第四节 晶体的对称性

- 人们臆测：晶体的外形对称性是晶体内在结构对称性的反映。
- 1891年，费多洛夫、熊夫利发表了空间群理论，充实了Bravaise空间点阵学说的内容。

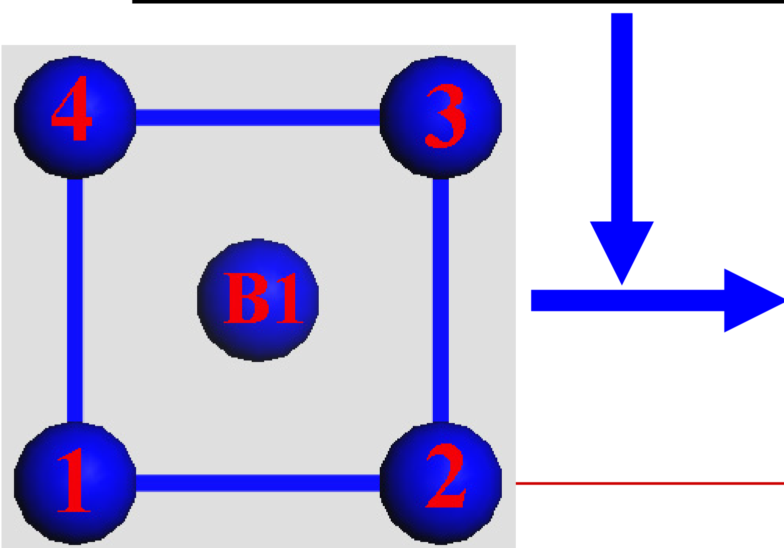
➢ 晶体的基本宏观对称性

- 与一般几何图形不同，由于晶体要受到晶体周期性的限制，所以，晶体只可能具有为数不多的对称类型。

- 按照空间群理论，**晶体的对称类型是由少数基本的对称操作组合而成的。**

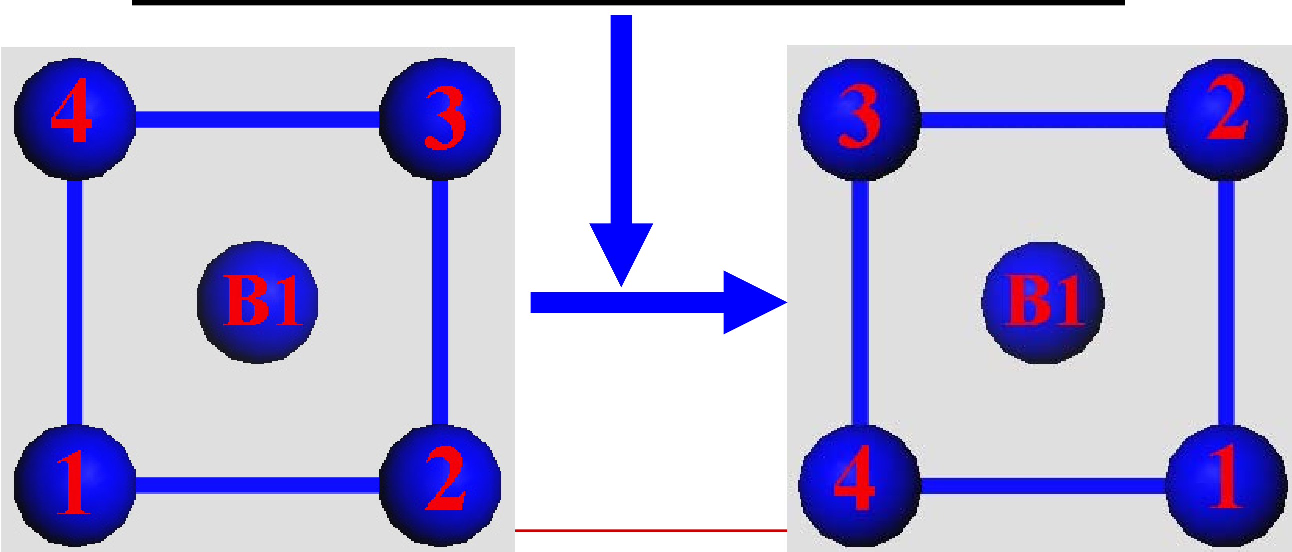
- 对称操作 — 变换
- 对称操作后的晶体必须与操作前的晶体自身重合

绕原子1逆时针旋转90°

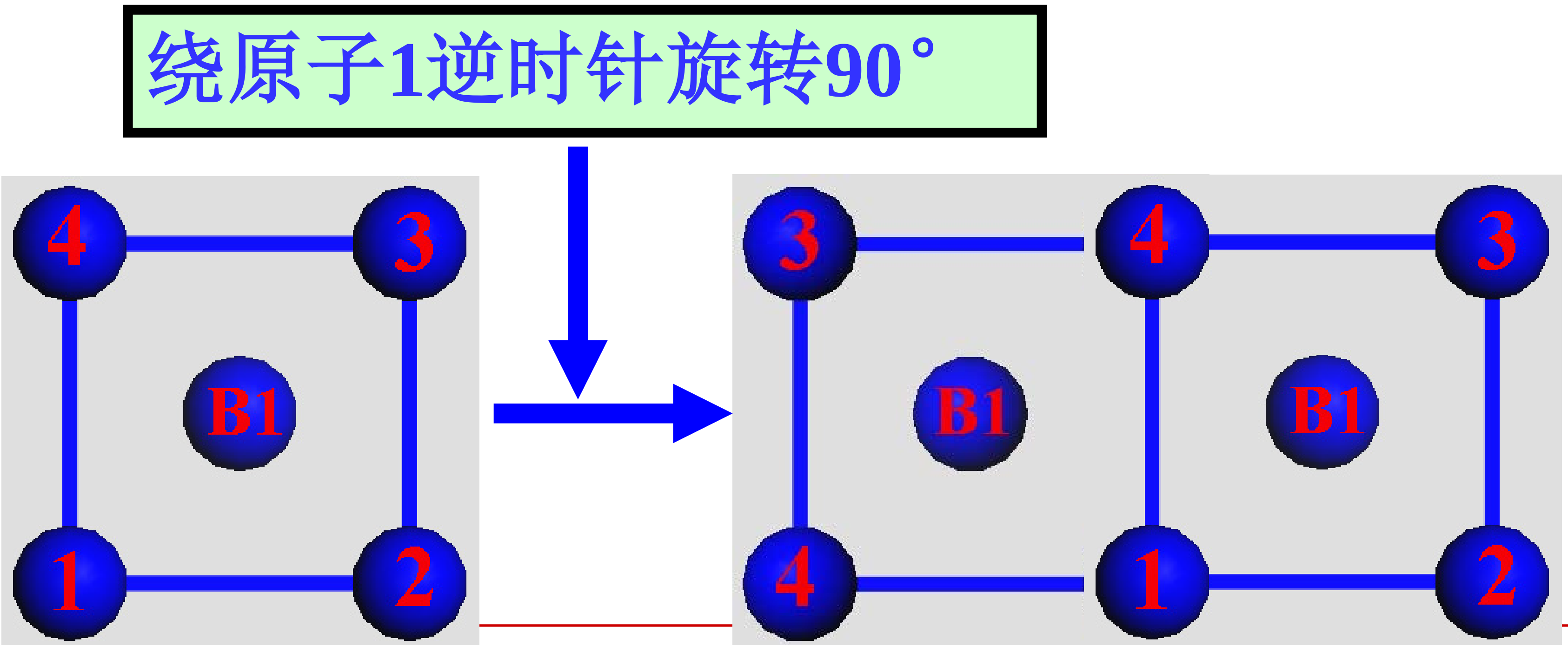


