金石琦 编著

晶体光学

科学出版社

晶体光学

金石琦 编著

科学出版社

1 9 9 5

（京）新登字 092 号

内 容 简 介

本书由浅入深、较系统全面地论述了晶体光学的基础理论及其应用.

全书共分七章.第一、二章论述晶体的基本知识及张量理论，为晶体光学奠定了基础；第三章运用张量理论，严格证明了光在各向异性介质中传播的一般规律；第四、五章分别讨论了光在单轴晶体和双轴晶体中的特殊传播规律；第六章论述了偏振光在晶体内的传播规律及实验装置；第七章介绍了晶体光学的重要物理效应及其应用.

本书可供与光学相关专业的大学高年级学生、研究生、教师以及科研人员参考.

晶 体 光 学

金石琦 编著

责任编辑 巴建芬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1995 年 10 月第 一 版 开本：787×1092 1/32

1995 年 10 月第一次印刷 印张：7 5/8

印数：1—1 150 字数：166 000

ISBN 7-03-004380-4/O·757

定价：14.00 元

序

随着科学技术的飞速发展，许多高新技术领域广泛应用了晶体的多重属性，尤其在光电子技术中，晶体的应用又开拓出一代全新的光电子产品．晶体光学作为近代光学的一个重要分支，越来越显示出它的重要性和广阔的应用前景．

由于在晶体中原子和分子作有规则的排列，晶体表现出若干显著的特性．与在其他介质中传播相比，光在晶体中有特殊的传播规律．光是一种电磁波，而光学晶体可以看作为电介质，因此，晶体光学可以用于研究电磁波与介质之间的相互作用问题．

本书对晶体光学的理论加以严格的论证，并对理论推导出的结论用直观的几何图形加以描述，还列举了一些物理实验方法和现象．并为没有学过固体理论基础的读者补充了必要的基础知识和张量理论．希望本书对于相关专业人员全面系统地掌握晶体光学知识具有一定的参考价值．

本书共分七章．第一章介绍了晶体的基本知识，第二章介绍了张量的基本理论，奠定了晶体光学的基础．第三章研究光在各向异性介质中的传播，运用张量理论，严格地从理论上论证了介电椭球的物理模型及双折射的规律．第四章和第五章分别讨论单轴晶体和双轴晶体的光学性质．第六章介绍偏振光．晶体光学中的其他效应和应用写在第七章中．

华中理工大学的叶嘉雄教授和阮玉教授给本书提出过许多宝贵意见，在此表示感谢．另外，在本书的出版过程中，得

到华中师范大学以及绥芬市口岸物资交易中心的曲永秀和赵桂兰同志的大力支持，特此表示衷心的感谢。

由于作者水平有限，错误与不妥之处在所难免，敬请读者批评指正。

金石琦

1992 年 11 月

目　　录

第一章　晶体结构的基本知识

晶体是由原子(或离子、分子等)按一定的规律周期排列而成的．一个理想晶体是由全同的结构单元在空间无限地周期性地重复而构成的．本章首先从晶体结构的周期性出发，阐述完整晶体中离子、原子或分子等的排列规律．然后，扼要介绍晶体的对称性以及晶系的特征．

§1.1　微粒的周期性排列

晶体中的离子、原子或分子等(统称为微粒)的排列是有规律的，它们按照一定的方式不断地作周期性重复，这种性质称为**晶体结构的周期性**，这是晶体的基本特征．

晶体中微粒重心的周期性排列所构成的框架，称为**晶格**．微粒重心的位置，称为晶格的**格点**(或称**结点**)，这些格点的总体，称为**点阵**，所有晶体的结构都可用点阵来描述．在点阵的每个格点上都附有一群微粒，这样一个微粒群称为**基元**．

理想晶体是由排列在三个基本平移矢量 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$ 所确定的一个点阵上的微粒构成的，因此，当我们从任意一个格点 $\boldsymbol{r}$ 去观察微粒排列时，与从另外一个格点 $\boldsymbol{r}'$

$$\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}+n_1\boldsymbol{a}+n_2\boldsymbol{b}+n_3\boldsymbol{c} \tag{1.1.1}$$

