

晶 体 学 原 理

PRINCIPLES OF
CRYSTALLOGRAPHY

方 奇 于文涛 编著

国 防 工 业 出 版 社

· 北 京 ·

图书在版编目(CIP)数据

晶体学原理/方奇,于文涛编著. —北京:国防工业出版社,2002.1

ISBN 7-118-02609-3

I.晶 II.①方...②于... III.晶体学
IV.07

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 046088 号

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号)

(邮政编码 100044)

三河市新艺印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787×1092 1/16 印张 20 $\frac{1}{4}$ 471 千字

2002 年 1 月第 1 版 2002 年 1 月北京第 1 次印刷

印数:1—3000 册 定价:28.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

本书的出版得到
华夏英才出版基金
山东大学研究生培养专项基金
的资助

前 言

作者多年在山东大学晶体材料国家重点实验室从事晶体结构研究工作和晶体学课程的教学工作。本书是在研究工作和研究生的晶体学课程讲义的基础上形成的，它适合于结构化学，固体物理，晶态材料等专业的研究生及大学高年级学生阅读，也可供相关专业的科技工作者参考。

晶体学的基本内容或主要分支是：(1) 晶体的空间对称性理论；(2) 以 X 射线为主的晶体衍射学；(3) 结晶化学及新兴的生物分子结晶学；(4) 晶体物理学；(5) 晶体生长与形态学。前 3 门学科的交叉形成晶体结构学；后 2 门学科是晶体材料学的重要基础。

对称性理论和 X 射线晶体学是整个晶体学的基础，是本书的主要内容。书中第 1 章到第 7 章的内容是晶体的空间对称性理论，侧重于微观对称理论，第 8 章与第 9 章阐述 X 射线晶体学原理，第 10 章到第 12 章侧重于晶体结构测定。

一种晶体总有其特点，本书在“结晶”过程中力求形成什么特色呢？

1. 侧重于晶体微观对称性原理的阐述。原理二字写入书名，体现了作者对基本原理的重视。物理学，化学，材料学，矿物学等许多自然学科都涉及晶体学，人们对晶体学的术语并不陌生，但也许难以确定手中晶体的结构特点以及由此决定的物理—化学性质，也许在阅读科技文献时被晶体学问题卡住，也许在论述与晶体结构有关的问题时不那么得心应手。因此需要清晰地掌握晶体学的基本概念，不仅需要知道是什么，而且有必要知道为什么。书中含有较多的插图和习题，以协助读者掌握晶体学的基本原理。

2. 用群论贯穿晶体学对称性理论。群论是理解空间对称性和运算对称操作的有力工具，虽然用直观几何方法也可以得出晶体学对称性理论的全部结论，但不用群论，晶体学的表述将失去简洁。晶体学用到的一点群论知识并不难掌握，考虑到有的读者没有学过群论，书中交待了一些必要的群论基础知识。

3. 在二维晶体学上着墨较多。我们认为，从二维晶体学入手是学习晶体学的捷径。这是由于：(1) 二维空间比三维空间直观得多，所见即所得，无须进行投影；(2) 二维晶体学的原理和方法对于学习三维晶体学极富启发性和建设性，二维的许多结论可直接推到三维；(3) 二维晶体学并不限于二维客体，许多三维晶体的对称性可以用二维晶体学图案表示，三维问题可归结为二维。

本书的分工如下：第 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 章，以及前言和附录由方奇撰稿；第 10, 11, 12 章由于文涛撰稿；雷虹副教授参加了前 9 章部分内容的撰写和插图工作。统稿的原则是：保持符号的一致，保留各自的风格。8.3 节与 10.4 节分别用不同的方法论述相近的问题，没有苛求形式的统一。

本书在编著过程中得到许多学者的大力帮助。例如高樟寿教授对全书提出了多项改进意见；作者对此表示由衷的感谢。作者还要感谢蒋民华院士长期以来的关心和支持。

本书的书稿曾于 1996 年和 1998 年两度作为研究生的教材试用，感谢山东大学晶体材料国家重点实验室的历届研究生刘陟，刘国群，薛刚，刘志强，曹笃霞，许文等提出的许多非常中肯的意见。

