

 现代化学专著系列·典藏版 45

准晶对称与准晶结构

陈敬中 陈 瀛 龙光芝 张 勇 王 平 孙学良 著



科学出版社

现代化学专著系列·典藏版 45

准晶对称与准晶结构

陈敬中 陈 瀛 龙光芝 著
张 勇 王 平 孙学良

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书主要包括“准晶对称理论”和“纳米微粒多重分数维准晶结构模型”。对5种正多面体进行了结晶学分类;论述了晶体和准晶体中共有12个晶系;推导了晶体与准晶体中的60个(32+28)点群、点群的对称性及其母子群关系链;证明了89种单形。介绍了Penrose模型、玻璃模型、无规堆砌模型和微粒分数维模型等准晶结构的理论模型及准晶结构的基础理论和空间几何理论。论证了纳米微粒多重分数维二十面体准晶结构模型及2维准晶结构模型,并证明“纳米微粒多重分数维准晶结构模型”是一种理想的准晶结构模型。

本书可作为物理学、化学、材料学、晶体学、准晶体学本科高年级学生,相关专业的硕士、博士研究生学习与研究的参考书,也可供物理类、化学类、材料学类、晶体学类的大学教员和科研工作人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

现代化学专著系列:典藏版/江明,李静海,沈家骢,等编著. —北京:科学出版社, 2017.1

ISBN 978-7-03-051504-9

I. ①现… II. ①江… ②李… ③沈… III. ①化学 IV. ①O6

中国版本图书馆CIP数据核字(2017)第013428号

责任编辑:许美凤 周巧龙/责任校对:张怡君

责任印制:张 伟/封面设计:铭轩堂

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京教图印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2017年1月第 一 版 开本:720×1000 B5

2017年1月第一次印刷 印张:11 1/2

字数:232 000

定价:7980.00元(全45册)

(如有印装质量问题,我社负责调换)



中国地质大学(武汉)、长安大学和陕西黄河矿业集团
联合资助出版

前 言

准晶物质发现是科学界最伟大的发现之一,它从根本上改变了化学家、物理学家、晶体学家及材料学家们对固态物质的认识。30年后,大胆质疑“常识”的以色列科学家丹尼尔·谢赫特曼(Daniel Shechtman)终于获得世界科学界的认可。2011年10月5日瑞典皇家科学院宣布,Daniel Shechtman因发现准晶体物质而独享2011年诺贝尔化学奖。

1982年4月,正在美国从事研究工作的Daniel Shechtman在电子显微镜中观察到一种长程定向有序而没有平移周期对称的金属相,他发现铝(锰)合金中的原子是以一种准周期对称有序方式排列的。1984年,Daniel Shechtman的“Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry(长程定向有序而没有平移周期对称的金属相)”一文在激烈的争议声中由美国“物理评论快报”公开发表。

准晶对称是对晶体学传统对称理论的突破。晶体对称理论诞生近300年来,一直排斥5次或6次以上对称轴的存在。固态物质结构中原子排列的基本规律是,晶体内原子应呈现周期对称的有序排列,而非晶体内原子呈无序排列。

准晶体中发现5次对称轴则突破了这一禁区。随后,具有8、10、12次对称轴的2维准晶,1维准晶也相继被发现。科研人员获得许多种类的准晶物质,1985年初中国学者郭可信、张泽等在 $(\text{Ti}_{1-x}, \text{V}_x)_2\text{Ni}$ ($x=0.1\sim 0.3$)合金中也发现了准晶;俄罗斯学者还发现自然生成的准晶物质,瑞典学者在工业环境条件下的钢质材料中也发现准晶物质。

准晶体不同于常规晶体与非晶体,是一类不具备晶格周期性有序排列却显现出长程有序性的固体物质。准晶体中所谓长程有序性,是指在某一个方向上往往以无理数序列的方式表达,而序列则像无理数一样无限不循环。2维准晶物质的特点是在主轴方向呈周期性平移对称,而在与此轴垂直的2维平面上呈准周期分布对称。除了3维与2维准晶外,1维准晶是一种2维层在其法线方向的准周期堆垛结构。