去观察时所看到的微粒排列在各方面都是一样的(式中 n_1，n_2，n_3 是任意的整数)．令 n_1，n_2，n_3 取所有整数值，则由方程(1.1.1)所确定的一族点 $\boldsymbol{r}'$ 就是上面提到的点阵．

沿空间三个不同方向的基本平移矢量 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ 各按一定的距离周期性地平移，构成整个晶体的结构．每一平移的距离，称为**周期**．在一定的方向上有着一定的周期；不同方向上的周期不一定相同．

三个基本平移矢量 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ 代表重复单元的三个棱边之长与取向．这样的重复单元称为**晶胞**．晶胞和平移矢量可以有各种不同的选取方法，其结果都可以给出完全一样的晶格．一般我们常常选取体积最小的晶胞，称为**原胞**(或**初级晶胞**)．它的格点只在顶角上，内部和面上都不包含有其他格点．很清楚，每一个格点均为 8 个原胞所共有，因此它对一个原胞的贡献只有 1/8．而每个原胞有 8 个顶角，故每个原胞平均只含有一个格点(如图 1.1 所示)．

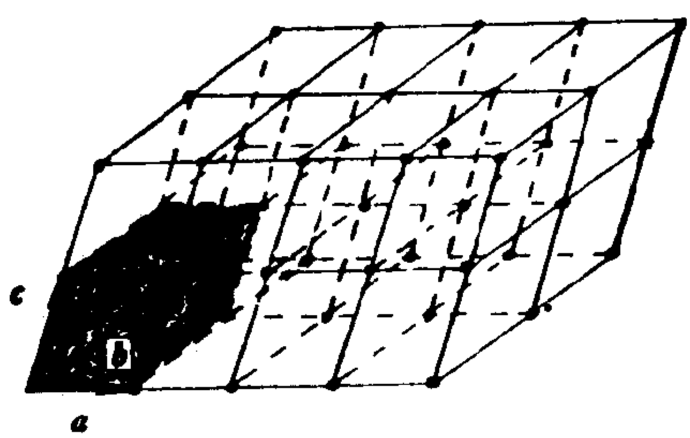


图 1.1　晶格
阴影包围的体积是三维空间点阵的原胞

在每个格点上都安置着一个由一个或多个微粒构成的基元，每个基元的组成、位形和取向都是全同的．每个格点上附加一个基元，就构成了晶体结构．如图 1.2 所示，将基元 (b) 安置到点阵(a)的每个格点上，便得到晶体结构(c)．在图 1.1 和图 1.2(a) 中，点阵用圆点表示；图 1.2(c) 中圆点没有画出．基元中的粒子数目，可以少到只有一个原子(诸如许多金属和