感谢本书编辑崔士义同志、耿新暖同志和王华同志的细致工作和通力合作。

由于作者水平和视野所限，书中定存在不少纰漏甚至可能存在错误。诚挚地希望读者予以指正，以便再次印刷时求得改进。

作者

2001 年 6 月

目 录

第一章 晶体概论	1
1.1 晶体的宏观特性	1
1.1.1 晶体	1
1.1.2 晶体的宏观均匀性, 各向异性, 对称性	5
1.2 晶体的微观结构	8
1.2.1 点阵与结构基元	8
1.2.2 晶体点阵的实验依据	10
习题	11
参考文献	12
第二章 点对称操作	13
2.1 群论基础 (I)	13
2.2 点对称操作	16
2.2.1 极射赤平投影	16
2.2.2 点操作的解析表示: 操作矩阵	19
2.3 第 I 类点对称操作: n 重旋转	20
2.3.1 1重旋转	21
2.3.2 2重旋转	22
2.3.3 3重旋转	22
2.3.4 4重旋转	23
2.3.5 晶体中5重对称轴的不存在性	24
2.3.6 6重旋转	26
2.4 第 II 类点对称操作: 反映与反演	27
2.4.1 反映	27
2.4.2 反演	30
2.5 第 I 类点操作与第 II 类点操作的组合	32
2.5.1 旋转—反演	32
2.5.2 旋转—反映	34
2.5.3 点操作—点操作的其它组合	35
习题	37
参考文献	39

第三章 空间对称操作	40
3.1 基本空间操作	40
3.1.1 再论对称性	40
3.1.2 基本空间操作	43
3.2 第 I 类空间操作: 第 I 类点操作与平移的组合	45
3.2.1 旋转与垂直平移的组合: 转轴的位移	45
3.2.2 旋转与一般平移的组合: 第 I 类操作的普遍形式	47
3.2.3 旋转与平行平移的组合: 螺旋	47
3.2.4 右手螺旋与左手螺旋	52
3.3 第 II 类空间操作: 第 II 类点操作与平移的组合	54
3.3.1 反映与垂直平移的组合: 反映面的位移	54
3.3.2 第 II 类操作的普遍形式	55
3.3.3 反映与平行平移的组合: 滑移	56
3.4 对称操作的符号	58
3.4.1 对称操作的几何符号	58
3.4.2 对称操作的 Seitz 符号	60
习题	62
参考文献	64
第四章 二维平面晶体学	65
4.1 群论基础 (II)	65
4.1.1 共轭, 共轭类	65
4.1.2 子群, 子群的陪集, 群的陪集展开	68
4.1.3 共轭子群, 不变子群	69
4.1.4 直积群	70
4.1.5 同构, 同态	71
4.2 平面晶体学点群	73
4.2.1 点群的直观体现: 对称要素系与对称等效点系	73
4.2.2 第 I 类点操作 (旋转) 构成的点群	74
4.2.3 包含第 II 类点操作 (反映) 的点群	75
4.3 平面点阵	77
4.3.1 平面点阵, 基矢, 晶胞	77
4.3.2 5种平面点阵	78
4.3.3 平面点阵分类, 点阵点群	80
4.4 平面空间群 I: 点式空间群	81
4.4.1 点式空间群的构成, 13个点式空间群	81
4.4.2 点式空间群的对称性描述	83
4.5 平面空间群 II: 非点式空间群	89

4.5.1	非点式空间群的构成, 模数群	90
4.5.2	4个非点式空间群	93
4.5.3	点阵点的对称性	97
习题		99
第五章	晶体学点群	103
5.1	第 I 类操作的点群: 纯旋转点群	104
5.1.1	共点非共轴的旋转与旋转之间的组合, 对称轴系	104
5.1.2	具有一个 n 重轴和 n 个与之垂直的 2 重轴的点群: 双面点群	107
5.1.3	具有一个以上高重轴的点群: 立方旋转点群	110
5.2	含第 II 类操作的中心对称点群	113
5.2.1	对开定理	113
5.2.2	单轴旋转群 n 与反演群 $\{1, \bar{1}\}$ 的直积群	114
5.2.3	双面群 D_n 与反演群 $\{1, \bar{1}\}$ 的直积群	114
5.2.4	立方旋转点群与 $\{1, \bar{1}\}$ 的直积群	115
5.3	含第 II 类操作的非中心对称点群	117
5.3.1	单轴旋转群 n 与反映群的组合	117
5.3.2	双面群 D_n 与反映群的组合: $\bar{4}2m$ 群与 $\bar{6}2m$ 群	118
5.3.3	立方旋转点群与反映群 $\{1, m_d\}$ 的组合: $\bar{4}3m$ 点群	121
5.3.4	点群 $\bar{4}(S_4)$	122
5.4	晶体学点群的分类, 子群—母群关系	122
5.4.1	晶体学点群的分类	122
5.4.2	子群—母群关系	124
5.5	晶体的几何形态	125
5.5.1	晶体几何的经验规律	126
5.5.2	宏观晶体的几何表征	127
5.5.3	晶形	131
习题		139
参考文献		140
第六章	空间点阵	142
6.1	倒易点阵	142
6.1.1	倒易点阵的定义	142
6.1.2	倒易点阵的性质	143
6.1.3	晶带与晶带定律	146
6.2	基矢变换与坐标变换	147
6.2.1	点变换	147
6.2.2	空间变换	150
6.2.3	基矢变换导致的对称操作的变换	152
6.3	14种 Bravais 点阵	154

