课件下载：

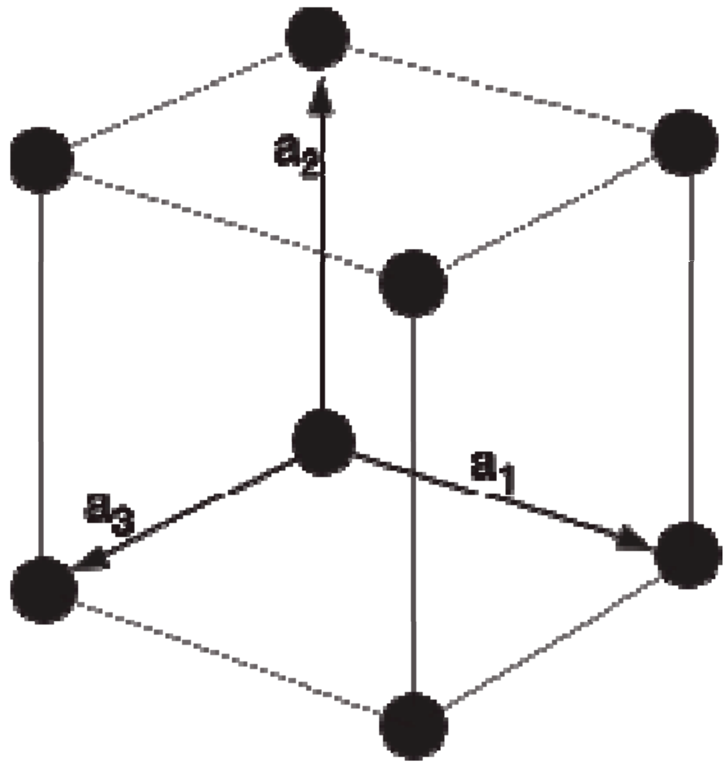
http://staff.ustc.edu.cn/~zhaojin/

1.1 晶格

The crystal lattice: Bravais lattice (3D)

