第三章概要

一、 几个基本概念的区分：

对称元素、对称操作、点群及其元素

1） 对称元素：如三次轴C_3，对称中心i等等；

2） 对称操作：一个对称元素包含一个或多个对称操作， 如对称心i只包含一个反演操作i; C_3则包含三个旋转操作 C_3^1 (旋转120度)、C_3^2 (旋转240度)和C_3^3 (旋转360度=恒等操作E)

3） 点群： 由一个物体中所有对称元素所包含的各种独立对称操作所构成的一个集合（满足群的要求）。 点群的元素是对称操作而非对称元素，这些独立对称操作的数目就是群阶。

- 点群的群阶并非各对称元素所包含的对称操作数目的简单加和；因为一个对称元素所产生的某个对称操作可能和另一个对称元素的某个对称操作等效，不能重复计算。如C_3^3和E操作的效果相同，又如一个具有C_4轴的体系必然同时具有C_2轴.

- 一个点群必然具有固定种类的对称元素，并包含固定数目和类型的独立对称操作（群元），因而可方便地使用点群这一抽象概念来表示物体对称性。

二、 S_n非真轴、S_n操作、S_n点群

1. S_n 非真轴 vs. S_n操作：

1) S_n 非真轴是一种对称元素。

2) 一个S_n*对称操作*本身是复合操作，即$S_n^{\,1} = \sigma_h \cdot C_n^{\,1}$。一个独立存在的$S_n$轴必须且只能包含$n$个$S_n^{\,m}$ ($m = 1,\ldots n$) 对称操作，同时还不能被其他对称元素的加和所替代。

3) S_n 非真轴的几种情形：

a) $n= 2m+1$时，S_{2m+1}轴的全部可及操作必然要求同时存在对称元素C_{2m+1}和σ_h，故不能独立存在。 *i.e.*, $S_{2m+1} = C_{2m+1} + \sigma_h$

b) $n= 4m+2$时，S_{4m+2}轴的全部可及操作必然要求同时存在对称元素C_{2m+1}和i，故不能独立存在。 i.e., $S_{4m+2} = C_{2m+1} + i$

c) $n=4m$时： S_{4m} 轴(如 S_4 和S_8是) 独立存在。

2. S_n 点群：一个独立的S_n点群同样不能由其它的点群来替代。

1) n = 4m时，S_{4m} 轴独立存在，S_{4m}点群独立存在。

2) n =2m+1时，$S_{2m+1} = C_{2m+1} + \sigma_h$, 属于$C_{nh}$点群。

3) n=4m+2时, $S_{4m+2} = C_{2m+1} + i$, 无任何点群仅包含对称元素 **C_{2m+1} 和 i，**因此，**S_{4m+2}点群**独立存在，有些书称之为**C_{ni}群(n = 2m+1),** 共有**$4m+2$**个独立的对称操作。

S_{4m+2}点群的群元包括：**4m+2个 S_{4m+2}^{k} (k = 1, …, 4m+2)，**

or：$\{C_{2m+1}k\} + \{i \cdot C_{2m+1}k\}$ (k=1,…,2m+1)

例如: $S_6^1 = \sigma_h \cdot C_6^1 = i \cdot C_3^1$ $S_6^2 = C_3^1$ $S_6^3 = \sigma_h \cdot C_6^3 = i$ $S_6^4 = C_3^2$

$S_6^5 = \sigma_h \cdot C_6^5 = i \cdot C_3^2$ $S_6^6 = E$