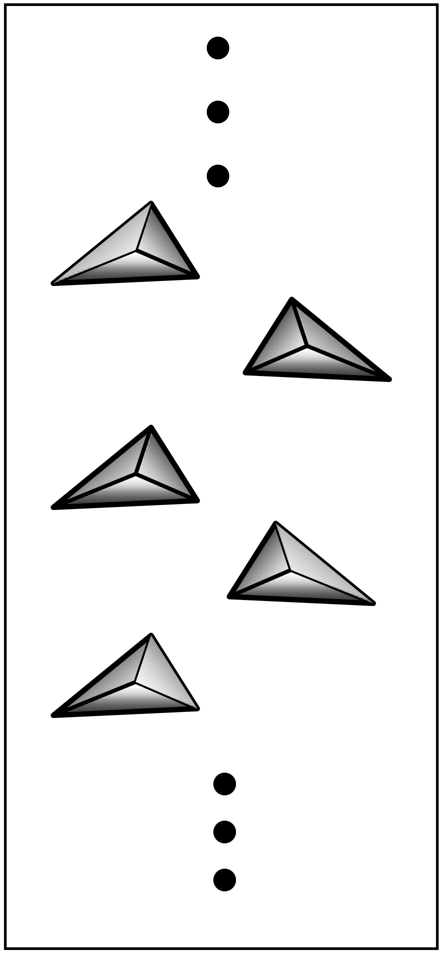
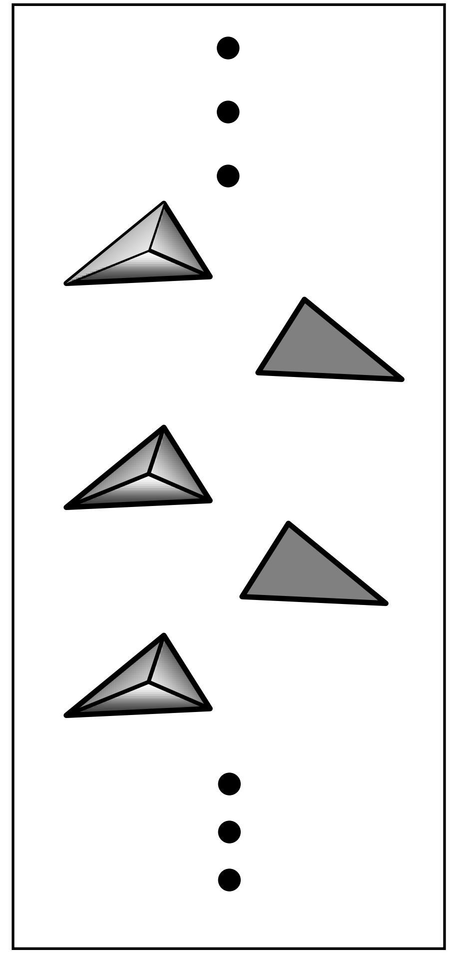


图3.1.5 具有二重螺旋轴的对称图形



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

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	?	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；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。

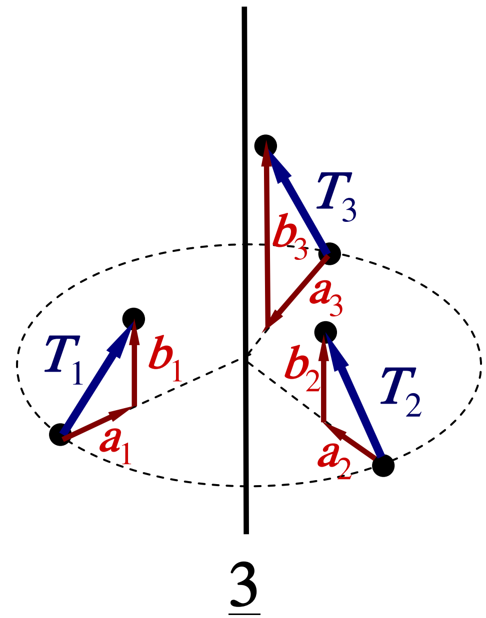
例1：空间点阵中的三重旋转轴（$\underline{3}$）必定和点阵中一组直线点阵平行，而和一组平面点阵垂直。

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$/\!/\,\underline{3}$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$/\!/\,\underline{3}$。

