



李家泽 阎吉祥 编著

光电子学基础

Fundament of Optoelectronics

——北京理工大学出版社——



光电子学基础

李家泽 阎吉祥 编著

北京理工大学出版社

内 容 简 介

本书是编者根据近十年授课经验与相关课题的科研实践经验而编写的教材。全书以光的电磁理论和麦克斯韦方程为基础,从光和物质相互作用的基本规律出发,系统地介绍了相干光束传播与控制方面的基本理论、单元技术与应用原理。具体内容包括电光学、声光学、非线性光学及导波光学。作为预备知识还介绍了晶体学和张量的基本知识。本书注重理论的系统性、结构的科学性和内容的实用性。

本书可作为工科高等院校光学工程系、应用物理系、电子工程系有关专业的本科生教材,也可供相近专业的工程技术人员和研究生参考。

图书在版编目(CIP)数据

光电子学基础/李家泽, 阎吉祥编著. —北京: 北京理工大学出版社, 1998. 8
ISBN 7-81045-407-2

I. 光… II. ①李… ②阎… III. 光电子学-高等学校-教材 IV. TN201

中国版本图书馆 CIP 数据核字(98)第 13730 号

责任编辑: 李绍英 责任校对: 陈玉梅

北京理工大学出版社出版发行

(北京市海淀区白石桥路 7 号)

邮政编码 100081 电话 (010)68912824

各地新华书店经售

北京房山先锋印刷厂印刷

*

787 毫米×1092 毫米 16 开本 16.5 印张 402 千字

1998 年 8 月第 1 版 1998 年 8 月第 1 次印刷

印数: 1—1500 册 定价: 24.00 元

※图书印装有误, 可随时与我社退换※

前言

根据北京理工大学 1992 年制定的“光电子技术专业教学计划”规定,《光电子学基础》是本专业的限定选修专业课。本书是依据教学计划制定的培养目标和课程教学大纲的要求而编写的教材。

本书由北京理工大学李家泽教授主编,第一章至第五章由李家泽编写,第六章至第七章由阎吉祥教授编写。中国科学院物理研究所张志三研究员主审。

本书是在李家泽主编的电子工业部电子类统编教材《晶体光学》(北京理工大学出版社,1988 年)和内部教材《光电子学》两书的基础上并参考、借鉴编者近十年讲授本课程的教学经验和相关课题的科研实践经验编写而成的。

光电子学是以光频波段电磁波的电子学效应基本理论和应用原理为研究对象,并由近代光学与电子学相互交叉与渗透而形成的一门新兴分支学科。由于激光器的出现和激光技术的发展使得传统电子学中的原理、技术延伸到光频波段成为可能。从整体上讲,光电子学和光电子技术还处于蓬勃发展的阶段,为加深和拓宽光电子技术专业学生的知识面,并形成比较系统的知识结构,本书将系统地向学生介绍有关相干光束传播与控制方面的基本理论、单元技术与应用原理。

具体地讲,本书将以光的电磁理论和麦克斯韦方程组为基础,从光和物质相互作用的基本规律出发系统地介绍晶体的电光效应及光波在电光晶体中的传播;晶体的声光效应及光波在声光晶体中的传播;非线性光学效应及光波在二阶非线性介质中的传播;光波导理论基础;光波导装置及应用简介。鉴于本专业教学计划中缺乏张量的基本知识及结晶学基本知识的教学内容,而这两方面的知识又是研究光电子学效应必不可少的工具,所以本书第一、二两章编写了晶体学基础和晶体性质的数学描述的内容,授课时可结合具体情况取舍。

本课程的参考教学时数为 52 学时。

在编写本书时,参阅了一些单位及一些编著者的资料和著作,在参考书目中未能全部一一列出,在此表示诚挚感谢。由于编著者水平有限,书中难免存在缺点和错误,殷切希望广大读者批评指正。

编者

1998.4

目 录

第一章 晶体学基础	(1)
1.1 晶体的基本概念.....	(1)
1.2 晶体构造的点阵理论和晶系的划分.....	(4)
1.3 晶体的对称性.....	(7)
1.4 晶体中晶棱晶面方向的标记.....	(12)
第二章 晶体性质的数学描述	(17)
2.1 张量的基本知识.....	(17)
2.2 张量分量的坐标变换.....	(23)
2.3 晶体宏观对称性对晶体物理性质的影响.....	(29)
第三章 晶体的电光效应及光波在电光晶体中的传播	(37)
3.1 电光效应的基本原理.....	(37)
3.2 两类型晶体的线性电光效应.....	(46)
3.3 光波在低频电场作用下的电光晶体中的传播.....	(53)
3.4 光波在微波电场作用下的电光晶体中的传播.....	(68)
3.5 晶体的二次电光效应.....	(74)
3.6 旋光现象和磁光效应.....	(80)
第四章 晶体的声光效应及光波在声光晶体中的传播	(85)
4.1 晶体的弹性性质及平面声波方程.....	(85)
4.2 弹光效应描述方法和声光效应分类.....	(96)
4.3 喇曼-奈斯型声光衍射	(103)
4.4 声光相互作用的耦合波方程及布拉格型声光衍射.....	(109)
4.5 声光器件原理.....	(117)
4.6 晶体的压电效应.....	(128)
第五章 非线性光学效应及光波在非线性介质中的传播	(138)
5.1 概述.....	(138)
5.2 非线性极化率的经典理论.....	(141)
5.3 二次非线性极化率.....	(147)
5.4 非线性介质中的电磁波传播方程.....	(157)
5.5 位相匹配.....	(162)
5.6 倍频与混频.....	(176)
5.7 光参量放大与振荡.....	(182)
第六章 光波导理论基础	(191)
6.1 平面介质波导的射线光学理论.....	(191)
6.2 平板波导的电磁理论基础.....	(196)
6.3 通道波导简介.....	(205)
6.4 导波模耦合理论简介.....	(209)
6.5 半导体波导理论.....	(217)

