

第四章 晶体学点群

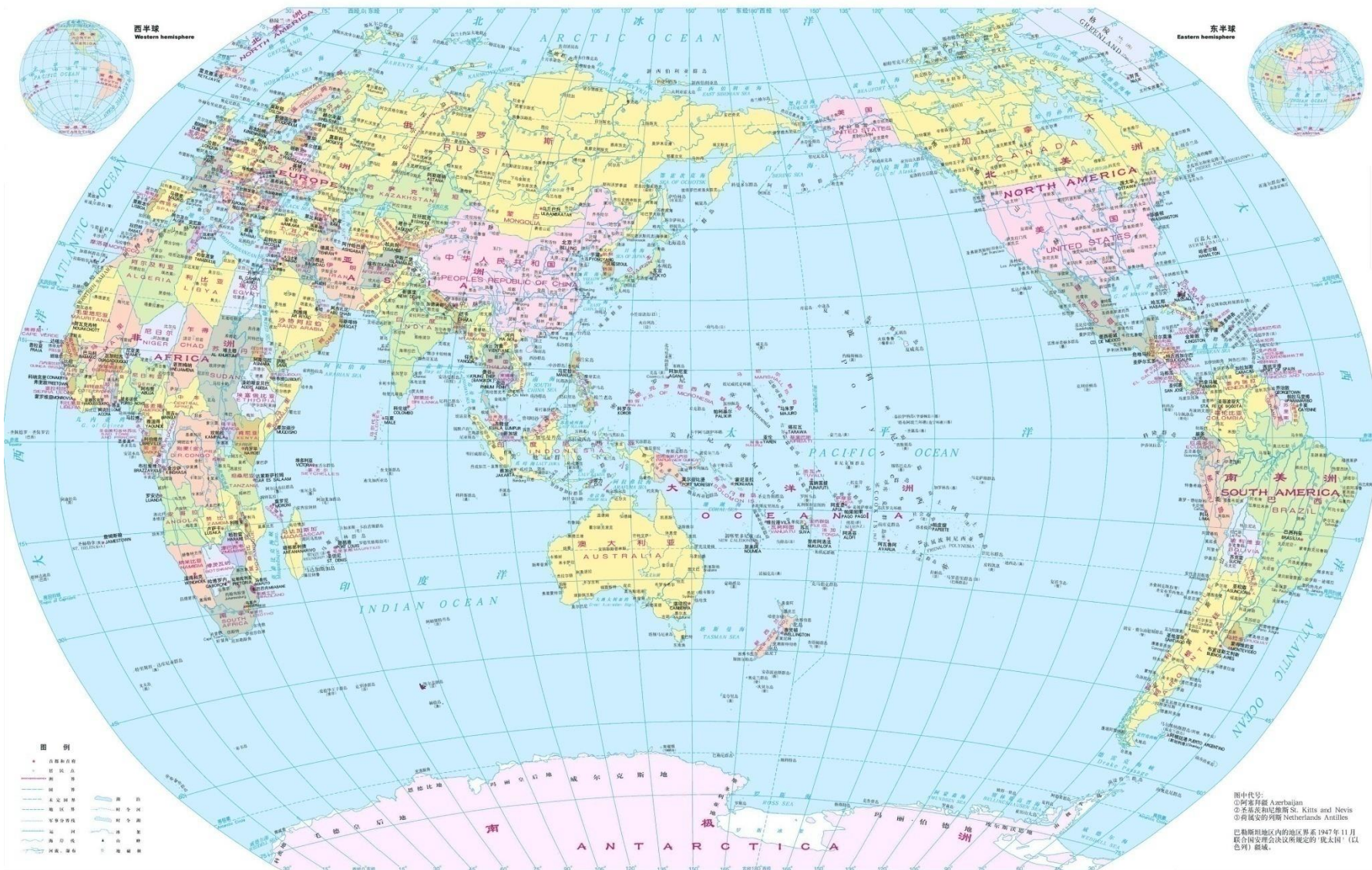
表2-1所列平面点群的对称操作按共轭类的划分

- ◆ 纯旋转点群：只含纯旋转操作
- ◆ 非纯旋转点群：还含有非纯旋转操作

纯旋转点群

世界地图

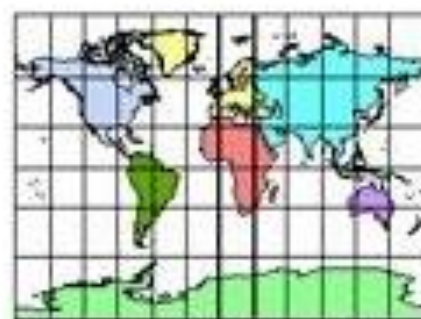
经典桌面资源站
WWW.JYDCSCTV.COM







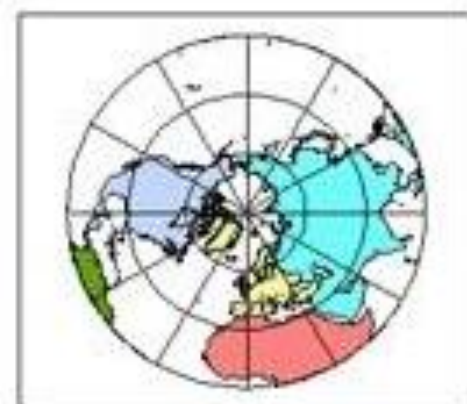
圆柱投影



圆锥投影



方位投影



极射赤面投影法

- 晶体中所有的点阵面，可以从晶体内部的某点上作出一组径向的法线加以表示。各法线将和该投影球的表面交成一组极点。
- 如图表示的是立方晶体的 $\{100\}$ 极点，该图仅表示了立方晶体中的 $\{100\}$ 面，用每个晶面的极点在球面上的位置来表示其对应的取向。