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;

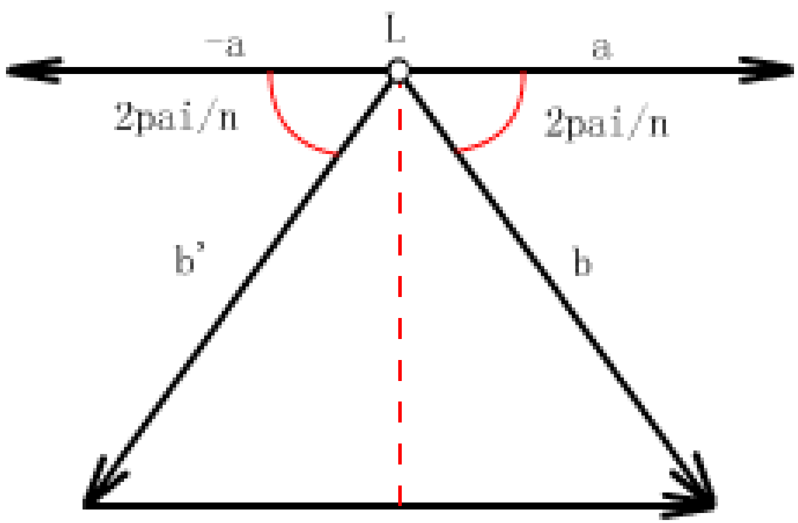
2. 任何对称面必定和点阵中一组平面点阵平行，并和一组直线点阵垂直。

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。

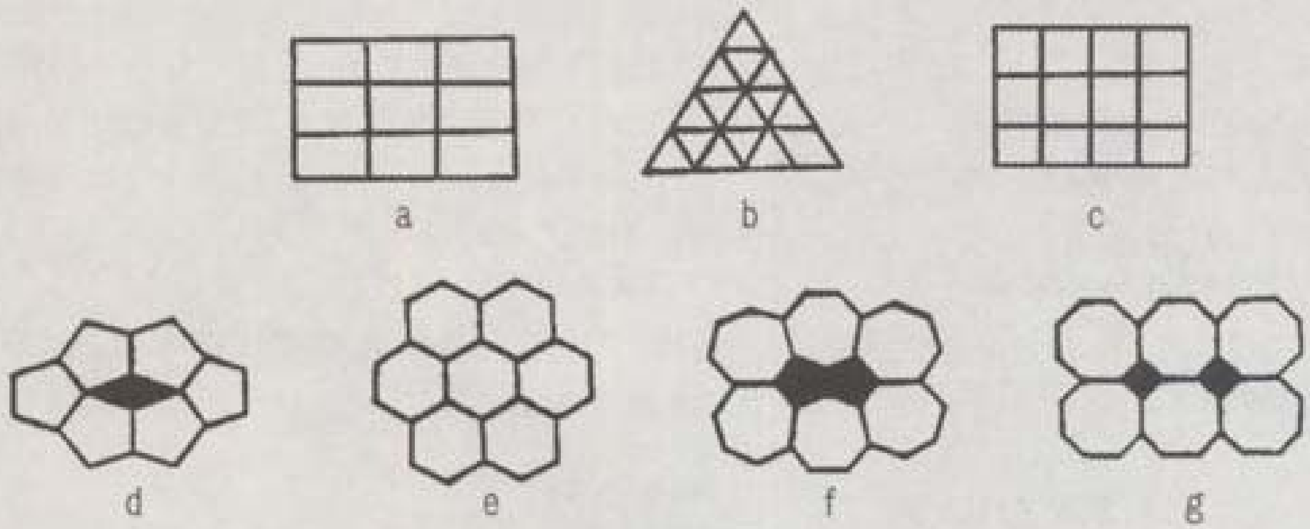


请同学们在课后利用点阵理论和对称性证明这个结论！

近年来，对准晶体的观测和研究中发现有5重轴的对称图像。这与我们的证明是否矛盾？

2011化学Nobel获奖者.ppt

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。



a、b、c、d、e、f、g分别表示垂直L^2、L^3、L^4、L^5、L^6、L^7、L^8的多边形网孔。五、七、八边形网孔不能无间隙地排列

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。

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。

对称要素	符号	对称动作	符号	等同图形	阶次
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	旋转平移	$L(a)T$	相等图形	∞
滑移面	?	反映平移	MT	相等图形和左右手图形	∞

