高等院校应用物理及光学专业规划教材

高等光学

GAODENG GUANGXUE

俞宽新 ◎ 编著

北京工业大学出版社
BEIJING GONGYE DAXUE CHUBANSHE

高 等 光 学

俞 宽 新　编著

北京工业大学出版社

内 容 简 介

本书由"晶体光学"和"波导光学"两部分组成，其中，"晶体光学"部分讲述晶体的基本知识，包括晶体的对称性和晶体的分类；介绍了张量的概念，讨论了晶体的线性光学性质，叙述了晶体的外场光学效应，讨论了晶体的非线性光学性质。"波导光学"部分讨论了平面和光纤两类波导，用几何光学法研究了波导的传光特性，用波动方程法研究了波导模式场的分布函数、模式方程及模式特征。

本书结构安排合理、语言简练、通俗易懂，并配有大量例题和习题，可供教学使用。本书适合高等工科院校应用物理或信息光电子专业的本科生和光学专业的研究生使用，也可供从事光电子技术研究的科研人员和工程技术人员参考。

图书在版编目（CIP）数据

高等光学/俞宽新编著．—北京：北京工业大学出版社，2009.9
ISBN 978-7-5639-2140-9

Ⅰ.高…　Ⅱ.俞…　Ⅲ.光学-高等学校-教材　Ⅳ.043

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2009）第 124975 号

高 等 光 学
俞宽新　编著
*
北京工业大学出版社出版发行
邮编：100124　电话：(010) 67391106
各地新华书店经销
徐水宏远印刷有限公司印刷
*
2009 年 9 月第 1 版　　2009 年 9 月第 1 次印刷
787mm×1092mm　　16 开本　20 印张　488 千字
ISBN 978-7-5639-2140-9
定价：34.00 元

前　言

随着激光技术的日益发展，使用晶体制作的各类声—光—电—磁固体器件的应用越来越广泛，新的功能晶体材料也在不断涌现。另外，随着集成光学技术和光通信技术的迅速发展，平面波导和光纤波导的应用也越来越广泛。对于高等工科院校理科专业，如应用物理专业、信息光电子专业的本科生和研究生，以及从事光电子技术研究的科研人员和工程技术人员来说，掌握固态晶体材料的光学性质和上述两类光波导的传光性质就显得非常重要。目前，图书市场上的《晶体光学》教材并不多，即便有，也几乎都是采矿、冶金类专业用的，其内容偏重于工程。本书的特色是将“晶体光学”与“波导光学”合在一起，作为一门课程，这在国内并不多见。“晶体光学”与“波导光学”的共同点在于，它们的研究方法相同，都是从描述光学的基本理论——麦克斯韦方程组和描述介质的基本性质——物质方程出发，推导出波动方程作为各自的理论基础。它们的不同点在于，一是晶体的无界性与波导的有界性，光波在晶体中传播时不受限制，没有边界条件，波动方程的解可以是单色平面波。而光波在波导中传播时要受到限制，有边界条件，波动方程的解是分立的模式场分布函数。二是晶体的各向异性和波导的各向同性，这将导致影响光学性质的介电系数的不同，晶体的介电系数是个二阶张量，而波导的介电系数是个零阶张量，即标量。

本课程的参考学时为60学时，“晶体光学”部分（第1～5章）讲授晶体的基本知识，主要包括晶体的对称性和晶体的分类；介绍张量的概念、尤其是与晶体光学性质相关的二阶对称的介电系数张量；晶体的线性光学性质，包括晶体光学基本方程、晶体光学性质的几何描述方法、晶体中的光路、晶体的旋光性、偏振光的干涉；晶体的外场光学效应，包括电光效应与声光效应以及根据这些效应制作的激光调制器与偏转器；晶体的非线性光学性质，包括倍频与混频、光参量放大与光参量振荡。“波导光学”（第6、7章）讲授平面波导和光纤波导，用几何光学法研究两类波导的传光特性，用波动方程法研究两类波导的模式场分布函数、模式方程及模式特征。

本课程是许多后续专业课的理论基础，如光电子学、光纤通信原理、信息光学、光学信息存储、纳米光学与技术、光电信息技术等。适合高等工科院校应用物理或信息光电子专业的本科生或研究生使用，也可供从事光电子技术研究的科研人员和工程技术人员参考。本书力求语言简练、通俗易懂，为了便于学生自学，配有大量例题和习题，并有答案供参考。由于编者水平有限，书中难免还存在一些不足和错误，恳请读者批评指正。