A Bravias lattice is a lattice of points, defined by

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + o\mathbf{a}_3$$

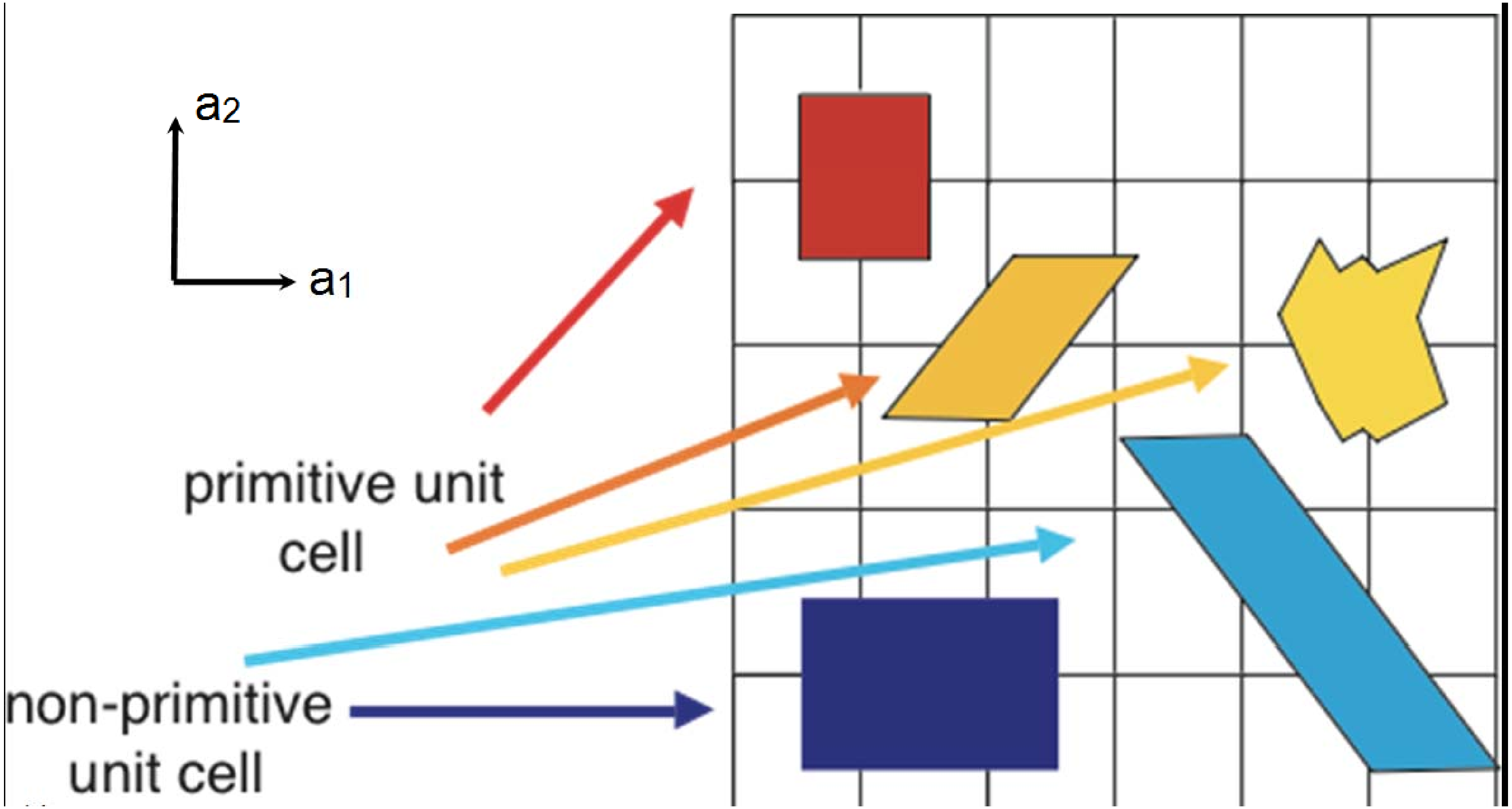