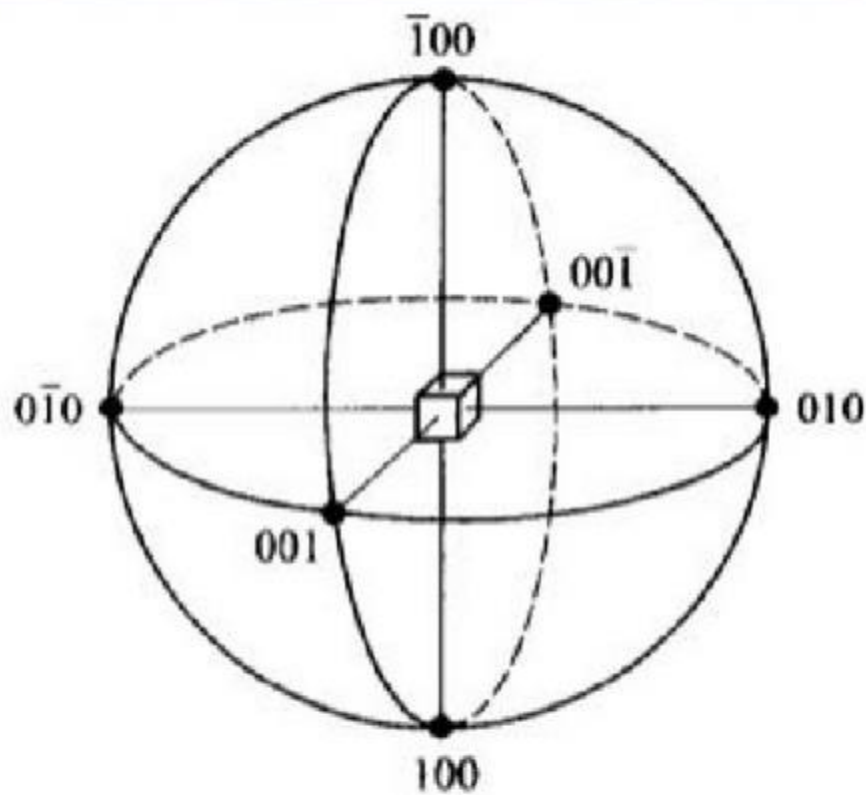
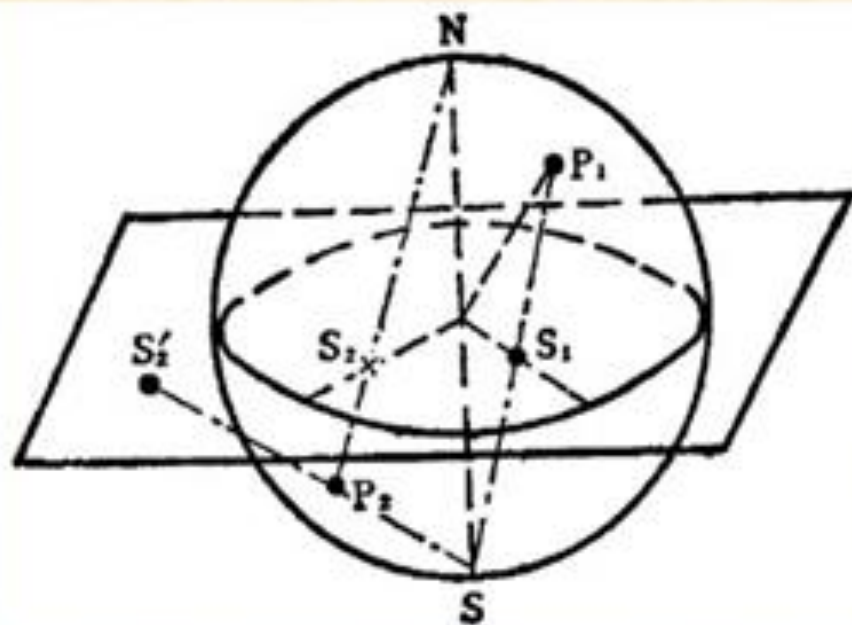