6.3.1	二维斜交点阵基础上的点阵	155
6.3.2	二维简单矩形点阵基础上的点阵	157
6.3.3	二维c心矩形点阵基础上的点阵, 面心正交点阵 oF	158
6.3.4	二维正方点阵基础上的三维点阵	159
6.3.5	二维六角点阵基础上的三维点阵	162
6.4	Bravais点阵的点阵参数	165
6.4.1	度量张量	165
6.4.2	点阵参数的计算公式	166
6.4.3	仿射坐标系下的若干几何公式	171
6.5	点阵基矢选取的唯一性问题, 约化胞	173
6.6	Wigner-Seitz 晶胞与空间点阵的其它分类法	175
	习题	178
	参考文献	179
第七章	晶体学空间群	181
7.1	点式空间群	181
7.1.1	三斜晶系空间群例举	183
7.1.2	正交晶系空间群例举	185
7.1.3	四方晶系空间群例举	189
7.2	非点式空间群	192
7.2.1	单斜晶系的空间群	192
7.2.2	四方晶系空间群例举	195
7.2.3	11对相互对映的空间群	196
7.3	立方晶系空间群的对称系投影图	197
7.4	空间群的分类	200
	习题	201
	参考文献	202
第八章	晶体对X射线的衍射方向	203
8.1	X射线的发射和吸收	203
8.1.1	X射线的发射	203
8.1.2	X射线的吸收	205
8.2	晶体点阵对X射线的衍射方向	207
8.2.1	Laue方程	207
8.2.2	Bragg方程	209
8.2.3	Eward反射球与衍射球	211
8.3	晶胞参数的测定	213
8.3.1	四圆X射线衍射仪简介	214
8.3.2	倒易空间坐标系, 实验坐标系	214

8.3.3	衍射方程	215
8.3.4	方位矩阵的确定	217
	习题	218
第九章	晶体对X射线的衍射强度	222
9.1	电子和原子对 X 射线的散射	222
9.1.1	自由电子对 X 射线的散射	222
9.1.2	原子对 X 射线的散射	223
9.2	晶胞对X射线的衍射强度	225
9.2.1	结构因子	225
9.2.2	Friedel 定律	227
9.3	晶体对X射线的衍射强度	228
9.3.1	理想晶体的衍射	228
9.3.2	实际晶体的衍射	229
9.4	电子密度函数	233
9.4.1	Fourier 级数	233
9.4.2	晶体的电子密度函数	234
9.4.3	电子密度函数的性质	235
9.5	晶体空间群的测定	237
9.5.1	倒易点阵的对称性, 衍射空间的对称性, 晶体的 Laue 类	237
9.5.2	非初基晶胞导致的系统消光与整体反射条件	239
9.5.3	滑移面导致的系统消光与晶带反射条件	241
9.5.4	螺旋轴导致的系统消光与系列反射条件	242
9.5.5	消光符号, 衍射符号, 可能的空间群	243
9.5.6	其它方法在空间群测定中的应用, 点群的测定	245
	习题	247
	参考文献	249
第十章	单晶衍射数据的收集	251
10.1	回摆法	251
10.1.1	原理与方法	251
10.1.2	晶体定向	253
10.1.3	点阵常数测量	254
10.1.4	数据收集范围	255
10.2	魏森堡法	255
10.2.1	方法原理	256
10.2.2	等倾斜魏森堡方法	256
10.2.3	魏森堡图中衍射点的分布	257
10.3	旋进照相方法	261