目　　录

上篇　晶 体 光 学

下篇 波导光学

上篇　晶体光学

晶体光学是研究可见光通过透明晶体所产生的光学现象及其规律的一门科学。光波是一种电磁波，描述电磁波行为的是麦克斯韦方程。晶体是非磁性各向异性的介质，在研究其光学性质时，可以视为是均匀无限大的。描述介质特性的是物质方程，物质方程中与介质光学性质相关的物理量是介电系数。各向同性介质的介电系数是个标量，晶体的介电系数是个张量，这是造成非晶体与晶体光学性质差异的根本原因。晶体光学的理论基础是麦克斯韦方程与物质方程，将两个方程结合在一起，就可以得到光场的波动方程，这是光波在任何介质中传播时都要遵循的最基本的方程。根据晶体介电系数的特点，从波动方程可以导出晶体光学的基本方程，通过求解这个方程可以得到光波在不同晶体中的传播规律。由于晶体可视为是均匀无限大的，也就是说没有边界约束条件，故光场是单色平面波，这与有边界的，如光波导中的光场是不同的。本书“晶体光学”部分共分 5 章，第 1 章讲述晶体的基本知识，主要包括晶体的对称性和晶体的分类。第 2 章介绍张量的概念，尤其是与晶体光学性质直接相关的二阶介电系数张量。第 3 章讲述晶体的线性光学性质，包括晶体光学基本方程的推导与求解，晶体光学性质的几何描述方法和晶体中光路的画法，并介绍晶体的旋光性和偏振光的干涉。第 4 章介绍两个应用非常广泛的晶体外场光学效应：电光效应与声光效应，以及根据这些效应制作的各类激光调制器件与激光偏转器件。第 5 章讲述晶体的非线性光学性质，包括非线性光学效应、倍频与混频、光参量放大与光参量振荡。

第1章　晶体学基础

在现代科学仪器和设备中，经常会遇到由各种晶体制成的器件。这些晶体一般都具有规则、对称的外形。它们的许多物理性质常常与方向有关，而且受到晶体对称性的限制。要了解晶体的物理性质，首先就要具备晶体学的基础知识。本章介绍晶体的基本概念、晶体的对称性、晶体的分类方法和坐标变换矩阵。

1.1　晶体的基本概念

1.1.1　晶体的结构

晶体与气体、液体以及非晶质固体的最本质的区别就是它在结构上具有长程有序性。组成晶体的最小单位称为基元，它可以是分子、原子、离子或原子团，晶体就是由基元近似无限地、周期性地重复排列所构成的。晶体结构的长程有序规律，可以用点阵结构来描述。图 1-1 是一种假想的二维晶体结构的示意图。该晶体是由完全相同的无数个基元，在平面内作近似无限地、周期性排列。由于基元是完全相同的，可以作如下抽象：在一个基元中任意选择一个几何点如基元中心，称为阵点。这些阵点在空间周期性排列所组成的格子称为空间点阵。通常晶体是三维的，因此，晶体可以被抽象为三维的空间点阵。在点阵中，可以从任意一个阵点出发，向它邻近的阵点作出 3 个不相平行的矢量 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$，这三个矢量就是阵点在这些方向上的重复周期。也就是说，从点阵中任意一个阵点出发，以这三个矢量为重复周期，可以作出点阵中所有的阵点。这三个矢量称为阵点的平移基矢，或简称基矢。点阵结构可以用数学式来描述。在空间任取一个坐标系，如果坐标系中每一个阵点的位置可以用矢径 $\boldsymbol{r}$ 来描述，则点阵中任意两个阵点的矢径就有如下关系：

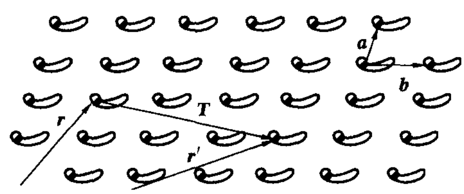


图 1-1　假想二维晶体结构的图像

$$r' = r + \boldsymbol{T} \tag{1-1}$$

式中，$\boldsymbol{T}$ 称为这两个阵点间的平移矢量，它等于基矢的线性组合：

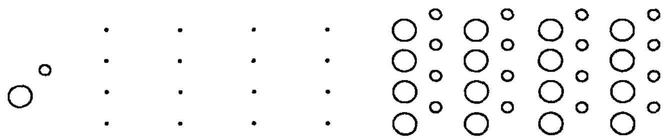
$$\boldsymbol{T} = u\,\boldsymbol{a} + v\,\boldsymbol{b} + w\,\boldsymbol{c} \tag{1-2}$$

式中，u、v、w 为任意整数。例如，在图 1-1 中只有两个基矢 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$，平移矢量 $\boldsymbol{T} = -\boldsymbol{a} + 3\,\boldsymbol{b}$。式（1-1）称为空间点阵定义式，满足该式的空间所有点就组成了一个点阵。

