

晶体学与准晶体学点群的母子群关系^{*}

龙光芝^{1)†} 陈 瀛³⁾ 陈敬中²⁾

1) 中国地质大学数学与物理学院物理系, 武汉 430074)

2) 中国地质大学材料科学与化学工程学院, 武汉 430074)

3) 中国地质大学地球科学学院, 武汉 430074)

(2005 年 8 月 1 日收到, 2005 年 12 月 28 日收到修改稿)

依据群论, 得出了准晶体学点群的直积或半直积推导算式, 依据结晶学理论, 绘出了五角、八角、十角和十二角晶系各点群的极赤投影图. 据此推导出了每一个准晶体学点群的全部最大子群, 从而推导并绘制出了三维晶体学和准晶体学点群之间的母子群关系(60 个点群的“家谱”). 该“家谱”以最大子群链的图解形式直观地给出了每个点群的最小母群和最大子群.

关键词: 准晶体, 晶体, 点群, 最大子群, 最小母群, 群链, 家谱

PACC: 6150E

1. 引 言

1984 年底 Shechtman 等^[1]报道了在急冷 Al-Mn 合金中发现了具有 5 次对称轴的二十面体相. 这种相不同于晶体, 因为晶体只允许存在 1, 2, 3, 4, 6 次旋转对称轴, 但也不属于非晶体, 因为它具有准周期长程平移序和长程取向序, 这种新的固体结构形态被称作准晶体, 简称准晶. 此后不少学者把准晶体学作为晶体学的一个重要的新分支进行研究. 除了具有 5 次对称轴的二十面体相的三维准晶外, 又先后在众多的合金中发现沿一个方向呈周期分布, 而围绕沿周期排列方向的旋转轴分别具有 5 次^[2]、8 次^[3]、10 次^[4]和 12 次^[5]旋转对称性的二维准晶. 还发现沿一个方向是准周期排列, 而与该方向垂直的平面是二维周期结构的一维准晶^[6].

陆洪文和费奔^[7]用纯数学理论证明了, 在实二次域上只可能存在 5, 8, 10, 12 次四种旋转对称性的准格点阵. 陈敬中等将晶体和准晶体合在一起进行了新的分类, 把晶体学原有的 7 个晶系、32 个点群、47 种单形, 扩充为 12 个晶系(增加了属于准晶系列的 5 个晶系: 五角、八角、十角、十二角和二十面体晶系), 60 个点群、89 种单形^[8].

晶体在物理、化学条件发生改变后, 对称性有可

能会改变, 准晶体也有此特性^[9]. 在一个点群 G 中, 添加对称性, 可构成 G 的一个母群; 而在点群 G 中, 撤去某种对称性, 其对称性降为 G 的一个子群^[10]. 所以研究晶体学和准晶体学各点群之间的母子群关系, 对于深入研究各种准晶体的结构及相变趋势有指导性的作用.

通常都是以最小母群和最大子群链的形式来表示各点群之间的母子群关系. 在结晶学界最具权威的工具书《国际晶体学表》1983 年第一版^[11]到 2002 年第五版^[12]中, 都给出了三维晶体学点群之间的母子群关系(32 个点群的“家谱”), 还给出了三维一般点群(包括二十面体晶系的点群)的母子群关系. 叶芙蓉等^[13]只用群元之间的关系和群论的基本数学定义也推导出 32 个三维晶体学点群间的母子群关系.

本文在前人研究的基础上, 推导并绘制出三维晶体学和准晶体学点群之间的母子群关系(60 个点群的“家谱”).

2. 十二角晶系各点群的最大子群的推导

2.1. 十二角晶系内各点群的构成及母子群关系

十二角晶系共有 7 个点群, 其中最小的是两个

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 48970082 和 49272091)资助的课题.

[†] E-mail: longwangrx@yahoo.com.cn

12阶的循环群 12 和 $\overline{12}$ 循环群 12 可由生成元 12^+ 进行连续操作而得到, 循环群 $\overline{12}$ 则可由生成元 $\overline{12}^+$ 进行连续操作而得到. 24 阶点群 $12/m$ 可由 12 阶点群 12 或 $\overline{12}$ 分别与 2 阶点群 $\overline{1} = \{1, \overline{1}\}$ 作直积而得到. 由于母子群的阶数比 $24/12 = 2$, 所以点群 $12/m$ 是点群 12 和 $\overline{12}$ 的最小母群, 点群 12 和 $\overline{12}$ 是点群 $12/m$ 的指数为 2 的最大不变(正规)子群^[14]. 其余的 3 个 24 阶点群可由 12 阶点群 12 和 $\overline{12}$ 分别与 2 阶点群 $2_0 =$

$\{1, 2_0\}$ 及 $m_0 = \{1, m_0\}$ 作半直积而得到. 最大的一个 48 阶点群 $\frac{12}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$, 可由这 4 个 24 阶点群分别与 2 阶点群 $\overline{1}, 2_0$ 及 m_0 作直积或半直积而得到. 为了更清楚地反映十二角晶系内各点群间的母子群关系, 在表 1 中列出了十二角晶系各点群的所有群元、阶数、推导算式及在十二角晶系内的最大子群(均为指数为 2 的不变子群).

