高等学校教学参考书

结晶学及矿物学

教学参考文集

（二）

成都地质学院矿物教研室　主编

地质出版社

高等学校教学参考书

结晶学及矿物学
教学参考文集(二)

成都地质学院矿物教研室　主编

地 质 出 版 社

高等学校教学参考书
结晶学及矿物学
教学参考文集（二）
成都地质学院矿物教研室　主编
*
责任编辑：赵俊磊
地质出版社出版
（北京和平里）
地质出版社印刷厂印刷
（北京海淀区学院路29号）
新华书店总店科技发行所发行
*
开本：787×1092 1/16　印张：10.625　字数：249,000
1991年2月北京第一版·1991年2月北京第一次印刷
印数：1—605册　　定价：2.80　元
ISBN 7-116-00786-5/P·670

前　言

由地质出版社教材编辑室组稿编辑，长春地质学院矿物教研室主编的《结晶学及矿物学教学参考文集》1983年5月出版以来，受到全国各地质院校的师生及科技人员欢迎。大家普遍认为该文集确实起到了在结晶学及矿物学方面拓宽知识面、加深对一些基础问题的理解、了解本学科当前发展动态、增加本学科与相关学科横向联系的作用。因此，教材室决定继续组稿，委托结晶学及矿物学课程指导委员会组织评审，由成都地质学院矿物教研室主编该文集的续集以满足各方面的要求。

本集共收入13篇文章，其中长春地质学院五篇，中国地质大学三篇，成都地质学院三篇，河北地质学院与南京大学各一篇。

对称是晶体的基本性质。目前在结晶学教学中多用直观方法讲解对称，很少使用矩阵运算等数学工具。“群论与晶体对称”就是把集合、群等数学概念和矩阵运算方法引入结晶学及矿物学课程的初步尝试。

同步辐射是20世纪70年代才发展起来的一门新技术。在我国虽然起步不久，但是在中国科学院高能物理研究所和中国科学技术大学等单位已初步具备了工作条件并已取得了可喜的成绩。在地学中它可以进行微区超微量成分及其价态的测定；它可以测定各种原子的配位状态；它可以快速测定高压高温反应中物质的结构。“同步辐射及其在矿物学中的应用”对此有初步介绍。

从“混合层粘土矿物的X射线衍射特征及其鉴定”至“云母的晶体结构和晶体化学”等八篇文章主要是结合某种或某些矿物的成分、结构特点，介绍其研究内容、研究方法和研究意义。其中有的对某种测试或研究方法及其原理介绍比较深入，有的则更多地强调其晶体化学信息在找矿、勘探中的意义。值得一提的是“矿物晶体形貌学研究的方法、成就与展望”一文把这一门古老的结晶学分支在最新科技推动下又获得了迅猛发展的情况作了个生动的介绍，激发青年地质工作者重新重视这一曾为结晶学及矿物学的发生和发展建立了功绩的基础分支。

“天然沸石的性质及应用”一文以沸石类矿物的成分结构特征为基础，介绍了沸石的分类、各种性能以及沸石在国民经济各方面的应用。关于应用的介绍虽然只是初步的，但给人以很大启发——理论应用于实际大有可为。

“胶体和胶体矿物”比较深入细致地介绍了矿物学中的这一重要概念，以及地质作用中因胶体分散体系的形成、凝结、陈化等等所产生的各种现象，其原理及研究意义。

“锰的氧化物与氢氧化物矿物”一文集中地介绍了这一部分矿物的成分结构特点，使学生可以开阔眼界。该文前部对锰的地球化学性质的介绍值得一读。研究矿物离不开成因，而矿物的形成、稳定、消亡以及组合都是在一定的地球化学条件下发生的。

限于篇幅，本文集未能选入更多的文章。对入选的13篇，主编也作了一些删节和改动。有部分改动曾通过信函征求过作者本人的意见，但大部分改动，特别是删节是主编作

的。此外，考虑到本文集在性质上有别于科学论文集，因此把参考文献改称补充读物，而且只保留了其中的少数。以上处理如有不当之处，责任在于主编。

戈定夷

1989.9

目　录

群论与晶体对称

长春地质学院

李 高 山

群论是数学中高等代数的一个分支，在量子力学和量子化学中是求解薛定锷方程必不可少的一个工具，所以群论在晶体场理论中，在分子轨道理论和能带理论中得到了极为广泛的应用，但在结晶矿物学中直至今日尚没有充分发挥其应有的作用。结晶学中的点群和空间群，是群论中的一种群，如果用群论这样一个数学工具和数学原理来讨论结晶学中的点群等问题，可以使结晶学中的部分问题，得到透彻而深入的说明和解释。本文重点讨论群论在结晶学中的应用，并以实例来证明论述结晶学中各项定律和规律，以丰富和加深对结晶学的理解。