10.4 四圆衍射仪法	262
10.4.1 四圆测角仪.....	263
10.4.2 四圆衍射仪的工作原理.....	264
10.4.3 角度方程.....	266
10.4.4 方位矩阵.....	268
参考文献.....	270
第十一章 晶体结构解析方法	271
11.1 直接法	271
11.1.1 单位结构因子和归一化结构因子.....	272
11.1.2 赛尔 (Sayre)等式.....	275
11.1.3 结构不变量与结构半不变量.....	276
11.1.4 不等式关系.....	278
11.1.5 卡尔-霍夫曼行列式.....	280
11.1.6 概率关系式.....	281
11.1.7 原点与起始反射.....	285
11.1.8 位相测定.....	286
11.2 向量空间法	291
11.2.1 帕特逊函数的定义.....	291
11.2.2 帕特逊函数的性质.....	294
11.2.3 从帕特逊函数推引原子坐标.....	296
参考文献.....	298
第十二章 结构的完成与描述	300
12.1 结构的完成	300
12.1.1 电子密度函数法.....	300
12.1.2 差值电子密度函数法.....	300
12.2 最小二乘法修正	302
12.3 结构模型的正确性	305
12.4 结构的描述	305
12.5 结构测定步骤	308
参考文献.....	310
英汉词汇对照	311

第一章 晶体概论

晶体的基本结构特征是其组成单元（原子或分子）在空间中具有周期性和对称性的排布，晶体中原子或分子的性质及其空间排布的方式决定了晶体的几何特征和物理—化学性质。研究晶体中各种组成单元的具体排布方式是结晶化学的主要任务。几何晶体学则侧重于晶体的宏观度量。晶体的对称理论贯穿于整个晶体学，是晶体学的理论基础。在绪论性的第一章里，我们讨论晶体的基本宏观性质和基本微观结构特征。

1.1 晶体的宏观特性

1.1.1 晶体

早在史前时期，美丽晶莹的晶体就引起了人们的注意，由表面光洁、线条笔直的晶面围成的晶体千姿百态而又对称有致，演尽大自然的鬼斧神工。

晶态是固体的热力学平衡态，在一定的热力学平衡条件下，每一种确定化学组成的固体对应着唯一的一种晶体。在液体冷却、溶液浓缩及气相沉积的实验过程中，在大自然沧海桑田而又瞬息万变的过程中，可以自发结晶出漂亮的多面体晶体。人们把特征多面体外形作为晶体区别于非晶固体的初步判据。

尽管在特殊的自然条件和人工条件下，有些晶体不是多面体(例如图1-2中晶体14),但就热力学可能性而言，任何晶态物质总是倾向于以凸多面体 (convex polyhedron)的形式存在，晶体的这一性质称为自限性或自范性。

自范性是晶体的**第一个特性**。

近代晶体学始于研究晶体的几何外形。丹麦的斯丹诺 (Steno, 1638~1686) 抓住了千变万化的多面体晶体中蕴涵着的第一个不变性，在1669年提出晶体的面角守恒定律(The law of constancy of angle): 在相同的热力学条件下，同一物质的各晶体之间比较，相应晶面的大小、形状和个数可以不同，但相应晶面间的夹角不变，一组特定的夹角构成这一物质所有晶体的共同特征。

如果用一句话定义晶体，可以说，晶体是原子或分子规则排布的固体；或者说，晶体是微观结构具有周期性和一定对称性的固体；或者说，晶体是可以抽象出点阵结构的固体(点阵的概念稍后介绍)。晶体的多面体外形和其它特性都是其微观周期性和对称性的宏观表现。

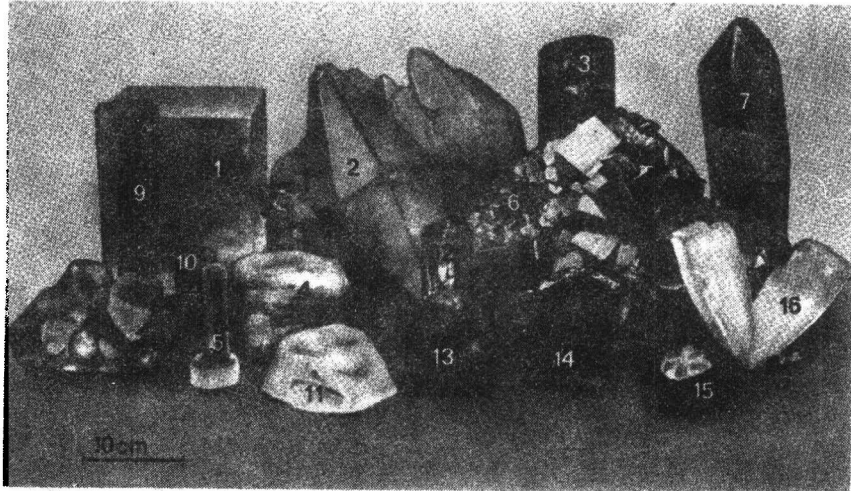


图 1-1 若干天然晶体的照片^[1]