表 1 十二角晶系内各点群的构成及母子群关系

点群	群元(对称操作)	阶数	推导算式	最大子群 均为不变子群
12	$1, 12^+, 12^-, 6^+, 6^-, 4^+, 4^-, 3^+, 3^-, 12^{+5}, 12^{-5}, 2_Z$	12		
$\overline{12}$	$1, \overline{12}^+, \overline{12}^-, 6^+, 6^-, \overline{4}^+, \overline{4}^-, 3^+, 3^-, \overline{12}^{+5}, \overline{12}^{-5}, 2_Z$	12		
$\frac{12}{m}$	$1, 12^+, 12^-, 6^+, 6^-, 4^+, 4^-, 3^+, 3^-, 12^{+5}, 12^{-5}, 2_Z, \overline{1}, \overline{12}^+, \overline{12}^-, \overline{6}^+, \overline{6}^-, \overline{4}^+, \overline{4}^-, \overline{3}^+, \overline{3}^-, \overline{12}^{+5}, \overline{12}^{-5}, m_Z$	24	$12 \otimes \overline{1}, \overline{12} \otimes \overline{1}$	$12, \overline{12}$
12 22	$1, 12^+, 12^-, 6^+, 6^-, 4^+, 4^-, 3^+, 3^-, 12^{+5}, 12^{-5}, 2_Z, 2_0, 2_{\pi/6}, 2_{\pi/3}, 2_{\pi/2}, 2_{2\pi/3}, 2_{5\pi/6}, 2_{\pi/12}, 2_{\pi/4}, 2_{5\pi/12}, 2_{7\pi/12}, 2_{3\pi/4}, 2_{11\pi/12}$	24	$12 \wedge 2_0$	12
12mm	$1, 12^+, 12^-, 6^+, 6^-, 4^+, 4^-, 3^+, 3^-, 12^{+5}, 12^{-5}, 2_Z, m_{\pi/6}, m_{\pi/3}, m_{\pi/2}, m_{2\pi/3}, m_{5\pi/6}, m_{\pi/12}, m_{\pi/4}, m_{5\pi/12}, m_{7\pi/12}, m_{3\pi/4}, m_{11\pi/12}$	24	$12 \wedge m_0$	12
$\overline{12} 2m$	$1, \overline{12}^+, \overline{12}^-, 6^+, 6^-, \overline{4}^+, \overline{4}^-, 3^+, 3^-, \overline{12}^{+5}, \overline{12}^{-5}, 2_Z, 2_0, 2_{\pi/6}, 2_{\pi/3}, 2_{\pi/2}, 2_{2\pi/3}, 2_{5\pi/6}, m_{\pi/12}, m_{\pi/4}, m_{5\pi/12}, m_{7\pi/12}, m_{3\pi/4}, m_{11\pi/12}$	24	$\overline{12} \wedge 2_0$	$\overline{12}$
$\frac{12}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$1, 12^+, 12^-, 6^+, 6^-, 4^+, 4^-, 3^+, 3^-, 12^{+5}, 12^{-5}, 2_Z, 2_0, 2_{\pi/6}, 2_{\pi/3}, 2_{\pi/2}, 2_{2\pi/3}, 2_{5\pi/6}, 2_{\pi/12}, 2_{\pi/4}, 2_{5\pi/12}, 2_{7\pi/12}, 2_{3\pi/4}, 2_{11\pi/12}, \overline{1}, \overline{12}^+, \overline{12}^-, \overline{6}^+, \overline{6}^-, \overline{4}^+, \overline{4}^-, \overline{3}^+, \overline{3}^-, \overline{12}^{+5}, \overline{12}^{-5}, m_Z, m_0, m_{\pi/6}, m_{\pi/3}, m_{\pi/2}, m_{2\pi/3}, m_{5\pi/6}, m_{\pi/12}, m_{\pi/4}, m_{5\pi/12}, m_{7\pi/12}, m_{3\pi/4}, m_{11\pi/12}$	48	$12/m \wedge 2_0, 12/m \wedge m_0, 12 22 \otimes \overline{1}, 12 22 \wedge m_0, 12mm \otimes \overline{1}, 12mm \wedge 2_0, \overline{12} 2m \otimes \overline{1}, \overline{12} 2m \wedge m_0,$	$12/m, 12 22, 12mm, \overline{12} 2m$ (双)

注: 表 1 中“ \otimes ”为点群的直积符号; “ \wedge ”为点群的半直积符号, 各 2 阶点群的全元形式为: $\overline{1} = \{1, \overline{1}\}, 2_0 = \{1, 2_0\}, m_0 = \{1, m_0\}$. 群元中, 各 $n(n > 2)$ 次转轴和 2 次转轴 2_Z 沿 Z 轴(垂直于纸面). 其余 2 次轴均垂直于 Z 轴, 与 X 轴的夹角由下标给出. 反映面 m_Z 的法线沿 Z 轴. 其余反映面的法线均垂直于 Z 轴, 与 X 轴的夹角由下标给出.

为了更形象地反映点群的对称性, 也为了便于最大子群链的推导, 根据表 1, 仿照四方晶系的极赤

投影图^[12] 绘出了十二角晶系 7 个点群的极赤投影图, 如图 1 所示.