6.6 波导理论的新进展.....	(226)
第七章 光波导装置与应用简介	(229)
7.1 波导的制造过程概况.....	(229)
7.2 开关和调制器.....	(236)
7.3 滤波器和偏振选择装置.....	(239)
7.4 光栅.....	(242)
7.5 半导体波导装置.....	(245)
7.6 光波导应用举例.....	(250)
7.7 MOEMS 简介	(253)
主要参考文献	(256)

第一章 晶体学基础

晶体学是多门学科的基础，近代光学发展的历史表明，由各种天然和人工晶体构成的光学功能材料也是光电子技术的重要基础。光电子技术中广泛应用的晶体材料主要包括：(1) 激光晶体；(2) 半导体晶体；(3) 非线性光学晶体；(4) 调制晶体(包括电光晶体、磁光晶体、弹光晶体、声光晶体等)。

光电子技术的重要任务之一是对光波参数进行快速控制。例如，在光通讯技术中，需要通过对激光束的振幅或相位进行调制而将信息加载到光载波上。在光信息记录与显示技术中，需要控制光束的波矢方向而实现光束的扫描。目前，在实际的光电子技术系统中大多数都是采用光学方法并运用光学功能器件来完成上述任务的，在各种光学功能器件中由各种光学晶体制成的元器件占有特殊重要的地位。本课程以下各章内容将会围绕上述主题展开讨论。

晶体是光电子技术的重要基础，晶体的物理性质与晶体结构密切相关，因此了解一些晶体结构和对称性的原理，初步掌握描述晶体的方法和术语，对于学习本门课程和有关专业技术都是必不可少的基础知识。

1.1 晶体的基本概念

晶体，对于我们来说是一个既陌生又不陌生的东西。可以毫不夸张地说，我们生活在一个晶体的世界中，例如我们周围的建筑材料，金属材料，糖、盐和各种化学药品等，它们大多是晶体。但是光电子技术中所使用的那些用人工精心生长的、完整的大块单晶体则是生活中不可多见的。本节将从晶体的外形、结构和基本性质三方面来介绍晶体的特征。

1.1.1 晶体的外形和晶面角守恒定律

人类在自然界中很早就与天然晶体接触，起初是从各种矿石中发现了许多具有规则外形的天然产物，于是就将这种具有天然的而不是经过人为加工成的规则几何多面体外形的固体称为晶体。

但是，应当指出，晶体在形成的过程中往往由于外界条件的限制，使许多的晶面，甚至所有的晶面不可能有规律地出现，从而就不能形成一个规则的几何多面体，甚至形成一个和周围环境一样的形状。进一步研究后可以发现，如果将一个外形不规则的晶体颗粒放入母液，并给以理想的生长条件，则晶粒可以自行生长，最后终将形成一个具有规则几何多面体的外形。这一试验说明，晶体本身具有自发地长成规则几何多面体外形的内在能力。

人们在对晶体外形从粗略观察转为定量测量以后进一步发现，由于生长条件的差异，同一品种晶体的外形可能不同。但不管它们外形存在何种差异，其几何多面体上相应两晶面的夹角总是严格相等的。图1-1给出的是石英晶体由于生长条件不同，而造成晶体外形的几种变异，尽管它们之间的形状相差很大，但经测量证明，各晶形两个相应晶面之间的夹角总保持不变，例如 a 面与 b 面夹角总是 $141^{\circ}47'$ ， b 面与 c 面夹角总是 $120^{\circ}00'$ ， a 面与 c 面夹角总是

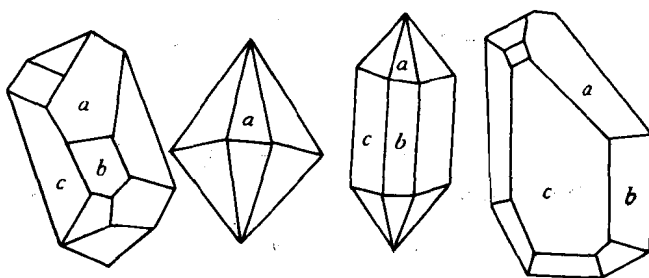


图 1-1 石英晶体的几种变异外形

113°08' 等。

大量晶体测量的结果表明，晶面角守恒是一个普遍的规律，因此晶面夹角就成为识别各种晶体的一种特有常数。另外，基于对晶面角守恒的认识，还导致了晶体对称性概念的产生，并促进了对晶体内部构造的研究。