图 7.2 立方晶体的 $\{100\}$ 极点

极射赤面投影法

- 如右图，假如 P_1 为某晶面的极点，过 P_1 点向相对一侧的 S 极引一直线，称为投影线，其与赤道平面的交点 S_1 即为 P_1 的极射赤面投影。



极射赤面投影法

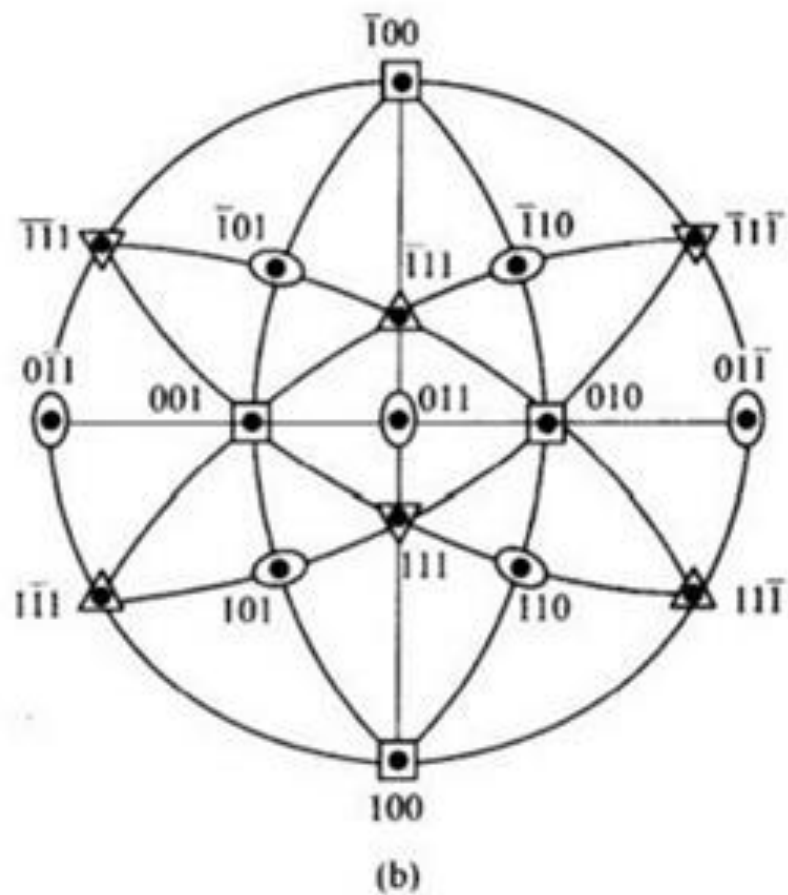
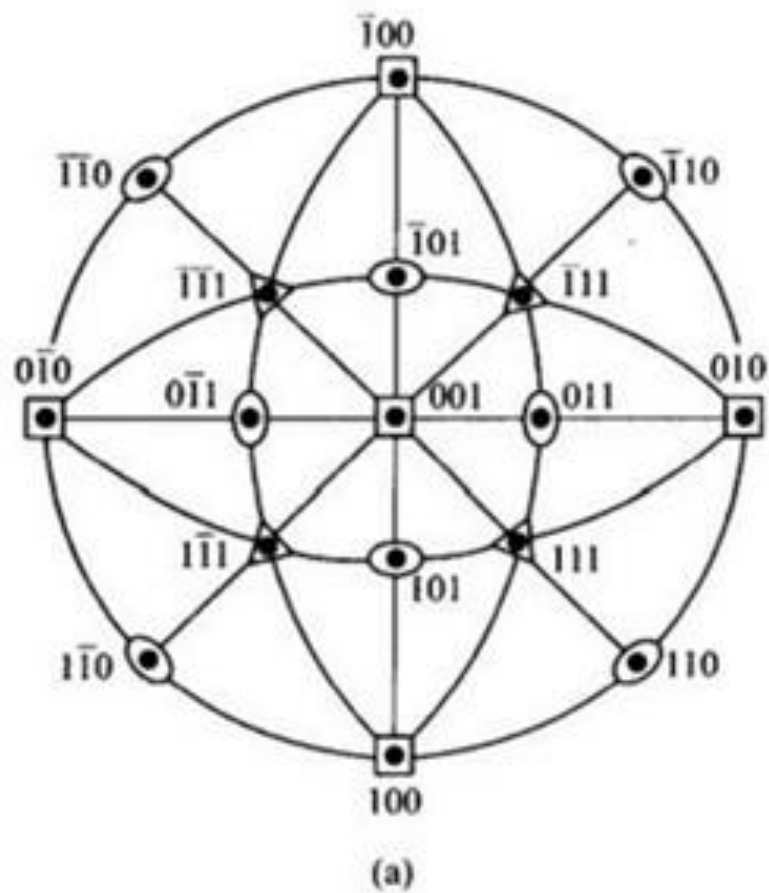
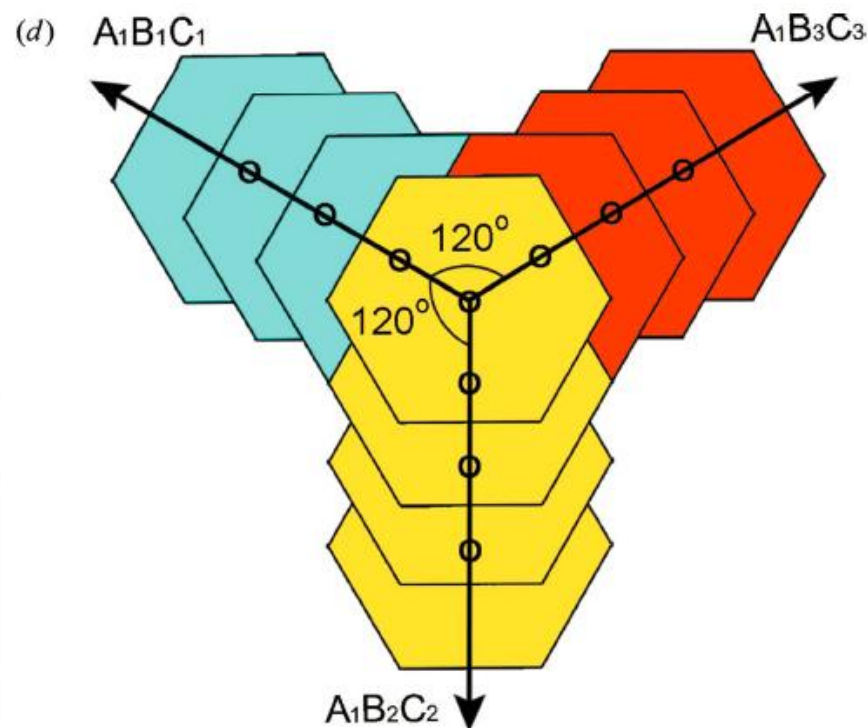
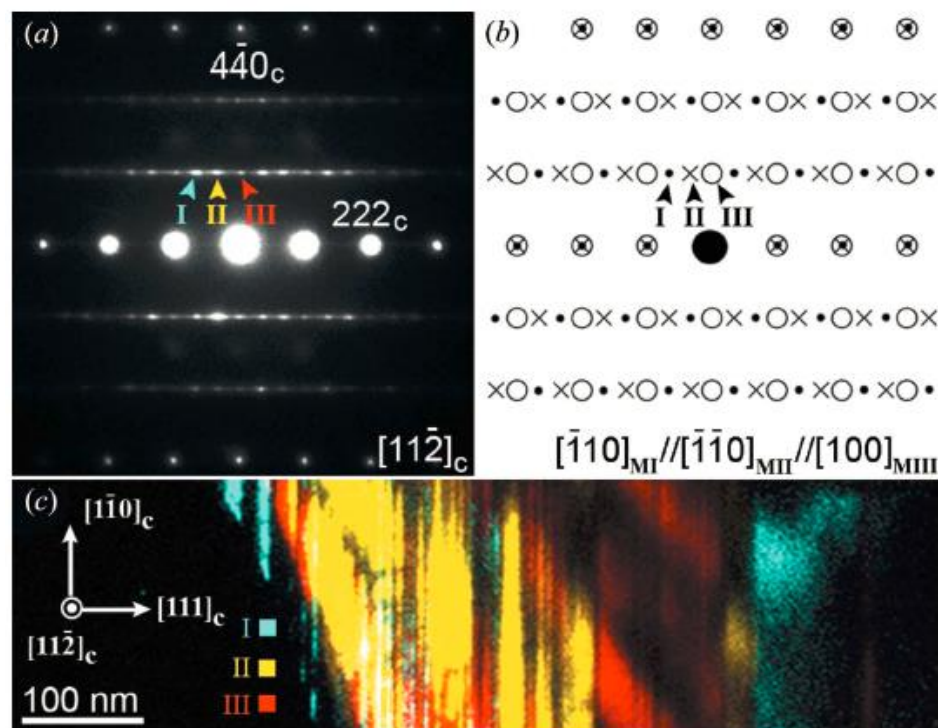