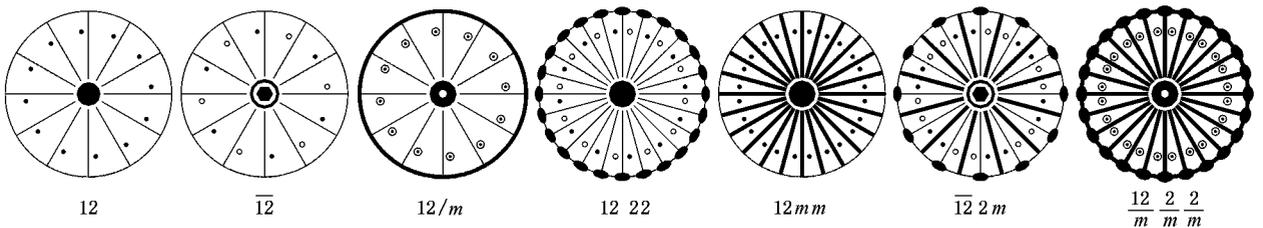


图 1 十二角晶系各点群的极赤投影图

表 1 中右下角的“ $\overline{12}2m$ (双)”表示:当由点群 $\frac{12}{m}$ 去掉不同的对称操作时,能够得到两组点群符号都是 $\overline{12}2m$,但对称操作元素空间取向不全同的最大子群.其中之一的极赤投影图已由图 1 给出,另一个的极赤投影图见图 2.

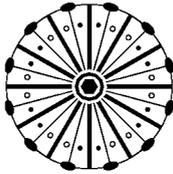


图 2 点群 $\overline{12}2m$ 的另一取向的极赤投影图

2.2. 十二角晶系各点群在六角和四方晶系中的最大子群

由于 12 具有 2 和 3 这两个质因数,而 $12 \div 2 = 6$, $12 \div 3 = 4$,所以十二角晶系各点群均会存在属于六角和四方晶系的最大子群.具体的关联方式需要通过大量的推导才能得到.

例如:对于点群 $12/22$ 而言,由表 1 及图 1 中点群 $12/22$ 的极赤投影图可以看出,当 12 次轴退化为 6 次轴时,通过删去不同的 2 次轴,可以得到对称元素不全同,而点群符号均为 622 的两个子群

$$A_1 = (622)_1 = \{1, 6^+, 3^+, 2_Z, 3^-, 6^-, 2_0, 2_{\pi/6}, 2_{\pi/3}, 2_{\pi/2}, 2_{2\pi/3}, 2_{5\pi/6}\},$$

$$A_2 = (622)_2 = \{1, 6^+, 3^+, 2_Z, 3^-, 6^-, 2_{\pi/12}, 2_{\pi/4}, 2_{5\pi/12}, 2_{7\pi/12}, 2_{3\pi/4}, 2_{11\pi/12}\},$$

图 3 给出了它们的极赤投影图.由于 A_1 和 A_2 是点群 $12/22$ 的指数为 2 的子群,所以当然也是最大不变(正规)子群.

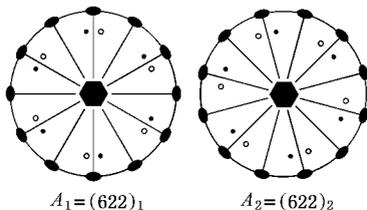


图 3 对称元素不全同的两个 622 点群的极赤投影图

当点群 $12/22$ 的 12 次轴退化为 4 次轴时,通过删去不同的 2 次轴,可以得到对称元素不全同,而点群符号均为 422 的 3 个子群

$$B_1 = (422)_1 = \{1, A^+, 2_Z, A^-, 2_0, 2_{\pi/4}, 2_{\pi/2}, 2_{3\pi/4}\},$$

$$B_2 = (422)_2 = \{1, A^+, 2_Z, A^-, 2_{\pi/6}, 2_{5\pi/12}, 2_{2\pi/3}, 2_{11\pi/12}\},$$

$$B_3 = (422)_3 = \{1, A^+, 2_Z, A^-, 2_{\pi/3}, 2_{7\pi/12}, 2_{5\pi/6}, 2_{\pi/2}\},$$

图 4 给出了它们的极赤投影图.

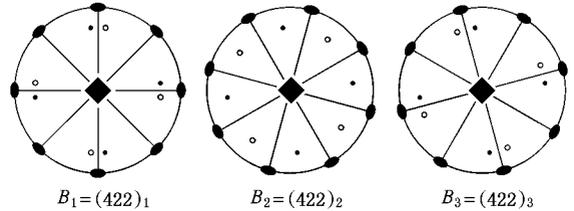


图 4 对称元素不全同的 3 个 422 点群的极赤投影图

运用群的群乘运算规则,再利用图 1 中点群 $12/22$ 的极赤投影图进行连续操作,可得

$$12^+B_112^- = 12^+\{1, A^+, 2_Z, A^-, 2_0, 2_{\pi/4}, 2_{\pi/2}, 2_{3\pi/4}\}12^-$$

$$= \{1, A^+, 2_Z, A^-, 2_{\pi/6}, 2_{5\pi/12}, 2_{2\pi/3}, 2_{11\pi/12}\} = B_2,$$

$$6^+B_16^- = 6^+\{1, A^+, 2_Z, A^-, 2_0, 2_{\pi/4}, 2_{\pi/2}, 2_{3\pi/4}\}6^-$$

$$= \{1, A^+, 2_Z, A^-, 2_{\pi/3}, 2_{7\pi/12}, 2_{5\pi/6}, 2_{\pi/2}\} = B_3,$$

由于子群指数为 3,是质数,所以 B_1, B_2 与 B_3 是点群 $12/22$ 的一组相互共轭的最大子群.