1. 岩盐NaCl; 2. 方解石CaCO₃; 3. 绿柱石Be₃Al₂[Si₆O₁₈]; 4. 玫瑰绿柱石; 5. 翡翠; 6. 黄铁矿FeS₂; 7. 石英SiO₂;
8. 天河石K[AlSi₃O₈]; 9. 辉锑矿Sb₂S₃; 10. 红电气石(Na,Ca)(Mg,Al)₆[Si₆Al₃B₃(O,OH)₃₀];
11. 黄玉Al₇(SiO₄)(F,OH)₂; 12. 巴西黄玉; 13. 透辉石CaMg[Si₂O₆]; 14. 萤石CaF₂; 15. 赤铁矿Fe₂O₃; 16. 天青石SrSO₄。

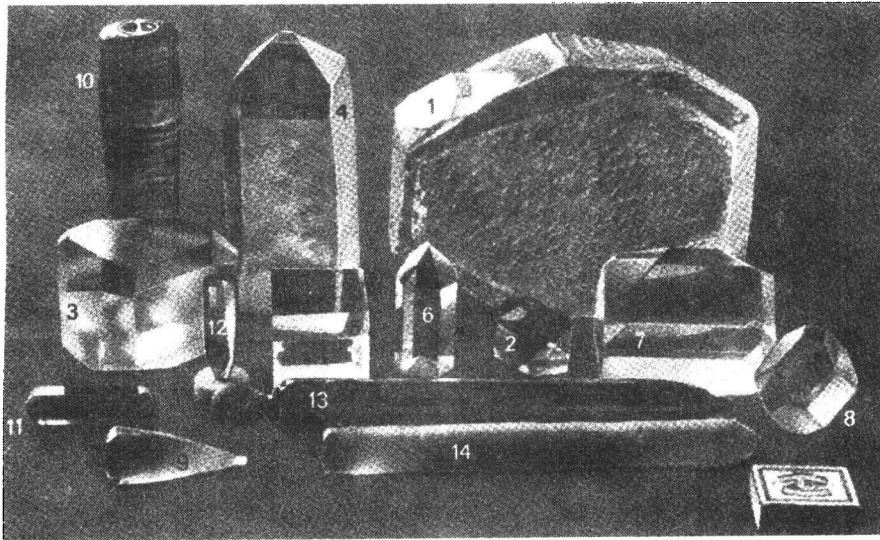


图 1-2 若干人工晶体的照片^[1]

- 1, 2. 石英SiO₂; 3. 硫酸三甘氨酸(NH₂CH₂COOH)₃H₂SO₄; 4. 磷酸二氢钾KH₂PO₄; 5. 氟化锂LiF; 6. 碘酸锂LiIO₃;
7. α-碘酸α-HIO₃; 8. 钾矾KAl(SO₄)₂·12H₂O; 9. 钟表轴承用红宝石Al₂O₃ + 0.05% Cr; 10. 激光红宝石Al₂O₃ + 0.05% Cr;
11. 石榴石Y₃Al₅O₁₂; 12. 铌酸锂LiNbO₃; 13. 硅Si; 14. 蓝宝石Al₂O₃。

微观结构可抽象为单一点阵描写的晶体称为单晶(single crystal); 实验上, 对单色 X 射线产生一系列与入射角相关的尖锐的衍射单峰的单个晶体可视为单晶。单晶可以小至 μm³ 量级 (图1-3), 大至 m³ 的量级。美国南达科塔州曾发现长14m, 重100t的锂辉石晶体, 山东大学晶体材料研究所生长出重达数百公斤的非线性光学晶体KH₂PO₄ (图1-4)。本书中晶体一词不加说明时即指单晶。