至此已可证明,准晶物质的存在具有普遍性。这类介于晶体与非晶体之间的固体物质被命名为准晶体,准晶体科学从此破土而出。

陈敬中、陈瀛、龙光芝、张勇、王平、孙学良等及时跟踪世界最新科学研究成果,并结合其多年来在“准晶对称理论与纳米微粒多重分数维准晶结构模型研究”方面取得的科研成果和发表的学术研究论文,撰写了《准晶对称与准晶结构》一书,以总

结学科新理论知识,反映学科前沿新成就和现代科学技术发展的新成果。书中主要介绍以下两个方面的内容:

第一个方面是准晶对称理论。对 5 种正多面体进行了结晶学分类,其中四面体、立方体、八面体属晶体学类,正十二面体、正二十面体属准晶体学类;论述了晶体和准晶体中共有 $12(7+5)$ 个晶系(其中晶体有 7 个晶系、准晶体有 5 种晶系);推导了 60 个 $(32+28)$ 点群(其中晶体有 32 个,准晶体有 28 个)及晶体与准晶体学点群的对称性及其母子群关系链;证明了 89 种 $(47+42)$ 单形(其中晶体有 47 种,准晶体有 42 种)。

第二个方面是准晶纳米微粒多重分数维结构模型。介绍了 Penrose 模型、玻璃模型、无规堆砌模型和微粒分数维模型等准晶结构的理论模型;论述了准晶结构的基础理论,准晶结构的几何理论;论证了纳米微粒多重分数维二十面体准晶结构模型及纳米微粒多重分数维 2 维准晶结构模型。证明“纳米微粒多重分数维准晶结构模型”更为符合凝聚态物理、分数维几何学、纳米科学、晶体结构和晶体化学等多种理论,是一种理想的准晶结构模型。

本书包括前言、第 1~10 章以及参考文献。各章节写作分工如下:

第 1 章,陈敬中、陈瀛、张勇;第 2 章,陈瀛、张勇、王平、陈敬中;第 3 章,陈瀛、王平、陈敬中;第 4 章,陈瀛、张勇、王平、陈敬中;第 5 章,陈瀛、龙光芝、陈敬中;第 6 章,龙光芝、陈瀛、陈敬中;第 7 章,陈敬中、陈瀛、张勇、龙光芝、王平;第 8 章,陈敬中、陈瀛、张勇、龙光芝、王平;第 9 章,陈瀛、陈敬中、张勇、龙光芝、孙学良;第 10 章,陈瀛、陈敬中、张勇、龙光芝、孙学良;全书最后由陈敬中、陈瀛负责定稿;宫斯宁负责全书文字、图件、参考文献的排版、整理、校对工作。

为了适应现代化建设对高层次晶体学、准晶体学、晶体化学、固体物理、材料科学等专业人才的需要,本书力求做到理论严谨、结构合理、文字精炼、图件清楚、引文准确。

本书从物质结构的基础理论、基本分类规则和传统晶体学向与现代准晶体学发展的科学进程,展望了现代准晶体学发展的必然趋势,力求做到与时俱进,介绍先进的学术思想,反映科学前沿,以适应新时代科学技术人才的培养要求。

在开展“准晶对称理论与纳米微粒多重分数维结构模型研究”的过程中,作者与日本桥本初次郎(H. Hashimoto)教授、德国 Zorka Papadopolos 教授、加拿大西安大略大学孙学良教授进行过认真交流和讨论,与中国学者郭可信教授、李方华教授、叶大年院士进行过交流和讨论,在此深表感谢!