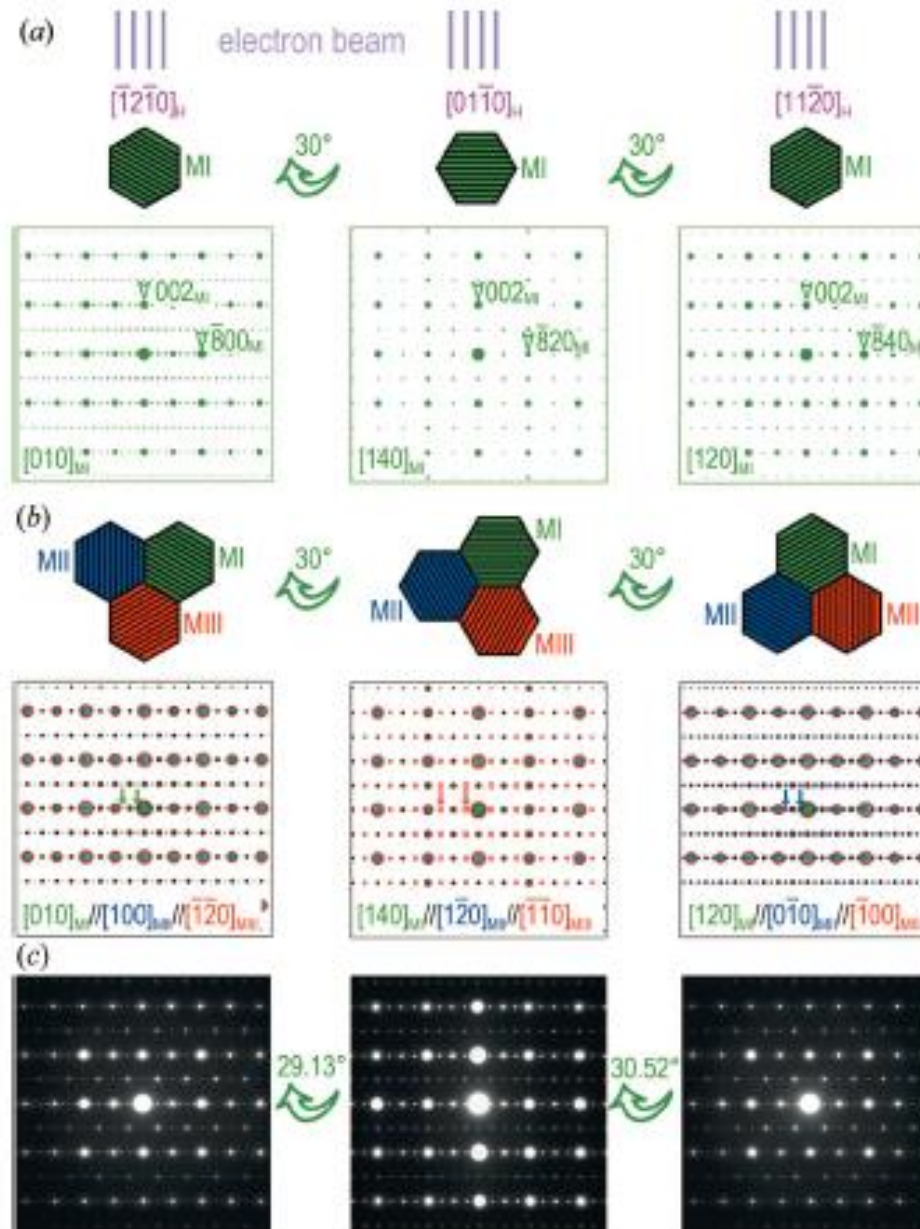
图 7.17 一个立方晶系分别以(001)和(011)为投影面的标准投影图

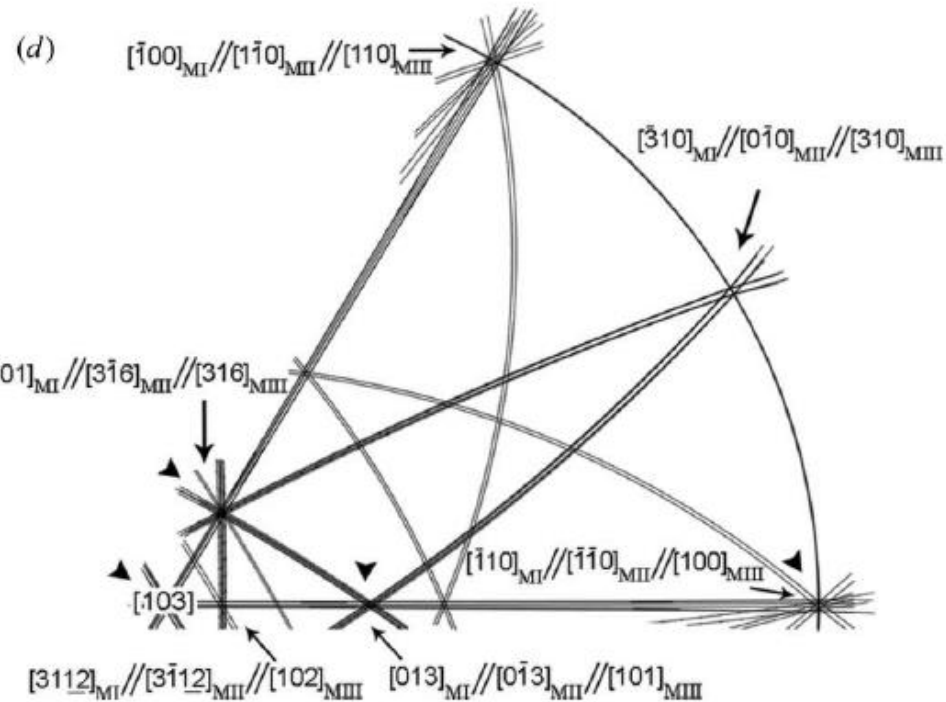
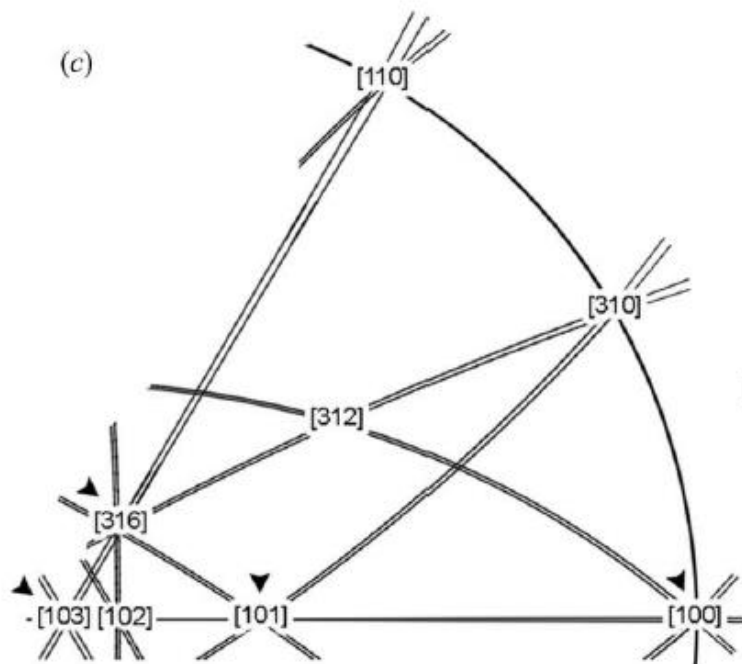
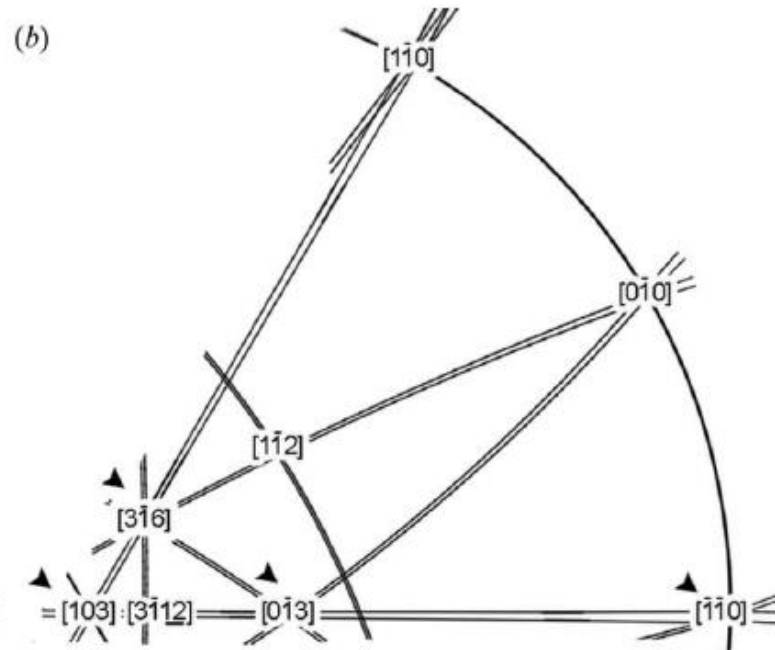
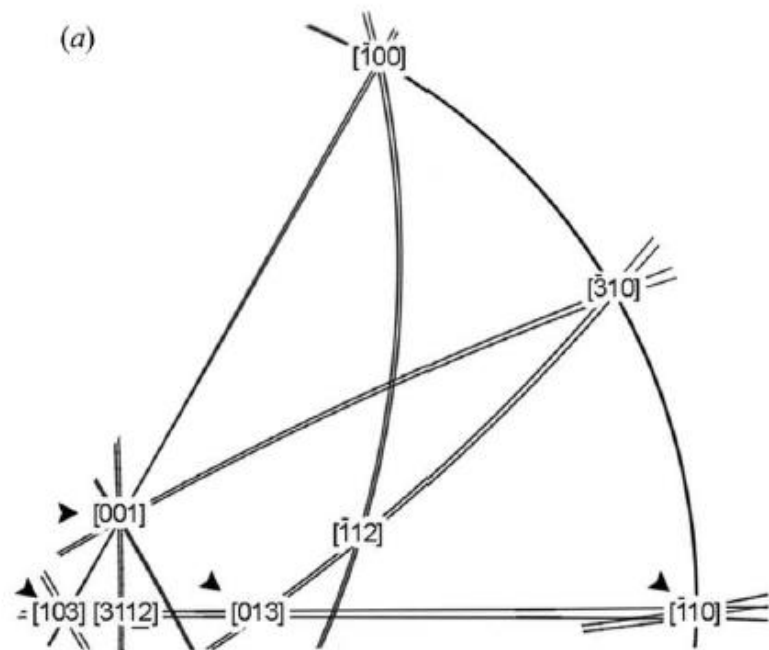
锂离子电池正极材料 Li_2MnO_3 的畴结构