This reflects the translational symmetry of the lattice

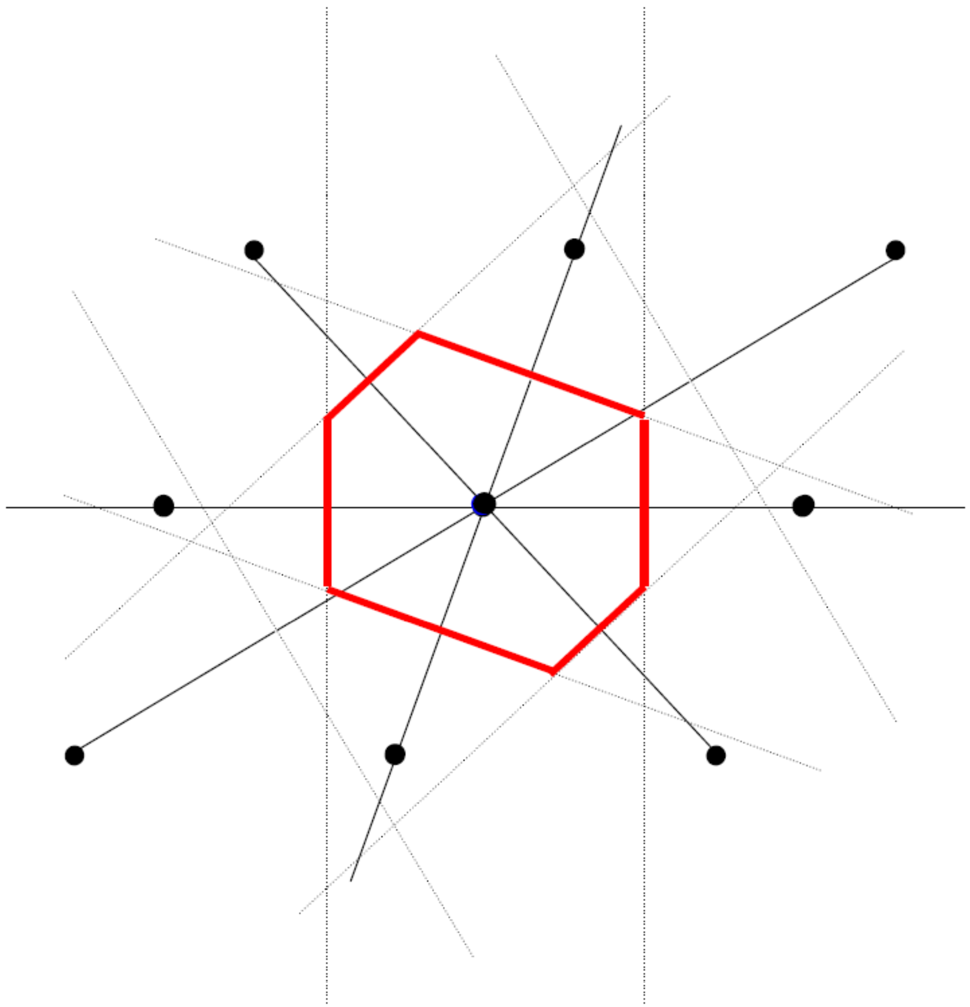
反映了晶格的平移对称性

Primitive cell 原胞

- 一个晶格的周期重复单元称作点阵的晶胞（unit cell)，最小周期重复单元称作原胞（Primitive cell ）
- 以点阵基矢构成平移矢量，可以把原胞复制填满整个空间。