1.1.2 晶体内部构造的周期性

晶体在外形上的规律性反映了晶体内部构造的规律性。

近代利用 X 射线对晶体研究的结果，具体揭示了晶体的内部构造。一切晶体不论其外形如何，组成晶体的原子(或离子、分子)在三度空间的排列总是有规律地重复，从而构成所谓格

子构造。这种按照一定规律不断重复排列的性质，造成晶体结构的远程有序性，而非晶体内的粒子分布则只有近程有序性，图 1-2 的 (a)、(b) 分别表示了石英晶体与石英玻璃的平面结构示意图。(a) 和 (b) 都是由 SiO_2 的四面体组成，硅在四面体的中心，氧在四面体的顶点上，石英晶体是这些四面体有规律的堆积，而在石英玻璃中则没有严格的堆积顺序，从而在图上表现不出远程有序。

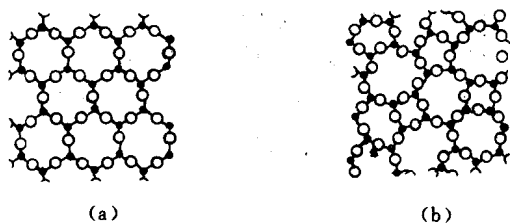


图 1-2 石英晶体与石英玻璃结构上的区别

在此基础上，我们可以导出关于晶体的严格定义，即晶体是具有格子构造的固体。

1.1.3 晶体的基本性质

晶体是具有格子构造的固体，由于这一特点，使得所有的晶体都能自发地形成规则几何多面体外形。除此之外，由于格子构造的规律还决定了晶体必须具有其它一些特性，我们把仅仅与格子构造规律有关的特性，称为晶体的基本性质。

应当指出，我们这里强调晶体的共性，并不排斥各种不同晶体可以有自己的个性，这是因为：

①这里所说的格子构造是指为一切晶体所普遍具有的格子构造规律，而不是指某一个别晶体的具体构造，这一点将在下节详细说明，不同晶体虽然均为格子构造，但是它们之间的格子形状可以不同。

②晶体的性质除与具体格子构造有关外，还与它的化学组成有关。

各种晶体由于其化学组成和具体格子构造不同，这就决定了不同晶体有不同的个性，例如金刚石晶体具有极高的硬度， α -石英具有良好的压电性等。

下面分别叙述晶体的基本性质。

1. 自限性

所谓自限性是指晶体具有自发地形成封闭的凸几何多面体的能力。晶体的外表为晶面、晶棱及晶顶等要素所包围，这些要素有如下关系：

晶面数 + 晶顶数 = 晶棱数 + 2。

晶体所具有的封闭几何多面体外形，乃是晶体内部格子构造的外部反映。晶体的生长过程，实质上是质点按照空间格子规律进行规则排列和堆积的过程，因此在晶体生长过程的每一瞬间，一直到晶体停止生长时止，每个最外层的面网，相邻面网相交的公共行列，以及面网和行列相聚处的公共结点总是表现为规则的几何形态——面(晶面)、线(晶棱)以及点(顶点)。它们组成了一个规则的封闭凸几何多面体。

2. 均匀性和各向异性

晶体的均匀性是指晶体在不同部位上具有相同的物理性质。在宏观观察中，由于分辨能力的限制，晶体的不连续性受到掩盖，晶体表现得象一个具有连续结构的物体。由于宏观观察的统计性，因此测得的宏观性质必然是一个统计平均的结果。晶体构造中所有质点都是在三度空间作周期性重复的，因此晶体不同部位的质点和排列方式相同，即晶体的宏观性质与观察位置无关，这就是晶体的均匀性。

晶体在宏观观察中表现出均匀性的同时，还表现出各向异性的特点。所谓各向异性就是晶体的宏观性质因观察方向不同而有差异。例如方解石和云母受力后的破裂(解理)总是沿着一个确定的方向上发生。

晶体的各向异性是由于晶体构造中各个方向上质点的性质和排列方式不同所引起的。下面以 NaCl 晶体构造为例说明。图 1-3 表示 NaCl 晶体的一个晶面，图中大圆表示 Cl^- ，小圆表示 Na^+ 。由图可见，沿 OA 方向是由 Cl^- 和 Na^+ 相间排列而成，沿 OB 方向则全部由一种 Cl^- 或一种 Na^+ 按一定间距排列而成，而沿 OC 方向则又是另一种排列方式。很明显，晶体的性质在一定的外界条件下取决于其成分和内部构成两个因素，既然现在沿不同方向上这两个因素都不相同，这当然要导致性质上出现差异。