综上所述，点阵是晶体结构的数学抽象，它与基元、晶体结构之间的关系可表示为

点阵＋基元＝晶体结构

如图 1－2 所示。任何一种具体的晶体结构，都可以看成是由某种具体的基元配置在一定点阵的阵点上构成的。或者说，晶体中的基元是按一定的空间阵点配置的规律排列的，而且这些基元在组成、排列和取向上都是完全一致的。各种晶体基元的组成可以有很大的差别，基元可以是单个原子，如许多金属晶体；也可以是两种不同的离子，如图 1－2 所示；还可以是包含成千上万个原子的大分子，如蛋白质。各种晶体的基元本身的对称性也可以有很大的差别，有高度对称的球状原子或完全不对称的大分子。以点阵中不在同一平面内的 3 个线性无关的基矢为棱，可以构成一个单位平行六面体，称为晶胞。通常，把满足式（1－2）要求的基矢称为素基矢，由素基矢为棱构成的晶胞称为素晶胞。素晶胞的特点是，阵点只位于晶胞的顶点上，晶胞内部无阵点。素晶胞经适当平移可以充满所有空间。所以，空间点阵也可以看成是无数个素晶胞平行叠置而成的空间格子，如图 1－3 所示。由于每个阵点为周围 8 个同样的素晶胞所共有，因此，每个素晶胞只包含一个阵点。由于空间点阵中的基矢可以有不同的选取方式，因此，有无限多形状不同的晶胞。如果除了顶点处有阵点外，在面中心、体中心或其他位置上也有阵点，这样的晶胞就称为复晶胞。图 1－4 为平面点阵中的素晶胞和复晶胞的不同选取方法。



(a)基元　　(b)点阵　　(c)晶体结构

图 1－2　点阵、基元与晶体结构的关系

晶体学中，通常把晶胞的 3 个基矢选作坐标轴，分别用 a、b、c 表示。它们的方向一般规定 c 轴，自原点向上为正方向；a、b 轴在水平面内，b 轴自原点向右为正方向；a 轴垂直纸面向外为正方向，如图 1－5 所示。晶胞的 3 个棱长称为轴单位，表示晶轴方向上的重复周期，记为 a_0、b_0、c_0。各晶轴之间的夹角称为轴角，按以下方式用希腊字母表示：$\alpha=(b, c)$、$\beta=(c, a)$、$\gamma=(a, b)$。a_0、b_0、c_0、α、β、γ 是表征晶胞形状和大小的一组参数，称为晶胞参数或格子参数。可以将晶胞与基元的关系写成

单位平行六面体＋基元＝晶胞

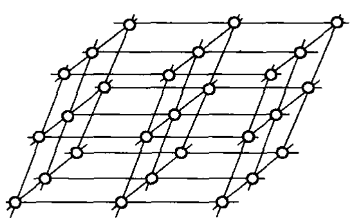
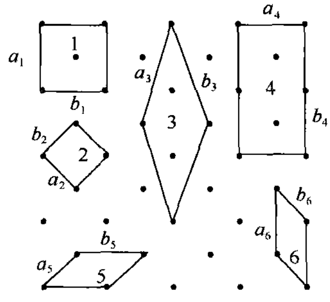


图 1－3　晶胞组成的空间点阵结构



1,3,4—复晶胞；2,5,6—素晶胞

图 1－4　平面点阵中的晶胞

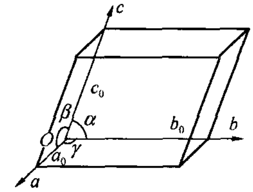


图 1－5　晶胞参数

所以，晶胞是能反映整个晶体结构特征的最小单位。素晶胞中只包含一个基元，复晶胞中则包含一个以上的基元。晶体是基元按空间点阵规律排列形成的。尽管由于空间点阵类型的不同和基元的差别，造成了无数种不同的具体晶体结构，但是空间点阵规律仍是一切晶体所共同遵循的。

严格地说，上述定义只适用于理想晶体。理想晶体在空间上是无限的，其点阵结构也应是完整的。但实际晶体不仅是有限的，而且存在着各种缺陷，如空位（点缺陷）、位错（线缺陷）和层错（面缺陷）等。这些缺陷不同程度地破坏了晶体构造的周期性。所以，实际晶体并不符合空间点阵规律。但考虑到实际晶体的尺寸远比晶体内部质点的重复周期大得多，缺陷所造成的偏差有的只是局部性的，有的则微乎其微。因此，在大多数情况下，空间点阵规律对实际晶体仍然是适用的。

