

晶体的对称性和对称操作

晶体结构不仅具有周期性，且还具有较复杂的对称性。自然界的许多晶体如水晶、雪花晶体以及天然金刚石等往往具有规则的几何外形。晶体外形的对称性为宏观对称性，而晶体内部结构原子或离子排列的对称性为微观对称性。前者是有限大小宏观物体具有的对称性，后者是无限晶体结构具有的对称性。晶体的宏观对称性是其微观对称性的外在表现。

晶体在进行某一变换后，其晶格在空间的分布仍然保持不变，这一变换称为对称操作。进行对称操作所依据的几何元素，则称之为对称元素。晶体结构的基本特点是空间点阵结构，其对称性与分子本身是有一些区别的。除了分子可能具有的对称中心、对称面和旋转轴等简单对称元素之外，晶体学中还可以具有滑移面和螺旋轴等含平移的对称性元素。

1. 简单对称元素

(1) 对称中心。若晶体中所有的点在经过某一点反演操作后能完全复原，则该点就称为对称中心，用符号 i 表示，如图 5.2a 所示。对称中心必然位于晶体中的几何中心处。

(2) 对称面。晶体通过某一平面作镜像反映而能复原，则该平面称为对称面或镜面，用符号 m 表示（图 5.2b）。对称面通常是晶棱或晶面的垂直平分面或者为多面角的平分面，且必定通过晶体的几何中心。

(3) 旋转轴。当晶体绕某一轴旋转而能完全复原时，此轴即称之为旋转轴。旋转轴一般会通过晶格单元的几何中心，且位于该几何中心与角顶或棱边的中心或面心的连线上。在围绕旋转轴旋转一周的过程中，晶体能复原 n 次，就称为 n 次旋转轴。晶体中实际可能存在的旋转轴有 1、2、3、4 和 6 次共五种（符号分别为 1、2、3、4、6），不可能出现 5 及大于 6 的轴次，这是晶体的点阵结构所决定的。图 5.2c-5.2e 分别为 2、3、4 次旋转轴的例子。

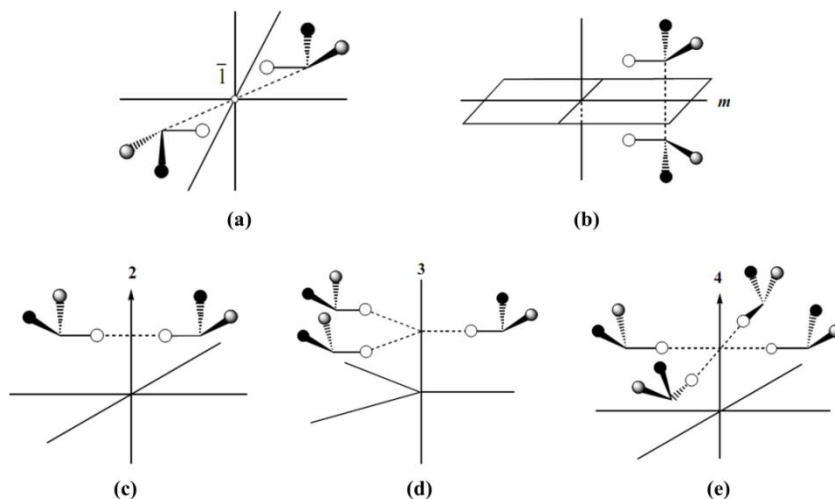


图 5.2 简单对称元素举例

(a) 对称中心； (b) 镜面 m ； (c) 2 次旋转轴； (d) 3 次旋转轴； (e) 4 次旋转轴；

(图中实心、灰色和空心圆圈代表相同或不同原子或基团)

2. 含平移的对称性元素

平移与对称面和旋转轴偶合可以产生出一些较为复杂的新对称元素，即滑移面和螺旋轴。所谓对称性的偶合，是指两个并非独立存在的对称操作联合作用，形成一个对称元素。除了滑移面和螺旋轴之外，结合旋转和倒反操作还可以偶合出 $\bar{3}$ 、 $\bar{4}$ 和 $\bar{6}$ 反轴。