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 $\underline{n}$，反映面 m，对称中心 I，反轴 $\overline{n}$。

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存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。

3.2.2 宏观对称要素的组合及32种对称类型

晶体宏观对称性的八种独立对称要素 i、m、$\underline{1}$、$\underline{2}$、$\underline{3}$、$\underline{4}$、$\underline{6}$、$\bar{4}$

描述一个具体晶体外形所具有的宏观对称要素不外乎是这八种对称要素的一种或几种的组合。

例如：正三棱锥具有的宏观对称要素为： $\underline{3}$、3 m

正三棱柱具有的宏观对称要素为：3 $\underline{2}$、$\bar{6}(\underline{3}+m)$、4 m。

对称要素的一种组合，就对应着一种对称类型。每一种几何外型都属于一种对称类型。

共有32种组合方式，称作晶体宏观对称性的32个点群。

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:

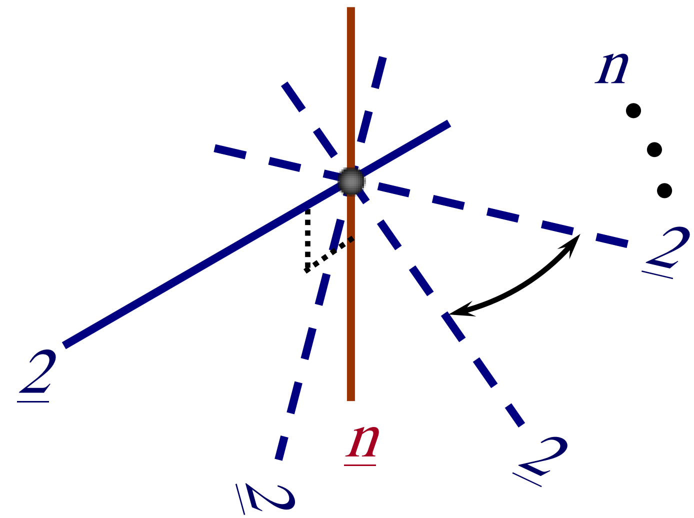
a、参加组合的对称要素必须至少相交于一点。这是因为晶体的外形是有限的、封闭的多面体。

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)