一、群论的概念

群是按照某种规律，相互联系着的一组元素的集合。它既可以是无限的集合(例如1、2、3、4、……n)，也可以是有限的集合（如结晶学中的点群)。但这一集合G，必须满足下列四个条件者方可称为群。

群必须满足的条件是：

1．群中任意两个元素的乘积或任意一个元素的平方仍为群中的一个元素，群的这一规律叫群的封闭性。

可以用$B\in G$，$A\in G$表示A、B均为群G中的一个元素。若$AB=C$，则C也为群G中的一个元素，记为$C\in G$。若$A^2=D$或$B^2=F$，则D、F仍为群G中的一个元素，记为$D\in G$，$F\in G$。

但应注意，AB不一定等于BA，群论中的交换律不是普遍存在的。如果群中元素相乘是对易的，则这种群可称为阿贝尔（Abel）群。

2．群中必有一个单位元素。E或I表示群中每个元素都可与其对易，并使它们不变。即$AE=EA=A$，$BE=EB=B$，E称为单位元素或称恒等元素（相当于点群中的一次对称轴)。

3．群元素的乘法结合律存在，即A、B、C均为同一群中的元素，则$(AB)C=A(BC)$。

4．群中的每个元素，必有一个逆元素，它也是群中的元素。A的逆元素以A^{-1}表示，则$AA^{-1}=A^{-1}A=E$。

凡具备上述四种基本性质的一组元素的集合，都构成一个群。

二、结晶学中的点群和空间群

结晶学中的点群或空间群都符合群所具备的性质。以L^2PC对称型即C_{2h}群为例（在群论和量子化学中点群总是以圣弗利斯符号来表示，而不用国际符号），其中共有四个群元素分别为$L^1(E)L^2(C_2)P(\sigma_h)$和$C(i)$。群中任意二个元素的乘积，如$L^2\times P\rightarrow C$（可以读作$L^2$与$P$作用产生$C$）或$P\times C\rightarrow L^2$（必须垂直对称面），或$L^2\times C\rightarrow P$，即每二个对称要素作用均产生一个新元素，这一新元素也是群C_{2h}中的一个元素，C_{2h}中也具有一个恒等元素$L^1(E)$，群中每个元素与L^1相乘均不变：$L^1\times L^2\rightarrow L^2$, $L^1\times P\rightarrow P$；C_{2h}群中结合律也存在：$(L^1L^2)P=L^1(L^2P)=L^1L^2PC$；$C_{2h}$群中各元素都有其逆元素，$L^1$、$L^2$、$P$、$C$的逆元素即各自本身❶。综上所述，结晶学中的各个点群和空间群完全符合群的四个基本规律，所以结晶学中的点群和空间群均是群论中的群，这些群也一定服从群论的各项规律。

三、群的几个基本性质

1．群可分为有限群和无限群，结晶学中的点群和空间群均属有限群，即群中元素的数目是有限的。

2．群中各元素可以相乘，这里的乘是指群中的二个元素可以作用。$A\times B$在群论中称为B被A左乘，左乘时先右边元素作用，后左边元素作用，即先B后A。一般来说，群论中$AB\neq BA$，但在阿贝尔群中是$AB=BA$的。结晶学的点群和空间群大部分为$AB\neq BA$，不属于阿贝尔群。以C_{3v}群为例，用极射赤平投影来表示$AB\neq BA$。在图1—1中清楚地表明C_{3v}群中确是$AB\neq BA$。令$A=\sigma_{v1}$，$B=\sigma_{v2}$，$C=\sigma_{v3}$，$D=C_{31}$（逆时针方向右旋）$F=C_{32}$（顺时针方向左旋）。

