

1.3

2025年3月5日 13:56

1.3 晶体结构的对称性与晶系

Neother原理 (定理)

表征晶体对称性及其物理性质对称性之间的关系 (每个连续对称性都有着相应的守恒定律, $E-t, r-t$)

对称性的重要性:

晶体的任一宏观物理性质一定具有它所属**点群**的一切对称性

宏观对称性 (点群)、微观对称性 (还包括平移对称性)

宏观对称性:

旋转、镜面、中心反演

至少有一个点不动, 因此操作构成的群称为点群

正交变换:

变换后任意两点距离不变

正交阵表示 (单纯旋转, 正交阵 $\det=1$; 加上中心反演或镜面, $\det=-1$) (三维情况, 中心反演=镜面+旋转 180°)

正交变换后不变 (本学期只关心正交变换的对称操作)

*不具有平移对称性

e.g. 立方体48个对称操作 (3种轴, 以及不动, 加中心反演翻倍) (没有数镜面)

正四面体的对称操作 \subset 立方体(24个)

平移对称性:

对转动的限制: 只能有1,2,3,4,6重轴 (晶体的对称性定律)

点对称操作的命名

$C_n(n)$: 转动

σ, m : 镜面反映

$i, I, \bar{1}$: 中心反演

S_n : 旋转-镜面反映

\bar{C}_n, \bar{n} : 旋转-中心对称

C_n 和 S_n 的对应关系

两种命名:

Hermann-Mauguin符号 (国际符号)

Schoenflies符号 (熊夫利符号)

主轴: 对称性最高的旋转轴

σ_h : 水平面 (垂直于主轴)

σ_v : 垂直面

σ_d : 二面体面(dihedron)

对称操作群

$G = \{E, A, \dots\}$

群:

广义“乘积”的闭合性

单位元素E

逆元 P^{-1}

结合律

极射赤面投影图

32种点群。。。。

14种布拉维格子（对应点群）

晶系（对应对称性相同的布拉维格子）