

光学晶体纤维

陈继勤 丁祖昌 董绵豫 编著



浙江大学出版社

编者的话

光学晶体纤维具有大块晶体的品质又能与石英等光纤兼容,在通讯、传感等领域有广泛应用前景。光学晶体纤维的性能和生长规律虽然与大块晶体、石英光纤等有许多共同基础,而且当前晶体学、晶体光学、纤维光学等方面不乏专著论述,但是光学晶体纤维还有其独有点,因此促使作者编写本书,既注意到与晶体光纤有关的晶体学、光学和纤维光学基础的有机论述,又将作者多年研究的结果写入,旨在推进光学晶体纤维发展和应用。

本书分三部分。一,光学晶纤的应用基础,二,光学晶纤的生长,三,光学晶纤的品质检测和应用举例。第一部分由陈继勤编写,第二部分由丁祖昌、陈继勤合写,第三部分由董绵豫编写。童立民博士生参与晶纤应用的编写。全书由陈继勤主编。

由于编者学识有限,书中缺点和错误在所难免,诚恳地希望读者批评指正。

1993.9

目 录

概 述	(1)
-----	-----

第一部分 光学晶体纤维的应用基础

第一章 晶体结构与晶体能级	(3)
---------------	-----

§ 1-1 晶体结构的描述	(3)
§ 1-2 晶体的对称性	(6)
§ 1-3 点群基本知识	(9)
§ 1-4 旋转群	(14)
§ 1-5 氢与类氢原子能级	(18)
§ 1-6 氦原子等二价原子的能级	(20)
§ 1-7 复杂原子的能级与光谱项	(25)
§ 1-8 晶体能带	(29)
§ 1-9 晶体中离子能级和光谱	(33)
§ 1-10 晶体场理论	(37)

第二章 光与晶体物质相互作用	(42)
----------------	------

§ 2-1 光的电磁理论基础	(42)
§ 2-2 光的吸收和辐射	(49)
§ 2-3 激光形成的条件	(55)
§ 2-4 非线性光学	(62)

第三章 光在晶体和光纤中传播	(71)
----------------	------

§ 3-1 光的散射	(71)
§ 3-2 光的吸收	(72)
§ 3-3 光的色散	(74)
§ 3-4 光在光纤中传播	(75)

第二部分 晶体光纤的生长

第四章 从熔体生长晶体的方法及其物理基础	(86)
§ 4-1 熔体生长晶体的几种方法	(86)
§ 4-2 从熔体生长单晶的物理基础	(93)
§ 4-3 晶体中生长缺陷的形成	(110)

第三部分 晶体光纤品质研究与应用

第五章 晶体纤维的品质检验与应用举例	(121)
§ 5-1 生长缺陷的显微分析	(122)
§ 5-2 晶纤的损耗与吸收谱	(134)
§ 5-3 晶纤的荧光谱	(148)
§ 5-4 掺杂离子浓度和分析	(156)
§ 5-5 晶纤折射率的测定	(164)
§ 5-6 晶纤应用举例	(167)

概 述

早在 1922 年 Gomperz 用连续熔化生长技术获得了金属纤维。50 年代由于发现单晶体纤维(又称晶须)的晶体结构很完整和强度很高,研究曾十分活跃。当前很受重视的增强纤维的研究就是在此基础上发展起来的。60 年代后期,由于通讯光纤的出现,使得单晶光纤的研究逐渐兴起,因为单晶光纤具有块状单晶固有特性和能与玻璃光纤兼容的优点,可用于光纤通讯的各种配套设备中(如光纤放大器、光纤回转仪等)和制作微型激光器及特定的传感器等。

1970 年 Gasson 等采用激光加热,区域熔化,重新结晶技术(称为激光加热浮区法)生长出 Y_2O_3 、 $CaZrO_3$ 、 $MgAlO_4$ 和 Al_2O_3 单晶光纤,尽管成品质量还不够理想,最小直径为 5mm,但为目前应用最广泛的激光加热基座生长法打下了初步基础。1971 年 LaBelle 和 Mlavsky 采用边缘限定(EFG)法生长了直径 0.1~0.5mm,长 30cm 的 $\alpha-Al_2O_3$ 单晶光纤,1972 年 Haggerty 将激光加热浮区法发展为四条激光束加热的浮区法,生长了 $\alpha-Al_2O_3$ 、 Y_2O_3 、 TiC 、 TiB_2 单晶光纤。1975 年美国 Bell 实验室的 Burrus 和 Stone 采用的激光加热基座法(LHPG 法)是 Haggerty 使用方法的发展。他们用 LHPG 法生长了 $Nd:YAG$ 、 $Nd:Y_2O_3$ 和 $Cr:Al_2O_3$ 等单晶光纤,并用 $Nd:YAG$ 单晶光纤制成 1.064 μm 波长的微型激光器。美国的 Stanford 大学材料中心,在单晶光纤方面做了不少工作,不但生长了许多各种材料的单晶光纤,而且对 LHPG 法作了改进,采用环状分布的 CO_2 激光束加热,提高了单晶光纤的品质。