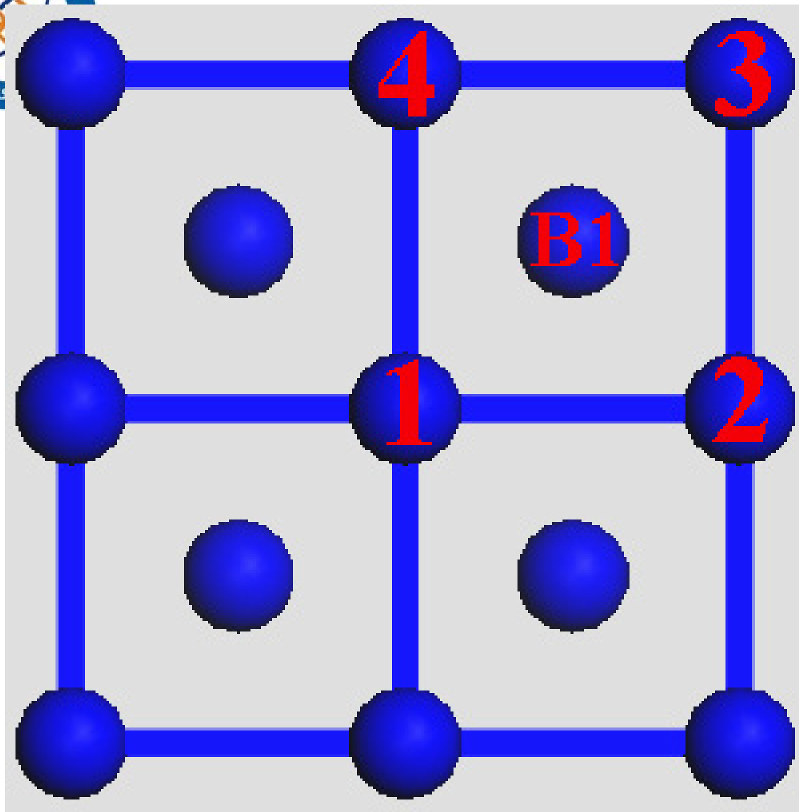
- 对称操作 — 变换
- 对称操作后的晶体必须与操作前的晶体自身重合

绕原子1逆时针旋转90°



- 对称操作 — 变换
- 对称操作后的晶体必须与操作前的晶体自身重合

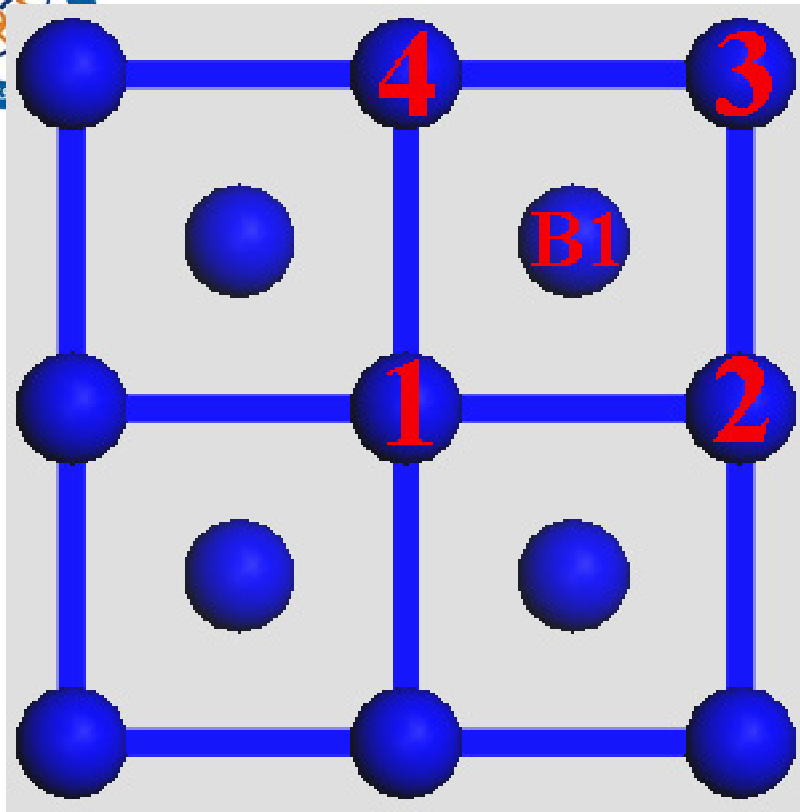




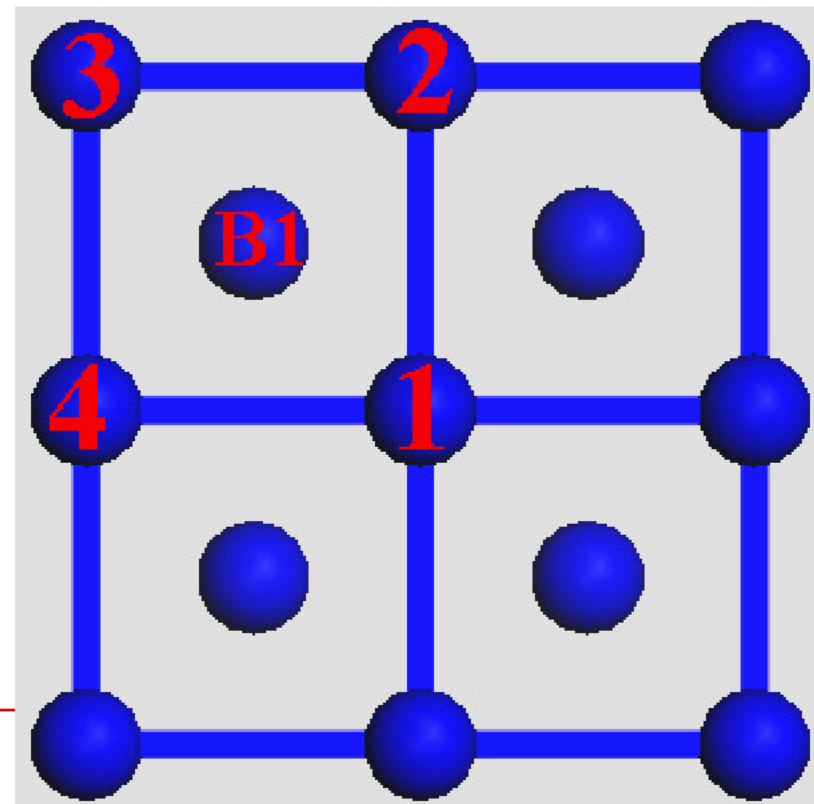
绕原子1逆时针旋转90°

旋转后的晶体与

原晶体自身重合

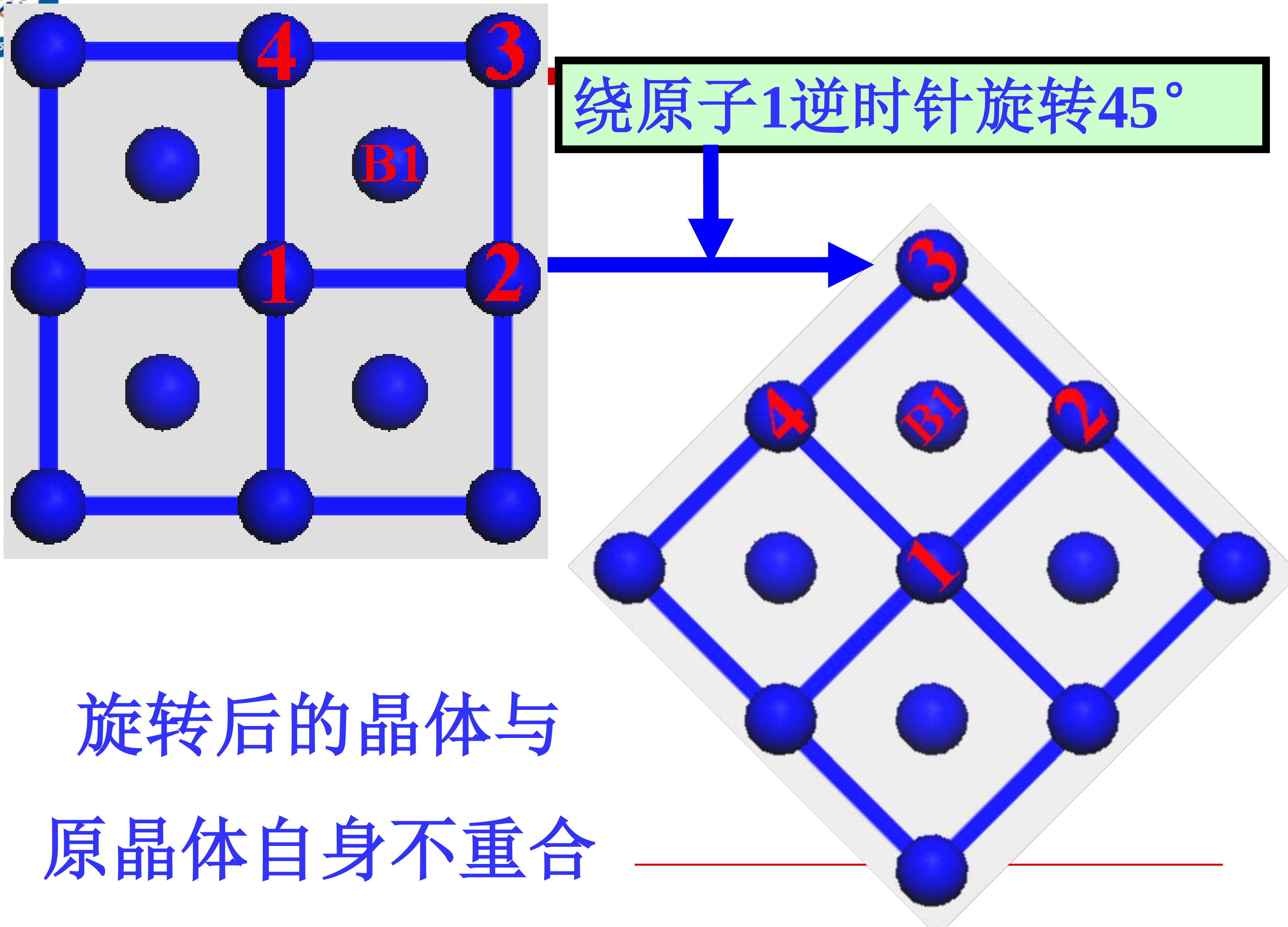


绕原子1逆时针旋转90°



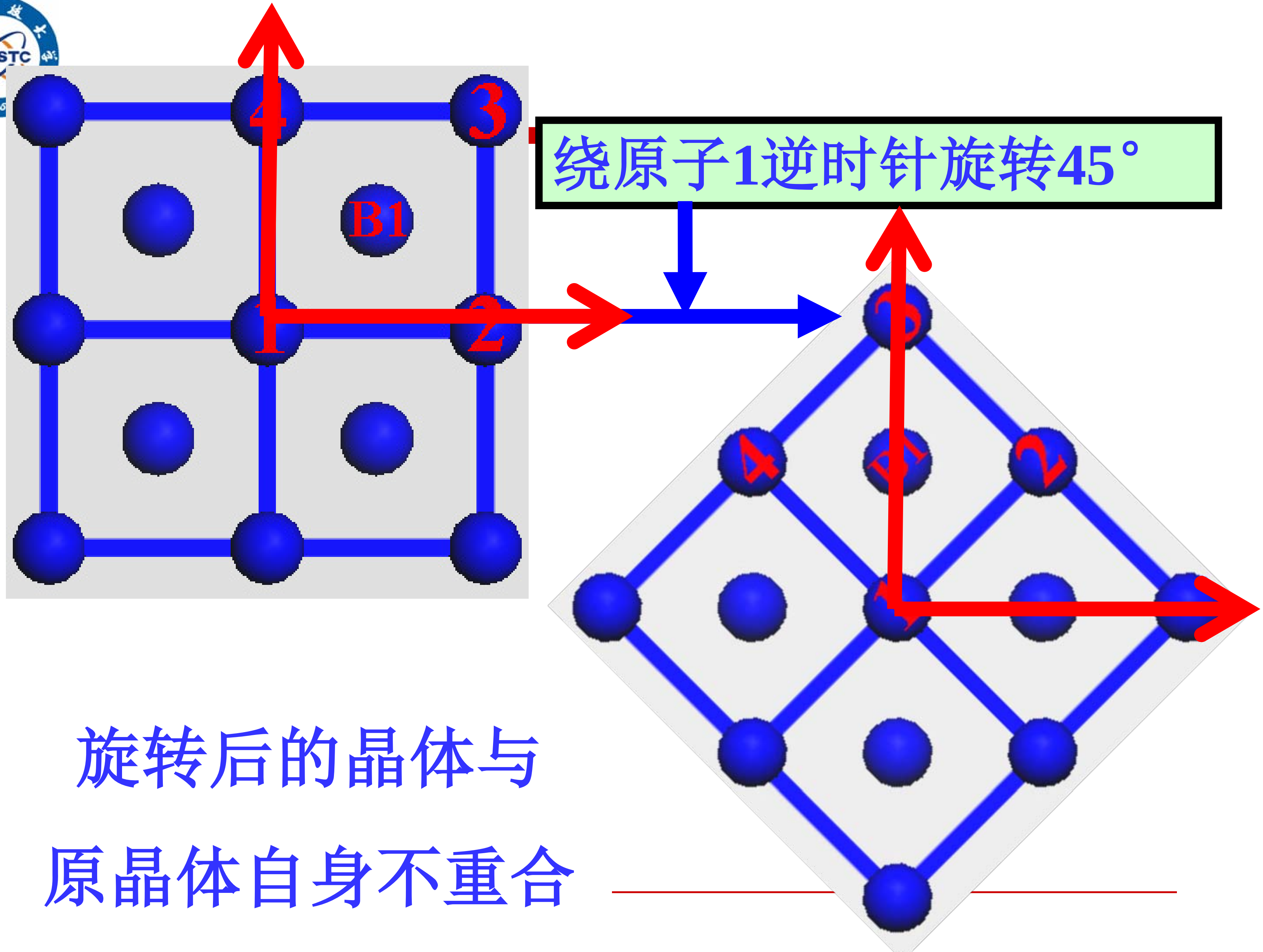
旋转后的晶体与

原晶体自身重合



旋转后的晶体与

原晶体自身不重合



旋转后的晶体与