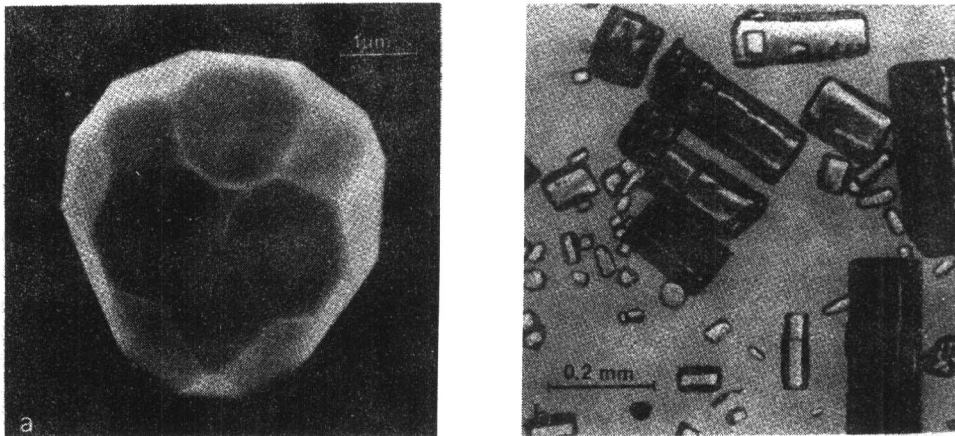


图 1-3 μm^3 尺度的锗单晶(左)和 mm^3 尺度的蛋白酶单晶(右)^[1]

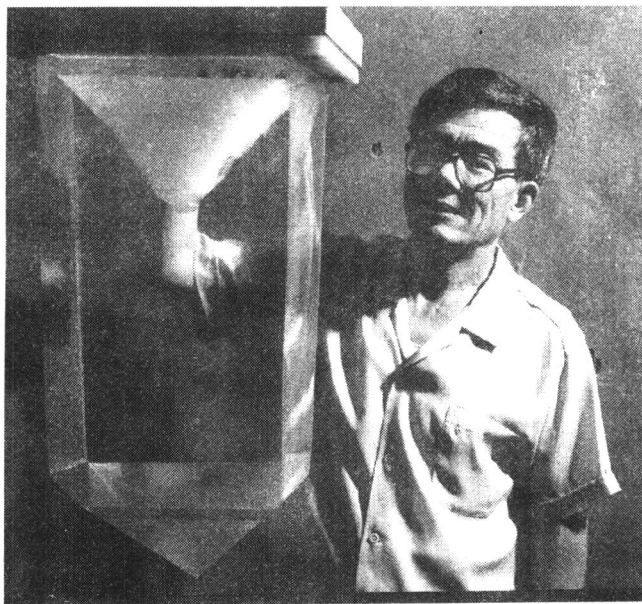


图 1-4 山东大学晶体材料研究所生长出的巨大 KH_2PO_4 单晶

多晶(polycrystals)是由无数随机取向的极微小单晶形成的聚合体。许多矿物，合成化合物，金属，合金等天然和人工合成的固体都是多晶态。有时多晶固体的组成晶粒具有某种择优取向，称这样的晶样具有织构 (texture)。

按照微观结构有序程度的不同，还存在着液晶 (liquid crystal)，塑晶(plastic crystal)以及近年来发现的准晶 (quasicrystal)等。限于篇幅，本书不讨论这些有趣的物质形态。非晶固体是无定形固体 (amorphous solid)，或称为玻璃体，例如玻璃、松香等。这种固体的原子分子排列像液体那样杂乱无章，没有周期性，可看作是过冷液体。

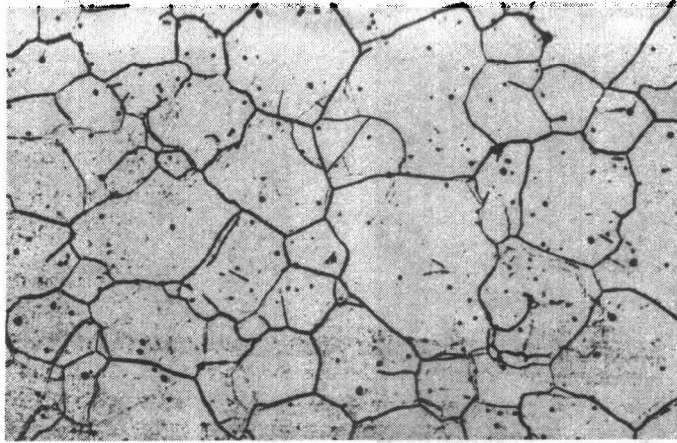


图 1-5 奥氏体多晶的金相照片(放大160倍)^[1]