人们在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**$2p/2n$。



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

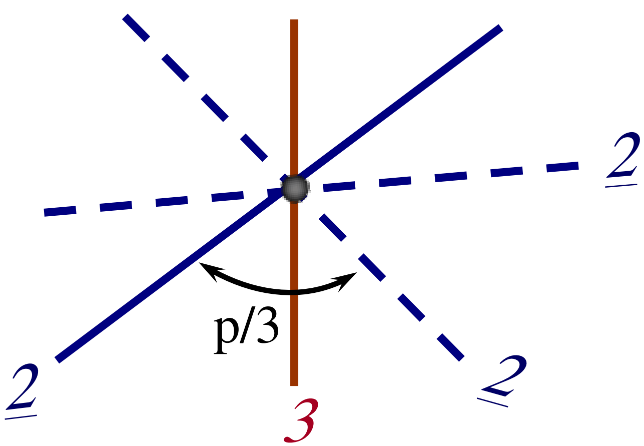


图3.2.2 三次轴与二次轴的组合

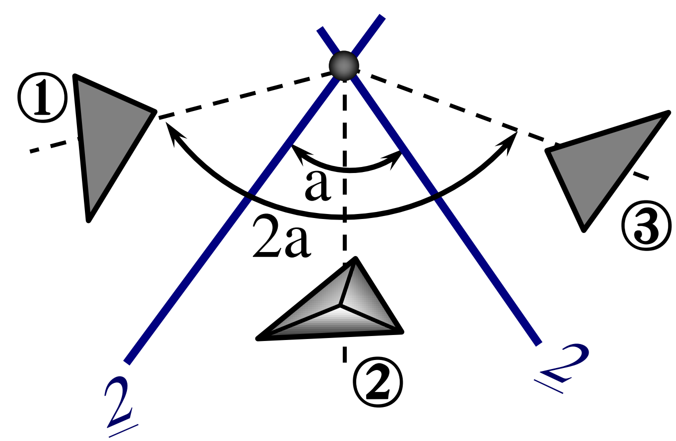
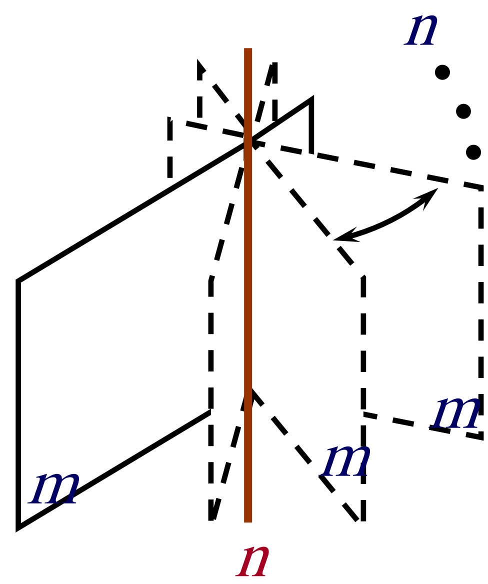


