

点群国际记号的含义

基本记号

1. n ($n=1,2,3,4,6$)

表示 n 个旋转操作，旋转的角度是 $\frac{2\pi}{n}$ 的整数倍。

2. \bar{n} ($n=1,2,3,4,6$)

若 n 为奇数，表示 $2n$ 个操作，为 n 个真旋转和 n 个真旋转之后反演的操作，这其中有一个是简单反演。

若 n 为偶数，表示的仍是 n 个操作，为 $\frac{n}{2}$ 个旋转角度为 $\frac{2\pi}{n}$ 的偶数倍的真旋转和 $\frac{n}{2}$ 个旋转 $\frac{2\pi}{n}$ 的奇数倍之后反演的操作，这其中没有简单反演。

3. m

即 $\bar{2}$ ，包括一个恒同变换（即不变）和一个旋转 180° 之后反演（即镜像）。

4. $\frac{n}{m}$

包括 $2n$ 个操作，为 n 个真旋转和 n 个真旋转之后反演的操作（这其中有一个是简单反演），等价于 n 个真旋转和 n 个真旋转之后镜像的操作。由于包括镜像操作和简单反演，其中必定包括一个 180° 的真旋转（群的封闭性），所以 n 只能为偶数。

把 3 个符号写在一起表示在 3 个主要旋转轴上存在的对称操作。一般情况下三个旋转轴是正交的。但是如果第二位为 3，表示的是立方晶系，三个轴就并非正交。

国际记号中只写出了主要旋转轴上存在的基本对称操作，其他操作均可以通过基本操作的叠加得到。

例如 mmm 实际上代表的是 $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ 。其中绕 x 轴旋转 180° 可以通过沿垂直 y 轴

的平面镜像再沿垂直 z 轴的平面镜像得到。

用矩阵的形式表示就是：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

其他的情况均类似。