卤化物等红外光纤材料,熔点低而且在熔化温度附近发生显著蒸发和分解,故不宜采用 LHPG 法生长。因之,Bell 实验室的 Bridge 等人采用气压导模法生长 $AgBr$ 等单晶光纤。

日本国际电讯电话研究和发展实验室的 Mimura 采用改进的下拉法(MPD 法)生长 KCl、KBr、CsBr 等单晶光纤。苏联科学院的 Vosilev 等对用于红外波导的卤化物单晶光纤的研究也取得成果。

1985 年以后国内清华大学、浙江大学、吉林大学相继开展单晶光纤的研究工作。前二所大学主要研究用 LHPG 方法生长的氧化物单晶光纤,吉林大学主要研究卤化物红外光纤。

随着通讯光纤的发展,单晶光纤在制造和应用上都取得了较大进展。总的说来,单晶光纤的制备分为从熔体生长和从溶液生长两大类。熔体生长单晶光纤有许多方法,但就实质来说是导模法和基座法两种。溶液法一般是用盐类溶液。表 1 为单晶光纤主要生长方法。

表 1 单晶光纤主要生长法

生长方法			典型材料
熔体生长法	导模法	改进的 EFG 法	NaNO_2
		气压导模法	AgBr 等
		热挤压法	TlBr-TlI 等
		改进的下拉(MP)法	KCl、KBr、CsBr 等
	激光加热基座(LHPG)法		Al_2O_3 、Nd:YAG、LiNbO ₃ 等
溶液生长法	磷酸盐溶液中结晶		$\text{NiP}_2\text{O}_{11}$ 、 Nb_2O_5 、 La_2O_3 、 P_2O_5 等

就应用范围可把单晶光纤归纳为:

1. 传输、传感器件。如用于光传输,高密度能量传输,温度计等。所用材料有 Al_2O_3 、 ZrO_2 及各种卤化物。
2. 激活器件。如激光放大器、激光振荡器、微型激光器、单晶 Q 开关等。所用材料有 Nd:YAG、Ti: Al_2O_3 、Nd: Y_2O_3 、Er:YAG 等。
3. 非线性光学器件。如调制器、激光混频器、谐波发生器、参量振荡器、电光调制器等,所用材料主要是 LiNbO₃。

第一部分 光学晶体纤维的应用基础

晶纤具有相应晶体的光学性能。晶纤的应用基础就在于对晶体光学性能的了解。本部分讨论晶体结构、光学性能等基础知识。

第一章 晶体结构与晶体能级

§ 1-1 晶体结构的描述

晶体是结构上长程有序的固体,其排列规律可用点阵构造描述。晶体结构可以描述为:

晶体结构 = 点阵 + 构造基元

构造基元可以是单个原子,(例如纯金属晶体)可以是两种不同的离子,还可以是几百、几千个原子组成的分子团。

点阵是把构造基元当作几何点,(称为阵点)经周期重复在空间无限延伸而构成晶体结构的单元。取任何单元中一个几何点作为原点,由原点出发向邻近阵点作出三个不相交矢量 a 、 b 和 c 。(为方便起见有时以 a_1 、 a_2 和 a_3 标记)。其长度 a 、 b 和 c 是重复周期。(见图1)通常把它们选为坐标轴 X 、 Y 、 Z 方向。 α 、 β 和 γ 分别是 Y 和 Z 轴, Z 和 X 轴以及 X 和 Y 轴的夹角。这样晶体结构就能得到描述。

1. 阵点坐标。从阵点 A 作平行于坐标面 (XY) 、 (YZ) 和 (ZX) 的平面,这些平面截 X 、 Y 、 Z 轴的距离分别为 ma 、 nb 和 pc ,则以 $A(m, n, p)$ 表示阵点 A 的坐标。