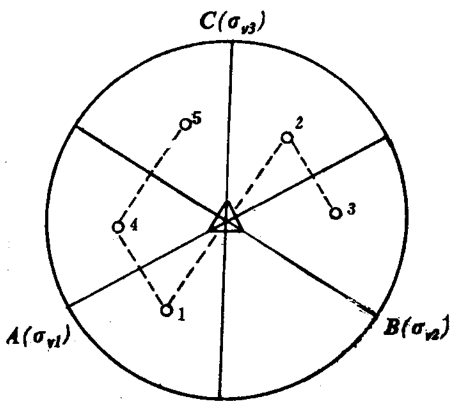

图 1—1　C_{3v}群赤平投影图

$A\times B$应是B作用后A再作用，图中1点先经B作用移至2点，再经A作用到3点。3点的位置相当C_{31}作用使1点移至3点，故$AB=D$；再看BA，即先A后B，这时1点经A作用先移至4，再经B作用，使4移至5点，即BA相乘使1点移至5点，相当于C_{32}的作用，故$BA=F$。所以$AB=D$、$BA=F$、$AB\neq BA$。

群元素相乘的这种性质在结晶学中是没被重视的，因为在点群中没有把三次对称轴分解为左旋的和右旋的两个元素，也没有专门讨论点群中的单一一个对称要素与群（点群）的关系。

---

❶ 点群和空间群中的对称要素对应于群元素，每个元素的逆向操作元素即其逆元素，如L^3包括两个元素，逆时针转120°记为C_{31}，顺时针转120°记为C_{32}，C_{31}与C_{32}互为逆元素，即$C_{31}^{-1}=C_{32}$或$C_{32}^{-1}=C_{31}$。对L^2来说，逆时针转180°和顺时针转180°结果一样，因此该元素的逆元素即其自身，即$C_2^{-1}=C_2$。P和C的操作没有正反向之分，因而每个元素的逆元素也是其本身。再如对L^4来说，C_{41}与C_{43}互为逆元素，而C_{42}集正逆元素为一身。

3．群中元素相乘服从群乘法的重排定理。点群中各对称要素的“相乘”，也服从重排定理。上述C_{3v}群中共有六个元素：$E(C_1)$、$A(\sigma_{v1})$、$B(\sigma_{v2})$、$C(\sigma_{v3})$、$D(C_{31})$和$F(C_{32})$。将这些元素相乘，列为乘法表（见表 1—1)。从表中可以看出，其依次相乘时乘得的结果是各元素的位置重新排定，在每一横行和每一竖列中，元素是不能重复出现的，这就是群的重排定理。

表 1—1　C_{3v}群元素乘法表

C_{3v}群	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

4．群中共轭元素的集合，构成群中的类。在结晶学点群中，也有一些对称要素是相互共轭的元素，它们也构成点群中的类。

若A、B、x均为群G中的元素，当$x^{-1}Ax=B$时，可称B是借助于x所获得的相似变换，也叫A与B是共轭的元素。如若A与B共轭，$A=x^{-1}Bx$，则B与A也共轭。若A既与B共轭又与C共轭时，则B与C也共轭即$B=x^{-1}Cx$。

凡是相互共轭元素的完整集合称为群的类，同一类内元素间均是共轭的。在结晶学点群和空间群中也可划分出类，以C_{3v}点群为例：群中共有元素（即对称操作）：E（一次对称轴）、σ_{v1}、σ_{v2}、σ_{v3}（三个直立对称面）C_{31}和C_{32}共六个，分为三个类，E自成一类，三个对称面属于一类，两个三次轴属于第三类。每类内的对称要素可借另一对称要素使其相互重复。但不同类之间的对称要素，不能借对称要素使其重复。

四、群论在结晶学中的应用

1．各种对称操作的矩阵表象

如果将对称要素放在直角坐标系中，可以将矢量$\boldsymbol{r}$的三维坐标x、y、z经对称操作后使矢量$\boldsymbol{r}$的坐标变换成x_1、y_1、z_1。矢量坐标的这种变换称为对称换算。这种对称换算的坐标可以用矩阵来表示。所以对称操作的矩阵表象就是用矩阵来描述对称操作前后的矢量$\boldsymbol{r}$的坐标变换，下面以矩阵形式来表示各种对称操作：

（1）$I(L^1)$　称为一次对称轴，在群论中也称为恒等操作或全同操作。经L^1操作后向量不产生位移，即操作后新坐标x_1、y_1、z_1与初始坐标相同，因之恒等操作可以用单位方阵表示：