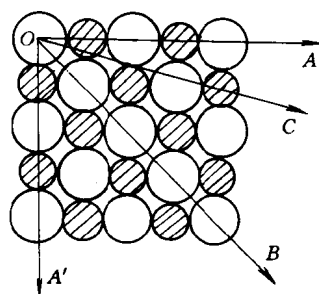


图 1-3 晶体的均匀性，各向异性及对称性示意图

3. 对称性

晶体的宏观性质一般说是各向异性的，但这并不排斥在几个特定方向上可以出现异向同性的现象。这种相同性质，在不同方向上有规律地重复出现，称为对称性。因为晶体的格子构造并不排斥在几个特定方向上，使得质点的性质和排列方式完全相同，从而表现出完全相同的宏观性质，例如图 1-3 中 OA 和 OA' 这两个相互垂直的方向上必然具有相同的宏观性质。

4. 最小内能性

任何物体都具有一定的内能。晶体是具有格子构造的固体，其内部质点呈现规则排列，这

种规则排列是质点间的引力和斥力达到平衡的结果。晶体中所有的质点皆处于平衡位置，在这种情况下，无论使质点间的距离增大或减小都将导致质点的相对势能增加。这也就意味着，在相同的热力学条件下，晶体的内能最小。

晶体的这些共性，是晶体区别于其它非晶态固体的重要特征，也是我们认识晶体的一个重要方面。

1.2 晶体构造的点阵理论和晶系的划分

晶体是由有规则地排列着的微粒(原子、分子或离子)构成的。微粒的排列按照一定规律不断重复，这种按一定规律的重复排列叫作晶体结构的周期性。为了描述晶体结构的周期性，下面引入空间点阵的概念。空间点阵就是用抽象的几何点(或称为结点)来代替实际晶体结构中的微粒，然后用这些结点在三维空间中周期性重复排列而得到的纯几何图形。引入空间点阵的目的是利用结点在空间点阵中的排列规律性，体现晶体结构中的微粒在空间分布的规律性，因此空间点阵是一种描述晶体结构的物理模型。本节的内容是利用空间点阵的性质来说明晶体构造的特点，并介绍晶系和 14 种空间格子的划分。

1.2.1 空间点阵和晶体的格子构造

下面按一维、二维和三维点阵的顺序介绍。

1. 一维点阵

一维点阵是由排列在一条直线上的无穷多个等距离的几何点所构成的，这些点称为结点或阵点。全部阵点的集合称为直线点阵。因此一维点阵就是无限等周期的阵点列。借助平移动作可使图形复原，图形复原的最小平移距离 a (即相邻两结点间的距离) 称为直线点阵的周期， a 为周期矢量，见图 1-4。

图 1-4 直线点阵

2. 二维点阵

二维点阵又叫平面点阵，这种点阵的各阵点分布在同一平面内。因此平面点阵可以看成是由一个直线点阵按一定周期 b 进行无限多次平移而成，但此平移矢量 b 与该直线点阵本身内的平移矢量 a 不相平行。按照上两个平移矢量可将平面点阵划分为相互平行排列的平行四边形单位(当然可以有不同的划分方式)，而且所有结点都位于平行四边形的顶点处。作了如此划分以后的平面点阵称为平面格子或面网，如图 1-5 所示。面网上单位面积内的结点数称为面网密度。

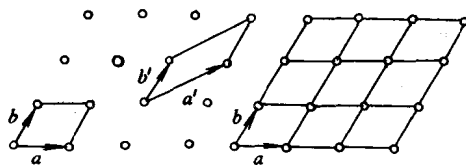


图 1-5 平面点阵与平面格子(面网)

3. 三维点阵

各阵点分布在三维空间中的点阵称为三维点阵或空间点阵。空间点阵一定可以分解为一组平行的平面点阵，亦即空间点阵可以看成是由一个平面点阵按一定周期 c 进行无限多次平移而成，此平移矢量 c 与该平面点阵本身内的任一平移矢量均不平行。在平面格子的基础上，再加上不包括在该平面点阵内的第三平移矢量 c ，即可将空间点阵划分为相互平行叠置的平行六面体单位，而且所有结点都位于平行六面体的顶点处。作了如上划分的空间点阵称为空

间格子,如图1-6所示。

4. 空间点阵的性质

根据上述点阵的定义,可导出如下一些性质:

①连接空间点阵或平面点阵中任意两个阵点可以决定一个行列,因此在一个空间或平面点阵中,可以有无限多个不同取向的行列,但相互平行的行列之结点间距必定相等,而不平行的行列在一般情况下其结点间距不相等。

②连接空间点阵中任意三个不在同一直线上的阵点即可决定一个面网。换言之,任意两个相交的行列可决定一个面网。在一个空间点阵中可有无限多个不同取向的面网,相互平行的面网其面网密度相等。另外,任意两个相交面网的交线为一公共的行列。

③空间点阵中任意三个相交且不在同一平面内的行列可以决定一个空间格子。由于空间点阵中可以有无限多个不同取向的行列,因而相应地就有无限多种划分平行六面体单位的方式。但是实际上平行六面体单位的划分是要遵循一定原则来进行的,具体原则将在稍后给出。