当作者将这本专著奉献给各位读者时,心情是非常激动的。作者恳请读者对拙著批评指正。

陈敬中 陈 瀛 龙光芝

2012 年 9 月 15 日

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 晶体学	1
1.1.1 晶体形态学	1
1.1.2 晶体结构	2
1.2 物质结构及对称理论新进展	3
1.2.1 对称性的哲学定义	3
1.2.2 对称性的范围	4
1.2.3 对称性的尺度	4
1.2.4 简单对称性和复合对称性	5
1.2.5 对称性理论新进展	5
1.3 现代晶体化学	5
1.4 纳米科学与纳米技术	6
1.4.1 纳米科技	7
1.4.2 纳米材料	7
1.4.3 纳米微粒的制备方法	7
1.5 准晶体学与诺贝尔化学奖	7
1.5.1 Daniel Shechtman 获得诺贝尔化学奖	7
1.5.2 准晶物质的发现	8
1.5.3 科学家“物质观”的革命	9
1.5.4 准晶对称与准晶结构	10
1.5.5 准晶物质的应用前景	10
第 2 章 晶体和准晶体的性质	11
2.1 晶体、准晶体的基本特征	11
2.1.1 晶体、准晶体的概念	11
2.1.2 晶体、准晶体的空间格子	13
2.1.3 晶体、准晶体的基本性质	14
2.1.4 非晶质体	16
2.2 晶体、准晶体生长的基本规律	17
2.2.1 结晶作用	17

2.2.2	准晶生长	18
2.2.3	布拉维法则	18
2.2.4	面角守恒定律	18
2.3	准晶物质的分类	19
第3章	正多面体的晶体学、准晶体学意义	23
3.1	正多面体的定义	23
3.2	五种正多面体特征	23
3.2.1	正多面体的形态	23
3.2.2	欧拉公式	24
3.2.3	共轭正多面体	25
3.2.4	正多面体之间的关系	26
3.2.5	正十二面体、正二十面体共轭生长及准晶结构模型	28
3.3	正多面体数学及晶体学、准晶体学参数	29
3.4	正二十面体与正十二面体	30
3.4.1	正二十面体与正十二面体之间的异同	30
3.4.2	$m\bar{3}5$ 点群的 7 种单形	30
3.5	正多面体的分数维堆垛及其准晶意义	31
3.5.1	准晶中的分形和分数维	31
3.5.2	结晶类正多面体共角顶分数维堆垛	32
3.5.3	准晶类正多面体共轭分数维堆垛	35
第4章	晶体、准晶体中的单形	38
4.1	单形的推导	38
4.2	单形的分类及几何形态	40
4.2.1	低级晶族	43
4.2.2	中级晶族	43
4.2.3	高级晶族的单形	43
4.3	各个晶系中点群及其对应的单形表	44
第5章	晶体、准晶体中的点群和极赤投影	48
5.1	准晶体的点群	48
5.2	准晶体中点群(对称型)的推导	49
5.2.1	A 类对称型的推导	49
5.2.2	B 类对称型的推导	51
5.2.3	晶体和准晶体点群(对称型)	53
5.3	晶体、准晶体的对称分类	53
5.4	晶体学和准晶体学中群的极赤投影图	55

5.5 晶体、准晶体对称性的基本规律	58
第6章 晶体与准晶体中点群的母子群关系(60个点群的家谱)	60
6.1 群论在晶体学与准晶体学中的应用	60
6.2 群论基础	61
6.2.1 群的定义及概念	61
6.2.2 共轭元和类	62
6.2.3 子群	63
6.2.4 直积群与半直积群	63
6.3 十二方晶系各点群的最大子群的推导	64
6.3.1 十二方晶系内各点群的构成及母子群关系	64
6.3.2 十二方晶系各点群在六方和四方晶系中的最大子群	66
6.4 五方和十方晶系各点群的最大子群	68
6.4.1 五方和十方晶系内各点群的构成及母子群关系	68
6.4.2 五方和十方晶系各点群在低级晶族中的最大子群	70
6.5 八方晶系各点群的最大子群	71
6.5.1 八方晶系内各点群的母子群关系	71
6.5.2 八方晶系各点群在四方晶系中的最大子群	72
6.6 二十面体晶系各点群的最大子群	73
6.7 晶体学和准晶体学点群的母子群关系图	73
6.7.1 晶体中 32 个点群的家谱	73
6.7.2 晶体学与准晶体学 60 个点群的母子群关系链	73
第7章 准晶结构的基础理论(纳米微粒与分形生长)	76
7.1 纳米世界里的科学	76
7.1.1 人类对纳米世界的认识	76
7.1.2 纳米科技研究的尺度	76
7.1.3 介观领域中的纳米科技	77
7.1.4 纳米科技与纳米材料	78
7.1.5 纳米结构的构筑技术	78
7.1.6 颗粒组元与界面组元	78
7.1.7 纳米材料的特征	79
7.2 分形和分数维的理论	81
7.2.1 自相似原则	81
7.2.2 典型的分形	82
7.2.3 分维(分数维)	84
7.3 分形和分维研究的意义	84