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

这里单位方阵就是一次对称轴（L^1或I）的矩阵表象。

（2）对称面（σ）的矩阵表象　对称面的对称操作是反映，反映的结果是对称面两侧的坐标相同但符号相反，当对称面与直角坐标系中的三个主平面xy、xz和yz一致时，则一个向量在对称面的作用下，其反映结果是垂直于反映面的坐标改变符号，即

$$\sigma_{xy}\begin{pmatrix}x_1\\y_1\\\bar{z}_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

$$\sigma_{xz}\begin{pmatrix}x_1\\\bar{y}_1\\z_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

$$\sigma_{yz}\begin{pmatrix}\bar{x}_1\\y_1\\z_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

（3）对称轴的矩阵表象（C_n）　对称轴的操作是沿顺时针或逆时针转动θ角后重复。如确定Z轴为对称轴，则绕Z轴转动的任何操作，都不改变Z轴的坐标，其逆时针引起的坐标变换（一般为3_1、4_1、6_1等）为：

$$\begin{pmatrix}x_1\\y_1\\z_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta&-\sin\theta&0\\\sin\theta&\cos\theta&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

其顺时针（一般为3_2、4_3、6_5等）的坐标变换为：

$$\begin{pmatrix}x_1\\y_1\\z_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta&\sin\theta&0\\-\sin\theta&\cos\theta&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

从上述二矩阵表象看，其逆时针转动与顺时针转动的矩阵表象正好是转置矩阵（也称换位矩阵）关系，（即乙矩阵是甲矩阵的行变列，列变行）。

（4）旋转反映轴（S_n）的矩阵表象　旋转反映轴与对称轴（C_n）操作不同之处，只是多一个对Z轴的反映而已，通过反映可使Z轴坐标符号改变：

$$\begin{pmatrix}x_1\\y_1\\z_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta&-\sin\theta&0\\\sin\theta&\cos\theta&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

（5）对称心（i）操作的矩阵表象　对称心使之成为反向平行的反伸操作，变换后坐标为初始位置的坐标但均须改变符号，其表象为：

$$\begin{pmatrix}x_1\\y_1\\z_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

以C_{3v}群为例，C_{3v}点群共有六个对称要素，该点群全部对称操作的矩阵表象为：

$$E\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\quad C_{31}\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{bmatrix}\quad C_{32}\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{bmatrix}$$

$$\sigma_{va}\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\quad \sigma_{vb}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\quad \sigma_{vc}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

对称群的矩阵表象是群的一种数学表示，这种表示使对称操作的运算更为具体和形象化。每一对称操作均伴随有坐标换算，都可用三维方阵来表象，因而每一点群，均有与群元素相同数目的这种方阵，构成一个以方阵集合的群。方阵群中每二个方阵相乘之积，必然等于方阵集合中的一个方阵，相当于方阵群中的一个元素（即点群中的一个对称要素）。坐标x、y、z和向量r称为三维表象的基。

2．对称要素组合定律与乘法

在结晶学中对称要素组合定理的证明问题，过去都是用对称操作的概念或几何学方法来加以证明，但是总说不清为什么两个对称要素“相乘”就产生一个新的对称要素。这里可以用群论的群乘法原理便能透彻的说明对称要素的组合定理。

对称要素的组合就是点群中二个对称要素的“相乘”，二元素“相乘”，也就一定会出现一个新的对称要素，并且也是这一点群中的一个对称要素，正如表1—1群乘法表所列的结果，就是C_{3v}群各元素的乘法结果。

当然更形象而有说服力的证明还可用对称操作的矩阵表象，直接将相乘的对称要素的表象矩阵相乘，即可获得新的矩阵，这新的矩阵就是二对称要素相乘产生的对称要素的对称操作矩阵表象，例如C_{3v}群中的σ_{va}与σ_{vb}“相乘”：其矩阵表象为：

$$\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\times\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}=C_{32}$$

所以$\sigma_{va}\times\sigma_{vb}=C_{31}$。即在$C_{3v}$群中$\sigma_{va}$与$\sigma_{vb}$二对称面相乘产生一个$C_{32}$对称轴。