2. 阵点直线。若 OA 连线以向径 R_{mn} 表示,则

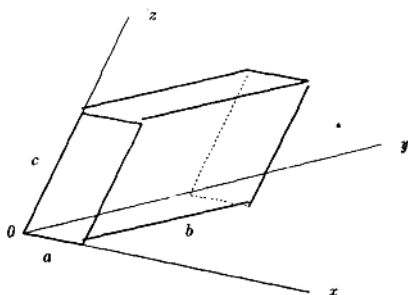


图1-1 晶体结构单元

$$R_{mnp} = ma + nb + pc \quad (1-1)$$

而 A 和 O 间的距离

$$\begin{aligned} |OA|^2 &= |R_{mnp}|^2 \\ &= m^2a^2 + n^2b^2 + p^2c^2 + 2mnab\cos\gamma + 2npbc\cos\alpha + 2pmca\cos\beta \end{aligned} \quad (1-2)$$

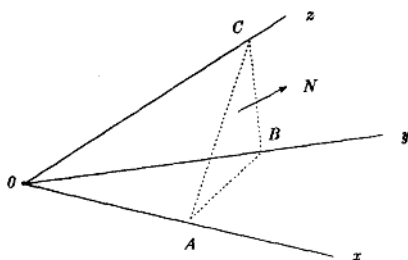


图1-2 阵点平面

3. 阵点平面。整个点阵由许多彼此平行的面族组成,描述面族需要二个参量:法线方向 n 和面间的距离 d 。设面族中一个平面 ABC (见图 1-2) 在 X, Y, Z 轴上的截距为 ma, nb 和 pc 。引入表征平面族的密勒指数 h, k, l 。它们是没有公因子的整数,与 m, n 和 p 的关系为:

向量 $R_{m'n'p'}$ 为:

$$R_{m'n'p'} = m'a_1 + n'a_2 + p'a_3$$

因为 $R_{m'n'p'}$ 与 R_{hkl} 垂直, 并注意到 $a_i \cdot b_j = \delta_{ij}$ 得出:

$$m'b + n'k + p'l = 0 \quad (1-5)$$

$(hkl)_1$ 面在 X, Y, Z 轴的截距为 $\frac{a_1}{h}, \frac{a_2}{k}, \frac{a_3}{l}$ 。若将 $(hkl)_1$ 面沿 X 轴向左平移 $\frac{a_1}{h}$, 则该面又通过原点 O 。所以 OA' 的向径 R 为:

$$R = (m' + \frac{1}{h})a_1 + n'a_2 + p'a_3$$

OA' 在 n_{hkl} 方向的投影为 d_{hkl} 。因此

$$\begin{aligned} \left[(m' + \frac{1}{h})a_1 + n'a_2 + p'a_3 \right] \frac{(hb_1 + kb_2 + lb_3)}{|n_{hkl}|} &= d_{hkl} \\ (m'h + n'k + p'l + 1) &= |n_{hkl}| \cdot d_{hkl} \\ \therefore d_{hkl} &= 1/|n_{hkl}| \end{aligned} \quad (1-6)$$

§ 1-2 晶体的对称性

晶体经过一定操作到达新的位置, 但新状态与转移前的原来状态没有差别, 这种操作称为对称操作。对称操作可用垂直于阵点平面的轴描述, 而且可以证明这种对称轴一定是阵点线。

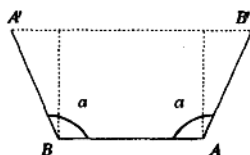


图 1-4

设晶体中通过 A 和 B 阵点有两根彼此平行的旋转轴, B 点绕 A 转到 B' , 转角为 α , 同样 A 点绕 B 转到 A' , 转动角也是 α 。(见图 1-4)。从图知 $B'A' = BA(1 + 2\cos\alpha)$, 因为要求的 A' 和 B' 也是阵点, 故 $B'A'$ 应是 BA 的倍数。所以 $\cos\alpha$ 只能取 0、 $\pm \frac{1}{2}$ 和 ± 1 , 即 $\alpha = 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 180^\circ$ 和 360° 。令 $n = \frac{360^\circ}{\alpha}$, n 就表