同理可以推导出十二角晶系中其他各点群所具有的六角和四方晶系中的最大子群:

点群 $\frac{12}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ 有两个最大不变子群 $\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$,有一组相互共轭的最大子群 $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$;

点群 $12/m$ 有一个指数为 2 的最大不变子群 $6/m$ 和一个指数为 3 的最大不变子群 $4/m$;

点群 $\overline{12}2m$ 有最大不变子群 622 和 $6mm$ 各一个,有一组相互共轭的最大子群 $\overline{4}2m$;

点群 $12mm$ 有两个最大不变子群 $6mm$,有一组相互共轭的最大子群 $4mm$;

点群 12 有最大不变子群 6 和 4 各一个;

点群 $\overline{12}$ 有最大不变子群 6 和 $\overline{4}$ 各一个.

3. 五角和十角晶系各点群的最大子群

3.1. 五角和十角晶系内各点群的构成及母子群关系

五角晶系共有 5 个点群,十角晶系共有 7 个点群,由于 5 是 10 的最大约数(除去 10 自身外),所以五角和十角晶系各点群之间有着密切的联系.仿照三角和六角晶系的极赤投影图^[12],在图 5 中绘出了

五角和十角晶系各点群的极赤投影图.表2中列出了五角和十角晶系各点群的所有群元、阶数、推导算

式及在五角和十角晶系内的最大子群(均为指数为2的不变子群).