本书主要讨论理想晶体，理想晶体呈现无限个原子分子构成的静态点阵图像，实际晶体与所谓理想晶体有何不同呢？

其一，实际晶体中的原子分子无时无刻不在振动，温度足够高时，晶格振动可引起晶体不同晶相之间的相变，或晶体到液体的相变(即熔解)。晶格振动是晶体的内禀属性，不应视为晶体的欠完美，用 X 射线衍射等实验手段测得的晶体结构实际上已对晶体中原子分子的运动进行了时间平均。

具有确定的熔点是晶体区别于非晶固态物质的第二个特性(有些晶体熔解前发生分解，这种情况另当别论)。

其二，理想晶体的尺度是无限的，而有限尺度的实际晶体存在边界效应。晶体的“表面相”与“本体相”比较，物理—化学性质有所不同(例如，晶体表面粒子的化学势通常高于内部粒子的化学势)。小尺度晶体与大尺度晶体比较，从数量上看， μm^3 尺度以上的晶体，“果皮”的量相对于“果实”的量可以忽略；而小尺度晶体的表面的量举足轻重，不能忽略。从性质上看， mm^3 尺度以上的晶体的各种性质基本上与尺度无关；而对于 μm^3 至 nm^3 尺度的小晶体，各种性质随尺度的变化极其陡峭。近年来兴起的纳米材料科学正在不断揭示 nm 宽度的一维晶线， nm 厚度的二维晶膜， nm^3 尺度的三维小晶粒等一系列纳米晶态物质所具有的与相应大晶体不同的，多方面的，新奇的物理—化学性质。

其三，实际晶体中存在各种形式的结构欠完美，例如点缺陷，畴等。由于晶体生成条件的不同和生成后历史的不同，晶体中存在着组分和结构对其理想化学式和理想结构的偏差，存在着亚微观的位错，甚至有包杂物。晶体有些性质(例如有些力学性质)对其结构缺陷不敏感，真实晶体几乎可以看作理想晶体；而另一些性质(例如导电率，光透过率)则或强或弱地与结构缺陷有关。结构缺陷并不一定是坏事，例如人为掺杂方法可制备各种半导体晶体。

下文中涉及到的晶体的均匀性(homogeneity)，各向异性(anisotropy)，晶体的微观对称性(symmetry)都是对理想晶体或近完美的实际晶体而言的。

晶体的第三个特性是对 X 射线的衍射效应，对此将在第八章中详细讨论。

1.1.2 晶体的宏观均匀性，各向异性，对称性

1. 晶体的宏观均匀性

晶体均匀性的含义是：在晶体中任取两个形状，大小，取向都相同的，微观足够大，宏观足够小的体积元，它们的所有物理性质都是相同的。换言之，均匀性是晶体中坐标原点的任何平移后性质的不变性。这里，晶体的物理性质可以是标量 (scalar)，例如热容量，密度；矢量 (vector)，例如热释电系数；或更一般地，可以是张量 (tensor)。

晶体的宏观均匀性允许我们把晶体看做连续介质，从而可以对其许多性质进行唯像的描述，而不必知道晶体的微观结构。均匀性并不是晶体的特性，液体和气体也具有均匀性，但其均匀性来自于原子分子热运动的随机性，这种均匀性包含着各向同性 (isotropy)。而晶体的均匀性则起源于其原子分子排布周期的微观性，点阵周期为 nm 量级，这与一般几何量具，光学仪器以及人类感官的分辨限度相比，实在太小了。请注意，晶体的均匀性并没有各向同性的内涵，均匀性和各向同性的含义并不相同。

2. 晶体的各向异性和对称性

各向异性和对称性是晶体的第四个特性，也是最显著的特性。

晶体的物理性质随方向不同而有所不同的特性称为晶体的各向异性 (anisotropy)。许多晶体容易沿一定晶面劈裂即解理 (cleavage)，解理性直观地反映出晶体力学性质的各向异性，有人把解理性单独作为晶体的一个宏观特性，然而解理性不能作为晶体的一个普遍性质。

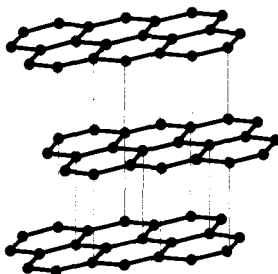


图 1-6 晶体各向异性示例：石墨的层状结构
层平行方向上的电导率远大于层法线方向上的电导率。

观察尿素晶体(图1-7)，其(110)晶面与(111)晶面显然是两种不同的晶面。这两个晶面法线方向上的有些物理性质是不同的，例如折射率(refractive index)和双折射(birefringence)等。