征旋转轴性质。例如 $n = 3$, 则晶体只要旋转 $\frac{1}{3}$ 圈 ($\alpha = 120^\circ$) 就回到原来的状态, 简称 3 重对称。表示晶体对称性的要素除了以 6、4、3、2、1 表征的旋转对称轴外, 还有 $\bar{1}$ 、 $\bar{2}$ 、 $\bar{3}$ 、 $\bar{4}$ 和 $\bar{6}$ 表示的旋轴反映轴。 $\bar{n}$ 表示 n 重旋转和反映 $\bar{1}$ 二种对称要素叠加。 $\bar{1}$ 实际上是对称中心, 它将 XYZ 点反映为 $\bar{X}\bar{Y}\bar{Z}$ 。 $\bar{2}$ 实际上是与二重旋转轴垂直的对称面。 $\bar{2} = 2 + \bar{1} = m$, (m 代表对称面), 即将 $XYZ \xrightarrow{2} \bar{X}\bar{Y}\bar{Z} \xrightarrow{\bar{1}} XYZ$, 上述变化等价于 $XYZ \xrightarrow{\bar{2}} \bar{X}\bar{Y}\bar{Z}$ 。 $\bar{3} = 3 + \bar{1}$, 所以实际上 $\bar{n} = n + \bar{1}$ 。

1、2、3、4、6 和 $\bar{1}$ 、 $\bar{2}$ 、 $\bar{3}$ 、 $\bar{4}$ 、 $\bar{6}$ 这 10 种宏观对称要素组合形成 32 种点群, 其中 11 种有对称中心。

32 种点群用两种符号描述: 熊夫利 (Schöflies) 符号和国际符号。

1. 熊夫利符号。C (Circulus) 表示只含旋转对称轴的晶类, 用下标数字表示轴次, 如 C_1 、 C_2 等

D (Diedergruppe) 表示垂直于主旋转轴的 2 次轴, 用下标数字表示轴次, 如 D_2 、 D_4 ... 等

i (Inversion) 表示对称中心, 当对称中心单独出现时以 C_i 表示, 有时 i 附加在旋转轴之后则表示旋转反映轴如 C_{2i} 表示 3 次旋转反映轴。但 C_{2i} 和 C_{4i} 分别写成 C_i 和 S_4 。(有的文献则以 S_n 表示 n 次旋转反映轴)。当一 对称面单独存在则以 C_s 表示, 否则将以字母 h 、 v 或 d 列在旋轴晶类或复轴晶类符号之后, 表示对称面处于水平、垂直或对角线的位置, 如 C_{2h} 、 C_{4v} 或 D_{3d} 等。

在立方晶系中, T (Tetraeder) 表示在四面体中存在的 4 个 3 次轴和 3 个 2 次轴组合。O (Oktaeder) 表示在八面体中存在的 4 个 3 次轴和 3 个 4 次轴的组。T 和 O 还可附加 d 、 h 以表示对称面, 如 T_d 、 O_h 等。

2. 国际符号。用数字 (表示对称轴)、字母 m (表示对称面) 以及数字和字母构成的分数组成国际符号。根据晶体所属晶系不同, 它分别表示晶系某三个方向的 (三方晶系为二个, 单斜及三斜晶系为一个) 对称要素。数字表示该方向旋转轴、字母 m 表示垂直该方向的对称面, 分数 (例如 $\frac{3}{m}$) 表示该方向上旋转轴 (3 次轴) 和垂直该方向的对

称面(m)同时存在。

各晶系的三个方向规定如下：

单斜晶系：只表示一个方向— Y (即 a_2) 方向

正交晶系：依次表示 $X(a_1)$ 、 $Y(a_2)$ 和 $Z(a_3)$ 三个相互垂直的方向。如 $mm2$ 意指 X 和 Y 方向均有垂直该轴的对称面，而 Z 方向有一个 2 次轴。

三方晶系：表示二个方向，主轴(Z 轴)方向和等同对称轴方向(指垂直主轴，并受主对称轴的对称性制约而等同的那些方向)，以 X 轴表示。例如 32 ，它表示主轴 Z 有一个 3 次轴，与 Z 轴垂直的 X 方向有一 2 次轴。实际上有三个等同的 2 次轴， X 方向只是其中一个。

四方及六方晶系：有三个方向，其顺序为主轴(Z 轴)，等同对称轴和两相邻等同对称轴夹角平分线。如 $42m$ 表示 Z 方向有一 4 次旋转反映轴， X 和 Y (等同对称轴)方向各有一 2 次轴。在 X 和 Y 方向的夹角平分线方向有一与该方向垂直的对称面 m 。