图3.2.3 二次轴与二次轴的组合

(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2p/2n。

B.两个反映面交角为a，则交线为一个n次轴，其基转角为2a。



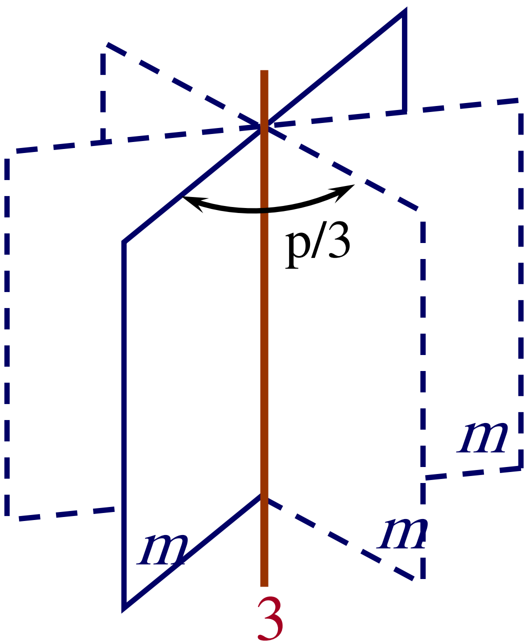


图 3.2.4 包含三次轴的反映面

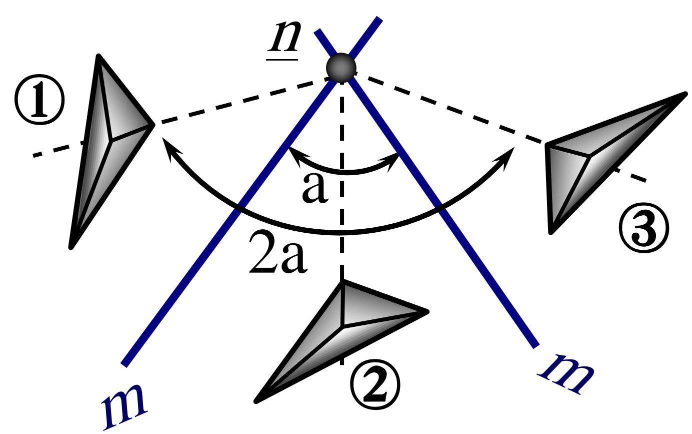


图3.2.5 两个反映面的组合

(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。

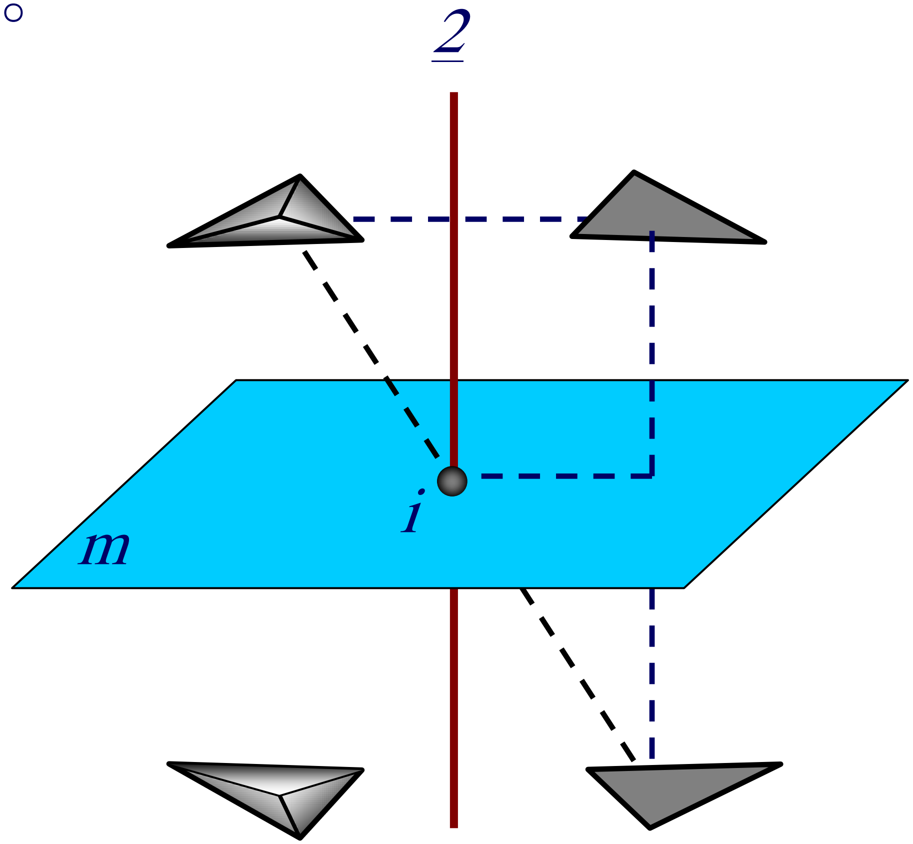


图3.2.6 $\underline{2}$ m & i 组合

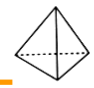
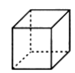
按以上的原则，将八种的晶体的宏观基本对称要素（i、m、$\underline{1}$、$\underline{2}$、$\underline{\bar{3}}$、$\underline{4}$、$\underline{6}$、4），进行组合，一共能够得到32种组合方式，也叫**32个点群**。

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	$\underline{2}$、$2m$	C_{2v}	$2mm$	mm
	$3\underline{2}$	D_2	222	222
	$3\underline{2}$、$3m$、i	D_{2h}	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	mmm
三方(三角)	$\underline{3}$	C_3	3	3
	$\bar{3}(\underline{3}+i)$	C_{3i}	$\bar{3}$	$\bar{3}$
	$\underline{3}$、$3m$	C_{3v}	$3m$	$3m$
	$\underline{3}$、$3\underline{2}$	D_3	32	32
	$\underline{3}$、$3\underline{2}$、$3m$、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	$4\,\underline{3}$、$3\,\underline{2}$	T	$2\,3$	$2\,3$
	$4\,\underline{3}$、$3\,\underline{2}$、$3\,m$、i	T_h	$\frac{2}{m}\,\bar{3}$	$m\,3$
	$4\,\underline{3}$、$3\,\overline{4}$、$6\,m$	T_d 	$\bar{4}\;3\,m$	$\bar{4}\;3\,m$
	$4\,\underline{3}$、$3\,\underline{4}$、$6\,\underline{2}$	O	$4\,3\,2$	$4\,3$
	$4\,\underline{3}$、$3\,\underline{4}$、$6\,\underline{2}$、$9\,m$、i	O_h 	$\frac{4}{m}\,\bar{3}\,\frac{2}{m}$	$m\,3\,m$