1.1.2　晶体的通性

结构不同的晶体，不但外形不同，而且在性质上也有很大差别。例如，金刚石具有高硬度，方解石具有良好的解理性，水晶有压电性等。除了晶体各自的特性外，各类晶体还具有一些仅仅与晶体的空间点阵规律有关的基本性质，称为晶体的通性，晶体的通性可以概括如下：

1. 自限性（自范性）

晶体具有自发地形成封闭几何多面体的特性，称为自限性。这是晶体内部点阵构造在宏观形态上的反映。在任一空间点阵中，分布在同一直线上的阵点构成行列，或称直线点阵；分布在同一平面上的阵点构成面网，或称平面点阵。晶体发生与成长的过程，实质上就是基元按照空间点阵规律进行排列和堆砌的过程，也可以看成是由基元组成的各个面网在不同方向上平行推移的过程，如图 1-6 所示。最外层的面网形成晶面，相邻晶面形成晶棱，相邻晶棱形成晶顶。晶面、晶棱、晶顶数目之间满足关系：晶面数＋晶顶数＝晶棱数＋2。例如最简单的长方体有 6 个晶面、8 个晶顶、12 个晶棱，满足 6+8=12+2。

应该指出，在相同的物理化学条件下形成的同一种晶体，其多面体外形可能因生长环境的影响而有差别，但相应的两个晶面之间的夹角总是恒定的。这一规律称为晶面角守恒定律。可以从晶体的点阵构造出发来解释这个定律。在相同条件下形成的同种晶体必然具有完全相同的空间点阵结构，而晶面是微观面网在晶体外形上的宏观反映。同种格子构造中，对应面网间的夹角是相等的，如图 1-7 所示。因此，同种晶体的对应晶面间的夹角必然相等。

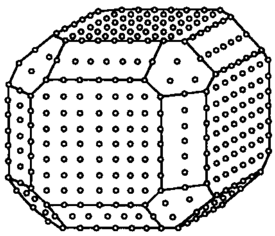


图 1-6　结晶多面体与点阵结构

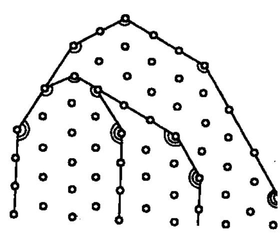


图 1-7　晶面角守恒定律

2. 均匀性

在宏观观察如测定各种宏观物理性质的试验中，由于仪器分辨能力的限制，观察具有统计性，晶体中基元排列的不连续性被掩盖了。因此，测得的性质必然是一个统计平均的结果。晶体中所有基元都是按点阵规律周期性排列的。如果在晶体的不同部位，沿彼此平行的相同方向进行观察，则在该方向上所有基元的取向和间距都是一样的。所以，晶体在相同方向上的宏观性质与观察的具体位置无关。也就是说，晶体在不同部位上具有相同的性质，这就是晶体的均匀性。

3. 各向异性

晶体因方向不同而表现出性质差异的特性，称为晶体的各向异性。各向异性是晶体区别于非晶体的重要特性。在非晶体中，由于基元的排列和取向是无规则的，即使基元本身很不对称，统计平均的结果，在不同部位、不同方向上的性质都是相同的。

晶体中基元是按点阵规律排列的，晶体不同部位基元的排列和取向是完全一致的，这是晶体结构上的均匀性。但是，在晶体的不同方向上，基元的排列一般是不相同的，因此，在这些方向上晶体的性质就不同，这便是晶体的各向异性。晶体的均匀性和各向异性是晶体点阵结构在宏观性质上表现出来的两个侧面。但并不是晶体所有性质都是各向异性，如晶体的密度、立方晶系晶体的介电系数、电导率、折射率等便是各向同性的。

4. 对称性

晶体的外形在自身的不同方位上自相重合或晶体的内部结构在不同位置上有规则地重复出现，称为晶体的对称性。晶体的物理性质也具有一定的对称性，即晶体在几个不同方向上的物理性质可以是相同的。

晶体的对称性也是由其内部结构决定的。由于空间点阵和基元都可以有一定的对称性，因此，在晶体内部结构中某几个不相平行的特定方向上，基元的取向和排列方式也可能完全相同。例如，在石英晶体中3个互成120°对称配置的方向上，基元的排列方式完全相同，因此，会产生相同的压电效应。如图1-8中的x'、x''、x'''方向。