另一标准选取法：Wigner-Seitz原胞

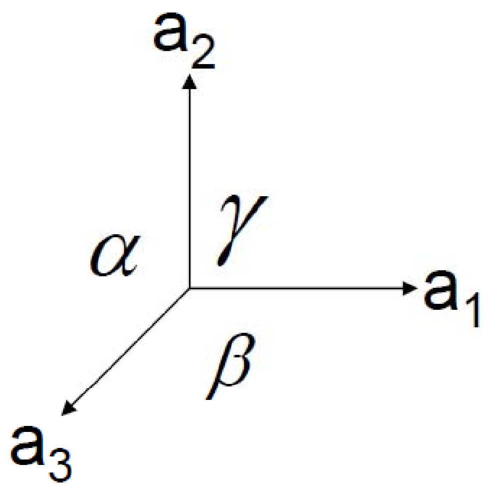


以格点为中心，取和近邻格点连线垂直平分线（面）围成的面积（体积）为原胞。这种选取方法是唯一的，一种点阵对应一种形式的 Wigner-Seitz原胞。

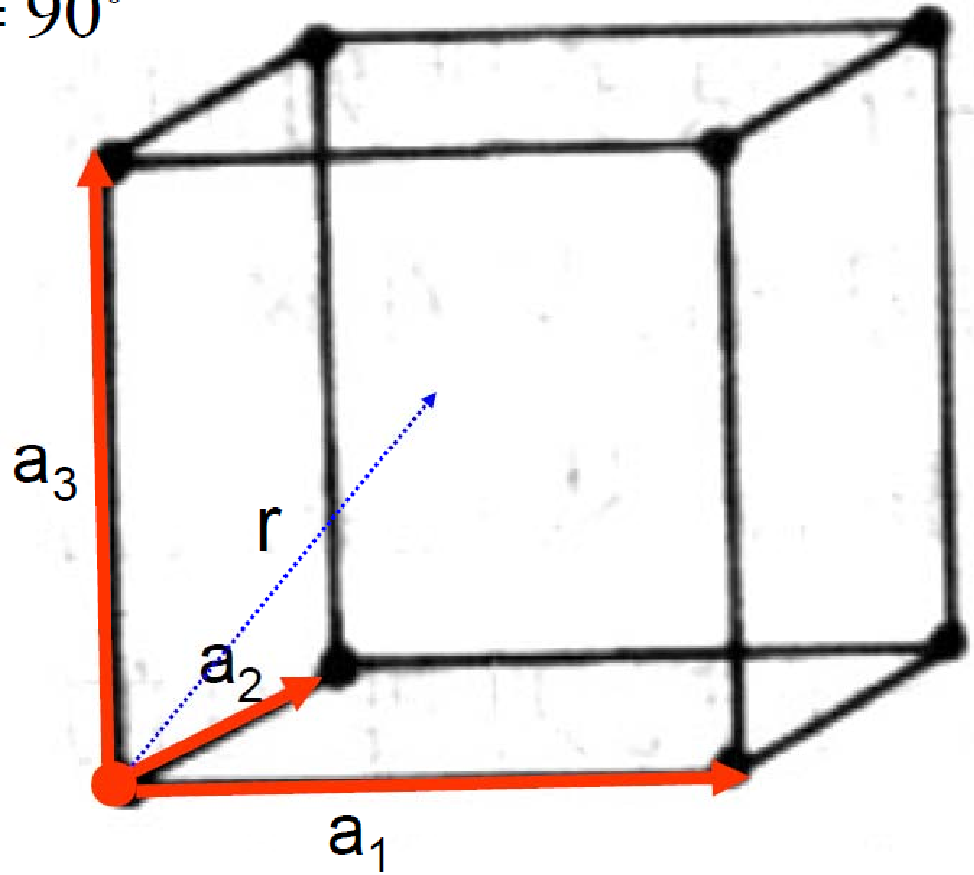
三维点阵的原胞是一个平行六面体，简立方点阵的原胞通常选用一个简立方体代表。

$$|a_1| = |a_2| = |a_3|,$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$$



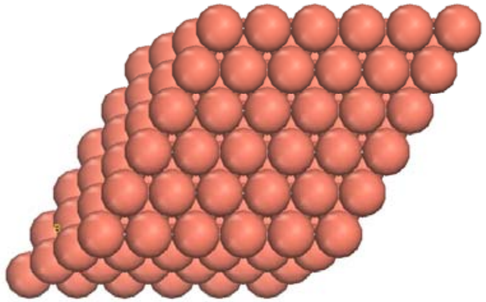
晶胞参量定义



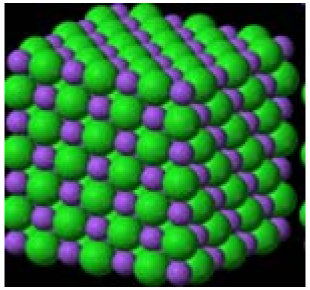
$|a_1|$、 $|a_2|$、 $|a_3|$ 被称为晶格常数（lattice constant)

How to form a crystal ?

- We could think: all that remains to do is to put atoms on the lattice points of the Bravais lattice.
向晶格点阵上堆积原子



- But: not all crystals can be described by a Bravais lattice (ionic, molecular, not even some crystals containing only one species of atoms.)并不是所有的晶体都能够被晶格点阵简单描述，有时一种晶体包含有不同类型的原子。



- BUT: all crystals can be described by the combination of a Bravais lattice and a basis. This basis is what one "puts on the lattice points".所有的晶体都可以被描述为： 晶格点阵+基元，基元就是往点阵上堆积的东西

晶面与晶向

晶体的一个基本特点是各向异性，沿晶格的不同方向晶体的性质不同，因此有必要识别和标志晶格中的不同方向。

点阵的格点可以分列在一系列平行的直线系上，这些直线系称作晶列。**同一点阵可以形成不同的晶列，每一个晶列定义一个方向，称作晶向。**如果从一个阵点到最近一个阵点的位移矢量为：(以基矢为单位） $l_1a_1 + l_2a_2 + l_3a_3$