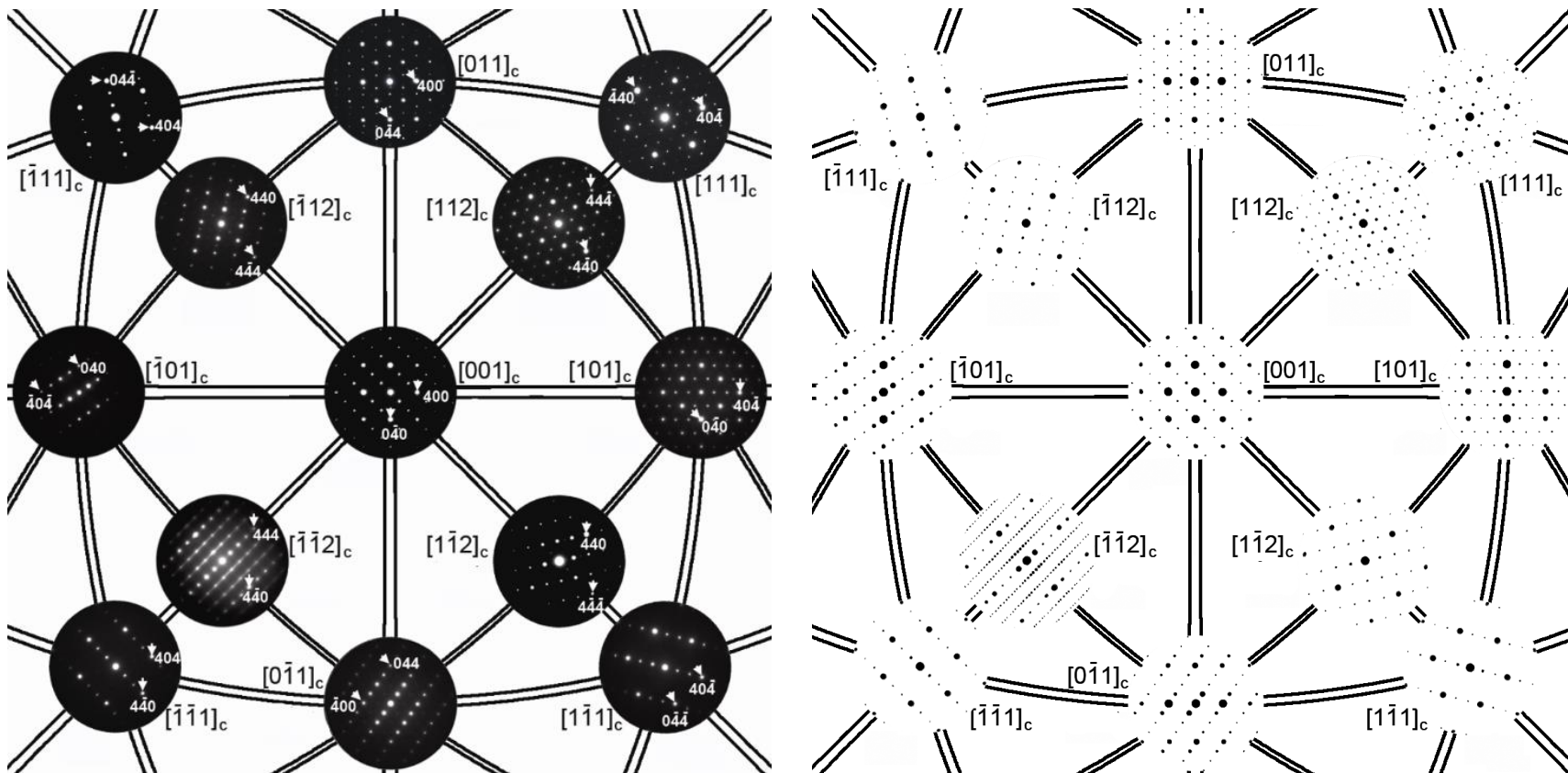


J. Appl. Crystallogr. 2014; *ACS Appl. Mater. & Interfaces* 2014

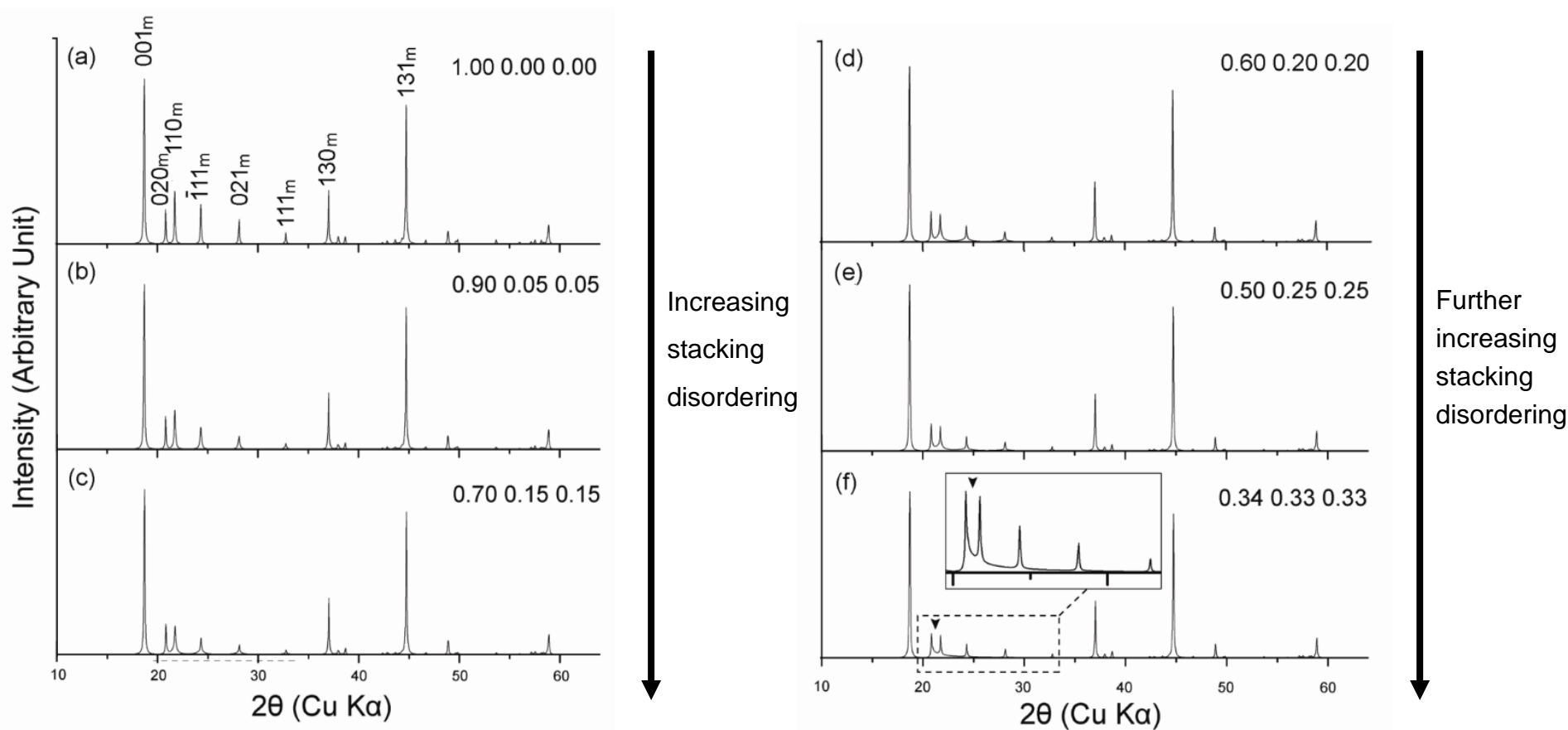