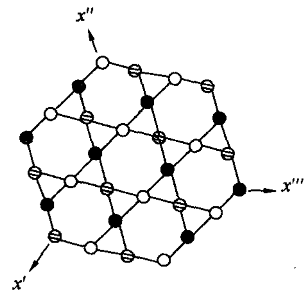


图1-8 石英晶体的基元

5. 最小内能性

在同种物质的气态、液态、非晶态、晶态的4种不同状态中，以晶态的内能最小，这种性质称为晶体的最小内能性。例如，晶体熔化时要吸热，并且有确定的熔点。非晶态能自发地向晶态转变，如玻璃的自发晶化，但晶体不可能自发地转变为其他状态。晶体的这一性质同样可以用晶体的点阵结构来解释。晶体内基元在三维空间周期性地排列，是基元间引力和斥力达到平衡的结果。因此，阵点就是平衡位置，故按阵点构成的晶体就具有最小内能。处于这些位置上的基元，它们之间的结合力是相等的。要使晶体中任何一个基元离开其平衡位置，必须提供一定的能量，而且每个基元所需的能量都是一样的。因此，晶体在熔化时就具有确定的熔点。气体、液体和非晶质固体中的基元，一般均未达到内能最低的平衡位

置。因此，当它们的基元趋向于平衡位置时，也就是向结晶状态转变时，必定有多余的能量放出，并促使这一过程自发地进行。所以说，晶态是最稳定的状态。

1.1.3 点坐标、方向符号、面指数

在晶体学中经常会遇到需要描述某一个基元的位置、某一方向或某一面网。这就需要建立坐标系，用点坐标、方向符号和面指数来描述。

1. 点坐标

任意选择晶胞的某个顶点作坐标原点，3个晶轴a、b、c作坐标轴，基元或阵点的坐标用双重方括号括起来，如[[XYZ]]表示。如图1-9中A点为原点，坐标为[[000]]，B_1、B_2、B_3点的坐标分别为$\left[\left[\frac{1}{4}0\frac{3}{4}\right]\right]$、$\left[\left[\frac{1}{2}0\frac{1}{2}\right]\right]$、$\left[\left[\frac{3}{4}0\frac{1}{4}\right]\right]$。此图为平面图，只画了$a$、$c$轴，$b$轴垂直于图面，故$b$坐标都为零。

2. 方向符号

在空间点阵中，任一直线点阵都表示晶体的一个方向，互相平行的各方向是等同的。因此，每一方向都可以平行移动，并使之通过坐标原点。这样，每个方向就可以用与它平行且通过原点的方向来代替。用过原点方向上除原点以外的任意一个阵点的坐标来标记。例如，在图1-10中，要确定方向1′，可将其平行移动，使之通过坐标原点，即方向1。在方向1上，第一个阵点的坐标是：$a=1$、$b=0$、$c=2$，第二个阵点的坐标是$a=2$、$b=0$、$c=4$。方向1上每一个阵点的坐标比值是相等的，这个比值可以认为是方向1上任意一个阵点坐标除以最大公约数后的比值，也是该方向上距坐标原点最近的阵点坐标的比值，用它来表示该方向，记为[uvw]。因此，方向1的方向符号为[102]、方向2的方向符号为[101]，晶轴a、b、c的方向符号分别为：[100]、[010]、[001]。遇到负坐标时，将负号移到坐标值的上方。此图仍为平面图，只画了a、c轴，b轴垂直于图面。另外，图中还标出了方向符号[301]、[$10\bar{1}$]。将某一方向符号的3个数同时变号后所得到的方向符号，与原方向相反。