④点阵经过平移后能够复原,它反映了点阵的周期性。基本平移矢量 a 、 b 、 c 就是空间点阵的周期矢量。根据点阵能够复原的要求,点阵包含的结点数目必须无限多,且每个结点的周围环境必须相同。应当指出,实际晶体结构只能在某种程度上近似地符合上述要求。

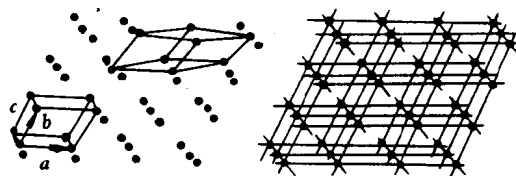


图1-6 空间点阵与空间格子

1.2.2 单位平行六面体的划分和晶系

1. 单位平行六面体的划分

从纯数学意义上来讲,一个空间点阵可以有无限多种划分平行六面体的方式,因而相应地就可以有无限多种空间格子形式。但是在结晶学中引入空间点阵的概念是用来描述晶体结构周期性的,因此我们在划分平行六面体单位时,应该考虑到晶体实际可能存在的结构形式,从而,平行六面体单位的划分将不是任意的,我们只能选择那些能够明确表现出整个空间点阵特性的单位,即

①所选择的平行六面体应该能够反映整个空间点阵的对称性,亦即平行六面体的对称性应与空间点阵的对称性一致。

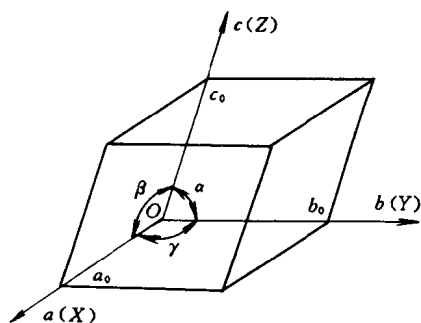


图1-7 单位平行六面体常数

种类型的特点亦可对晶体进行分类。

②在不违反空间点阵对称性的条件下,平行六面体上棱与棱之间的直角关系应力求最多。

③在符合以上两项原则的基础上,平行六面体的体积应最小。

按照上述三条原则所选出来的平行六面体称为单位平行六面体。作为空间格子重复单元的单位平行六面体,其特征可用三个棱长 a 、 b 、 c 以及它们之间的夹角 α 、 β 、 γ 六个参数来描述,通常称这六个参数为单位平行六面体常数,见图1-7。根据单位平行六面体常数之间的不同关系,可将它们划分为七种类型,根据这七

2. 七大晶系

单位平行六面体是专对抽象的空间格子而言的，如果在具体的晶体构造中引入相应的划分单位，则相应的单位即称为晶胞。通常晶胞常数与单位平行六面体常数相对应，但用符号 a_0 、 b_0 、 c_0 和 α 、 β 、 γ 表示。晶胞是晶体构造的最小重复单元，它反映了晶体的对称性，因此可以根据晶胞常数(或单位平行六面体常数)的特点将晶体划分为七个晶系，七大晶系及相应的晶胞常数见表 1-1。

表 1-1 七大晶系及晶胞常数

晶 系	晶轴上的周期	晶轴间的夹角	独立晶胞常数的数目
三斜	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	6
单斜	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	4
正交(斜方)	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3
四方	$a_0 = b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2
六方	$a_0 = b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	2
三方	$a_0 = b_0 = c_0$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	2
立方	$a_0 = b_0 = c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	1

1.2.3 十四种布拉维空间格子

上面划分出来的七种类型单位平行六面体，都是只有在顶点上才分布有结点，但是实际上有一些空间点阵在选取单位平行六面体时，除在顶点上分布有结点外，同时还需要在面心或体心上分布有结点，才能保证充分符合单位平行六面体的选择原则。于是各种类型的单位平行六面体一般又可以按照结点在其中的分布规律再细分成四种可能型式的空间格子。经布拉维证明，七个晶系中只能有十四种独立的空间格子，除了这十四种以外，就不可能再推导出其它类型的空间格子。这十四种空间格子通常称为布拉维格子，各晶系可能存在的空间格子型式列于表 1-2 中。

各类格子占据的结点数分别为：

$$\text{原始格子} \quad 8 \times \frac{1}{8} = 1$$

$$\text{底心格子} \quad 8 \times \frac{1}{8} + 2 \times \frac{1}{2} = 2$$

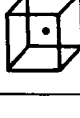
$$\text{体心格子} \quad 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$$

$$\text{面心格子} \quad 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

最后再次指出，空间点阵只是用来描述晶体内部结构中微粒排列周期性的一种物理模型，只有让点阵中的阵点代表晶体中微粒的重心以后，点阵与晶体之间才有如下的对应关系，即空间点阵 $\leftrightarrow$ 晶体，结点 $\leftrightarrow$ 微粒重心，单位平行六面体 $\leftrightarrow$ 晶胞，面网 $\leftrightarrow$ 晶面，行列 $\leftrightarrow$ 晶棱。此外，点阵是三维空间无限延伸的，而晶体在三维空间都是有确定限度的，并且实际晶体中还存在着杂质、位错和热运动等。