利用对称操作的矩阵表象也可证明在结晶学点群中也是$AB\neq BA$（A、B为群中二元素）。如上述$\sigma_{va}\times\sigma_{vb}=C_{32}$，现在用矩阵表象来看$\sigma_{vb}\times\sigma_{va}$是否也等于$C_{32}$：

$$\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}=C_{31}$$

结果$\sigma_{va}\times\sigma_{vb}=C_{32}$，$\sigma_{vb}\times\sigma_{va}=C_{31}$故$\sigma_{va}\times\sigma_{vb}\neq\sigma_{vb}\times\sigma_{va}$。从赤平投影图上也可清楚证明上述关系。

3．从结晶群的矩阵表象来看，对称轴顺时针旋转与逆时针旋转，如C_{31}与C_{32}，C_{41}与C_{43}，正好都是转置矩阵的关系，C_{31}，C_{41}矩阵的行变列，列变行就是C_{32}和C_{43}的矩阵：

$$C_{31}: \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_{32}: \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$C_{41}: \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_{43}: \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4．结晶点群中类的划分及其在结晶学中的用途和意义

群中共轭元素的集合构成群的类。在结晶点群中，若干个对称要素也可以构成类。以C_{4v}群为例，讨论该群中哪些元素构成一类。C_{4v}群共有对称要素：σ_{va}、σ_{vb}、σ_{vc}、σ_{vd}、C_1、C_{41}、C_{42}、C_{43}、并分别以A、B、C、D、E、F、H和G代表上述各元素。先按群乘法重排原理得该群的乘法表（见表1—2）：

表 1—2 C_{4v}群乘法表

C_{4v}	E	A	B	C	D	F	G	H
E	E	A	B	C	D	F	G	H
A	A	E	H	G	F	D	C	B
B	B	H	E	F	G	C	D	A
C	C	F	G	E	H	A	B	D
D	D	G	F	H	E	B	A	C
F	F	C	D	B	A	H	E	G
G	G	D	C	A	B	E	H	F
H	H	B	A	D	C	G	F	E

群中共轭元素的集合便构成群中的类。同一类中的元素均为共轭元素。通过一些运算即可判定元素间的共轭关系，如：$C^{-1}AC=C^{-1}G=CG=B$（$AC=G$和$CG=B$在表 2 中 可以查出。C代表对称面σ_{vc}，逆元素$C^{-1}=C$），即A借助C与B共轭。

$D^{-1}AD=D^{-1}F=DF=B$，即A亦可借助D与B共轭。

$A^{-1}CA=A^{-1}F=D$，故C借助A与D共轭。

$F^{-1}DF=F^{-1}B=GB=C(F^{-1}=C_{41}^{-1}=C_{43}=G)$，故$D$亦可借助$F$与$C$共轭。

$A^{-1}FA=A^{-1}C=G$，故F借助A与G共轭。

$B^{-1}GB=B^{-1}C=F$，故G亦可借助B与F共轭。

$A^{-1}HA=AB=H$，故H借助A与H共轭。

$F^{-1}HF=GG=H$，故H亦可借助F与H共轭。

综上通过群元素乘法重排定理证明：

A只与B共轭，是C_{4v}群中的一类。

C只与D共轭，是C_{4v}群中的一类。

F只与G共轭，是C_{4v}群中的一类。

H自身共轭，是C_{4v}群中只有一个元素构成的类。

E也是自身构成一类。

所以在C_{4v}群中共有八个元素，分为五类，A和B以及C和D虽然均是包含C_4轴的对称面，但分属于两个不同的类。从C_{4v}群极射赤平投影图（图1—2）上可看出，A、B二对称面可以通过C_4轴将二者联系起来，但不能将其与C、D二对称面联系在一起，反之C、D可以通过C_4轴联系在一起，而不能与A、B相联系。这种关系也可以称为A、B二对称面是处于"等效"位置上的对称面，它们与C、D二对称面是处在不"等效"位置上。