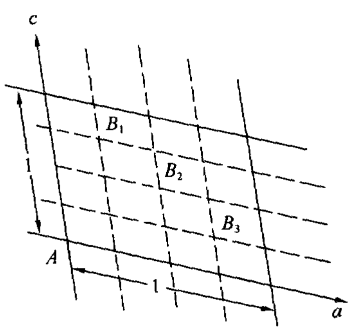


图1-9 点坐标

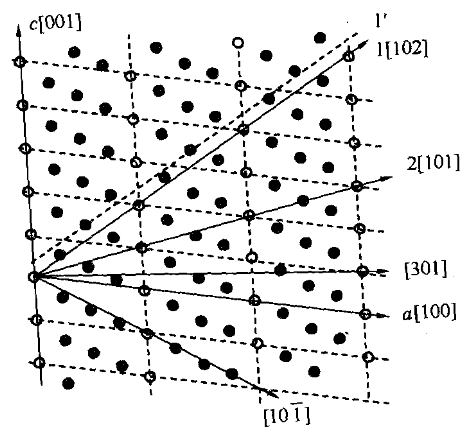


图1-10 方向符号

3. 面指数

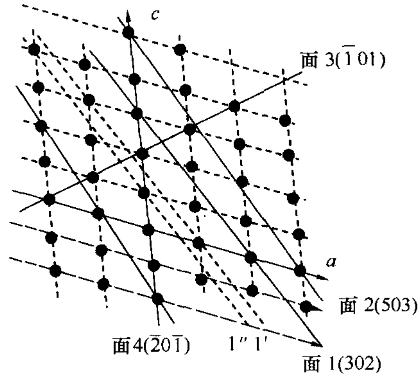


图 1-11 面指数

一个面网总可以与 1 个、2 个或 3 个坐标轴相交，故面网在空间的位置可以用轴截距来表示。所谓轴截距是指晶轴被面网所截切的长度，该长度是以各晶轴的单位周期 a_0、b_0、c_0 作为度量单位的。例如，平面点阵图 1-11 中标有面 1 的直线代表的是垂直于图面的一个面网与图面的截线，它与 b 轴平行，因此，它在 b 轴上的截距为∞，在 a 轴上的截距为 2、在 c 轴上的截距为 3。另外，与面 1 平行的面 1′在 a、b、c 轴上的截距分别为 1、∞、$\frac{3}{2}$；面 1″在 a、b、c 轴上的截距分别为$\frac{2}{3}$、∞、1，虽然这两个面网的轴截距不同，但它们的比值是相同的，都是 2∶∞∶3。为了避免比值中出现∞，可采用它们的倒数之比来标记面网在点阵中的位置，并且将这些比值化为最小整数比。这样一来，上述比值变为 3∶0∶2。面指数的记号为（hkl），故该面网为（302）。图中的其他面网分别为：面 2(503)、面3($\bar{1}$01)、面 4($\bar{2}$0$\bar{1}$)。面指数实际上是一组平行面内中最逼近原点的那个面的轴截距的倒数。面指数高的面网，其面网密度和面间距都比较小；反之面指数低的面网，其面网密度和面间距都比较大。所谓面网密度是指单位面积中的阵点数，所谓面间距是指该组平行面网中相邻两个面网的间距。晶体的晶面往往是低指数面，这一规律称为布拉维法则。如某一面网与某一方向平行，则该面指数（hkl）和方向符号［uvw］之间存在下述关系：

$$hu+kv+lw=0 \tag{1-3}$$

若晶轴是两两垂直的，且三个轴单位相等，这时候晶轴坐标系实际上就是直角坐标系。在此直角坐标系中常用的平面方程有点法式和一般式两种，其形式分别为

$$A(x-x_0)+B(y-y_0)+C(z-z_0)=0 \tag{1-4}$$

$$Ax+By+Cz+D=0 \tag{1-5}$$

式中，$D=-Ax_0-By_0-Cz_0$，(x_0, y_0, z_0)为平面上某一已知点的坐标，(A, B, C)为该平面法线方向上任意一点的坐标，同时，也可以称［ABC］为平面法线的方向符号，并可证明（ABC）为该平面的面指数。这是因为此平面在三个坐标轴上的截距分别为：$a=-\frac{D}{A}$、$b=-\frac{D}{B}$、$c=-\frac{D}{C}$，用$-D$同时去乘这三个截距的倒数，得到晶面指数即是（ABC）。直角坐标系中直线方程有标准式和一般式两种形式，其中标准式为

$$\frac{x-x_0}{m}=\frac{y-y_0}{n}=\frac{z-z_0}{p} \tag{1-6}$$

式中，(x_0, y_0, z_0)为此直线上的某一已知点的坐标，［mnp］则为该直线的方向符号。事实上，平行于该式所表示的直线，且过原点的直线方程，可以令 $x_0=y_0=z_0=0$ 得到，为

$$\frac{x}{m}=\frac{y}{n}=\frac{z}{p} \tag{1-7}$$

显然，坐标为（m，n，p）的点就在此直线上，故此直线的方向符号就是［mnp］。直线一般式是由两个平面方程的一般式联立而成的方程组求得，即

$$\begin{cases}A_1x+B_1y+C_1z+D_1=0\\A_2x+B_2y+C_2z+D_2=0\end{cases} \tag{1-8}$$

这是因为两个平面的交线就是直线。与它平行并过原点的直线可以令上述两方程中的 $D_1=$

$D_2=0$ 而得到，然后通过消元法，分别消去 x、y、z 这三个未知数中的任意两个，便可将该直线的一般式改写成标准式，为

$$\frac{x}{\begin{vmatrix} B_1 & C_1 \\ B_2 & C_2 \end{vmatrix}}=\frac{y}{\begin{vmatrix} C_1 & A_1 \\ C_2 & A_2 \end{vmatrix}}=\frac{z}{\begin{vmatrix} A_1 & B_1 \\ A_2 & B_2 \end{vmatrix}} \tag{1-9}$$