立方晶系：有三个方向，其顺序为：(1) 相互垂直而等同的 4(或 2) 次轴，记为 X 、 Y 、 Z 轴，即立方体各面的法线方向 $\langle 100 \rangle$ 方向，(2) 4 个 3 次轴方向，即立方体的四个对角线方向 $\langle 111 \rangle$ 方向，(3) 立方体六个面的对角线方向 $\langle 110 \rangle$ 方向。如立方晶系的 $\frac{4}{m}\frac{3}{m}\frac{2}{m}$ (简写 $m3m$) 国际符号意指 $\langle 100 \rangle$ 方向是 4 次轴和垂直该轴的对称面 m 组合， $\langle 111 \rangle$ 方向为 3 次旋转反映轴，而 $\langle 110 \rangle$ 方向是 2 次轴和对称面组合。

在上述两种符号中，常用的是国际符号。

根据各晶类的对称特点，32 种晶类分为七大晶系：三斜、单斜、正交、四方、三方、六方和立方晶系。又根据晶体是否具有高次轴(3 次轴以上)和高次轴的数目分为：光学均质体，单轴晶体和双轴晶体。表 1-1 列出各晶族、晶系的划分及对称特点。

表 1-1

晶族	晶系	对称特点(对称要素)		所属晶类
低级晶系(双轴晶)	三斜	无高次轴	只有 1 次轴(旋转或旋转反映轴)	$C_1-1, C_1-\bar{1}$
	单斜		只有一个 2 次轴(旋转或旋转反映轴)	$C_2-2, C_2-m, C_{2h}-2/m$
	正交(斜方)		有三个互相垂直的 2 次轴(旋转或旋转反映轴)	$D_2-222, C_{2v}-mm2$ $D_{2h}-mmm$
中级晶系(单轴晶)	四方	只有一个高次轴	唯一高次轴为 4 次轴	$C_4-4, S_4-\bar{4}, C_{4h}-4/m$ $D_4-222, C_{4v}-4mm$ $D_{2d}-\bar{4} 2m, D_{4h}-4/mmm$
	三方		唯一高次轴为 3 次轴	$C_3-3, C_3-\bar{3}$ $D_3-32, C_{3v}-3m$ $D_{3d}-\bar{3} m$
	六方		唯一高次轴为 6 次轴	$C_6-6, C_3-\bar{3}, C_{6h}-6/m$ $D_6-622, C_{6v}-6mm$ $D_{3h}-\bar{6} m2, D_{6h}-6/mmm$
高级晶系(光学均质晶)	立方	多于一个高次轴	在立方体体对角线方向有 4 个 3 次轴	$T-23, T_h-m3$ $O-432, T_d-\bar{4} 3m$ O_h-m3m

§ 1-3 点群基本知识

晶体的 32 种点群就是符合群定义的对称元素的集合。描述对称性的对称元素有 C_n (n 次旋转轴), $\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$ (σ 指对称面 m , 而 v, h 和 d 指水平、垂直和对角线), S_n (n 次旋转反映轴), i (对称中心) 和 E (恒等元

素)。例如 C_2 点群, 内含 E 和 C_2 二个对称元素。 D_{2d} 点群, 则含 E 、 $2C_2$ 、 $3C_2$ 、 σ_h 、 $2S_4$ 和 $3\sigma_v$ 等十二个对称元素。若元素 E 、 A 、 B 、 C 、 D 、 F ... 等组成点群, 则一定满足下列四个条件。