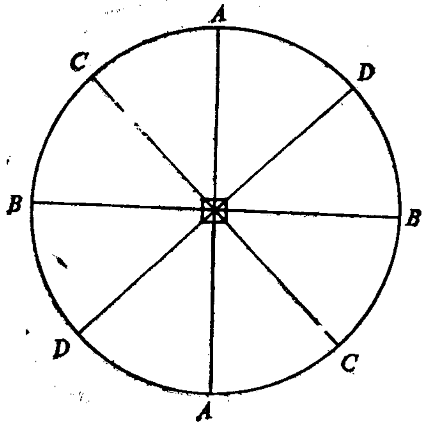

图 1—2　C_{4v}群赤平投影图

综合上述可见，凡是通过对称要素能联系在一起的元素，就属群中的同一类元素，一个点群是类的集合。

5．国际符号与群的分类

众所周知，结晶学中点群符号常以国际符号来表示，国际符号按晶系的不同，分别表示三个或两个不同结晶方向的主要对称要素。例如：

（1）等轴晶系　选a方向、$(a+b+c)$方向和$(a+b)$方向。这三个方向彼此不能借助其它对称要素的操作彼此重复，因此我们称等轴晶系的a方向，$(a+b+c)$方向和$(a+b)$方向为三个"不等效"方向。这三个方向正是等轴晶系点群中的三个主要类的方向。如在$m3m$或432点群中通过乘法表和元素的共轭关系能够证明，六个L^2为一类，三个L^4为一类，四个L^3为一类，即分别为三种"不等效"方向。

（2）四方晶系　选择c、a和$(a+b)$三个方向，这三个方向也是四方晶系的点群中的三个主要类的方向，也是三种"不等效"方向用点群中任何对称要素的操作也不能使这三个方向重复。

从上述二例可以获得一个普遍规律；国际符号所选择的三个方向均为点群中不同类元素的分布方向，不同类的元素（对称要素）处在"不等效"的位置上，群中任何对称要素也不能使不同类的元素重复。

群论这一数学工具，在量子矿物学、矿物物理学、结晶学及晶体化学中尚有更为广泛的用途。它可以帮助人们确定过渡型离子在不同晶体场条件下能级的分裂特征；确定跃迁方向和跃迁选律；解决矿物多色性的偏振吸收原理。在确定分子轨道能级图和解释矿物中化学键的复杂问题时，群论都可以提供最有效的计算模型，能极大限度的简化量子力学的繁杂计算过程。因而群论在结晶学和现代矿物学的发展中定将起日益重要的作用。所以群论对从事岩矿理论和矿物物理学的同志们是一个极为重要的、而又必须掌握的工具，并

应积极将群论引入结晶学和矿物学中去，以促进结晶学和矿物学的迅速发展。

补 充 读 物

1．李高山：1987，群论在结晶矿物学中的应用。世界地质，第2期，长春地质学院《世界地质》编辑部。

2．李高山、李英堂：1981，量子矿物学。长春地质学院内部印刷。

3．Marfunin, A. S.，李高山等译：1984，矿物物理学导论。地质出版社。

同步辐射及其在矿物学上的应用

成都地质学院

黄进初　章正刚

同步辐射是在同步加速器或粒子储存环中作加速运动的带电粒子所产生的一种光子射线，其光子能量范围包括紫外辐射和软X射线以及硬X射线。作为一种X射线源，它具有自然准直、强度大和波段范围宽等特点，这就使之大大优越于传统的X射线源。因而应用它可以做一些用传统的X射线源难以进行的、甚至不能进行的各种实验，并可以获得很高的分辨率。自20世纪70年代以来，随着其理论的不断完善，它在矿物学以及其它领域中的应用越来越广泛。目前应用得比较多的是通过它作光源所产生的矿物X射线吸收光谱，与常用的红外吸收光谱，光吸收谱❶以及穆斯堡尔谱等一样，它们分别从不同的方面去揭示矿物的化学组成和晶体结构等特点。

随着同步辐射在矿物学中应用的开展，相应地发展了不同的方法，如X射线吸收谱边带结构、X射线吸收边扩展区的精细结构、高温高压下X射线衍射、小角度散射、X射线显微分析以及X射线形貌术等。本文先介绍同步辐射一般性质、然后重点介绍前两种方法的原理及应用。

一、同步辐射的产生及其性质

人们从经典电磁理论早已知道，作加速运动的带电粒子会辐射光子。在同步加速器或加速器的储存环中作圆周运动的一个带电粒子，在其速度接近光速时，每运动一圈，因辐射光子引起的能量损失为

$$\Delta E=\frac{4\pi e^2}{3R}\left(\frac{E}{mc^2}\right)^4$$

式中，e、E和m分别为粒子的电荷、能量和质量；R为粒子运动的轨道半径；c为光速。具有这一能量（ΔE）的光子辐射即为同步辐射。现将同步辐射的主要性质简单介绍如下：

1．辐射光子的能量分布

目前世界上大约有16个高能粒子储存环在稳定地运转，并为用户提供同步辐射。它们的辐射光子束的能量分布见图2—1。对于每一个源的同步辐射都有一个特征能量$\varepsilon_c$$\left(\varepsilon_c=2.218\frac{E^3}{R}\right)$其定义是：在辐射束中，有一半光子的能量大于$\varepsilon_c$，而另一半则小于$\varepsilon_c$。图2—1