故此直线的方向符号为$\left[\begin{vmatrix} B_1 & C_1 \\ B_2 & C_2 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} C_1 & A_1 \\ C_2 & A_2 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} A_1 & B_1 \\ A_2 & B_2 \end{vmatrix}\right]$。另外，根据高等数学知，由式（1－5）所表示的平面与由式（1－7）所表示的直线之间相互平行的充分必要条件是

$$Am+Bn+Cp=0 \tag{1-10}$$

实际上，此条件与式（1－3）是一致的。此平面与该直线相互垂直的充分必要条件是

$$\frac{A}{m}=\frac{B}{n}=\frac{C}{p} \tag{1-11}$$

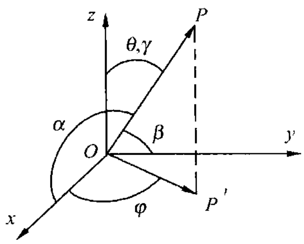


图 1－12　方向的表示方法

直角坐标系中表示一个方向除了用晶体学的方向符号以外，还可以用矢量法、角度法、方向余弦法等表示，如图 1－12 所示。矢量法用所描述方向上的任意某个矢量，如 OP 的矢端 P 点坐标表示，记成（x，y，z）。实际上，该方法与方向符号除写法上稍有不同以外，本质上是完全一样的。角度法使用了 2 个角度，记成（θ，φ）。其中，θ 称极角，即 OP 方向与 z 轴的夹角，取值范围为 $0\sim\pi$；φ 称方位角，即 OP 方向在 xy 平面上的投影 OP' 与 x 轴的夹角，取值范围为 $0\sim2\pi$。方向余弦法则是用 OP 方向与 3 个坐标轴的夹角 α、β、γ 的余弦表示，记成（$\cos\alpha$，$\cos\beta$，$\cos\gamma$）。3 个角的取值范围为 $0\sim\pi$，并且 3 个余弦值之间存在一个约束条件，即

$$\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1 \tag{1-12}$$

上述 4 种方向表示方法之间可以互相转换，如由矢量法转成极角和方位角的方法是

$$\cos\theta=\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}},\tan\varphi=\frac{y}{x} \tag{1-13}$$

求方向余弦的方法是

$$\cos\alpha=\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}},\cos\beta=\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}},\cos\gamma=\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \tag{1-14}$$

注意到方向符号［mnp］和矢量法（x，y，z）之间的对应关系为：$x\rightarrow m$、$y\rightarrow n$、$z\rightarrow p$，上述各式也可用于方向符号与角度法、方向余弦法之间的转换。用极角、方位角计算方向余弦的方法是

$$\cos\alpha=\sin\theta\ \cos\varphi,\cos\beta=\sin\theta\ \sin\varphi,\cos\ \gamma=\cos\theta \tag{1-15}$$

用方向余弦计算极角、方位角的方法是

$$\cos\theta=\cos\gamma,\tan\varphi=\frac{\cos\beta}{\cos\alpha} \tag{1-16}$$

另外，在计算上述各角度时，要注意它们的取值范围，如计算 α、β、γ 时，如果它们的余弦值为正，则取锐角；余弦值为负，则取钝角。计算方位角 φ 时，要判断所求方向在 xy 平面内的投影在哪个象限，再决定 φ 的取值。

例 1-1　分别求直角坐标系中［102］和［111］方向的方向余弦，以及这两个方向与 3 个坐标轴的夹角。

解　(1)［$10\bar{2}$］：此方向与 x 轴夹角为

$$\cos\alpha=\frac{1}{\sqrt{1+(-2)^2}}=\frac{\sqrt{5}}{5},\alpha=63.4^\circ$$

此方向与 y 轴夹角为

$$\cos\beta=\frac{0}{\sqrt{1+(-2)^2}}=0,\beta=90^\circ$$

此方向与 z 轴夹角为

$$\cos\gamma=\frac{-2}{\sqrt{1+(-2)^2}}=-\frac{2\sqrt{5}}{5},\gamma=153.4^\circ$$

(2) [111]：

$$\cos\alpha=\cos\beta=\cos\gamma=\frac{1}{\sqrt{1^1+1^2+1^2}}=\frac{\sqrt{3}}{3},\alpha=\beta=\gamma=54.7^\circ$$

例 1-2 求直角坐标系中 $[1\bar{2}3]$ 方向的极角、方位角。

解 极角为

$$\cos\theta=\frac{3}{\sqrt{1+(-2)^2+3^2}}=\frac{3\sqrt{14}}{14},\theta=36.7^\circ$$

