# 晶体学中的对称群

科学出版社

中国科学院科学出版基金资助项目

# 晶体学中的对称群

王仁卉　郭可信　著

科学出版社

1990

## 内 容 简 介

晶体学是固体科学的基础，对称性理论是晶体学的理论基础. 运用群论可以很方便地研究晶体的对称性.

本书的重点是运用群论讨论晶体的对称性. 全书共十三章，大致可分成三部分. 前三章是基础，介绍了对称操作以及群论中与研究晶体的对称性关系较密切的基本概念和定理. 第四、五、七、八章是全书的主体，用群论推导了晶体学点群、平移群和空间群，介绍了 1983 年出版的“International Tables for Crystallography, Volume A: Space-Group Symmetry (国际晶体学表，A 卷：空间群对称性)”的主要内容. 其余各章介绍了群论和晶体的对称性在固体科学中的应用，以及晶体学与对称性概念的推广.

本书可作为固体物理(凝聚态物理)、固体化学、材料科学、地质矿物学等学科的研究生教材，也可供上述学科及其它有关学科的师生和科技工作者参考.

**晶体学中的对称群**

王仁卉　郭可信 著

责任编辑　杨家福　何舒民

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100707

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行　各地新华书店经售

*

1990 年 10 月第 一 版　　开本：787×1092 1/16

1990 年 10 月第一次印刷　　印张：27 3/4

印数：平 1—800　　精 2

　　　精 1—400　　字数：636 000

ISBN 7-03-001731-5/TB·50 (平)

ISBN 7-03-001732-3/TB·51 (精)

定价：平　　装 21.80 元

　　　布脊精装 24.00 元

# 前　言

晶体的主要特征是其原子的配置具有周期性及一定的对称性．广义地说，周期性也是一种对称性，即平移对称性．在一定的生成条件下，晶体可结晶成为大的单晶体，其外形为多面体，呈现出该种晶体的对称性．图 0-1 是若干在地壳内形成的天然矿物晶体，图


图 0-1　若干天然晶体实物的照片[1]．1．食盐 $NaCl$；2．方解石 $CaCO_3$；3．绿柱石 $Be_3Al_2[Si_6O_{18}]$；4．沃罗比耶夫矿，一种粉红色的绿柱石；5．翡翠，一种浅绿色的绿柱石；6．黄铁矿 $FeS_2$；7．石英 $SiO_2$；8．天河石 $K[AlSi_3O_8]$；9．辉锑矿 $Sb_2S_3$；10．红电气石 $(Na,Ca)(Mg,Al)_6[Si_6Al_3B_3(O,OH)_{30}]$；11．黄玉 $Al_2(SiO_4)(F,OH)_2$；12．巴西黄玉；13．透辉石 $CaMg[Si_2O_6]$；14．萤石 $CaF_2$；15．赤铁矿 $Fe_2O_3$；16．天青石 $SrSO_4$