Twinning Variants in KWO





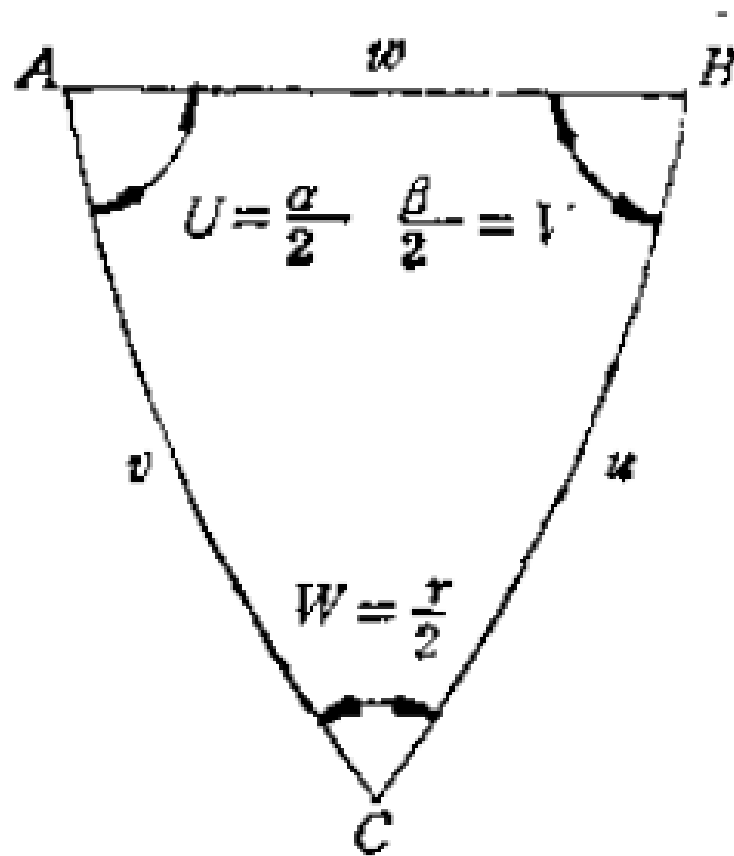
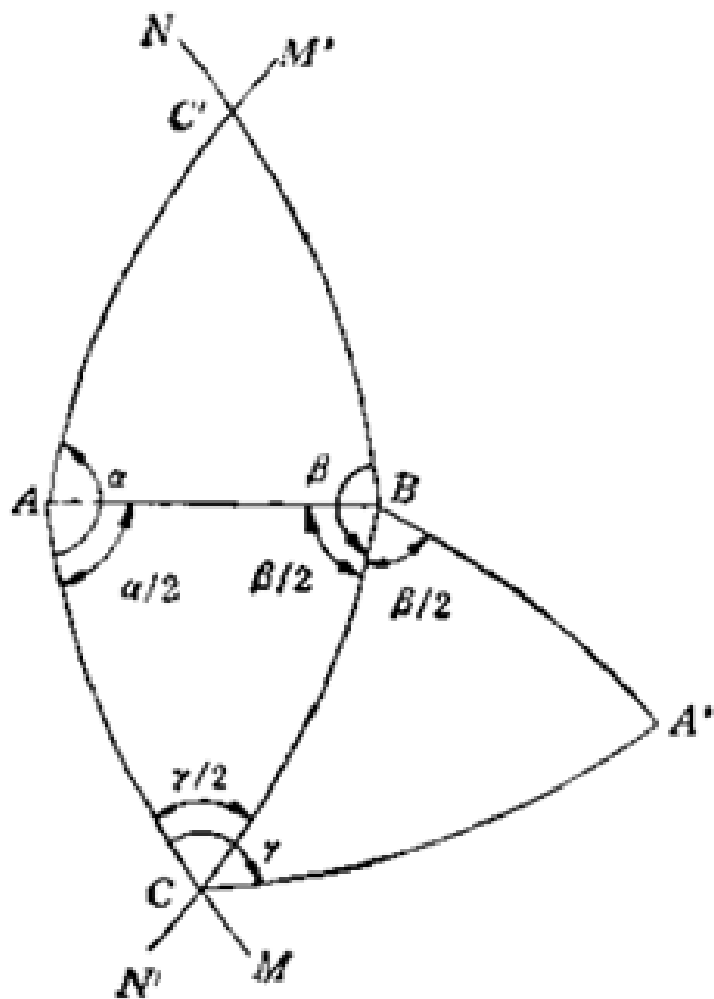