表 1-2 十四种布拉维空间格子

表 1.2

格子 晶系	原始(P)	底心(C)	体心(I)	面心(F)
三斜				
单斜			与 C 格子相同	与 C 格子相同
正交				
四方		与 P 格子相同		与 I 格子相同
三方				
六方		P 格子也可理解为 C 格子		
立方				

1.3 晶体的对称性

晶体的对称性是指晶体的几何形态在一些不同方向上往往表现有自相重合的特性，这种特性是由于晶体内部结构在某些不同方向上或在同一方向上某些不同位置存在着有规则地重复性的结果。晶体对称性包括微观对称性和宏观对称性两类。宏观对称性主要研究晶体的几何外形及宏观物理性质的对称性，而微观对称性则讨论晶体内部微观结构的对称性。

本节先介绍晶体宏观对称性的一般概念，然后介绍晶体结构所可能具有的宏观对称性的类型(32 个点群)，其具体推导过程则予以略去。这些内容对于研究晶体的物理性质和正确地选用晶体都是十分重要的。

1.3.1 晶体的对称操作和宏观对称要素

1. 对称操作

物体相同部分有规律地重复称为对称。

欲使对称图形中相同部分发生重复,必须通过一定的动作方能实现,这样一种联系着对称图形中各个相同部分,又能够使对称图形复原的动作称为对称操作。显然,在对对称图形施行对称操作时必须凭借一定的几何要素(点、线或面)来进行,这种辅助几何要素称为对称要素。

所有可能的对称操作不外乎倒反(反伸、反演)、平移、旋转、反映以及它们之间的组合。但其中平移操作只能在无限图形中方能成立。通常把晶体中的对称要素分为两类,一类是在有限图形(晶体的几何形态)中能够成立的对称要素,称为宏观对称要素,另一类是在无限图形(晶体的点阵结构)中才能成立的对称要素,称为微观对称要素。

2. 晶体的宏观对称要素

在作为有限图形的晶体多面体中可能存在着的对称要素有以下几种。

(1) 对称中心(对称心) 对称中心是一个假想的定点,相应的对称操作称为倒反(或反伸)。如果把对称心作为坐标原点,那末对称心的作用将使点 $M(x, y, z)$ 转移到 $M'(-x, -y, -z)$ 。或者如果作通过对称心之任意直线,则在直线上距对称心等距离的两端上必可找到对称点。在有对称心的晶体中,晶体上的每一个晶面都有一个和它平行并且形态倒反的晶面。对称心的习惯记号为 C 。

(2) 对称面(镜面) 对称面为一假想的平面,相应的对称操作称为反映。如果作一垂直于对称面之任意直线,则在直线上距垂足等距的任意两点必然是以该对称面联系着的对称点,这意味着对称面必可将图形分为互成镜像反映的两个等同部分。在具有对称面的晶体中,则必然是由以该对称面为中心的互成镜像的两部分所组成。对称面的习惯记号为 P 。

(3) 旋转轴(对称轴) 旋转轴为一条假想的直线,相应的对称操作为绕该直线的旋转。当进行旋转操作时,图形本身旋转一定角度后能够自行重合(或复原),有些图形旋转几个角度后都能发生重合,其中最小的角度称为基转角,常用 α 表示。由于任何几何图形在旋转一周后,必能自相重合,因此基转角必须能整除 360° ,即

$$n = \frac{360^\circ}{\alpha} \quad (n \text{ 为正整数})$$

n 表示在旋转轴旋转一周过程中,图形相同部分重合的次数,称为旋转轴的轴次。旋转轴的习惯记号为 L^n , n 表示轴次。晶体由于受到内部格子构造的限制,其可能存在的轴次不是任意的,可以证明 n 只能取 1、2、3、4 和 6,即旋转对称操作中可能存在的对称要素有 L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 和 L^6 共五种。

(4) 旋转倒反轴 这是一种复合对称要素,其相应的对称操作是旋转倒反,即在绕轴旋转后,再对轴上的一个定点进行倒反,所以它是旋转与倒反的联合操作。必须指出,旋转和倒反两个操作是紧密连接不可分割的,其中倒反的动作是凭借一个倒反点来进行的,在一般情况下倒反点并不一定能够以独立的对称心的形式存在。因此,一个旋转倒反轴并不一定等于一个旋转轴和一个对称心的组合。旋转倒反轴的习惯记号为 L_i^n ,其中下标 i 表示倒反,上标 n 表示轴次。旋轴倒反轴的轴次和旋转轴的轴次一样, n 只能取 1、2、3、4 和 6。进一步还可以证明,在各次旋转倒反轴中只有 L_i^4 为独立对称要素,其余的均可用其它简单的对称要素或它们的组合来代替,即

$$L_4^1 \Leftrightarrow C; \quad L_2^2 \Leftrightarrow P; \quad L_3^3 \Leftrightarrow L^3 + C; \quad L_6^6 \Leftrightarrow L^3 + P(P \perp L^3)$$