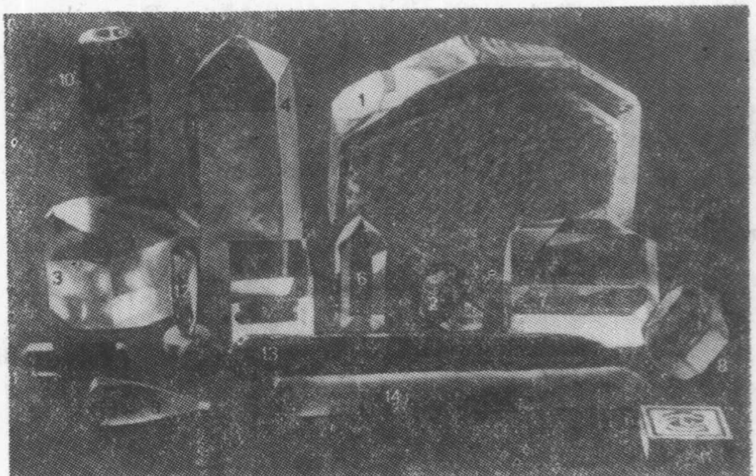
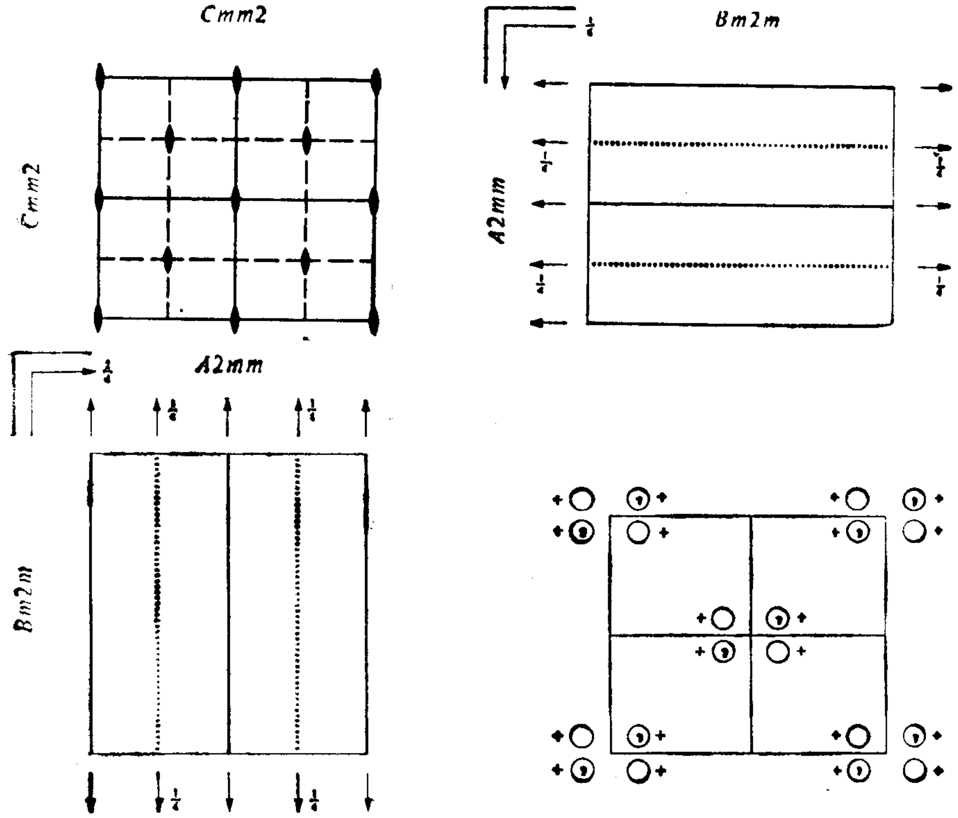


图 0-2　若干人工合成单晶体实物的照片[1]．1，2．石英 $SiO_2$；3．三甘氨酸硫酸盐 $(NH_2CH_2COOH)_3\ H_2SO_4$；4．磷酸二氢钾 $KH_2PO_4$；5．氟化锂 $LiF$；6．碘酸锂 $LiIO_3$；7．$\alpha$ 碘酸 $\alpha$-$HIO_3$；8．钾矾 $KAl(SO_4)_3\cdot 12H_2O$；9．红宝石 $Al_2O_3+0.05\%Cr$，作为手表的轴承；10．激光红宝石 $Al_2O_3+0.05\%Cr$；11．石榴石 $Y_3Al_5O_{12}$；12．铌酸锂 $LiNbO_3$；13．硅 $Si$；14．蓝宝石 $Al_2O_3$

① $Cmm2$ $C_{2v}^{11}$ $mm2$ 正交晶系

② No. 35 $Cmm2$ Patterson 对称性 $Cmmm$

③




④ **原点** 在 $mm2$

⑤ **无对称单元** $0\leqslant x\leqslant\frac{1}{4}$; $0\leqslant y\leqslant\frac{1}{2}$; $0\leqslant z\leqslant 1$

⑥ **对称操作**

对 (0, 0, 0)+组

(1) 1 (2) 2 $0, 0, z$ (3) $m$ $x, 0, z$ (4) $m$ $0, y, z$

对 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$+组

(1) $t\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$ (2) 2 $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z$ (3) $a$ $x, \frac{1}{4}, z$ (4) $b$ $\frac{1}{4}, y, z$

图 0-3 空间群 $Cmm2$

## 空间群图表的简短说明

① **标题** §8-1.

| | | | |
|---|---|---|---|
| 简略 Hermann-Mauguin 符号 | Schoenflies 符号 | 晶类（点群） | 晶系 |
| (§7-5) | (§7-5) | (§4-2, §4-3) | (§5-2) |

② **空间群序号** 完全 Hermann-Mauguin 符号 (§7-5)　Patterson 对称性 (§8-6)

③ **空间群图** 由对称元素配置图(§8-2, §8-3)和一般位置配置图(§8-2, §8-3)组成. 图的个数和类型依赖于晶系,对称元素的图示符号见§1-2和§1-3.