7.3.1	纳米是尺度大小问题,分形是位置关系问题	84
7.3.2	分形结构与自然科学的关系	85
第8章	准晶结构的几何理论	86
8.1	准晶结构研究概述	86
8.1.1	准晶结构的 Penrose 拼图模型	86
8.1.2	准晶结构的玻璃模型	87
8.1.3	准晶结构的无规堆砌模型	88
8.1.4	纳米微粒多重分数维准晶结构模型	89
8.2	准晶结构的几何特征	89
8.2.1	晶体、准晶体空间几何	89
8.2.2	具有 5,8,10,12 次对称轴的准晶几何格子	91
8.2.3	具有 5,8,10,12 次对称轴准晶结构的平面准点阵	96
8.3	准晶结构与 Penrose 拼图	99
8.3.1	Penrose 拼图的含义	99
8.3.2	具有 2,3,4,5,6,8,10,12 次对称轴的 Penrose 拼图	101
8.3.3	准晶体结构中的 Penrose 拼图	103
8.3.4	与准晶结构有关的 Penrose 拼图的特征	105
8.4	准晶结构的分数维特征	106
8.4.1	分形和分数维	106
8.4.2	准晶结构中的分数维图形	107
8.4.3	准晶结构中分数维图形的维数值计算	109
8.4.4	准晶结构的准周期	110
8.4.5	共轭准晶结构模型的多标度分形特征	110
第9章	纳米微粒多重分数维二十面体准晶结构模型	112
9.1	准晶结构研究	112
9.2	二十面体类的准晶生长和准晶结构	113
9.2.1	二十面体准晶的生成条件	113
9.2.2	二十面体准晶对称轴之间的夹角	113
9.2.3	正二十面体基本连接方式	115
9.2.4	正二十面体与正十二面体相互共轭生长关系	115
9.3	二十面体准晶结构模型设计原则	116
9.4	二十面体与十二面体共轭分数维模型	118
9.4.1	a_1 二十面体的特点	119
9.4.2	a_2 二十面体的特点	120
9.4.3	a_n 二十面体的特点	121

9.5	共轭分数维模型与准晶共轭结构模型	122
9.6	二十面体准晶共轭结构与 Penrose 拼图	123
9.6.1	从二十面体看 Penrose 拼图	123
9.6.2	从二十面体看 3 维 Penrose 拼图与共轭结构模型	125
9.6.3	Penrose 拼图与准晶高分辨电子显微镜结构图像	125
9.6.4	准晶共轭结构模型与 Penrose 拼图	125
9.7	大块准晶的共轭结构模型	125
9.7.1	Al-Mn 准晶共轭结构模型的基本特点	125
9.7.2	Al-Cu-Li 生成的大块准晶结构模型	127
9.8	二十面体准晶的透射电子显微分析	131
9.8.1	试样制备和实验方法	131
9.8.2	二十面体准晶的电子衍射分析	132
9.8.3	透射电子形貌观察	134
9.8.4	高分辨电子显微镜图像分析	134
9.8.5	背散射电子图像及二次电子图像	136
第 10 章	纳米微粒多重分数维 2 维准晶结构模型	138
10.1	2 维准晶结构的纳米微粒多重分数维特征	138
10.1.1	只有一个高次轴(8、10 或 12 次)	138
10.1.2	2 维准晶与晶体之间的相变关系	138
10.2	2 维准晶胞选取和准晶结构模型	138
10.2.1	2 维准晶胞的选取——二种或三种基本菱形(方形)	139
10.2.2	2 维准晶胞的选取原则	140
10.3	8 次对称性准晶结构	140
10.3.1	8 次对称性准晶的研究概述	140
10.3.2	8 次对称性准晶的基本特征	141
10.3.3	8 次对称性准晶的结构模型	143
10.3.4	准晶结构与晶体结构的过渡关系	146
10.3.5	8 次对称性准晶的纳米微粒多重分数维结构	147
10.4	10 次对称性准晶结构	149
10.4.1	10 次对称性准晶的研究概述	149
10.4.2	10 次对称性准晶的基本特征	150
10.4.3	10 次对称性准晶的结构模型	153
10.4.4	10 次对称性准晶的纳米微粒多重分数维结构	155
10.5	12 次对称性准晶结构	158
10.5.1	12 次对称性准晶的研究概述	158