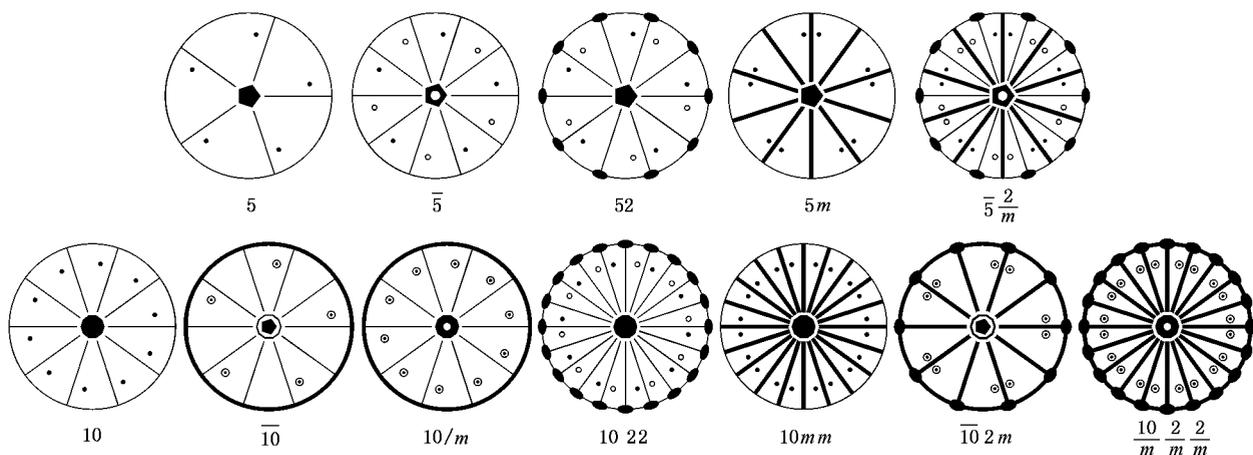


图5 五角和十角晶系各点群的极赤投影图

表2 五角和十角晶系内各点群的构成及母子群关系

晶系	点群	群元(对称操作)	阶数	推导算式	最大子群 均为不变子群
五角	5	$1 \ 5^+ \ 5^- \ 5^{+2} \ 5^{-2}$	5		
	$\bar{5}$	$1 \ 5^+ \ 5^- \ 5^{+2} \ 5^{-2} \ \bar{1} \ \bar{5}^+ \ \bar{5}^- \ \bar{5}^{+2} \ \bar{5}^{-2}$	10	$5 \otimes \bar{1}$	5
	52	$1 \ 5^+ \ 5^- \ 5^{+2} \ 5^{-2}, 2_0 \ 2_{\pi/5} \ 2_{2\pi/5} \ 2_{3\pi/5} \ 2_{4\pi/5}$	10	$5 \wedge 2_0$	5
	5m	$1 \ 5^+ \ 5^- \ 5^{+2} \ 5^{-2}, m_0, m_{\pi/5}, m_{2\pi/5}, m_{3\pi/5}, m_{4\pi/5}$	10	$5 \wedge m_0$	5
	$\bar{5} \frac{2}{m}$	$1 \ 5^+ \ 5^- \ 5^{+2} \ 5^{-2} \ \bar{1} \ \bar{5}^+ \ \bar{5}^- \ \bar{5}^{+2} \ \bar{5}^{-2}, 2_0 \ 2_{\pi/5} \ 2_{2\pi/5} \ 2_{3\pi/5} \ 2_{4\pi/5}, m_0, m_{\pi/5}, m_{2\pi/5}, m_{3\pi/5}, m_{4\pi/5}$	20	$\bar{5} \wedge 2_0, 52 \otimes \bar{1} \ 5m \otimes \bar{1}$	$\bar{5} \ 52 \ 5m$
十角	10	$1 \ 10^+ \ 10^- \ 5^+ \ 5^- \ 10^{+3} \ 10^{-3} \ 5^{+2} \ 5^{-2} \ 2_z,$	10	$5 \otimes 2_z$	5
	$\bar{10}$	$1 \ \bar{10}^+ \ \bar{10}^- \ 5^+ \ 5^- \ \bar{10}^{+3} \ \bar{10}^{-3} \ 5^{+2} \ 5^{-2}, m_z$	10	$5 \otimes m_z$	5
	10/m	$1 \ 10^+ \ 10^- \ 5^+ \ 5^- \ 10^{+3} \ 10^{-3} \ 5^{+2} \ 5^{-2} \ 2_z, \bar{1} \ \bar{10}^+ \ \bar{10}^- \ \bar{5}^+ \ \bar{5}^- \ \bar{10}^{+3} \ \bar{10}^{-3} \ \bar{5}^{+2} \ \bar{5}^{-2}, m_z$	20	$10 \otimes \bar{1} \ \bar{10} \otimes \bar{1} \ \bar{5} \wedge m_z$	$10 \ \bar{10} \ \bar{5}$
	10 22	$1 \ 10^+ \ 10^- \ 5^+ \ 5^- \ 10^{+3} \ 10^{-3} \ 5^{+2} \ 5^{-2} \ 2_z, 2_0 \ 2_{\pi/5} \ 2_{2\pi/5} \ 2_{3\pi/5} \ 2_{4\pi/5} \ 2_{\pi/10} \ 2_{3\pi/10} \ 2_{\pi/2} \ 2_{7\pi/10} \ 2_{9\pi/10}$	20	$10 \wedge 2_0, 52 \otimes 2_z$	$10 \ 5\mathcal{X}(\text{双})$
十角	10mm	$1 \ 10^+ \ 10^- \ 5^+ \ 5^- \ 10^{+3} \ 10^{-3} \ 5^{+2} \ 5^{-2} \ 2_z, m_0, m_{\pi/5}, m_{2\pi/5}, m_{3\pi/5}, m_{4\pi/5}, m_{\pi/10}, m_{3\pi/10}, m_{\pi/2}, m_{7\pi/10}, m_{9\pi/10}$	20	$10 \wedge m_0 \ 5m \otimes 2_z$	$10 \ 5m(\text{双})$
	$\bar{10} 2m$	$1 \ \bar{10}^+ \ \bar{10}^- \ 5^+ \ 5^- \ \bar{10}^{+3} \ \bar{10}^{-3} \ 5^{+2} \ 5^{-2}, m_z, 2_0 \ 2_{\pi/5} \ 2_{2\pi/5} \ 2_{3\pi/5} \ 2_{4\pi/5}, m_{\pi/10}, m_{3\pi/10}, m_{\pi/2}, m_{7\pi/10}, m_{9\pi/10}$	20	$\bar{10} \wedge 2_0 \ 52 \otimes m_z \ 5m \otimes m_z$	$\bar{10} \ 52 \ 5m$
	$\frac{10}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$1 \ 10^+ \ 10^- \ 5^+ \ 5^- \ 10^{+3} \ 10^{-3} \ 5^{+2} \ 5^{-2} \ 2_z, \bar{1} \ \bar{10}^+ \ \bar{10}^- \ \bar{5}^+ \ \bar{5}^- \ \bar{10}^{+3} \ \bar{10}^{-3} \ \bar{5}^{+2} \ \bar{5}^{-2}, m_z, 2_0 \ 2_{\pi/5} \ 2_{2\pi/5} \ 2_{3\pi/5} \ 2_{4\pi/5} \ 2_{\pi/10} \ 2_{3\pi/10} \ 2_{\pi/2} \ 2_{7\pi/10} \ 2_{9\pi/10}, m_0, m_{\pi/5}, m_{2\pi/5}, m_{3\pi/5}, m_{4\pi/5}, m_{\pi/10}, m_{3\pi/10}, m_{\pi/2}, m_{7\pi/10}, m_{9\pi/10}$	40	$10/m \wedge 2_0 \ 10/m \wedge m_0, 10 \ 22 \otimes \bar{1} \ 10 \ 22 \wedge m_0, 10mm \otimes \bar{1} \ 10mm \wedge 2_0, \bar{10} 2m \otimes \bar{1} \ \bar{10} 2m \wedge m_0,$ $\bar{5} \frac{2}{m} \otimes 2_z$	$10/m, 10 \ 22, 10mm, \bar{10} 2m(\text{双}), \bar{5} \frac{2}{m}(\text{双})$

注:表2中,与表1不同的各2阶点群的全元形式为 $2_z = \{1 \ 2_z\}, m_z = \{1 \ m_z\}$

3.2. 五角和十角晶系各点群在低级晶族中的最大子群

由于 10 只有 2 和 5 这两个约数(除了 1 和 10 外),而 2 和 5 都是质数,所以十角晶系各点群除了会存在属于五角晶系的最大子群外,还会存在属于低级晶族的最大子群.另外,与三角晶系类似,五角晶系各点群也会存在属于低级晶族的最大子群.运用群的群乘运算规则,及各点群的极赤投影图,与前面十二角晶系的推导类似,可以推导出十角和五角晶系各点群所存在的属于低级晶族的最大子群:

点群 $\frac{10}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ 有一组相互共轭的最大子群

$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$;

- 点群 10 22 有一组相互共轭的最大子群 222;
- 点群 $\overline{10}2m$ 有一组相互共轭的最大子群 $mm2$;
- 点群 $10mm$ 有一组相互共轭的最大子群 $mm2$;
- 点群 $10/m$ 有一个最大不变子群 $2/m$;

- 点群 10 有一个最大不变子群 2;
- 点群 $\overline{10}$ 有一个最大不变子群 m ;
- 点群 $5 \frac{2}{m}$ 有一组相互共轭的最大子群 $2/m$;
- 点群 52 有一组相互共轭的最大子群 2;
- 点群 $5m$ 有一组相互共轭的最大子群 m ;
- 点群 $\overline{5}$ 有一个最大不变子群 $\overline{1}$;
- 点群 5 有一个最大不变子群 1.