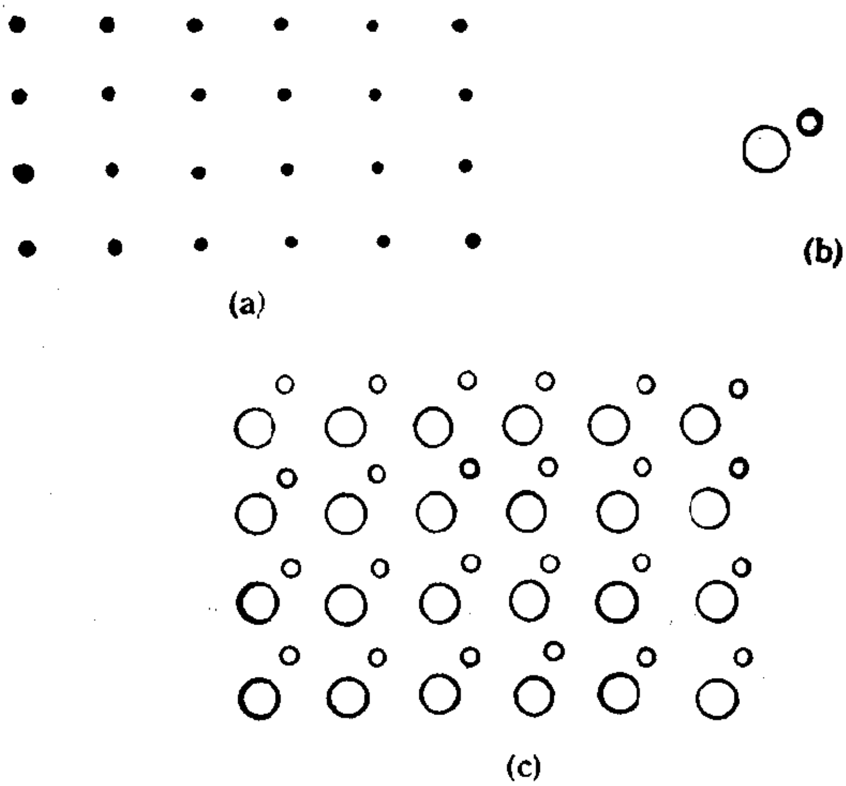


图 1.2　晶体结构的形成

（a）空间点阵　（b）基元(含有两个不同的离子)

（c）晶体结构

惰性气体晶体)，也可以有很多(例如有些晶体的基元中，原子数目超过 1000 个)．基元中第 i 个原子的中心位置相对于一个格点可用下式表示：

$$\boldsymbol{r}_i = x_i\boldsymbol{a} + y_i\boldsymbol{b} + z_i\boldsymbol{c} \tag{1.1.2}$$

其中，$0 \leqslant x_i, y_i, z_i \leqslant 1$.

§1.2　点阵的基本分类

构成原胞的三个基本平移矢量(有时称为基矢) $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ 通过晶体平移矢量

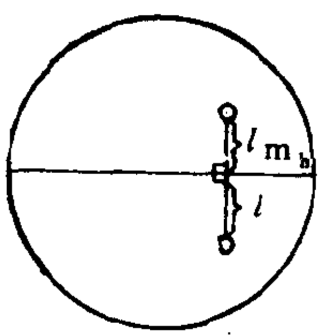
$$\boldsymbol{T} = n_1\boldsymbol{a} + n_2\boldsymbol{b} + n_3\boldsymbol{c} \tag{1.2.1}$$

作平行于自身的位移，这称为**点阵平移操作**．晶体点阵可以

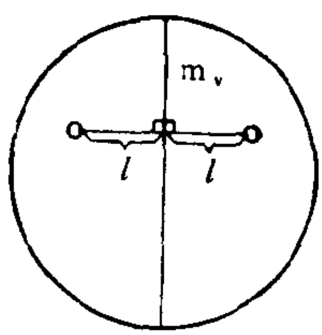
通过点阵平移 $\boldsymbol{T}$ 和其它各种对称操作与自身重合.一种典型的对称操作是围绕通过某一点阵的轴的转动. 当转动角度为 $2\pi,\pi,2\pi/3,\pi/2$ 和 $\pi/3$ 弧度或者这些角度的整数倍时,总可以找到一些能与自身重合的点阵;与这些转动角相对应的分别是一重、二重、三重、四重和六重转动轴,用符号 1,2,3,4 和 6 表示这些转动轴. 转动其它的角度,例如 $2\pi/5$ 弧度或 $2\pi/7$ 弧度,不可能使任何点阵与自身重合.

为了更加明确起见,现在定义**空间群**. 空间群是下述操作系的总称:任意对称操作及点阵平移操作后,晶体点阵与自身重合的特点与构成晶体的微粒(原子、离子、分子或其它粒子)无关. 而相对于某一格点进行这些对称操作之后,点阵保持不变,这些对称操作的集合称为**点阵点群**.