10.5.2	12次对称性准晶的基本特征·····	158
10.5.3	12次对称性准晶的结构模型·····	161
10.5.4	准晶结构与晶体结构的过渡关系·····	163
10.5.5	12次对称性准晶的纳米微粒多重分数维结构·····	163
参考文献·····		166

第 1 章 绪 论

1.1 晶 体 学

1.1.1 晶体形态学

晶体研究已有 300 多年历史,经历了晶体形态学、晶体结构学、晶体化学、准晶体学、纳米晶体、现代晶体化学发展的漫长过程,它是伴随着数学、物理学、化学、地质学、材料科学及测试分析技术和方法发展而成长起来的。

晶体学作为一门科学出现始于 17 世纪中叶。1669 年,丹麦斯丹诺(N. Steno)提出了晶体的面角守恒定律,奠定了几何结晶学的基础。1688 年,加格利耳米尼斯(Guglielmini)把面角守恒定律推广到多种晶体上。1749 年,俄国罗蒙诺索夫创立了物质结构的微分子学说,从理论上阐明了面角守恒定律的实质。到 1772 年,法国罗姆·得利(Del'lele)测量了 500 种矿物晶体的形态,写出了著名晶体形态学,肯定了面角守恒定律的普遍性。从此,人们了解到晶体晶面的相对位置是每一种晶体的固有特征,而晶面的大小在很大程度上取决于晶体生长期间的物理化学条件。

1784 年,法国阿羽伊(R. J. Haüy)发表了晶体均由无数具有多面体形状的分子平行堆砌而成,1801 年发表著名的整数定律,从而解释了晶体外形与其内部结构的关系。他认为晶体是对称的,晶体的对称性不但为晶体外形所固有,同时也表现在晶体的物理性质上。

1809 年,德国魏斯(C. S. Weiss)根据对晶体的面角测量数据进行晶体投影和理想形态的绘制,确定了晶体形态的对称定律,晶体只可能有 1、2、3、4 和 6 次旋转对称轴,而不可能有 5 次和高于 6 次的旋转对称轴存在,为晶体对称分类奠定了基础。

1830 年,德国赫塞尔(J. F. C. Hessel)推导出晶体的 32 种对称型(点群)。到 1867 年,俄国加多林又用数学方法推导出晶体的 32 种对称型。德国圣佛里斯创立了以他名字命名的对称型符号,格尔曼和摩根创立了国际符号,从而完成了对晶体宏观对称理论的总结。在对称理论迅速发展期间,魏斯还确定了晶带定律。魏斯和米勒(W. H. Miller)还分别于 1818 年和 1839 年先后创立了用以表示晶面空间位置的魏斯符号和米勒符号。到 19 世纪末,由于晶体形态对称理论的迅速发展,整个几何结晶学理论达到了相当成熟的程度。

1.1.2 晶体结构

19 世纪末到 20 世纪 70 年代, X 射线的发现与应用, 使得晶体形态学进一步发展到晶体结构学, 微观对称理论也日益成熟。晶体的结构被揭示出来, 并在系统完成一大批晶体结构研究的基础上发展建立起了以研究晶体成分和晶体结构及其与物理化学性质关系为主要内容的学科, 即晶体化学。

19 世纪中叶, 在几何结晶学基础上, 借助于几何学、群论方法以及化学、物理学发展所创造的条件, 晶体构造理论得到了进一步发展。在阿羽伊的晶体构造理论的启示下, 19 世纪产生的空间点阵和空间格子构造理论, 逐渐演化成为质点在空间规则排列的微观对称学说。1855 年, 法国结晶学家布拉维(A. Bravais)运用数学方法推导出晶体的 14 种空间格子, 为晶体结构理论奠定了基础。但是, 此理论只能说明晶系中对称最完全的晶类的对称, 而对对称较低的晶类的对称不能解释。

俄国费德洛夫(Federov)圆满地解决了晶体构造的几何理论, 创立了平行六面体学说, 提出了反映及反映滑移等新的对称变换, 于 1889 年推导出晶体构造(无限图形)的一切可能的对称形式, 即 230 种空间群, 并发现了结晶学极限定律。此后, 德国圣佛利斯等分别推导出相同的 230 个空间群。晶体构造的空间几何理论日趋完善。