1. 有恒等元素 E , E 与群内任一元素例如 A 相乘有下列特性; $EA = AE = A$

2. 群内任意二个元素相乘恒等于群内另一特定元素。即 $AB = C$

3. 群中每一元素都有一个对应的逆元素, 设 A 为群内任一元素, 它的逆元素为 A^{-1} , 并有

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E$$

4. 群中元素结合律成立, 即

$$A(BC) = (AB)C$$

表 1-2 为 32 个点群的对称元素。任一点群中的对称元素集合都符合群的定义。

表 1-2 32 个点群

编号	点群名称	对称元素
1	C_1	E
2	C_2	E, i
3	$C_3, (C_{12})$	E, σ_h
4	C_4	E, C_2
5	C_{2v}	E, C_2, i, σ_h
6	C_{3v}	$E, C_2, \sigma_v(XZ), \sigma_v(YZ)$
7	D_2	$E, C_2(Z), C_2(Y), C_2(X)$
8	D_{2d}	$E, C_2(Z), C_2(Y), C_2(X), i, \sigma(XY), \sigma(XZ), \sigma(YZ)$
9	C_4	E, C_4, C_2, C_4^3
10	S_4	E, S_4, C_2, S_4^3
11	C_{4v}	$E, C_4, C_2, C_4^3, i, S_4^3, \sigma_h, S_4$
12	C_{6h}	$E, 2C_6, C_3, 2\sigma_v, 2\sigma_h$

13	D_{2d}	$E \ 2S_4 \ C_2 \ 2C'_2 \ 2\sigma_d$
14	D_4	$E \ 2C_4 \ C_2(\equiv C_4^2) \ 2C'_2 \ 2C''_2$
15	D_{4h}	$E \ 2C_4 \ C_2 \ 2C'_2 \ 2C''_2 \ i \ 2S_4 \ 2\sigma_v \ 2\sigma_d \ \sigma_h$
16	C_4	$E \ C_4 \ C_4^3$
17	S_4	$E \ C_2 \ C_4^2 \ i \ S_4^3 \ S_4$
18	C_{2v}	$E \ 2C_2 \ 3\sigma_v$
19	D_3	$E \ 2C_3 \ 3C_2$
20	D_{3h}	$E \ 2C_3 \ 3C_2 \ i \ 2S_6 \ 3\sigma_v$
21	C_{3v}	$E \ C_3 \ C_3^2 \ \sigma_v \ S_6 \ S_6^5$
22	C_3	$E \ C_3 \ C_3^2 \ C_3^4 \ C_3^5 \ C_3^6$
23	C_{3h}	$E \ C_3 \ C_3^2 \ C_2 \ C_3^4 \ C_3^5 \ i \ S_6 \ S_6^5 \ \sigma_h \ S_6^3 \ S_6^4$
24	D_{2d}	$E \ 2C_2 \ 2C_2' \ \sigma_d \ 2S_6 \ 3\sigma_d$
25	C_{2h}	$E \ 2C_2 \ 2C_2' \ C_2 \ 3\sigma_v \ 3\sigma_d$
26	D_2	$E \ 2C_2 \ 2C_2' \ C_2 \ 3C'_2 \ 3C''_2$
27	D_{2h}	$E \ 2C_2 \ 2C_2' \ C_2 \ 3C'_2 \ 3C''_2 \ i \ 2S_2 \ 2S_6 \ \sigma_v \ 3\sigma_v \ 3\sigma_d$
28	T	$E \ 4C_3 \ 4C_3^2 \ 3C_2$
29	T_d	$E \ 4C_3 \ 4C_3^2 \ 3C_2 \ i \ 4S_6 \ 4S_6^5 \ 3\sigma_d$
30	T_h	$E \ 8C_3 \ 3C_2 \ 6S_6 \ 6\sigma_d$
31	O	$E \ 6C_4 \ 3C_2(=C_4^2) \ 8C_3$
32	O_h	$E \ 8C_3 \ 6C_2 \ 6C_4 \ 3C_2(=C_4^2) \ i \ 6S_4 \ 8S_6 \ 3\sigma_v \ 6\sigma_d$

以 C_{2v} 群为例, 该群由 $E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'$ 对称元素组成。因含元素 E , 符合点群定义(1), 从 $\sigma_v', \sigma_v = \sigma_v \sigma_v' = C_2, C_2 \sigma_v = \sigma_v C_2 = \sigma_v'$, 等知符合点群定义(2), 又 $C_2 C_2 = E, \sigma_v \sigma_v = E, \sigma_v' \sigma_v' = E$ 等表明每一对称元素都存在逆元素, 符合点群定义(3), 另外从 $C_2(\sigma_v \sigma_v') = C_2 C_2 = E, (C_2 \sigma_v) \sigma_v' = \sigma_v' \sigma_v' = E$, 得出, $C_2(\sigma_v \sigma_v') = (C_2 \sigma_v) \sigma_v'$, 符合点群定义