4. 八角晶系各点群的最大子群

4.1. 八角晶系内各点群的母子群关系

八角晶系共有 7 个点群.仿照四方晶系的极赤投影图^[12],在图 6 中绘出了八角晶系各点群的极赤投影图.表 3 中列出了八角晶系各点群的所有群元、阶数、推导算式及在八角晶系内的最大子群(均为指数为 2 的不变子群).

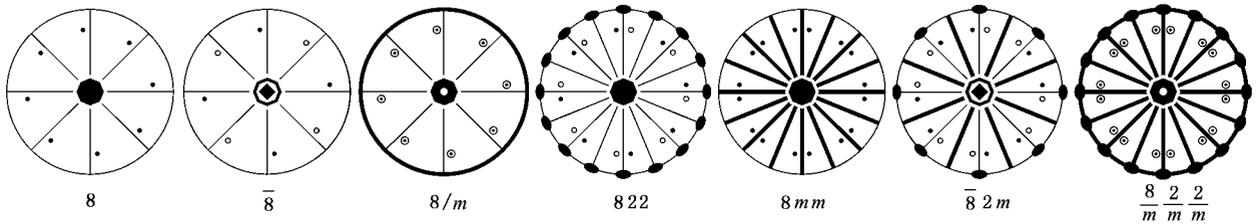


图 6 八角晶系各点群的极赤投影图

表 3 八角晶系内各点群的构成及母子群关系

点群	群元(对称操作)	阶数	推导算式	最大子群 均为不变子群
8	$1, 8^+, 8^-, 4^+, 4^-, 8^{+3}, 8^{-3}, 2_Z$	8		
$\overline{8}$	$1, \overline{8}^+, \overline{8}^-, 4^+, 4^-, \overline{8}^{+3}, \overline{8}^{-3}, 2_Z$	8		
$8/m$	$1, 8^+, 8^-, 4^+, 4^-, 8^{+3}, 8^{-3}, 2_Z, \overline{1}, \overline{8}^+, \overline{8}^-, \overline{4}^+, \overline{4}^-, \overline{8}^{+3}, \overline{8}^{-3}, m_Z$	16	$8 \otimes \overline{1} \overline{8} \otimes \overline{1}$	$8 \overline{8}$
822	$1, 8^+, 8^-, 4^+, 4^-, 8^{+3}, 8^{-3}, 2_Z, 2_0, 2_{\pi/4}, 2_{\pi/2}, 2_{3\pi/4}, 2_{\pi/8}, 2_{3\pi/8}, 2_{5\pi/8}, 2_{7\pi/8}$	16	$8 \wedge 2_0$	8
$8mm$	$1, 8^+, 8^-, 4^+, 4^-, 8^{+3}, 8^{-3}, 2_Z, m_0, m_{\pi/4}, m_{\pi/2}, m_{3\pi/4}, m_{\pi/8}, m_{3\pi/8}, m_{5\pi/8}, m_{7\pi/8}$	16	$8 \wedge m_0$	8
$\overline{8} 2m$	$1, \overline{8}^+, \overline{8}^-, 4^+, 4^-, \overline{8}^{+3}, \overline{8}^{-3}, 2_Z, 2_0, 2_{\pi/4}, 2_{\pi/2}, 2_{3\pi/4}, 2_{\pi/8}, 2_{3\pi/8}, 2_{5\pi/8}, 2_{7\pi/8}$	16	$\overline{8} \wedge 2_0$	$\overline{8}$
$\frac{8}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$1, 8^+, 8^-, 4^+, 4^-, 8^{+3}, 8^{-3}, 2_Z, \overline{1}, \overline{8}^+, \overline{8}^-, \overline{4}^+, \overline{4}^-, \overline{8}^{+3}, \overline{8}^{-3}, m_Z, 2_0, 2_{\pi/4}, 2_{\pi/2}, 2_{3\pi/4}, 2_{\pi/8}, 2_{3\pi/8}, 2_{5\pi/8}, 2_{7\pi/8}, m_0, m_{\pi/4}, m_{\pi/2}, m_{3\pi/4}, m_{\pi/8}, m_{3\pi/8}, m_{5\pi/8}, m_{7\pi/8}$	32	$8/m \wedge 2_0, 8/m \wedge m_0, 822 \otimes \overline{1}, 822 \wedge m_0, 8mm \otimes \overline{1}, 8mm \wedge 2_0, \overline{8}2m \otimes \overline{1}, \overline{8}2m \wedge m_0$	$8/m, 822, 8mm, \overline{8}2m(\text{双})$