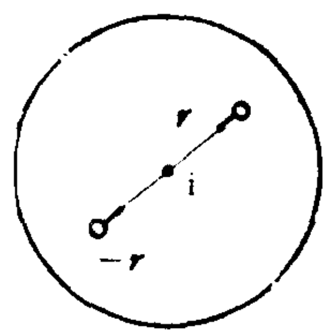
除了前面已经给出的可能存在的转动外,还有**镜面反映** m,反映所参照的面叫做**镜面**或者**对称面**. 水平镜面用 m_h 表示,见图 1.3(a);垂直镜面用 m_v 表示,见图 1.3(b).



(a)
镜面反映 m_h.



(b)
镜面反映 m_v



(c)
反演操作 I

图 1.3　点阵点群的镜面反映 m 和反演操作 I

反演操作 I 是使晶体进行 $\boldsymbol{r}\rightarrow-\boldsymbol{r}$ 的操作,见图 1.3(c). $\boldsymbol{r}$ 是晶体中任意一点以格点作参考的位置矢量,其操作是先绕通过该格点的轴转动 π 弧度,然后对于垂直于转动轴且通

过该格点的一个平面进行反映。晶体经过反演操作后能够复原，则称它具有对称中心；对称中心也称反演中心，用符号 i 表示。

图 1.4 表示一个立方体的对称轴和对称面。其中，(a) 为平行于立方体表面的一个对称面，(b) 为立方体中的一个对角对称面，(c) 为立方体的三个四重轴，(d) 为立方体的四个三重轴，(e) 为立方体的六个二重轴。