19 世纪末, 晶体结构的几何理论已被许多学者所接受。1895 年, 德国学者伦琴(W. C. Roentgen)发现了 X 射线。1909 年, 德国学者劳厄(M. Laue)提出了 X 射线通过晶体会出现干涉现象, 并与弗利德利希(Friedrich)等用实验证明了晶体格子的客观性, 劳厄等开创了晶体学研究新时代。此后, 法国学者布拉格父子(W. H. Bragg 和 W. L. Bragg)发表了第一个测定的氯化钠晶体结构, 在一个不长的时期内测定了许多晶体结构, 而且改善了晶体结构测定的理论和实验技术, 从而开拓了晶体结构研究的新领域。从 1909 年 X 射线通过晶体产生衍射效应的实验第一次获得成功以来, 所有已知晶体结构的测定基本上都是应用上述方法作出的。

自 1889 年费德洛夫(Federov)推导出 230 个空间群之后, 俄国舒布尼柯夫(Shubnikov)将对称理论向前推进了一步, 1951 年提出正负对称型的概念, 创立了对称理论的非对称学说。随后, 扎莫扎也夫(Zamozayev)和别洛夫(Belov)根据正负对称型概念增加了晶体所可能有的对称形式, 将费德洛夫 230 个空间群发展为 1651 个舒布尼柯夫黑白对称群。1956 年, 别洛夫又提出多色对称理论的概念, 并探讨了 4 维空间的对称问题。这些理论在晶体学、晶体化学、晶体物理学领域中得到广泛的应用。

现在, 已可利用高分辨率透射电子显微镜来直接观察晶体的内部结构了。1932 年德国鲁斯卡(Ruska)等试制出世界上第一台电子显微镜, 在早期, 人们主要

是利用电子显微镜的放大能力,观察一些细微晶体的形态。后来在电子显微镜中安装了观察晶体的电子衍射图像装置,使人们在 20 世纪广泛运用电子衍射花样及显微图像来研究晶体的微细结构一类现象。1956 年,英国科学家 Menter 在酞菁铂晶体上观察到了晶面间距为 1.19nm 的晶格像,逐步建立了高分辨成像理论,发展了高分辨透射电子显微镜。现在分辨率已优于 0.1nm 。从而可以直接观察晶体中的晶格像、结构像,甚至可以观察到晶体中的原子像。

X 射线衍射法是根据晶体试样中所有晶胞对 X 射线散射,以散射波叠加后得到的平均效应进行分析的。例如, 1mm^3 单晶试样中约有 10^{17} 个晶胞,测定晶体结构是根据 10^{17} 个晶胞的散射波总和来分析的,所以测得的结构只能是一种“平均结构”,也就是说,它是一种晶胞级上的“平均结果”。电子显微镜,尤其是高分辨电子显微镜则不同,它可以直接在 0.1nm 的分辨率上来观察和研究有关结构现象,结果真实地反映了晶胞级上的各种微细结构和微观现象。

自 20 世纪 70 年代以来,电子显微镜研究方法已经成为物质超微结构研究的基本方法。

1.2 物质结构及对称理论新进展

现代科学技术的进步,现代测试分析方法的发展,促使物质结构对称理论的研究进入一个新的层次。对称理论从哲学范畴应定义为“变换中的不变性”。对称理论,要从对称性的范围、对称性的尺度、简单对称性和复合对称性等方面来研究。

准晶结构、分形结构、纳米结构、拓扑结构、团簇结构、空洞结构、反结构、记忆结构、全息结构、生物克隆等,它们的对称基本特征反映出对称性理论的新进展。

1.2.1 对称性的哲学定义

为了全面、科学地讨论对称性理论,有必要从哲学的角度来讨论对称性理论问题。对称性的哲学定义有以下三方面内容:

(1) 对称性

现代对称性理论具有更广泛的内涵,从哲学观点看,对称性的基本定义是变换中的不变性。

(2) 对称破缺

对称性具有普遍性,与此相关,对称破缺也具有普遍性。对称破缺有两种,即自发的对称破缺和非自发的对称破缺。自发的对称破缺,原本就具有一定的不对称性。非自发的对称破缺,从具有一定对称性到失去该对称性的转化,从较高的对