④ **单胞原点** §8-2. 给出了原点的位置对称性及相对于对称元素的位置.

⑤ **无对称单元** §8-2. 给出无对称单元的一种选取.

⑥ **对称操作** §1-7. 列出了把起始点 $x, y, z$ 变换成一般位置的每一点 $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ 的对称操作的几何符号. 这种符号描述对称操作的种类,滑移分量或螺旋分量(在括号内),以及相应的对称元素的位置.

对称操作和相应的一般位置坐标有相同的编号. 有心空间群的对称操作按其有心平移矢量分成若干块列出. 例如"对 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$+组"条款内列出的是基本对称操作与 $C$ 心平移 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$ 组成的复合操作. 每一块内的对称操作的编号顺序是相同的.

及其简短说明 (a)

① No. 35 $Cmm2$

② 选用的生成操作 (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$;

(2); (3)

③ 位置

| 多重性 Wyckoff 字母 点对称性 | | | 坐标 | 反射条件 |
|---|---|---|---|---|
| | | | $(0,0,0)+\quad\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)+$ | 一般: |
| 8 | $f$ | 1 | (1) $x,y,z$ (2) $\bar{x},\bar{y},z$ (3) $x,\bar{y},z$ (4) $\bar{x},y,z$ | $hkl$: $h+k=2n$<br>$0kl$: $k=2n$<br>$h0l$: $h=2n$<br>$hk0$: $h+k=2n$<br>$h00$: $h=2n$<br>$0k0$: $k=2n$<br>特殊: 同上,加上 |
| 4 | $e$ | $m..$ | $0,y,z\quad 0,\bar{y},z$ | 无额外条件 |
| 4 | $d$ | $.m.$ | $x,0,z\quad \bar{x},0,z$ | 无额外条件 |
| 4 | $c$ | $..2$ | $\frac{1}{4},\frac{1}{4},z\quad \frac{1}{4},\frac{3}{4},z$ | $hkl$: $h=2n$ |
| 2 | $b$ | $mm2$ | $0,\frac{1}{2},z$ | 无额外条件 |
| 2 | $a$ | $mm2$ | $0,0,z$ | 无额外条件 |

④ 特殊投影的对称性

沿 [001], $c2mm$
$a'=a\quad b'=b$
原点 $0,0,z$

沿 [100], $p1m1$
$a'=\frac{1}{2}b\quad b'=c$
原点 $x,0,0$

沿 [010], $p11m$
$a'=c\quad b'=\frac{1}{2}a$
原点 $0,y,0$

⑤ 最大不同构子群

I [2]$C112(P2)$ (1;2)+
[2]$C1m1(Cm)$ (1;3)+
[2]$Cm11(Cm)$ (1;4)+

IIa [2]$Pmm2$ 1; 2; 3; 4
[2]$Pba2$ 1;2; (3; 4) + $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$
[2]$Pbm2(Pma2)$ 1; 3; (2; 4) + $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$
[2]$Pma2$ 1; 4; (2; 3) + $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$

IIb [2]$Ccc2(c'=2c)$; [2]$Cmc2_1(c'=2c)$; [2]$Ccm2_1(c'=2c)(Cmc2_1)$; [2]$Imm2(c'=2c)$; [2]$Iba2(c'=2c)$; [2]$Ibm2(c'=2c)$ $(Ima2)$; [2]$Ima2(c'=2c)$

⑥ 最低指数的最大同构子群

IIc [3] $Cmm2(a'=3a$ 或 $b'=3b)$; [2]$Cmm2(c'=2c)$

⑦ 最小不同构母群

I [2] $Cmmm$; [2]$Cmma$; [2]$P4mm$; [2]$P4bm$; [2]$P4_2cm$; [2]$P4_2nm$; [2]$P\bar{4}2m$; [2]$P\bar{4}2_1m$; [3]$P6mm$

II [2]$Fmm2$; [2]$Pmm2(2a'=a,\ 2b'=b)$

图 0-4 空间群 $Cmm2$

## 空间群图表的简短说明

① **简略的标题.**

② **生成操作** §8-3. 这些表中选用的一组生成操作以平移和对称操作的序号（即一般位置坐标的序号)的形式列出. 由这些生成操作的乘幂的乘积可得到一系列的对称操作及一系列的相应的一般位置的坐标.