4.2. 八角晶系各点群在四方晶系中的最大子群

由于 8 只有一个质因数 2,而 $8 \div 2 = 4$,所以八

角晶系各点群均会存在四方晶系的最大子群.运用群的群乘运算规则,及各点群的极赤投影图,与前面十二角晶系的推导类似,可以推导出八角晶系各点

群所具有的四方晶系的最大子群：

点群 $\frac{8}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ 有两个最大不变子群 $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ ；

点群 822 有两个最大不变子群 422；

点群 $8/m$ 有一个最大不变子群 $4/m$ ；

点群 $\bar{8}2m$ 有最大不变子群 422 和 $4mm$ 各一个；

点群 $8mm$ 有两个最大不变子群 $4mm$ ；

点群 8 有一个最大不变子群 4；

点群 $\bar{8}$ 有一个最大不变子群 4。

5. 二十面体晶系各点群的最大子群

二十面体晶系只有两个点群：60 阶的点群 235

和 120 阶的点群 $\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5}$ 。而 $\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5} = 235 \otimes \bar{1}$ ，所以，

$\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5}$ 是 235 的最小母群，235 是 $\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5}$ 的最大不变子群。

另外二十面体晶系还与等轴晶系、五角晶系、三角晶系有密切的关系： $235 = 23 \cdot 5$ ， $235 = 52 \cdot 32$ ，

$\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5} = \frac{2}{m} \bar{3} \cdot 5$ ， $\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5} = \bar{5} \frac{2}{m}$ ， $\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5} = \bar{3} \frac{2}{m} \cdot 52$ ，其

中“·”为点群的弱直积符号。所以，点群 $\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5}$ 还分别

有 3 组共轭最大子群 $\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5} \frac{2}{m}$ 和 $\bar{3} \frac{2}{m}$ ，点群 235 分别

有 3 组共轭最大子群 23、52 和 32。

事实上，二十面体晶系两点群 $\frac{2}{m} \bar{3} \bar{5}$ 和 235 的最

大子群链，在《国际晶体学表》^[12] 第 803 页所列的一般点群的母子群关系中已经给出来了。

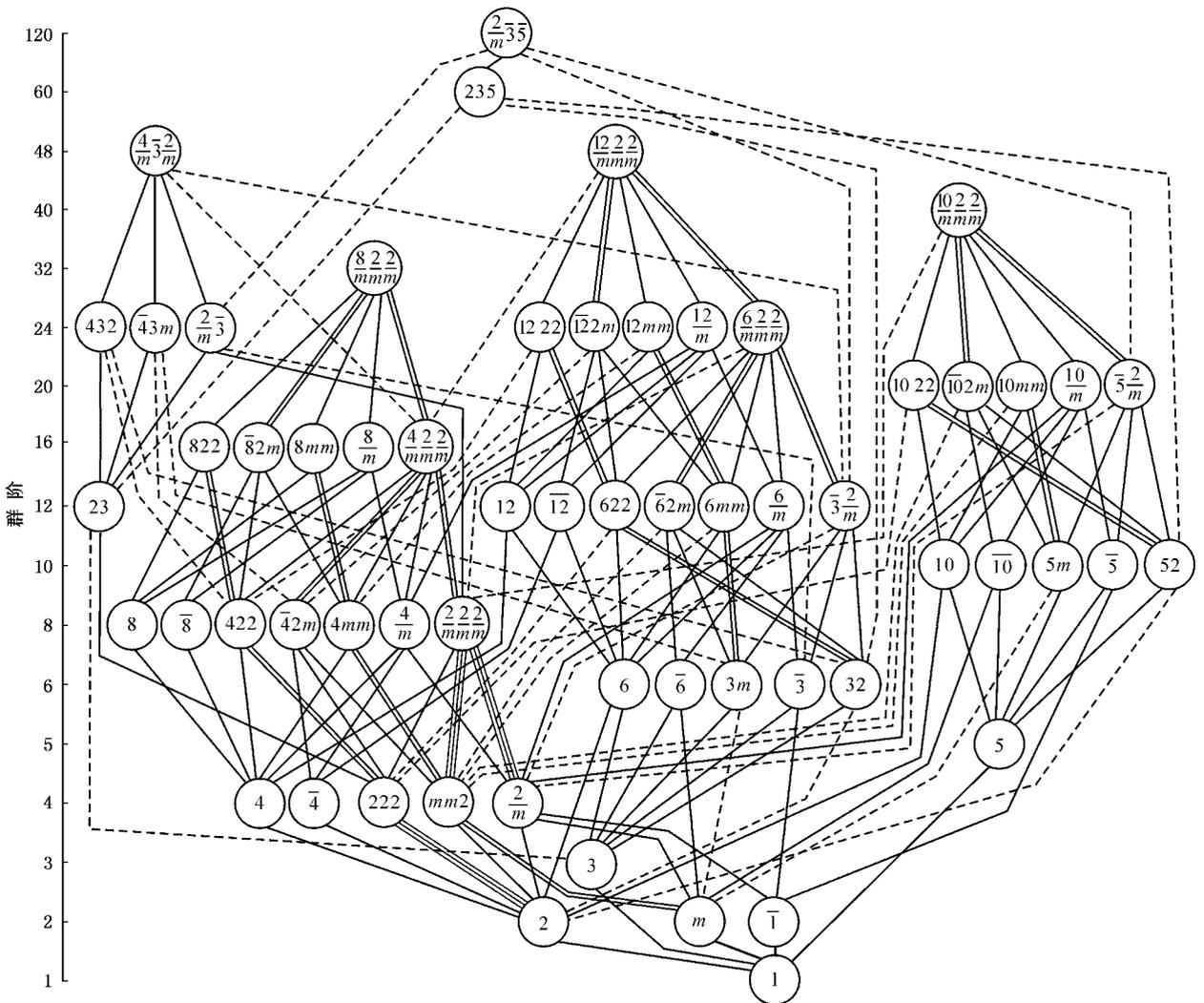


图 7 三维晶体学与准晶体学点群的母子群关系(60 个点群的“家谱”)