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、结合、有单位、有逆）

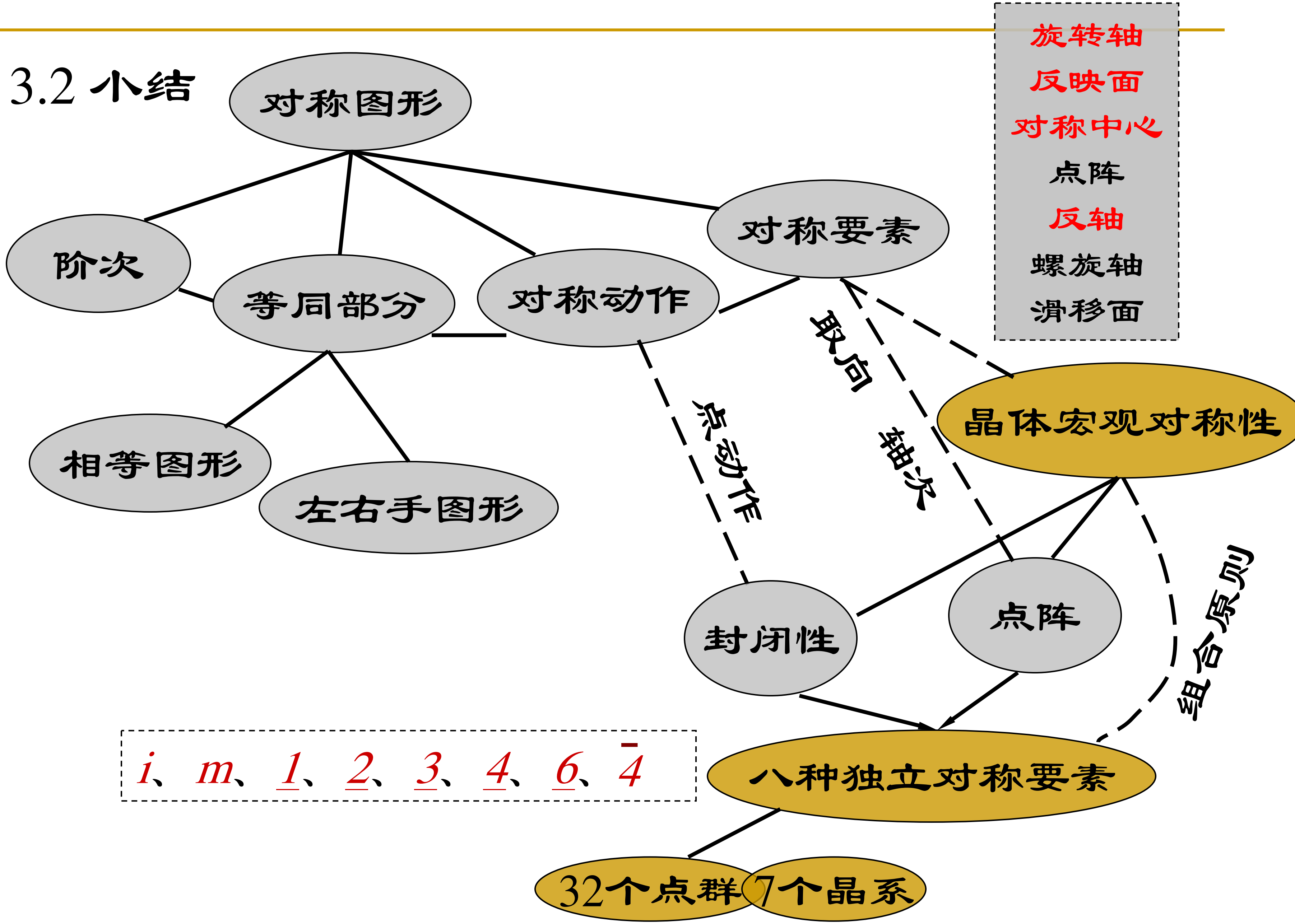
32个点群有两种符号：熊夫利符号和国际符号(了解3.2.3)

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	$4\ \underline{3}$
中级	六方	$\underline{6}$ 或 $\bar{6}$
	四方	$\underline{4}$ 或 $\bar{4}$
	三方	$\underline{3}$ 或 $\bar{3}$
低级	正交	$3\ \underline{2}$ 或2 m（都互相垂直）
	单斜	$\underline{2}$ 或m
	三斜	无

3.2 小结



对称图形
阶次
等同部分
对称动作
对称要素
相等图形
左右手图形
点动作
取向
轴次
晶体宏观对称性
组合原则
封闭性
点阵
八种独立对称要素
32个点群
7个晶系
旋转轴
反映面
对称中心
点阵
反轴
螺旋轴
滑移面
i、m、1、2、3、4、6、$\bar{4}$

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	?	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。