③ **位置** §8-3和§8-4. 一般 Wyckoff 位置列在上部,往下是特殊 Wyckoff 位置，其多重性依次减小,位置对称性依次增高. 对于一般位置和每一种特殊位置，由左到右依次列出其多重性、Wyckoff 字母、取向关系确定的位置对称性符号、等效位置坐标和反射条件(§8-5). 一般位置坐标的编号与对称操作的编号相应.

④ **特殊投影的对称性** §8-7. 每一空间群列出了沿三个对称方向的正交投影,包括投影方向，投影所得的平面群,投影单胞的轴和原点.

⑤ **最大不同构子群** §8-8.

第 **I** 类: 同平移子群($t$ 子群).

第 **IIa** 类: 同晶类子群($k$ 子群),空间群的惯用晶胞是有心的,子群失去了某些有心平移.

第 **IIb** 类: 同晶类子群($k$ 子群),子群的惯用晶胞比母群的大.

对于第 **I** 和 **IIa** 类子群,依次列出: 子群在母群中的指数（在方括号内),采用母群坐标系时子群的 Hermann-Mauguin 符号,子群的惯用的 Hermann-Mauguin 符号(在圆括号内,当它与前者不同时才列出),子群中保留的一般位置的编号.

对于第 **IIb** 类子群,依次列出: 子群在母群中的指数(在方括号内),采用母群坐标系时子群的 Hermann-Mauguin 符号，子群的基矢 $\boldsymbol{a}'$, $\boldsymbol{b}'$, $\boldsymbol{c}'$ 与母群的基矢 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$ 的关系(在圆括号内)，子群的惯用的 Hermann-Mauguin 符号(在圆括号内,当它不同时才列出).

⑥ **最低指数的最大同构子群** §8-8.

第 **IIc** 类: 最低指数的同晶类子群($k$ 子群) 与母群有相同的标准 Hermann-Mauguin 符号. 所列出的数据与第 **IIb** 类子群相同.

⑦ **最小不同构母群** §8-8. 若 $H$ 是 $S$ 的最大不同构子群, $S$ 就是 $H$ 的最小不同构母群，这里只区分成第 **I**(同平移母群)与第 **II**(同晶类母群)两类. 列出的数据与第 **IIb** 类子群相同.

及其简短说明（b)

0-2 是若干在实验室人工合成的晶体[1],其中有些呈多面体的形状,有些则不是(图 0-2 中的晶体 9—14). 大多数金属晶体不显示反映其对称性的规则外形. 大量天然的和人工合成的固体不是单晶体,而是由许多尺寸、形状、取向都不相同的小晶粒组成的多晶体.

晶体学包括对称性理论、晶体结构及其研究方法、晶体缺陷、晶体生长与人工合成,以及晶体物理等内容. 因此,晶体学是包括固体物理、晶体化学、固体电子学、材料科学、地质矿物学等在内的固体科学乃至高分子物理与化学、分子生物学等学科的基础. 而对称性理论是晶体学的核心和理论基础. 晶体对称操作的集合构成对称群; 平移操作的集合构成平移群,描述晶体的周期性;围绕一点的对称操作的集合构成点(对称)群, 它决定晶体的宏观特征和宏观物理性能的对称性;在空间里的对称操作的集合称为空间群,它概括了晶体的全部对称性. 运用群论的概念、方法和定理可以很方便地研究晶体的对称性.

本书的重点是运用群论讨论晶体的对称性, 同时介绍了从 1983 年出版的"International Tables for Crystallography, Volume A: Space-Group Symmetry (国际晶体学表, A卷: 空间群对称性)"[2] 一书中所载的 230 种空间群的图表中能获得什么信息. 图 0-3, 图 0-4 为该书中所载空间群 *Cmm2* 及简短说明. 另外, 本书还详细介绍了群论和晶体对称性在固体科学中的应用及晶体学与对称性的概念的推广. 其中广义晶体学和广义对称性的概念在研究准晶体、高分子材料、液晶和生物分子的结构时很有用. 准晶体不具有完全的三维周期性,可能是三维都没有周期性,也可能是二维没有周期性而第三维有周期性,等等. 在没有周期性时,准晶体原子的分布仍有一定的规律性,即具有准周期性. 准晶体可描述为六维空间中周期性的晶体的一部分在三维空间的投影; 高分子材料多是在三维空间中仅在统计意义上具有二维或一维周期性.