称变为较低的对称。

(3) 对称性恢复

对称性恢复,是指某些破缺了的对称性在特定物理化学条件下,可以或大致恢复到原来的对称性的过程及其结果。

(4) 对称性、对称破缺和对称性恢复

物质结构的对称性、对称破缺、对称性恢复是一个综合复杂的物理学、化学过程。在材料科学、矿物学等研究过程中,有时重点研究对称性,有时重点研究对称破缺,有时又重点研究对称性恢复。但在更多情况下应是研究对称性、对称破缺、对称性恢复的综合复杂的物理学、化学、过程。

1.2.2 对称性的范围

变换中的不变性,它包括一切类型的对称性。

自然科学:在数学、物理学、化学、生物学、地质学、天文学、材料科学、信息科学等自然科学中,充满着各自的对称性表征方式和表达语言,这类例子随处可见。运用对称性理论,可以形象地表达一些深奥的科学哲理,使一些复杂科学问题变得通俗易懂。

社会科学:政治经济学、文学艺术、体育、音乐等各个领域都具有不同特征的对称性。运用对称性原理来讨论问题、表征结果、表达思想,将是一种理想的方式和美丽的语言。

这些对称性的集合将是一个无限的总体。研究过程中,同样都有对称性、对称破缺、对称性恢复等综合复杂的内容和过程。

1.2.3 对称性的尺度

在讨论对称性问题时,除了注意对称性的范围外,还必须考虑研究问题的大小尺度,宏观、微观对称要素的差别。

(1) 点群与空间群

点群表征晶体外形的对称性,空间群则表征晶体内部结构的对称性,两者在研究问题时是协调统一的。

(2) 晶胞和分子

例如, C_{60} 的晶胞为立方面心格子, $Fm3m$; C_{60} 的分子为足球状,由20个六边形环和12个五边形环组成球形三十二面体,其中五边形环只与六边形环相邻,而不

互相连接;三十二面体共有 60 个顶角,每个顶角上占一个碳原子(二十面体切角顶)。

(3) 人体外形对称与内部结构对称

人体外形对称具有对称面 m , 而人体内部结构不具有这种对称面。人的生长过程具有自相似性放大,为复杂的分形对称。

每一个生物细胞中都包含有产生一个完整有机体的全部基因(全息元),在适当条件下全息元不断地复制,也就是一个细胞会发育成一个与母体相同的完整新体。细胞与生物体具有全息对称关系,克隆技术就是最好的研究成果。

1.2.4 简单对称性和复合对称性

对称性理论表明物质结构不仅存在着简单对称性,还常常以复合对称性表征。目前一些对称性研究中比较注重简单对称性,而忽视了对称性复合特征。

准晶结构研究中,开始人们比较注意简单的分形生长理论,认为只可能生成微粒准晶物质。我们从准晶多重分形生长理论,提出了纳米微粒多重分数维结构模型,此种模型不仅能解释一般准晶结构,还能很好解释大块准晶结构模型。

生物克隆原理和技术,是一个具有自相似性放大的生长过程,为复杂的多重分形对称。

根据研究的领域范围和尺度大小,物质结构的对称理论有时可从简单对称性讨论,有时则需要从复合对称性深入探讨。

1.2.5 对称性理论新进展

对称性理论新进展主要表现在拓扑对称变换、幻数和团簇结构、空洞结构(反结构)、记忆结构、全息结构、克隆结构和技术、纳米物质结构和技术等几个方面。

在各个学科领域开展对称性规律研究是极为重要的。

1.3 现代晶体化学

晶体化学,是研究晶体成分与晶体结构,以及它们与晶体的物理与化学性质的关系。伴随着物理学、化学、晶体学、晶体结构、X 射线分析、电子显微分析、扫描隧道显微分析等飞速发展,大量周期晶体结构测定完成,同时准周期、非周期结构、物质结构的缺陷、纳米材料结构等研究越来越深入,现代晶体化学已成为一门重要的基础科学。

现代晶体化学主要研究内容有

① 从天然晶体结构研究,到合成晶体结构研究;