(a) experimental and (b) simulated SAED patterns



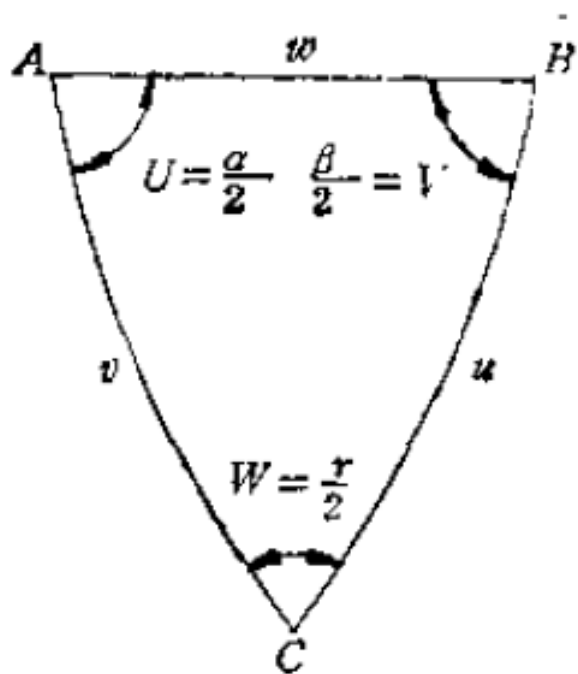
DIFFaX simulation: Increasing the stacking disordering leads to the decreasing of characteristic diffraction peaks in Li_2MnO_3

4-2-1 Euler 作图法



4-2-1 Euler 作图法

$$\begin{aligned} & \bullet \quad B_{\beta} \cdot A_{\alpha} = C_{\gamma} \\ & \therefore C_{\gamma} \cdot A_{-\alpha} = B_{\beta} \\ & B_{-\beta} \cdot C_{\gamma} = A_{\alpha} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \bullet \quad \cos W &= -\cos U \cos V \\ &+ \sin U \sin V \cos w \end{aligned}$$

$$\therefore \cos W = \frac{\cos W + \cos U \cos V}{\sin U \sin V}$$

类似的:

$$\cos U = \frac{\cos U + \cos V \cos W}{\sin V \sin W}$$

$$\cos V = \frac{\cos V + \cos W \cos U}{\sin W \sin U}$$

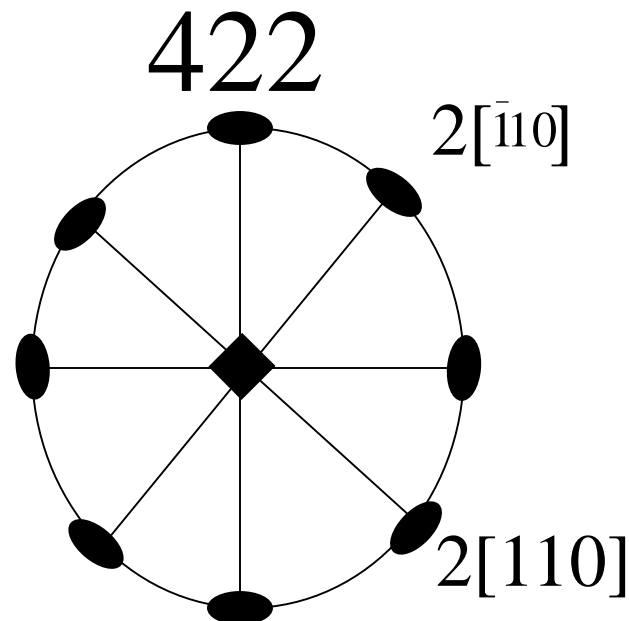
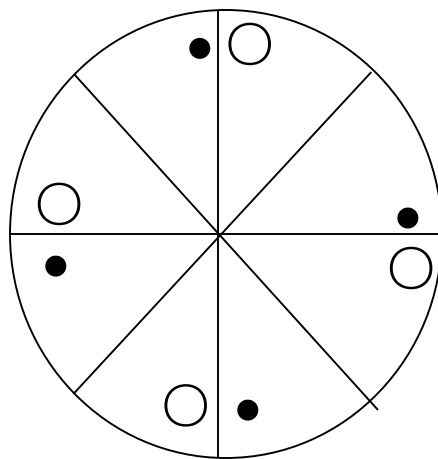
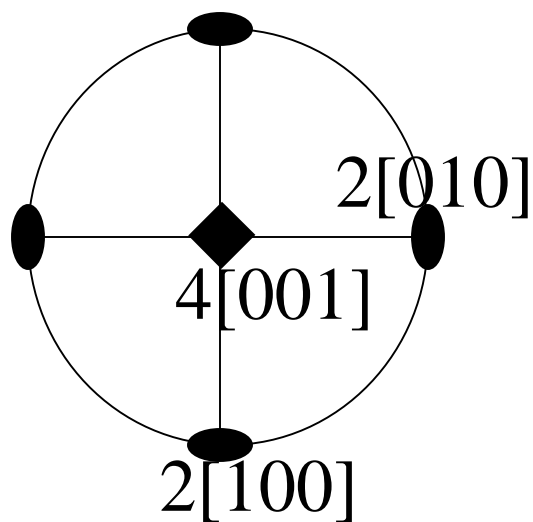
旋转轴的可能组合

- $\cos W = \frac{\cos U \cos V}{\sin U \sin V} \quad (4-2)$
- 观察 (4-2) 式可知, A,B,C三者中任一轴次增加, 都使相应的 $\cos \nearrow, \sin \searrow$, 使 $\cos W \nearrow$, 故再无其他组合。

◆ P74页 (表4-1)