本书初稿和第二稿分别于 1982 年和 1985 年由武汉大学教材出版科内部印出, 并被武汉大学、中国科学院金属研究所、武汉地质学院等单位用作研究生和助教进修班学员教材. 这次正式出版, 我们对其又作了一些修改,但不足之处仍在所难免,欢迎广大读者指正. 杨奇斌、吴玉琨等同志对本书手稿提出了不少宝贵意见,汪大海同志帮助绘图, 特此致谢.

1) B. K. Vainshtein, Modern Crystallography I, Springer-Verlag, Berlin, 1981.

2) T. Hahn (ed.), International Tables for Crystallography, Vol. A, Space Group Symmetry, D. Reidel, Dordrecht: Holland/Boston: USA, 1983.

# 目　　录

# 第一章 对称操作

## §1-1 引 言[1]

许多物体具有对称性．例如，铅笔围绕它的长轴有对称性，人体相对于他的中平面有对称性，等等．但在本书中我们主要讨论晶体而不是日常生活中其它客体的对称性．晶体不同于其它客体的主要特征在于，晶体是由在三维空间规则地重复排列的原子或原子集团组成的．原子集团的这种规则的重复就是平移对称性的一种形式．我们用点阵描述晶体的平移对称性．所谓点阵就是空间中的点的无限阵列，其中每一阵点代表一个作为基本重复单元的原子集团，所有的阵点都具有相同的环境．图 1-1(a) 表示某具有三维周期性的图案，图 1-1(b) 则是这图案的点阵．我们选任意阵点 $O$ 作为原点，适当的三个

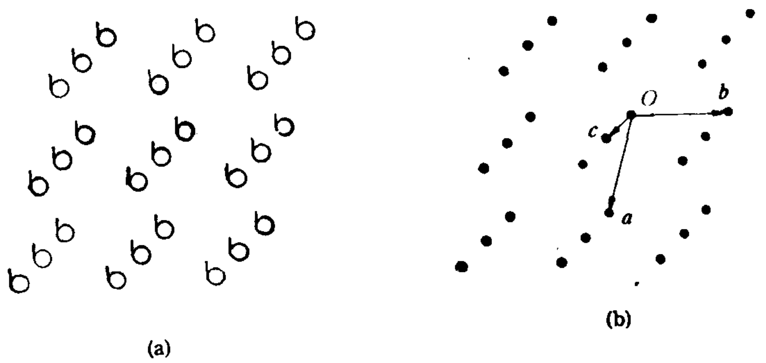



图 1-1 三维周期性的图案 (a) 及其空间点阵 (b)

不共面的矢量 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{c}$ 作为坐标轴的基矢．这里 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{c}$ 恰构成作为空间点阵的基本重复单元的平行六面体，我们称这个平行六面体为单胞．如果我们使整个空间点阵沿平移矢量

$$\boldsymbol{t}=u\boldsymbol{a}+v\boldsymbol{b}+w\boldsymbol{c}$$

平移（这里 $u$, $v$, $w$ 为任意整数），则得到的新的空间点阵恰与平移之前的一样，我们称沿矢量 $\boldsymbol{t}$ 的平移为空间点阵或晶体的一种平移对称操作．

为了进一步了解什么叫对称操作，我们再考虑图 1-2 所示的苯分子 ($C_6H_6$)．为了简单起见，图中仅绘出了六个碳原子．若把苯分子绕着垂直于分子面的轴（即 $\boldsymbol{c}$ 轴）旋转 60°，则苯分子与旋转之前完全一样，因此我们可以说，绕着 $\boldsymbol{c}$ 轴旋转 60° 是苯分子的一种对称操作．一般说来，一个分子或一个晶体的某一对称操作定义为这样

