

# 作业 3

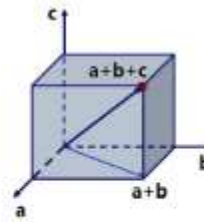
1. 利用晶体中宏观对称要素组合定理，分别推导出 10 个不同的对称型。

答：参考 《晶体衍射学(I)-3 完整版.pdf》 P21~P74

一共 32 种宏观对称型，挑选 10 个即可。

本题目的：巩固晶体对称性的推导

2.简述各晶系晶体的定向原则。



## 点群的国际符号

点群国际符号的特征方向

晶 系	与国际符号的三位相应之方向（顺序列出）					
	以单位晶胞之三个基矢表示			以方向指数表示		
立 方	a	a+b+c	a+b	[100]	[111]	[110]
六 方	c	a	2a+b	[001]	[100]	[210]
三 方*	c	a		[001]	[100]	
四 方	c	a	a+b	[001]	[100]	[110]
正 交	a	b	c	[100]	[010]	[001]
单 斜	b			[010]		
三 斜	a			[100]		

\* 此处所列是按三方晶系的H取向



## 点群的对称元素方向及国际符号

晶系	第一位		第二位		第三位		点群
	可能对称元素	方向	可能对称元素	方向	可能对称元素	方向	
三斜	1, $\bar{1}$	任意	无		无		1, $\bar{1}$
单斜	2, m, 2/m	Y	无		无		2, m, 2/m
正交	2, m	X	2, m	Y	2, m	Z	222, mm2, mmm
四方	4, $\bar{4}$ , 4/m	Z	无, 2, m	X	无, 2, m	底对角线	4, $\bar{4}$ , 4/m, 422, 4mm, 42m, 4/mmm
三方	3, $\bar{3}$	Z	无, 2, m	X	无		3, $\bar{3}$ , 32, 3m, $\bar{3}m$
六方	6, $\bar{6}$ , 6/m	Z	无, 2, m	X	无, 2, m	底对角线	6, $\bar{6}$ , 6/m, 622, 6mm, 62m, 6/mmm
立方	2, m, 4, $\bar{4}$	X	3, $\bar{3}$	体对角线	无, 2, m	面对角线	23, m3, 432, 43m, m3m

本题目的：熟悉不同晶系的窥视方向

### 3.由点群的对称元素书写点群的国际符号时，要遵守什么原则？

国际符号原则：

①通过对称元素判断晶系分类：



#### 晶体的分类

根据32点群对称特征，晶体分为七个晶系（crystal system）：

立方晶系	有四个3次轴
四方晶系	唯一的高次轴为4次轴或4次反轴
六方晶系	唯一的高次轴为6次轴或6次反轴
三方晶系	唯一的高次轴为3次轴和3次反轴
正交晶系	二次轴或反映面大于1
单斜晶系	二次轴或反映面等于1
三斜晶系	只有1次轴

②根据晶系类别确认窥视方向：



#### 点群的国际符号

	点群国际符号的特征方向					
	与国际符号的三位相应之方向（顺序列出）					
	晶系	以单位晶胞之三个基矢表示			以方向指数表示	
$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	立方	a	a+b+c	a+b	[100]	[111]
$a=b \neq c, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	六方	c	a	2a+b	[001]	[100]
$a=b \neq c, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	三方*	c	a		[001]	[100]
$a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	四方	c	a	a+b	[001]	[100]
$a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	正交	a	b	c	[100]	[010]
$a \neq b \neq c, \alpha=\gamma=90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	单斜	b			[010]	
$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$	三斜	a			[100]	

\* 此处所列是按三方晶系的H取向

③对于每一个窥视方向写出相应的对称元素国际符号。

简写国际符号原则：决定晶系的特征对称元素方向上的对称元素全部保留，其他方向如果同时存在旋转轴和反映面，则只保留反映面。

本题目的：熟练国际符号的书写

#### 4.设计一个实验或用途，充分利用晶体的对称性特性。

答：言之有理即可，例如课上的例子：用 CCD 拍到某高对称性晶体某个位置某个角度的一张衍射图样 pattern, 利用其对称性计算出同一晶体其他位置/其他角度的多张 pattern, 最后对所有 pattern 进行计算即可完成该晶体的三维重建。