方位角为

$$\tan\varphi=\frac{n}{m}=-2$$

因该方向在 xy 平面内的投影在第四象限内，故 $\varphi=296.6^\circ$。

例 1-3 求直角坐标系 xy 平面内 $2x+3y-6=0$ 直线所表示的方向符号与晶面指数。

解 与已知直线平行且过原点的直线为

$$2x+3y=0$$

即

$$\frac{x}{3}=\frac{y}{-2}$$

故方向符号为 $[3\bar{2}0]$ 或 $[\bar{3}20]$。

另外，已知直线在坐标轴上的截距分别为 3，2，∞，则晶面指数为 (230)。

例 1-4 求平面方程 $3x+2y-4z+5=0$ 所表示的晶面指数，以及该平面法线方向的方向符号。

解 晶面指数为 $(32\bar{4})$，法线的方向符号为 $[32\bar{4}]$ 或 $[\bar{3}\bar{2}4]$。

例 1-5 求两个平面 $2x+2y-z+5=0$ 和 $2x-y+3z-2=0$ 相交直线的方向符号。

解 三个方向符号的数值分别为

$$m=\begin{vmatrix}2 & -1\\ -1 & 3\end{vmatrix}=5,n=\begin{vmatrix}-1 & 2\\ 3 & 2\end{vmatrix}=-8,p=\begin{vmatrix}2 & 2\\ 2 & -1\end{vmatrix}=-6$$

故方向符号为 $[5\,\bar{8}\,\bar{6}]$ 或 $[\bar{5}\,86]$。

1.2 晶体的对称性

1.2.1 晶体对称性的概念

晶体相同部分的有规则重复称为对称。晶体中的对称特点是既多样化，又受到点阵构造

的限制。晶体的对称性包括微观对称性和宏观对称性。微观对称性是指组成晶体的基元在空间作有规律地重复，宏观对称性是指晶体外形的相同部分有规律地重复。由于结晶多面体是其内部结构的宏观反映，因此，晶体的宏观对称性必然是晶体微观对称性的宏观反映。应该指出，晶体的宏观物理性质也是由晶体内部结构决定的，因此，晶体的宏观物理性质也要受相应的晶体宏观对称性的制约。

晶体对称性是指，当晶体对某些几何要素如点、线或面作某些操作，如反演、反射、旋转或操作组合时，晶体结构复合，则称这些操作为对称操作，相应的几何要素为对称要素。晶体中的对称操作和对称要素也可分为宏观和微观两类。宏观对称要素也称有限图形的对称要素，微观对称要素也称无限图形的对称要素。晶体的外形是有限图形，只可能具有宏观对称要素。同样，晶体的宏观物理性质只与宏观对称要素有关。

1.2.2　晶体的宏观对称操作与对称要素

晶体的宏观对称操作与相应的对称要素可分为以下 5 类：

1. 反演与对称中心

反演操作是指，选择某个假设点作为定点，作各阵点对它的对称点后，晶体结构能复合，称该定点为对称中心。若将对称中心作为坐标原点，则反演的作用是将任意一点的坐标（x，y，z）变换成（$-x$，$-y$，$-z$）。如果某晶体具有对称中心，则该晶体的每一个晶面都有一个与它反向平行的对应晶面。反演操作习惯记为 $\bar{1}$。

2. 反射与对称面

反射操作是指，选择某个平面作为定面，作各阵点对它的对称点后，晶体结构能复合，称该定面为对称面。也可称垂直于该平面的直线为反射轴。若将对称面作为坐标平面，则反射的作用是将反射轴的坐标变号。如对称面为 xy 面，即反射轴为 z 轴，则任意一点的坐标（x，y，z）变换成（x，y，$-z$）。如果某个晶体有对称面，则该对称面将把晶体分为互成镜像的两个等同部分。反射操作习惯记为 m。

3. 旋转与对称轴

旋转操作是指，选择某个直线作为定线，令晶体绕它旋转一定角度后能使晶体结构复合，称该定线为对称轴或旋转轴。有些晶体旋转几个不同的角度都能重合，则其中最小的角度称为基转角，以 α 表示。由于任何有限晶体在旋转一周后，必自相重合，因此基转角必能整除 360°，即

$$\frac{360^\circ}{\alpha}=n \tag{1-17}$$

式中，n 为正整数，为晶体在围绕对称轴旋转一周的过程中，晶体结构重复的次数，称为旋转轴的轴次。由于受内部点阵构造的限制，旋转轴的轴次不是任意的，只能有 1、2、3、4、6 次旋转轴，不可能有 5 次或高于 6 次的旋转轴。旋转操作的习惯记号即为它的轴次 n，并称为 n 度轴。高度旋转轴往往能包含低度旋转轴，若晶体某方向为 4 度轴，此方向肯定同时