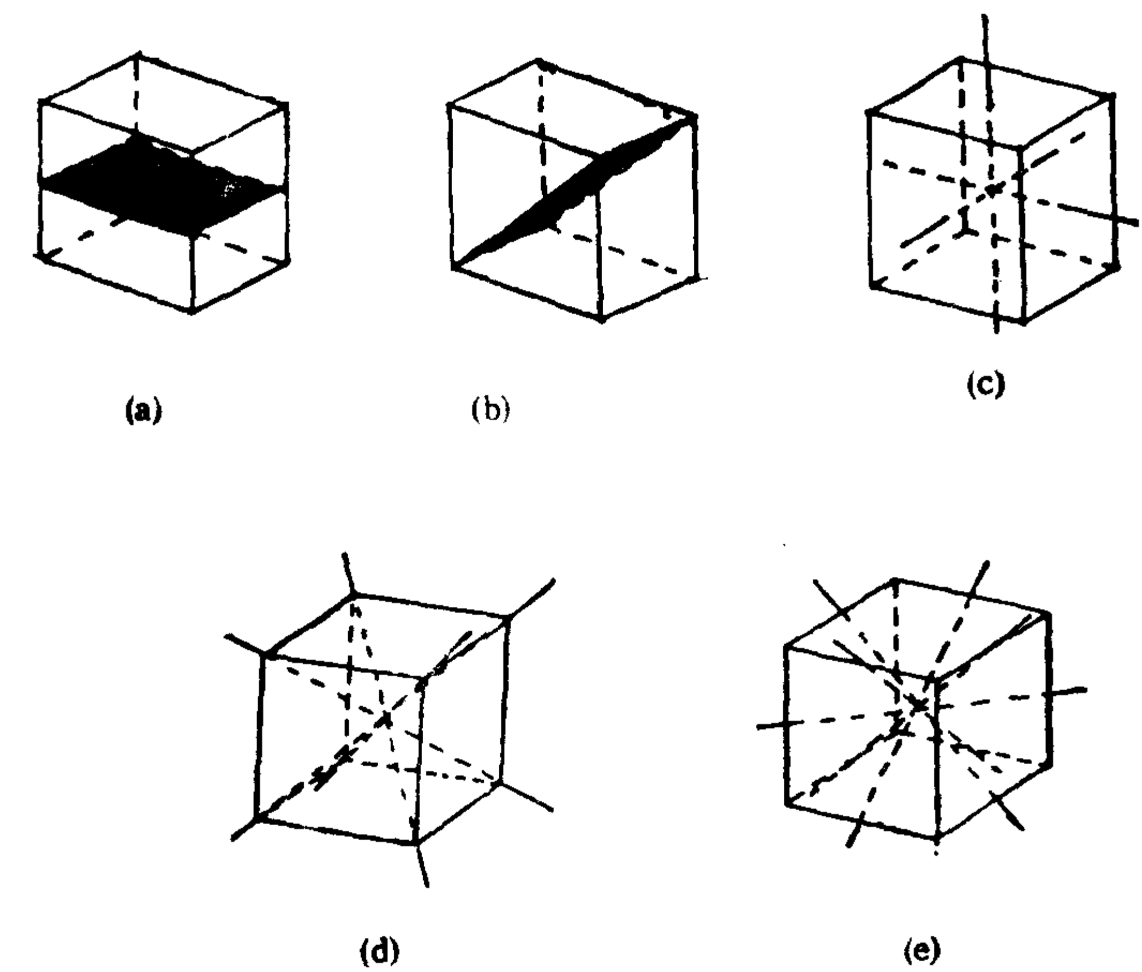


图 1.4　立方体的对称轴和对称面

(a) 立方体的一个平行对称面　(b) 立方体的一个对角对称面
(c) 立方体的三个四重轴　(d) 立方体的四个三重轴
(e) 立方体的六个二重轴

下面将根据空间维数及操作方式对点阵给予分类，并给读者直观的空间概念及不同点阵的各种特性。

1. 二维点阵类型

因为对点阵平移矢量的长度 a，b 或它们的夹角 φ 都没有什么自然限制，所以可能的点阵无限多。图 1.5 的点阵是采用任意的 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 绘出的，像这样的一般点阵，称为斜方点阵。当它围绕任何一个格点转动时，只有在转动 π 和 2π 弧度时才能保持不变。

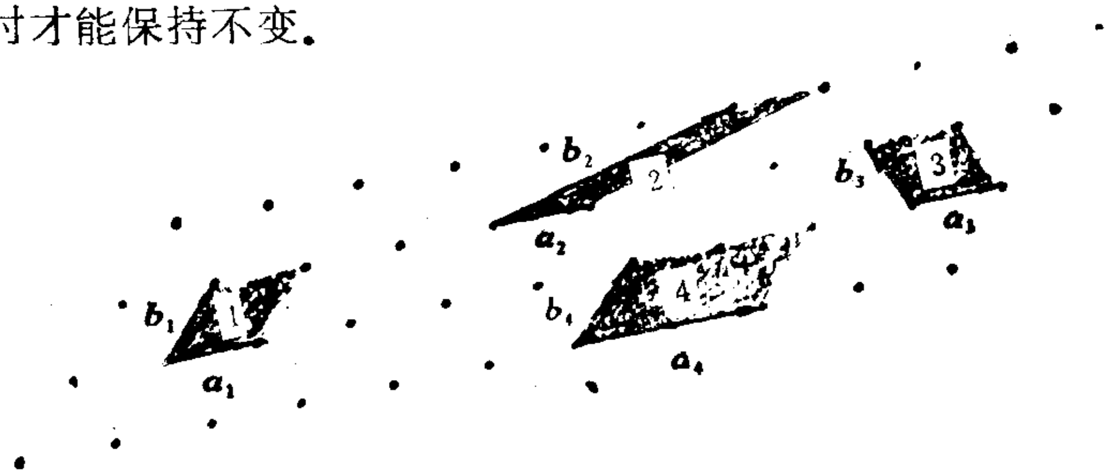


图 1.5　一个二维点阵的格点

成对的 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ 矢量都是点阵平移矢量，但矢量 $\boldsymbol{a}_4$，$\boldsymbol{b}_4$ 不是初基平移矢量，因为不能由 $\boldsymbol{a}_4$ 和 $\boldsymbol{b}_4$ 的整数倍组合构成点阵平移 $\boldsymbol{T}$