(1) 滑移面

滑移面是由一个对称面加上沿着此面的平移所组成，晶体结构可借此面的反映并沿此面平移一定距离而复原。例如，图 5.3a 的结构，点 2 是点 1 的反映， AA' 面是对称面；但图 5.3b 所示的结构就不同，纯粹是反映操作不能得到复原，点 1 必须先经 AA' 面反映，然后再平移 $a/2$ 距离才能与点 2 重合，此时 AA' 面就是滑移面。滑移面的表示符号如下：如果滑移方向平行于晶轴的方向，可表示为 a 、 b 、 c 滑移面；如果滑移方向与一个晶面的对角线平行，则可表示为 n 滑移面。

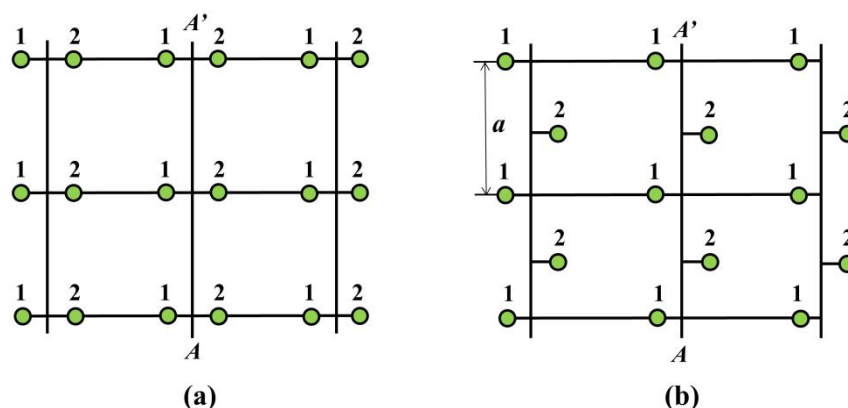


图 5.3 滑移面示意图

(2) 螺旋轴

螺旋轴是由旋转轴和平行于轴的平移所构成，它也是晶体学中很常见的对称元素，可记为 n_m ，其中 n 表示螺旋轴的阶次，而 m 表示沿螺旋轴方向平移的分量。晶体结构绕该螺旋轴旋转 $360^\circ/n$ 后，沿该螺旋轴方向平移 m/n 单位向量长度。例如， c 方向的 2_1 螺旋轴（图 5.4a）表示某点 (x, y, z) 顺时针旋转 $360^\circ/2 = 180^\circ$ 之后，平移到 $1/2c$ 。 c 方向的 3_1 螺旋轴（图 5.4b）表示某点 (x, y, z) 顺时针旋转 120° 之后，平移到 $1/3c$ 。如果为 3_2 螺旋轴，则平移值为 $2/3c$ 。

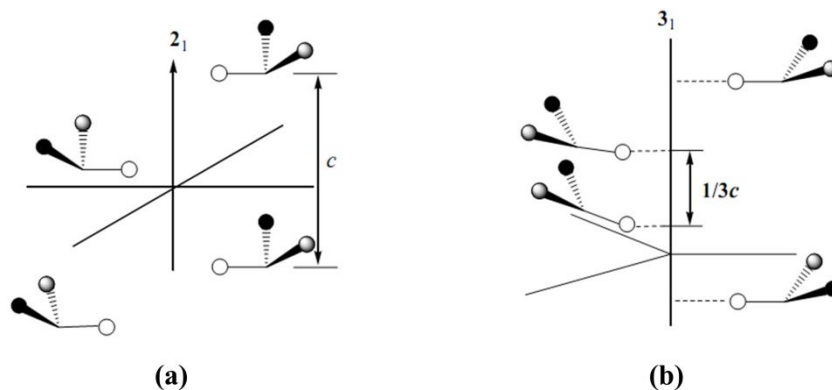


图 5.4 螺旋轴举例

(a) c 方向的 2_1 螺旋轴； (b) c 方向的 3_1 螺旋轴；
(图中实心、灰色和空心圆圈代表相同或不同原子或基团)