原晶体自身不重合

- 若基本对称操作中不包括平移操作，则由基本对称操作可组成32种宏观对称类型——32种点群。
- 若基本对称操作中包括平移操作，则由基本对称操作可组成230种微观对称类型——230种空间群。

(1)、反映面

若晶体通过某一平面作镜象操作后能自身重合，则该平面称为反映面，常标记为 m .

(2)、反演中心

若晶体通过某一点作中心反演操作后能自身重合，则该点称为反演中心，标记为 i .

（3）、n度旋转对称轴

晶体绕某一个固定的轴 $\vec{u}$ 旋转

角度 $\vartheta = \dfrac{2\pi}{n}$ 以后能自身重合，

则称 $\vec{u}$ 为n度旋转对称轴。

可以证明： n只能取1，2，3，4，6；也就是说： 晶体中不可能具有5度或6度以上的旋转对称轴。晶体的旋转对称轴常标记为：

$$C_1 \quad C_2 \quad C_3 \quad C_4 \quad C_6$$

（4）、n度旋转---反演轴

晶体绕某一个固定的轴 $\vec{u}$ 旋转 $\vartheta=\dfrac{2\pi}{n}$ 角度以后，再经过中心反演，若晶体能自身重合，则称 $\vec{u}$ 为n度旋转---反演轴。

同样，n只能取1，2，3，4，6。

常用 $\bar{n}$ 来表示n度旋转—反演轴

即：

$S_1 \quad S_2 \quad S_3 \quad S_4 \quad S_6$

可以证明：

- $S_1 = i$， $\boldsymbol{i}$ 为反演中心
- $S_2 = m$， m 为垂直于该旋转轴的反映面

$$S_3 = C_3 + i \qquad S_6 = C_3 + m$$

- 只有 S_4 是独立的。