A	B	C	cosw	点群符号	u	v	w	
2	2	2	0	222	90 ⁰	90 ⁰	90 ⁰	双面点群
		3	½	32	90 ⁰	90 ⁰	60 ⁰	
		4	1/√2	422	90 ⁰	90 ⁰	45 ⁰	
		6	√3 /2	622	90 ⁰	90 ⁰	30 ⁰	
		n	cos $\frac{180^0}{n}$	n2,n22	90 ⁰	90 ⁰	180 ⁰ /n	
	3	3	1/√3	23	70.5 ⁰	54.7 ⁰	54.7 ⁰	立方点群 二十面体点群
		4	2/√6	432	54.7 ⁰	45 ⁰	35.3 ⁰	
		5	τ/√3	235	37.4 ⁰	31.7 ⁰	20.9 ⁰	
		6	/					
	4 ⋮	4 ⋮	/					
3	3 ⋮	3 ⋮	/					

4-2-3 双面点群 n2



$$(4^+[001])(2[100])(4^-[001])=2[010]$$

$$(4^+[001] \times 2[100])$$

\therefore 共有 n 支互成 $\frac{360^\circ}{n}$ 的二次轴，

$$= (8^+[001] \times 2[100]) \underbrace{(2[100] \times 8^+[001])}_{8^-[001]} (2[100])$$

当 n 为偶数时仅 $\frac{n}{2}$ 支，另派生出与之成 $2[110]$

$\frac{180^\circ}{n}$ 的 $\frac{n}{2}$ 支二次轴

4-3-1 第二类对称群的对开定理

- 两个第二类操作的乘积是第一类操作

第一类操作 W^I : 例: \bar{n} ,

第二类操作 W^II : 例: \bar{n} , m , $\bar{1}$

$$W_i^I W_j^I = W_k^I$$

$$W_i^I W_j^{II} = W_k^{II} W_l^I = W_m^{II}$$

$$W_i^{II} W_j^{II} = W_k^I$$

第二类对称群: 包含有第二类操作。

- 第二类操作群中的全部第一类操作构成一个群 (封闭性、逆元)

对开定理

第二类操作群中的第一类操作子群的指数为2

即任何第二类对称群中的第一类操作的数目与第二类操作的数目相等

对开定理证明

第二类对称群 \bar{G} 中全部第一类操作的集合
 $H=\{1, h_2, \dots, h_r\}$ 构成群 (封闭性 逆元)
设 $b \in \bar{G} \setminus H$, 作陪集 $\underline{bH} = \{b, bh_2, \dots, bh_r\}$

都是第二类操作, 互不相同

$$\text{任意 } c \in \bar{G} \setminus H \quad \therefore \quad \frac{h_p}{c^{-1}h_ph_p^{-1}c^2} = \underline{cb} \\ = c^{-1}cbh_p^{-1}c^2$$

$$\therefore \quad c = b(h_p^{-1}c^2) \in \underline{bH}$$

\therefore 陪集 \underline{bH} 内包含群 \bar{G} 中的全部第二类操作。

\therefore 第二类对称群中第一类操作数=第二类操作数

4-3-2 推导非纯旋转点群的原理

- (1) 群 \bar{G} 含倒反 $\bar{1}$
- $\bar{G} = H \cup \bar{1}H = \{1, h_2, \dots, h_r; \bar{1}, \bar{1}h_2, \dots, \bar{1}h_r\}$
- 反之, 任意纯旋转点群 H 可与 $\{1, \bar{1}\}$ 构成外直积
- $\bar{G} = H \times \{1, \bar{1}\}$
- (2) 群 \bar{G} 不含 $\bar{1}$:
- $\bar{G} = H \cup \bar{n} H = \{1, h_2, \dots, h_r; \bar{n}, \bar{n}h_2, \dots, \bar{n}h_r\}$

与 \bar{G} 中 $\bar{n}h_i$ 对应的纯旋转操作 $nh_i \notin H$


- 反证法：若 $nh_i = h_j$, 则 $\underbrace{\bar{1} nh_i}_{\in \bar{G}} \underbrace{h_j^{-1}}_{\in \bar{G}} = \bar{1} h_j h_j^{-1} = \bar{1} \in \bar{G}$
- 作集合 $G = H \cup nh = \{1, h_2, \dots, h_r; n, nh_2, \dots, nh_r\}$
- G 是与 \bar{G} 同构的 $2r$ 阶群。证封闭性：由 $(\bar{n}h_i)(\bar{n}h_j) = h_k$
- 可知 $(nh_i)(nh_j) = h_k$, 等等。
- 反之，设 G 是纯旋转操作，且有个指数为 2 的子群 H ：
- $G = H \cup nH$, 则 $\bar{G} = H \cup \bar{n}H$ 与 G 同构，是一个非纯旋转点群。

十一个纯旋转晶体学点群的子群

点群	阶	子群										
		1	2	3	4	6	222	32	422	622	23	432
1	1	1										
2	2	1	2									
3	3		1	3								
4	4	1	2		4							
6	6	1	2	3		6						
222	4	1	2				222					
32	6	1	2	3				32				
422	8	1	2		4		222		422			
622	12	1	2	3		6	222	32		622		
23	12	1	2	3			222				23	
432	24	1	2	3	4		222	32	422		23	432

指数为二的子群

§4-3 非纯旋转点群

- 4-3-3 推导方法
- 纯旋转点群  非纯旋转点群
- $\{6\} = \{1, 3^+, 3^-, 6^+, 2, 6^-\} \otimes \{1, \bar{1}\} \quad \{\frac{6}{m}\} = \{1, 3^+, 3^-, 6^+, 2, 6^-;$
 $\bar{1}, \bar{3}^+, \bar{3}^-, \bar{6}^+, m, \bar{6}^-\}$
- $= \{1, 3^+, 3^-\} \cup 6^+ \{1, 3^+, 3^-\}$ 同构 $\{\bar{6}\} = \{1, 3^+, 3^-; \bar{6}^+, m, \bar{6}^-\}$
- $\{32\} = \{1, 3^+, 3^-, 2[100], 2[010], 2[110]\} \otimes \{1, \bar{1}\} \quad \{\frac{3}{m}\} = \{1, 3^+, 3^-, 2[100], 2[010],$
 $2[110]; \bar{1}, \bar{3}^+, \bar{3}^-, m[100], m[010],$
 $m[110]\}$
- $= \{1, 3^+, 3^-\} \cup 2[100] \{1, 3^+, 3^-\}$ 同构 $\{3m\} = \{1, 3^+, 3^-; m[100], m[010], m[110]\}$
- $\{422\} = \{\underline{1}, \underline{4^+}, \underline{2}, \underline{4^-}, \underline{2[100]}, \underline{2[010]}, \underline{2[110]}, \underline{2[\bar{1}10]}\} \otimes \{1, \bar{1}\} \longrightarrow \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$
- $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$

同构

{

$4mm$

$\bar{4} 2m$

$\bar{4} m2$