表 1-3 列出了晶体中的宏观对称要素及其表示符号, 其中只有 C 、 P 、 L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^6 和 L_4^4 共八种是独立的。

表 1-3 晶体宏观对称要素及其符号

对 称 要 素		图示符号	熊夫利符号	国际符号	习惯符号
对称中心(对称心)		无	C_i	$\bar{1}$	C
对称面(镜面)		直线或圆	C_s	m	P
旋 转 轴	1 次旋转轴(1 次轴)	无	C_1	1	L^1
	2 次旋转轴(2 次轴)		C_2	2	L^2
	3 次旋转轴(3 次轴)		C_3	3	L^3
	4 次旋转轴(4 次轴)		C_4	4	L^4
	6 次旋转轴(6 次轴)		C_6	6	L^6
旋 转 倒 反 轴	1 次旋转倒反轴(等于对称中心)	无	$C_i(\equiv S_1)$	$\bar{1}$	C
	2 次旋转倒反轴(等于与轴垂直的对称面)	与对称面 图示符号同	$C_2(\equiv S_2)$	$2(\equiv m)$	P
	3 次旋转到反轴(等于 3 次轴加对称中心)		$C_{3i}(\equiv S_6)$	$\bar{3}$	L_i^3
	4 次旋转倒反轴(包含 2 次轴)		S_4	$\bar{4}$	L_i^4
	6 次旋转倒反轴(等于 3 次轴加上垂直于该轴的对称面)		$C_{3i}(\equiv S_6)$	$\bar{6}(\equiv \frac{3}{m})$	L_i^6

1.3.2 晶体的 32 种对称类型(32 点群)

在一切晶体中总共只有八种独立的宏观对称要素, 这八种对称要素可以分别单独地存在于晶体中, 也可以几个对称要素相交于晶体之几何中心而同时并存于一种晶体中。在后一种情况下, 任意两个对称要素必将根据对称要素组合定理产生出另一些新的对称要素。晶体的对称类型是结晶多面体所具有的全部宏观对称要素的总和, 也就是说, 应包括一切原始的和合成的对称要素在内。例如两个对称面直角相交, 便合成出一个 2 次旋转轴, 因而它的对称要素共有 4 个, 即两个对称面, 一个 2 次轴和一个 1 次轴, 这四个对称要素就构成了一种晶体对称类型, 其国际符号为 $mm2$ 。再例如图 1-8 中所示的几种晶体, 它们所具有的对称要素分别为: 图(a)有一个 3 次旋转轴和三个对称面, 若用国际符号表示, 它具有的对称要素为 3

+3*m*，属 3*m* 对称类型。图(b)所具有的对称要素为三个 2 次旋转轴，三个对称面，一个对称心，共有对称要素 (3 × 2) + (3 × *m*) + $\bar{1}$ ，属 $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (或简写为 *mmm*) 对称类型。图(c)所具有的对称要素为一个 4 次旋转轴，四个 2 次旋转轴，属 422 对称类型。图(d)具有三个 2 次旋转轴，三个对称面和一个对称心。尽管图(d)和图(b)的外形相差甚远，但它们所具有的对称要素种类、数目和组合方式完全相同，它们都属于 *mmm* 同一个对称类型。

从数学观点来看，八种独立对称要素可以产生无穷多种组合方式，但在晶体结构中因受到如下因素的限制，使得可能存在的对称要素组合方式大大减少：

① 结晶多面体的对称是内部空间格子构造对称性的外在反映，因而对称要素的安置必须符合晶体内部格子的对称性。

② 我们讨论的对象是有限图形，因此所有对称要素必须具有公共点。

可以证明，由于上述两个条件的限制，八种独立对称要素及它们之间可能存在的组合只有 32 种，它们构成了晶体的 32 种对称类型，或称为晶体的 32 点群，见表 1-4。