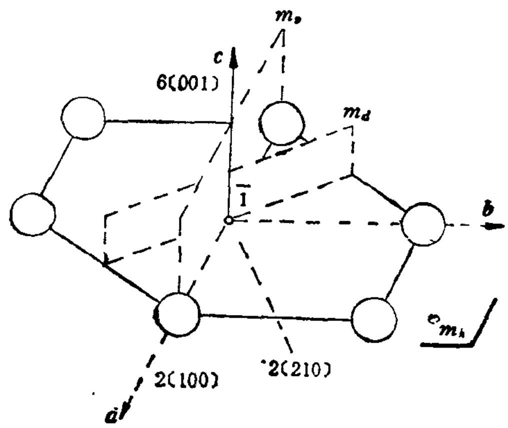



图 1-2 苯分子和它的若干对称操作

的操作，它变换了各原子的位置，但得到的分子或晶体恰与操作之前一样. 显然，绕 $c$ 轴旋转 120°，180°，240°，300° 和 360°也是苯分子的对称操作. 苯还有绕着其它轴的旋转对称操作以及除旋转之外的其它对称操作. 与前述平移对称操作不同，这些操作都是围绕空间中的一个点进行的，即在操作过程中至少有一个空间中的点不移动，因此我们称之为点对称操作.

本章先讨论晶体中的点对称操作（§ 1-2），再讨论非点式操作（§ 1-3）. 非点式操作包括螺旋旋转和滑移反映两大类，它们是由点对称操作与平移操作组成的复合操作. 点对称操作和非点式操作共有七种类型（§ 1-6）. § 1-4 和 § 1-5 则讨论晶体中旋转轴的轴次并证明只有这七种对称操作.

晶体中的这些对称操作可用图示符号（§1-2，1-3-1 和 1-3-2 节），Seitz 符号（1-3-3 节），(3 × 3) 矩阵或 (4 × 4) 增广矩阵（1-3-3 节），或用国际晶体学表 A 卷[2]中采用的几何符号（1-7-2 节）描述. 在 § 1-7 中将介绍这些符号之间，特别是后两种符号之间的关系.

## § 1-2 点对称操作及其矩阵表示[1]

设 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$ 为坐标轴，它们不一定互相垂直.原则上有两种描述对称操作的方式.一种叫主动操作，操作时使空间中所有的点或位矢相对于固定的坐标轴移动. 另一种叫被动操作，操作时让坐标轴移动，但空间中所有的点或位矢保持不动. 这里我们仅考虑主动对称操作. 此外，我们按照国际晶体学表[2]的习惯，采用右手坐标系，作图时一般让 $\boldsymbol{a}$ 大致朝下，$\boldsymbol{b}$ 朝右，$\boldsymbol{c}$ 从纸面指向读者. 设某一位矢 $\boldsymbol{r} = x\boldsymbol{a} + y\boldsymbol{b} + z\boldsymbol{c}$ 经对称操作 $\boldsymbol{W}$ 的作用后变成位矢 $\tilde{\boldsymbol{r}} = \tilde{x}\boldsymbol{a} + \tilde{y}\boldsymbol{b} + \tilde{z}\boldsymbol{c}$，也就是说，坐标为 $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ 的一点经对称操作 $\boldsymbol{W}$ 的作用后变成坐标为 $\tilde{\boldsymbol{x}} = \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ \tilde{z} \end{pmatrix}$ 的点. 经过点对称操作后的新位置可表为旧位置的矩阵变换：