S_1, S_2, S_3, S_6 不是基本对称操作，它们是由一些基本对称操作组合而成的。

S_4 是一种基本对称操作

晶体的宏观对称性中包含**8**种基本对称操作元素，即：

$$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, S_4, i, m$$

由这8种基本对称操作元素可以组合成32种不包括平移操作在内的宏观对称类型，常称为32种点群。

➢ 晶体的微观对称性

- 晶体的微观对称性包含了平移操作。
- 包含了平移操作后，又出现了两类基本对称操作，即：

n度螺旋轴和滑移反映面。

(1)、n度螺旋轴

n度螺旋轴 $\vec{u}$ 表示：绕轴 $\vec{u}$ 旋转 $\frac{2\pi}{n}$ 后，再沿着该轴的方向平移 $\frac{\vec{T}}{n}$ 的 l 倍，晶体能自身重合。（其中，l 为小于 n 的整数，$\vec{T}$ 为沿轴 $\vec{u}$ 方向的周期矢量）

晶体也只能具有1，2，3，4，6度螺旋轴

（2）、滑移反映面

滑移反映面表示：经过该面的镜象操作后，再沿着平行于该面的某个方向平移 $\frac{\vec{T}}{n}$ 的距离，晶体能自身重合。

($\vec{T}$ 为该方向的周期矢量，n 等于2或4)

综上所述：

1、晶体的宏观对称性中包含8种基本对称操作元素，即：

$$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, S_4, i, m$$

由这8种基本对称操作元素可以组合成32 种不包括平移操作在内的宏观对称类型，常称为32种点群。

2、由8种基本对称操作元素，再加上n度螺旋轴和滑移反映面，可以组合成230种对称类型，常称为230种空间群。