图 1.5 所示的平行四边形 1，2，3 中，成对的 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ 矢量都可以取为点阵的初基平移矢量。平行四边形 1，2，3 面积相等，且只含有一个格点，它们中的任何一个都可取作原胞。而平行四边形 4 的面积是上述面积的两倍，且含有两个格点，故不能取作原胞。如果要构造一个点阵，使之在一种或多种操作下保持不变，就必须对 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 作出一些限制。已知有四种不同的限制，除了前面提到的斜方点阵（$a \neq b, \varphi \neq 90°$）外，还有六方点阵（$a = b, \varphi = 120°$），正方点阵（$a = b$，$\varphi = 90°$）和长方点阵（$a \neq b$，$\varphi = 90°$）。长方点阵有两种二维点阵类型，其它（斜方、六方、正方）点阵各自只引出一种特殊的点阵类型，因此共有五种各不相同的二维点阵类型。

点操作 4$\left(\text{转动角度为 } \varphi = \frac{2\pi}{4} = \frac{\pi}{2}\right)$要求点阵是一个正方点阵，如图 1.6(a)所示。点操作 3 和 6 要求点阵是一个六边形点阵，如图 1.6(b)所示，这个点阵在围绕一个通过一格点并垂直于点阵平面的轴转动 $\frac{2\pi}{6}$ 时保持不变。