再观察尿素晶体，其(111)晶面与 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 晶面可以通过绕 Z 轴的2重旋转(即旋转 $2\pi/2$ 角度)而互换，晶体经历这种旋转后不可辨别。

定义：对客体(object)实施一个操作，若操作前后客体不可辨别，则该操作称为对称操作(symmetry operation)。即对称操作是将某一客体(物体，晶体，分子，实物，函数等等)变换成该客体自身的操作。

尿素晶体的由对称操作相联系的(111)晶面法线方向与 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 晶面法线方向上的所有

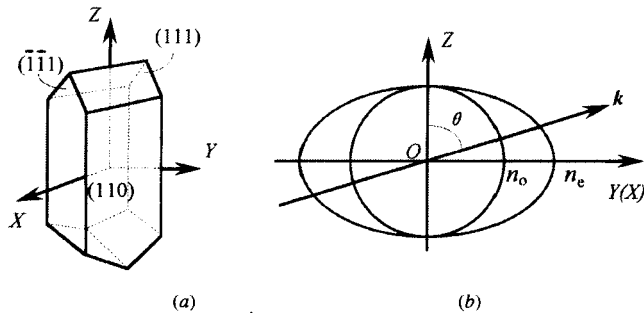


图 1-7

(a) 尿素晶体的几何外形；(b) 尿素晶体的折射率曲面，寻常光折射率 n_o 具有球对称性，非寻常光折射率 n_e 具有旋转椭球对称性。

物理性质应该完全相同。晶体存在各向异性的同时还存在有规律的等同，这正是其对称性的表现。各向异性强的晶体对称性低；反之，对称性高的晶体各向异性弱，各向异性与对称性是晶体的对立统一的两方面属性。

晶体的各向异性和对称性直观地反映在其几何外形上（例如针状或片状的晶形），更普遍地反映在其各种物理性质上。

晶体物理性质由宏观可测物理量之间的关系来确定。

例如晶体密度 ρ 是一个标量，它由质量 m 和体积 V 通过 $m = \rho V$ 定义。

再如晶体的介电常数 ϵ (permittivity) 是二阶张量 (second-rank tensor)，它由电位移矢量 D 和电场强度矢量 E 通过 $D = \epsilon E$ 定义。关系式 $D = \epsilon E$ 中的 E 作为作用矢量， D 作为感生矢量。

介电常数张量 ϵ 作为一种物理性质，它在某方向上的值是指：将作用矢量 E 施加到该方向上，感生矢量 D 在这一方向的投影与 E 的模的比值。一般来说，晶体任一物理性质在空间各方向的值的分布总呈现出一定的各向异性和对称性，这种分布可以通过实测和基于对称性规律的推演得到。

晶体物理性质的各向异性和对称性可以用示性曲面(indicatrix surface)直观地表示。例如图1-7中的尿素晶体的折射率曲面(indicatrices of the refractive indices)给出 n_o 、 n_e 在所有方向的数值。尿素晶体的寻常光 (ordinary beam) 的折射率 n_o 与方向无关，是各向同性的，其折射率曲面是全对称的球面；非寻常光(extraordinary beam)的折射率 n_e 则随极角 θ 而各向异性，但不随方位角 ϕ 变化，即对 ϕ 是全对称的，其折射率曲面是旋转椭球面。晶体的双折射 (birefringence) $\Delta n = n_e - n_o$ 也随 θ 各向异性，随 ϕ 各向同性。在 $\theta = 0$ 的特殊方向， $\Delta n = 0$ ，不发生双折射，此即光轴(optical axis)的方向。

比较图1-7(a)，(b)可见：晶体物理性质的对称性不低于晶体本身的对称性。Neumann原理告诉我们：晶体任一宏观物理性质的对称要素的集合中拥有晶体点群的全部对称要素（点群及对称要素的概念见第二章）^[2]。

立方晶系晶体的物理性质往往具有很高的对称性，甚至具有球面表示的全对称性，但它至少有一种性质不是球对称的；换言之，晶体多少总有一定的各向异性。例如立方晶系晶体的电导率(electric conductivity)，相对介电常数(dielectric constant)，折