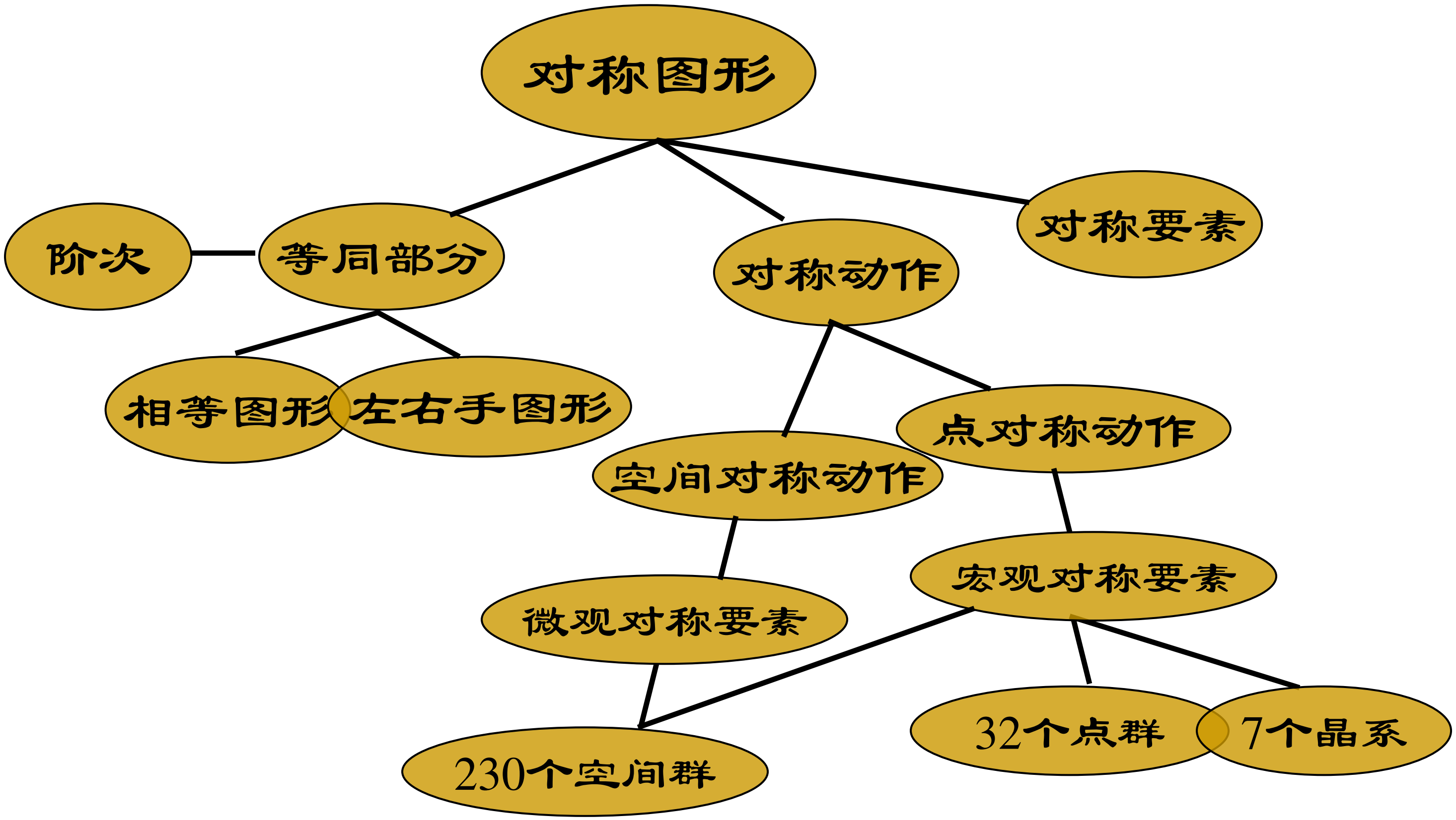
它反映了晶体结构的微观对称性。230种晶体微观对称性也称为230个空间群。任何一个晶体就其结构而言，必定属于这230种中的一个，不会出现超出之外的新类型，也不会在其中找不到。

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、结合、有单位、有逆）

本章概念



对称图形
阶次
等同部分
对称动作
对称要素
相等图形
左右手图形
点对称动作
空间对称动作
宏观对称要素
微观对称要素
32个点群
7个晶系
230个空间群

本章概念

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	?	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 3:13PM

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。