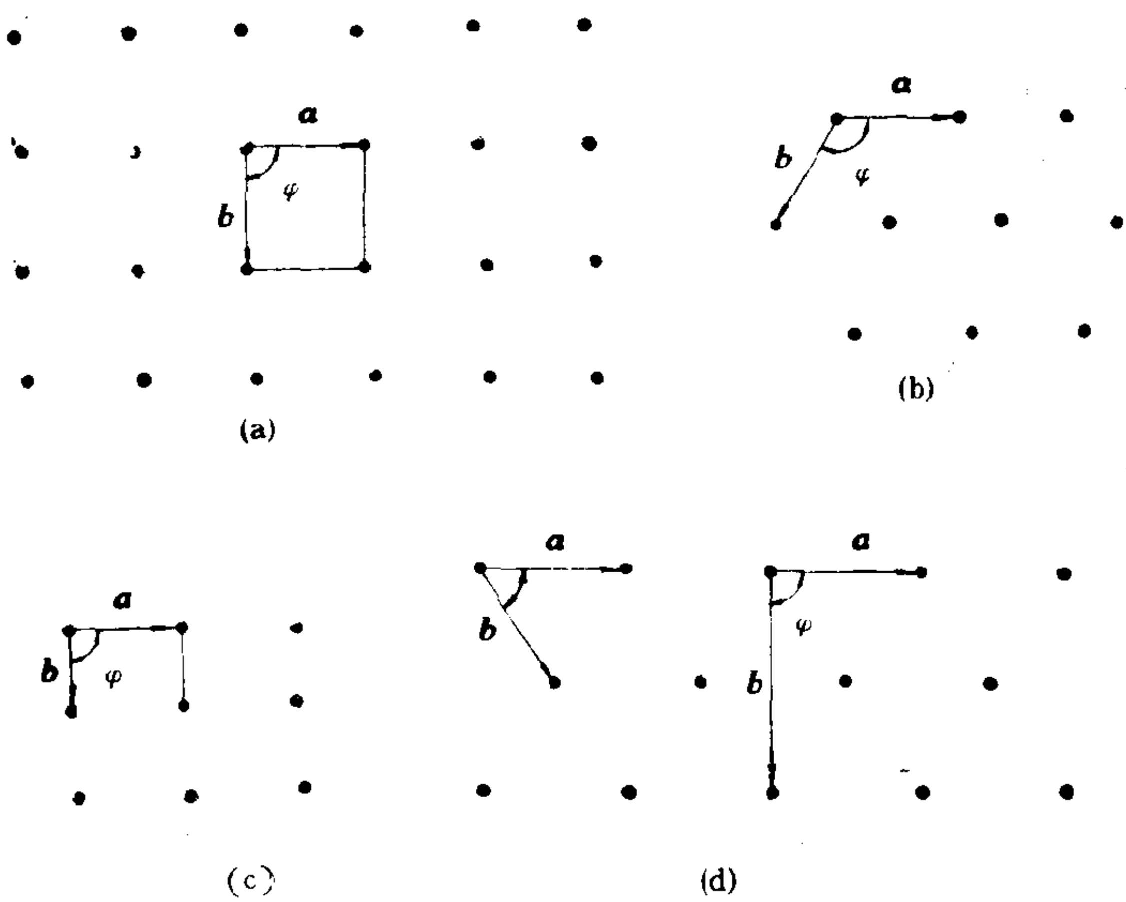


图 1.6 四种特殊的二维点阵

(a) 正方点阵 $|\boldsymbol{a}| = |\boldsymbol{b}|$, $\varphi = 90°$ (b) 六角点阵 $|\boldsymbol{a}| = |\boldsymbol{b}|$, $\varphi = 120°$ (c) 长方点阵 $|\boldsymbol{a}| \neq |\boldsymbol{b}|$, $\varphi = 90°$ (d) 有心长方点阵，图示原胞及长方单晶胞的轴，后者 $\varphi = 90°$

选用笛卡儿坐标 x, y 轴的单位矢量 $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$ 来表示基矢 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$，则

$$\boldsymbol{a} = a_x\boldsymbol{i} + a_y\boldsymbol{j},\ \boldsymbol{b} = b_x\boldsymbol{i} + b_y\boldsymbol{j} \qquad (1.2.2)$$

若基矢对 x 轴作镜面反映 m，则 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ 通过反映操作变换成新

的矢量 $\boldsymbol{a}',\boldsymbol{b}'$:

$$\boldsymbol{a}' = a_x\boldsymbol{i} - a_y\boldsymbol{j},\ \boldsymbol{b}' = b_x\boldsymbol{i} - b_y\boldsymbol{j} \tag{1.2.3}$$

如果在反映下点阵不变,则 $\boldsymbol{a}'$, $\boldsymbol{b}'$ 必定是点阵矢量,即它们必定具有 $n_1\boldsymbol{a} + n_2\boldsymbol{b}$ 的形式,此处 n_1 和 n_2 是整数。

如果取

$$\boldsymbol{a} = a\boldsymbol{i},\ \boldsymbol{b} = b\boldsymbol{j} \tag{1.2.4}$$

则有 $\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}' = -\boldsymbol{b}$,点阵与自身重合. 由式(1.2.4)定义的点阵是长方点阵,如图 1.6(c)所示.

对于 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的另一种不同的可能选择方式,给出了另外一种类型的在反映下不变的点阵. 如果 $\boldsymbol{b}' = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}$, 那么 $\boldsymbol{b}'$ 就是一个点阵矢量;再由方程(1.2.3)可得

$$b_x' = a_x - b_x = b_x,\ b_y' = a_y - b_y = -b_y \tag{1.2.5}$$

若令 $a_x = a, a_y = 0$, 则方程(1.2.5)只有一个解 $b = \frac{1}{2}a$, 从而对于一个具有镜面对称性的点阵来说,另一种可以选择的基矢是

$$\boldsymbol{a} = a\boldsymbol{i},\ \boldsymbol{b} = \frac{1}{2}a\boldsymbol{i} + b_y\boldsymbol{j} \tag{1.2.6}$$

这种选择给出一个有心长方点阵,如图 1.6(d)所示.