❶　光吸收谱也叫光学吸收谱是以可见光波段为主，包括近红外与紫外线波段在内的吸收谱的习惯称谓。它通常与晶体场效应、原子间电荷转移等有关。

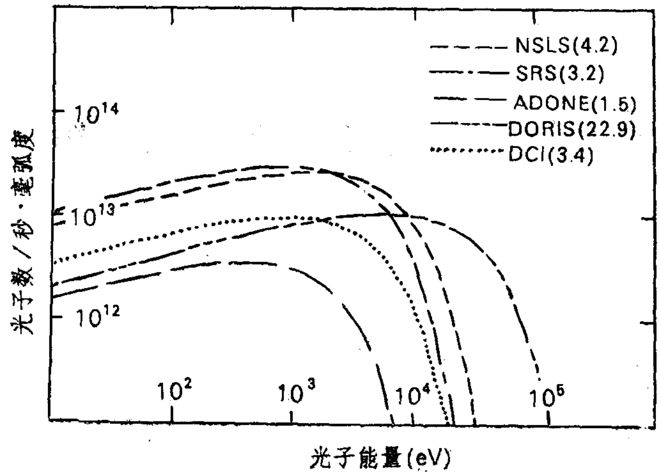

图 2—1　各种装置的射线强度随光子能量的变化

(据Calas, 1984)

右上角是装置的代号，括号内的数字是相应同步辐射的特征能量，单位是keV

的曲线表明，当光子能量$\varepsilon \ll \varepsilon_c$时，光强度（·光子数目）大致是按$(\varepsilon/\varepsilon_c)^{2/3}$分布的，而当$\varepsilon \gg \varepsilon_c$时，光子数目则按负指数律$\exp(-\varepsilon/\varepsilon_c)$随能量增加很快减少。同步辐射源大致可按其特征能量$\varepsilon_c$分为两类：①产生软X射线及紫外辐射（储存环半径$R=0.5—1.5$m，特征能量$\varepsilon_c=0.1—1$keV，相应的波长$\lambda_c=10—100$ Å）；②产生常规X射线（$R=4—40$m，$\varepsilon_c=1—10$keV，$\lambda_c=1—10$ Å）。

2．辐射的几何特性

一个低速运动的带电粒子的辐射是各个方向都有的，但是当粒子的速度接近光速时，其辐射就集中在以粒子运动方向为中心的小圆锥角内。在水平面内作圆周运动的粒子（图

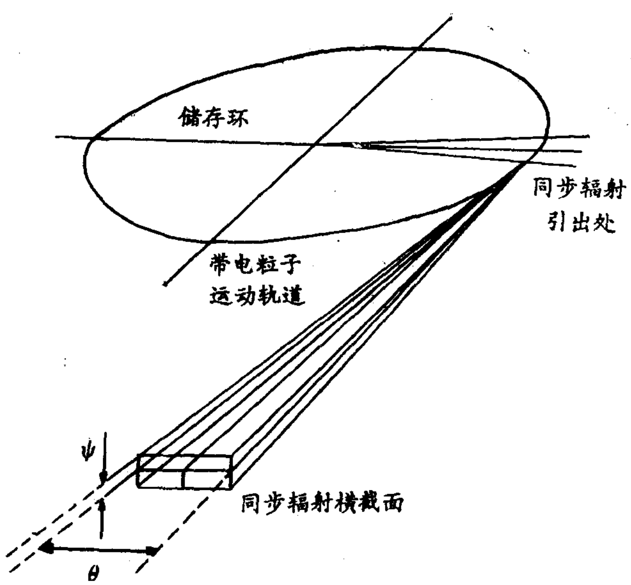

图 2—2　一个水平的带电粒子储存环及其同步辐射的几何特性

(据Calas等, 1984)

ψ—射线束在铅垂平面内的发散