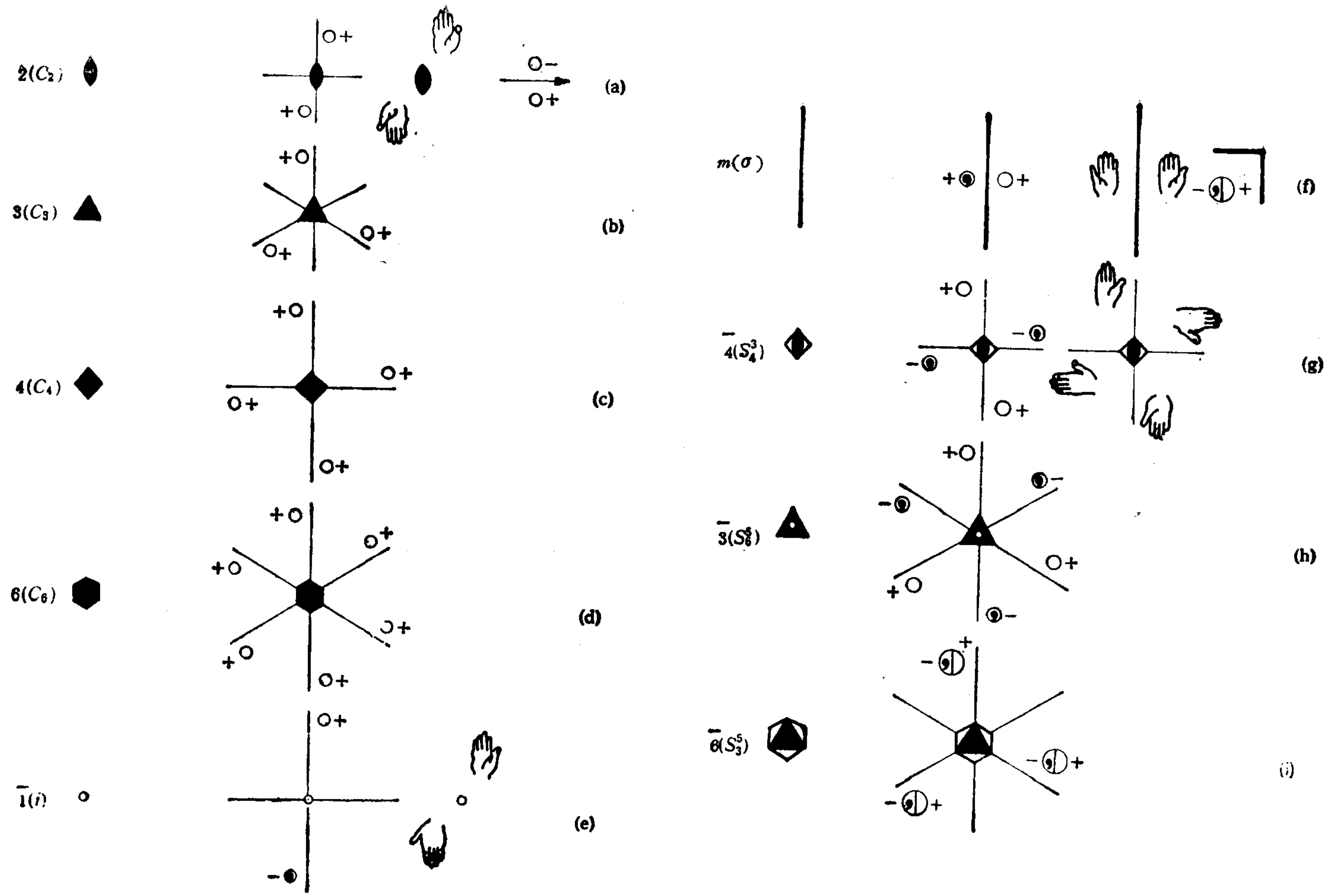
$$\begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ \tilde{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & W_{22} & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & W_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{1-1a}$$

或

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{x} \tag{1-1b}$$

这里方程（1-1b）是矩阵方程（1-1a）的简写，$\boldsymbol{W}$ 是点操作的矩阵表示. 现在我们较深入地讨论各种点对称操作.

(1) 全同操作：就是不施以任何操作.这种对称操作在 Hermann-Mauguin 符号(以下有时简称为 HM 符号)中用 1 表示，在 Schoenflies 符号中用 $E$ 表示. 描述这种操作的矩阵是 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$，即所谓的单位矩阵或全同矩阵.



$2(C_2)$
$3(C_3)$
$4(C_4)$
$6(C_6)$
$\bar{1}(i)$
$m(\sigma)$
$\bar{4}(S_4^3)$
$\bar{3}(S_6^5)$
$\bar{6}(S_3^5)$
(a)
(b)
(c)
(d)
(e)
(f)
(g)
(h)
(i)


图 1-3　若干点对称操作

(2) 旋转：是绕着某轴旋转 $2\pi/n$ 角．按 HM 符号记为 $n$，Schoenflies 符号为 $C_n$，这里 $n$ 称为旋转轴次．这种操作有时叫做纯旋转，客体的左右手向指关系不变．而非纯旋转则是旋转与倒反或旋转与反映的复合操作，客体的左右手向指关系改变．这里只讨论 $n=1,2,3,4,6$ 的情况，因为在晶体中只存在这几种旋转，这点将要在 § 1-4 中证明．为了方便起见，有时我们还用点阵方向指数 [$u$ $v$ $w$] 标出旋转轴的方向，例如，2 [0 0 1] 表示绕 [0 0 1] 轴(即 $\boldsymbol{c}$ 轴)旋转 $\pi$ 角的操作．