2. 三维点阵类型

在三维的情况中,有 14 种不同的点阵类型(其中一种是一般的,即三斜点阵,其余13种是特殊的),如图 1.7 所示,同时也将它们列于表 1.1 中. 14 种点阵类型,按照 7 种惯用单胞类型可划分为 7 个晶系,即三斜、单斜、正交、四角、立方、三角和六角晶系. 表 1.1 中所列的 7 个晶系,以立方晶系的对称性最高,称为**高级晶族**;六方、四方、三方晶系次之,称为**中**

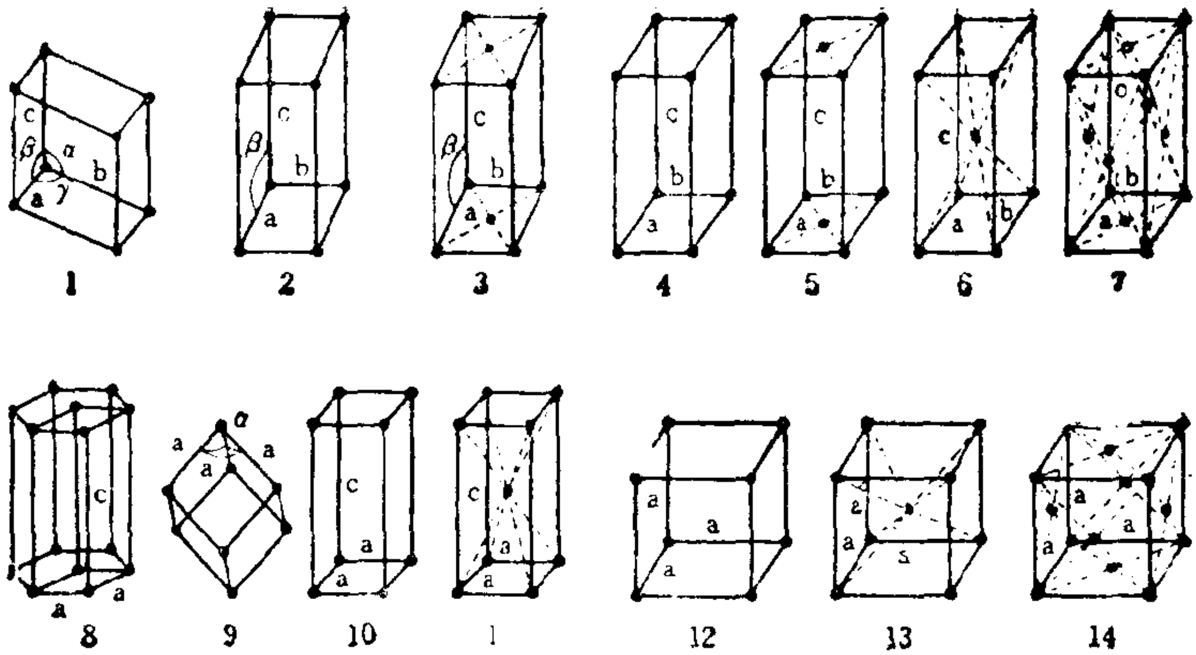


图 1.7　14 种空间点阵

1: P$\bar{1}$, 三斜, 2: P2/m, 单斜, 3: C2/m, 单斜, 1 面心; 其他配置是 A2/m, I2/m, F2/m, 4: Pmmm, 正交, 5: Cmmm, 正交, 1 面心; 其他配置是 Ammm, Bmmm, 6: Immm, 正交体心, 7: Fmmm, 正交, 面心, 8: C6/mmm, 六角; 有的空间群用H符号, 9: R$\bar{3}$m, 菱面体, 10: P4/mmm, 四角; 其他配置是 C4/mmm, 11: I4/mmm, 四角体心; 其他配置是 F4/mmm, 12: Pm3m, 立方, 13: Im3m, 体心立方, 14: Fm3*m*, 面心立方

表 1.1　三维空间的 14 种点阵类型

晶系	点阵数目	点阵符号*	对惯用晶胞的轴和角的限制
三斜	1	P	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$
单斜	2	P, C	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$
正交	4	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
四角	2	P, I	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
立方	3	P (或 sc)	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
		I (或 bcc)	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
		F (或 fcc)	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
三角	1	R	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma < 120°$, $\neq 90°$
六角	1	P	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$

*P: 初基, C: 底心, F: 面心, I: 体心, R: 菱形