6. 晶体学和准晶体学点群的母子群关系图

按照前面推导出的结论,再参照《国际晶体学表》^[12]第 796 页所给出的 32 个晶体学点群之间的母子群关系(“家谱”),及第 803 页所给出的一般点群(包括二十面体点群)的母子群关系,我们以最小母群和最大子群链的形式,绘制出三维晶体学和准晶体学点群(总共 60 个)之间的母子群关系图(60 个点群的“家谱”)见图 7。

图 7 所示的三维晶体学与准晶体学点群的母子群关系(60 个点群的“家谱”)中,每个点群用线往上

连着的点群是它的最小母群,往下连着的点群是它的最大子群。实线下端连着的最大子群是不变(正规)子群,双实线或三实线表示下端有符号相同但对称元素不全同的两个或三个最大不变子群。虚线则表示下端有一组相互共轭的最大子群。

7. 结 语

本文所推导出的三维晶体学与准晶体学点群的母子群关系(“60 个点群的家谱”)是对《国际晶体学表》中三维晶体学点群的母子群关系(“32 个点群的家谱”)的扩展与补充,对于研究准晶体的相变趋势有指导性作用,也有助于对准晶体结构的研究。

- [1] Shechtman D, Blech I, Gratias D, Cahn J W 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1951
- [2] Bancel P A 1993 *Phil. Mag. Lett.* **67** 43
- [3] Wang N, Chen H, Kuo K H 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 1010
- [4] Bancel P A, Heiney P A, Stephens P W, Goldman A I, Horn P M 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 2422
- [5] Ishimasa T, Nissen H U, Fukano Y 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 511
- [6] He L X, Li X Z, Zhang Z, Kuo K H 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 1116
- [7] Lu H W, Fei B 2004 *Progress in Natural Science* **14** 1322 (in Chinese)[陆洪文、费 奔 2004 自然科学进展 **14** 1322]
- [8] Chen J Z 2001 *Modern Crystal Chemistry—Theories and Technique* (Beijing: Higher Education Press) p172—202 (in Chinese)[陈敬中 2001 现代晶体化学——理论与方法(北京:高等教育出版社)第 172—202 页]
- [9] Zhou G D, Guo K X 1999 *Diffraction of Crystal and Quasicrystal*

(Beijing: Peking University Press) p252 (in Chinese)[周公度、郭可信 1999 晶体和准晶体的衍射(北京:北京大学出版社)第 252 页]

- [10] Fang Q, Yu W T 2002 *Crystallography Theory* (Beijing: National Defence Industry Press) p124 (in Chinese)[方 奇、于文涛 2002 晶体学原理(北京:国防工业出版社)第 124 页]
- [11] Hahn T 1983 *International Tables for Crystallography*, Vol. A: *Space-Group symmetry* (Oxford: Alden Press) p679—686
- [12] Hahn T 2002 *International Tables for Crystallography*, Vol. A: *Space-Group symmetry*, 5th ed (Oxford: Alden Press) p796—803
- [13] Ye X R, Cao Y A, Yuan H W, Yang Q B, Wang Y M 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2575 (in Chinese)[叶芙蓉、曹佑安、袁鸿武、杨奇斌、王元明 2002 物理学报 **51** 2575]
- [14] Ma Z Q 1998 *Group Theory in Physics* (Beijing: Science Press) p42—43 (in Chinese)[马中骐 1998 物理学中的群论(北京:科学出版社)第 42—43 页]

Subgroups and supergroups of crystallographic and quasi-crystallographic point groups *

Long Guang-Zhi^{1,2)†} Chen Ying³⁾ Chen Jing-Zhong²⁾

¹ *Faculty of Physics and Mathematics, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China*

² *Faculty of Material Science and Chemistry Engineering, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China*

³ *Faculty of Earth Sciences, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China*

(Received 1 August 2005 ; revised manuscript received 28 December 2005)

Abstract

The direct products and semidirect products of quasi-crystallographic point groups, were derived from group theory. According to crystallography theory, the stereographic projection of pentagonal system, octagonal system, decagonal system and dodecagonal system, were derived and drawn. Basing upon them, all maximal subgroups of each quasi-crystallographic point group were derived and drawn. As a result, subgroups and supergroups of the three-dimensional crystallographic and quasi-crystallographic point groups (the ' family tree ' of sixty point groups) were derived and depicted in drawing. In the ' family tree ', the minimal supergroups and maximal subgroups of sixty point groups were illustrated in detail in the form of maximal subgroup chains.

Keywords : quasicrystal, crystal, point group, maximal subgroup, minimal supergroup, group chain, family tree

PACC : 6150E

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 48970082 and 49272091).

† E-mail : longwangrx@yahoo.com.cn