极（射）赤（面）投影图是形象描绘对称操作的重要方法．极赤投影图是这样作出来的：设 $+z$ 轴与单位球面的交点为北极，$-z$ 轴与单位球面的交点为南极．$+z$ 方向半球面上的某一点（代表着一个方向）与南极的连线同 $xy$ 平面的交点就是 $+z$ 方向半球面上该点的极赤投影点，习惯上用一个小圆点来标记．在 $-z$ 方向半球面上的点则用北极进行投影，习惯上用一小圆圈来标记．

我们还可以用另一种方式来描绘对称操作．用一个圆圈代表某一客体，例如原子集团．圆圈旁的"＋"号或"－"号分别表示这圆圈在纸面上或纸面下，坐标分别为 $+z$ 或 $-z$．有逗号的圆圈则表示与无逗号的圆圈具有相反的左右手向指关系，见图 1-3．

图 1-3 示若干点对称操作．每一种点对称操作的分图中从左到右依次为该点对称操作的 HM 符号(括号内是 Schoenflies 符号)，相应对称元素的符号，以及用这对称操作联系着的图象．

旋转轴垂直于纸面的对称操作 $2(C_2)$ 把图 1-3(a) 中右上方纸面之上的客体(右手或○＋)变成图中左下方纸面之上的客体(右手或○＋)，于是由这两个客体构成的整体具有点对称性 $2(C_2)$．相应的对称元素为 2 次轴，用符号 ⬮ 来表示．若二次轴躺在纸面上，比如说沿 [0 1 0] 方向，则其符号为沿 [0 1 0] 方向的箭头．与沿 [0 1 0] 方向的二次轴相联系的对称图形则用一个纸面上的圆圈○＋与一个纸面下的圆圈⊙－表示．附录 1 给出了晶体中各种点对称操作的矩阵 $\boldsymbol{W}$，相应的对称元素的方向，以及坐标为 $(x, y, z)$ 的点经对称操作 $\boldsymbol{W}$ 变换后的坐标 $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$．例如，对称操作 2[0 0 1] 作用在点 $(x, y, z)$ 上变换成

$$\begin{pmatrix}\tilde{x}\\ \tilde{y}\\ \tilde{z}\end{pmatrix}=(2[0\ 0\ 1])\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\ -y\\ z\end{pmatrix}$$

这就得到点 $(-x, -y, z)$，与图中所示一致．

下面再讨论对称操作 $3(C_3)$，用实心三角形▲表示，见图 1-3(b)．$3(C_3)$ 是三个在纸面上方同一高度处互成 120° ($2\pi/3$) 且与 3 次轴等距离的图案的对称操作．显见，$(3)^2=(3)(3)$ ($C_3^2=C_3C_3$) 也是这一图案的一种对称操作．在本书中我们约定：操作 $\boldsymbol{W}_2\boldsymbol{W}_1$ 表示首先对某客体施以 $\boldsymbol{W}_1$ 操作，紧接着再施以 $\boldsymbol{W}_2$ 操作．

图 1-3(c) 与 (d) 分别描绘对称操作 $4(C_4)$ 与 $6(C_6)$．注意 $4^2(C_4^2)=2(C_2)$ 也是一种操作，这是下列事实的一个最简单的例子：某些对称操作的存在意味着其它一些对称操作的存在．例：若 $4(C_4)$ 是某晶体或分子的对称操作，则 $2(C_2)$ 以及 $4^3(C_4^3)$ 也是对称操作．类似地，$3(C_3)$ 暗示着 $3^2(C_3^2)$，由 $6(C_6)$ 可知 $6^m(C_6^m)$ 也是对称操作，此处 $m=1,2,3,4,5,6$，其中 $6^2(C_6^2)=3(C_3)$，$6^3(C_6^3)=2(C_2)$，$6^6(C_6^6)=1(E)$．

对称操作使客体(原子团和圆圈符号)相对于对称元素移动某一量．通常总是把圆圈