(4)。根据上述关系,可以组成点群的乘法表(1-3)其他的点群也可列出类似的乘法表,

表 1-3 C_{2v} 群的乘法表

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ'_v
E	E	C_2	σ_v	σ'_v
C_2	C_2	E	σ'_v	σ_v
σ_v	σ_v	σ'_v	E	C_2
σ'_v	σ'_v	σ_v	C_2	E

考察对称操作得知, $\sigma_v \sigma_v = E$, 表明 σ_v 与其自身共逆, σ_v^{-1} 就是 σ_v 本身。称 $\sigma_v \sigma_v^{-1}$ 变换为相似变换, 可以证明:

$$\sigma_v \sigma_v \sigma_v^{-1} = \sigma'_v$$

称 σ_v 和 σ'_v 互相共轭。在群论中把所有相互共轭的元素归为类。因此类就是群中相互共轭的元素的一个完整集合。 D_{3h} 群共有 16 个对称元素: $E, 2C_6, C_2, 2C'_2, 2C''_2, 2\sigma_v, 2\sigma_d, 2S_6$ 和 i 。可以归为十类。即 ① E 自成一类, ② C_6 和 C_3 成一类, ③ C_2 自成一类, ④ 二个 C'_2 属一类, ⑤ 二个 C''_2 属一类, ⑥ i 自成一类, ⑦ S_6 和 S_6^5 成一类, ⑧ σ_v 和 σ'_v 属一类, ⑨ σ_d 和 σ'_d 属一类, ⑩ σ_h 自成一类。

子群是指原始群中一个较小的群, 例如 $E, C_2, \sigma_v, \sigma'_v$ 组成群 C_{2v} , 而 E, C_2 组成 C_2 群。 C_2 群是 C_{2v} 群的子群。

对称操作可用矩阵表示, 因此点群可以用一组对应群操作的矩阵表示。例如 D_3 点群有 6 个对称元素: $E, C_3, C_3^2, C_2, C_2', C_2''$ 。它可以归为三类; 即 $E, 3C_2 (C_2, C_2', C_2'')$, $2C_3 (C_3, C_3^2)$ 。以字母 E, A, B, C, D, F 表示对称元素 $E, C_2, C'_2, C''_2, C_3, C_3^2$, 则相应的矩阵 $\Gamma^{(3)}(R_i) (R_i = E, A, B, \dots)$ 为:

$$\Gamma^{(3)}(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Gamma^{(3)}(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma^{(3)}(B) &= \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \sqrt{3} \\ \frac{1}{2} & \sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \\
\Gamma^{(3)}(C) &= \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \sqrt{3} \\ -\frac{1}{2} & \sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} & \Gamma^{(3)}(D) \\
&= \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \sqrt{3} \\ -\frac{1}{2} & \sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} & \Gamma^{(3)}(F) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \sqrt{3} \\ \frac{1}{2} & \sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

矩阵对角元素的和称为矩阵的迹,也称为矩阵的特征标,以 $X(R)$ 表示。

矩阵表示分为两类;可约表示和不可约表示。可约表示可以分解为不可约表示的线性组合。设 Γ 为可约表示, $\Gamma^{(\alpha)}$ 为不可约表示,则

$$\Gamma = \sum \alpha_i \Gamma^{(\alpha)} \quad (1-7)$$

同时特征标也可以线性组合,即

$$X(R) = \sum \alpha_i X^{(\alpha)}(R) \quad (1-8)$$

其中 $X(R)$ 和 $X^{(\alpha)}(R)$ 分别是可约表示 Γ 和不可约表示 $\Gamma^{(\alpha)}$ 的特征标, α_i 是系数。

如果 $\Gamma^{(\alpha)}(R)$ 的维数是 l , h 是群的阶数(有限群所包含元素的个数就是它的阶数),则有:

$$\sum l i^2 = h$$

例如 D_3 群,从表(1-2)查知它含 $E, 2C_3, 3C_2$ 等 6 个对称元素,即 $h=6$ 。这 6 个元素分为三类,对应于群的操作,有三个不等价不可约表示 $\Gamma^{(1)}(R)$ 、 $\Gamma^{(2)}(R)$ 和 $\Gamma^{(3)}(R)$,相应的 l_1, l_2, l_3 分别为 1, 1 和 2 所以: $l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 1^2 + 1^2 + 2^2 = 6$

可以证明,可约表示与不可约表示之间存在大正交关系:

$$\alpha_j = \frac{1}{h} \sum X^{(j)}(R) \cdot X(R) \quad (1-9)$$