表 1-4 32 点群表

晶系	全部对称要素 (用习惯符号表示)	对 称 类 型			晶系	全部对称要素 (用习惯符号表示)	对 称 类 型		
		熊夫利符号	国际符号 (全写)	国际符号 (简写)			熊夫利符号	国际符号 (全写)	国际符号 (简写)
三斜	L^1	C_1	1	1	四方	$L^4 4L^2$	D_4	422	42
		C_i	$\bar{1}$	$\bar{1}$		$L^4 4C_2$	C_{4v}	4 <i>mm</i>	4 <i>mm</i>
单斜	P	C_s	<i>m</i>	<i>m</i>		$L^4 2L^2 2C_2$	D_{2d}	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$
	L^2	C_2	2	2		$L^4 4L^2 5PC$	D_{4h}	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$\frac{4}{m} mm$
	$L^2 PC$	C_{2h}	$\frac{2}{m}$	$\frac{2}{m}$	六方	L^6	C_6	6	6
正交	$3L^2$	D_2	222	222		L^6_i	C_{3h}	$\bar{6}$	$\bar{6}$
	$L^2 2P$	C_{2v}	<i>mm</i> 2	<i>mm</i>		$L^6 PC$	C_{6h}	$\frac{6}{m}$	$\frac{6}{m}$
	$3L^2 3PC$	D_{2h}	$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	<i>mmm</i>		$L^6 6L^2$	D_6	622	62
三方	L^3	C_3	3	3		$L^6 6P$	C_{6v}	6 <i>mm</i>	6 <i>mm</i>
	$L^3 C$	C_{3i}	$\bar{3}$	$\bar{3}$		$L^6 3L^2 3P$	D_{3h}	$\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$
	$L^3 3L^2$	D_3	32	32		$L^6 6L^2 7PC$	D_{6h}	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$\frac{6}{m} mm$
	$L^3 3P$	C_{3v}	3 <i>m</i>	3 <i>m</i>	立方	$3L^2 4L^3$	T	23	23
	$L^3 3L^2 3PC$	D_{3d}	$\bar{3} \frac{2}{m}$	$\bar{3}m$		$3L^2 4L^3 3PC$	T_h	$\frac{2}{m} \bar{3}$	$m\bar{3}$
四方	L^4	C_4	4	4		$3L^4 4L^3 6L^2$	0	432	43
	L^4_i	S_4	$\bar{4}$	$\bar{4}$		$3L^4 3L^3 6P$	T_d	$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$
	$L^4 PC$	C_{4h}	$\frac{4}{m}$	$\frac{4}{m}$		$3L^4 4L^3 6L^2 9PC$	O_h	$\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$	$m\bar{3}m$

1.3.3 点群按特征对称要素分类和点群的表示符号

1. 点群按特征对称要素分类

在 1.2.2 节中我们根据晶胞常数将晶体划分为七个晶系。在讨论了晶体对称性概念以后就会明白，格子或晶胞的形状不同，实质上反映出的是它们具有的宏观对称要素种类和数目上的差别，七个晶系的差别就在于它们分别具有不同的特征对称要素。例如，凡是具有四个 3 次旋转轴的晶体就属于立方晶系，凡是具有 6 次旋转轴或 6 次旋转倒反轴的晶体就属于六方晶系等。同样我们还可以从 32 点群出发，根据它们所包含的特征对称要素将晶体划分为七个晶系，现将七个晶系的特征对称要素列于表 1-5 中。另外，根据各晶系是否具有高次旋转轴和所具有高次旋转轴的数目可进一步将晶体划分成三个晶族。凡无高次旋转轴的晶体属低级晶族，有一个高次旋转轴(包括 3、4、6 次旋转轴)的晶体属中级晶族，有一个以上高次旋转轴的晶体属于高级晶族。三个晶族的晶体在光学性质上分别与双轴晶体，单轴晶体与各向同性晶体相对应。

表 1-5 晶族，晶系的特征对称要素

晶 族	晶 系	对 称 特 点(特征对称要素)	
低级晶族 (双轴晶体)	三 斜	无高次轴	只有 1 次旋转轴
	单 斜		只是一个 2 次旋转轴
	正 交		有三个相互垂直的 2 次旋转轴
中级晶族 (单轴晶体)	四 方	有一个高次轴	有一个 4 次旋转轴
	三 方		有一个 3 次旋转轴
	六 方		有一个 6 次旋转轴
高级晶族 (各向同性晶体)	立 方	有多于一个高次轴	在立方体对角线方向上 有四个 3 次旋转轴

2. 点群的国际符号

点群的国际符号所采用的基本对称要素为对称面、旋转轴和旋转倒反轴，它们分别用如下符号来表示：

对称面用 m 表示；旋转轴按它们的轴次分别用 1, 2, 3, 4 和 6 表示，旋转倒反轴也按它们的轴次分别表示为 $\bar{1}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ 和 $\bar{6}$, $\bar{2}$ 通常用与其垂直的对称面来代替。

点群的国际符号最多用三位记号表示，三斜晶系和单斜晶系则只用一位记号表示。每个位序根据所属晶系之不同而依次分别表示出晶体中某一确定方向上的对称要素。各晶系晶体国际符号中的三个位序的方向同它们各自平行六面体的三个矢量 a, b, c 之间的对应关系如表 1-6 所示。

在某一个位序上示出的对称要素符号即代表与该位序相应方向上所存在的对称要素——平行于此方向的旋转轴或旋转倒反轴，以及垂直于此方向的对称面，当在某方向上同时存在着旋转轴及与之垂直的对称面时，则记为 $\frac{N}{m}$ (或 N/m)，分子表示旋转轴，分母表示对称面。如果在某位相应的方向上没有对称要素，则将该位空缺。

一般说来，一个点群所具有的全部对称要素通常在国际符号中不能直接反映出来。符号中所写出的对称要素只是基本的对称要素，其余的对称要素需根据基本对称要素推导出来，例