则晶向就用 $[l_1l_2l_3]$ 来标志。

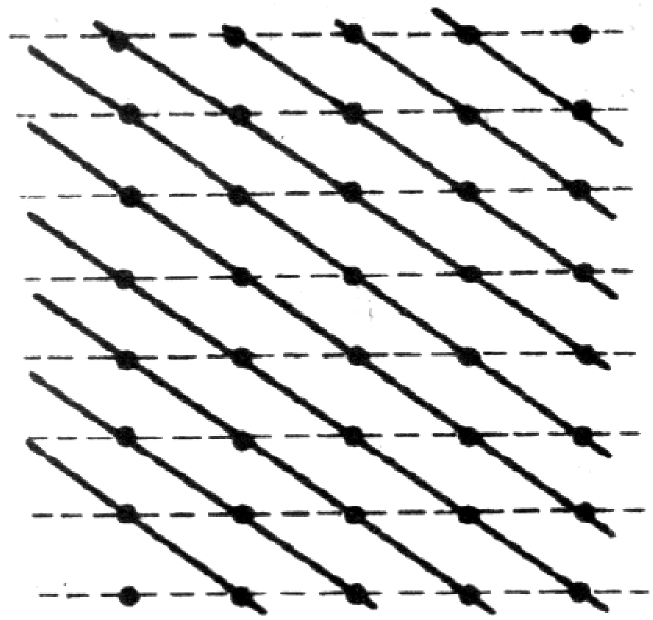


图 1－16　晶列

按照上述方法确定的简立方晶格的晶向如图所示，

晶向指数和坐标系的选取有关，OA的反方向记做$[\bar{1}00]$，由于立方晶格的对称性，沿立方边的6个晶向

$[100],[\bar{1}00],[010],[0\bar{1}0],[001],[00\bar{1}]$

是等价的，记做：

$$<100>$$

同样，$<111>$

代表了8个体对角线晶向。

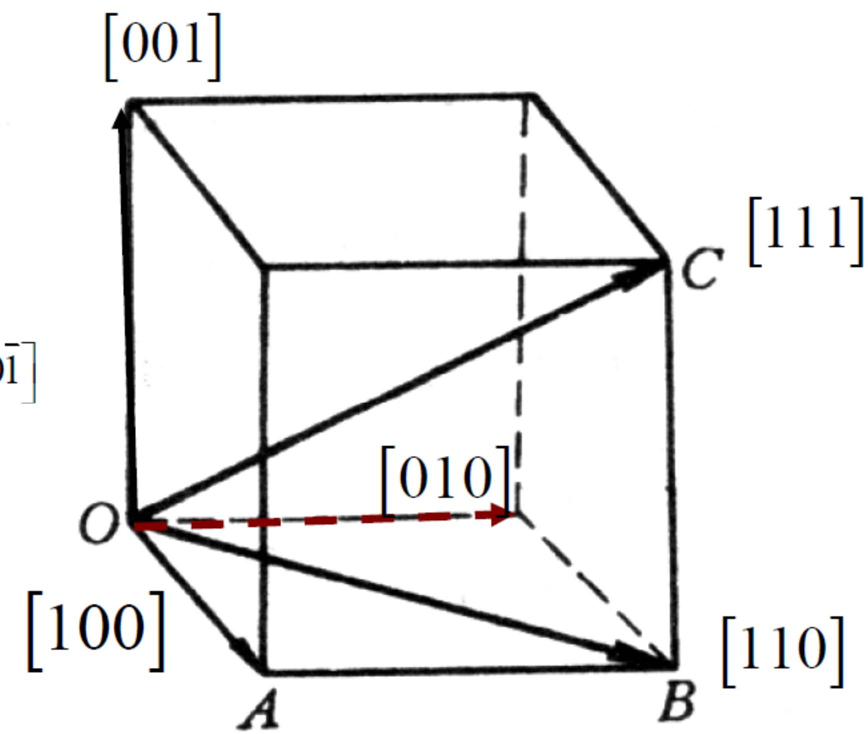
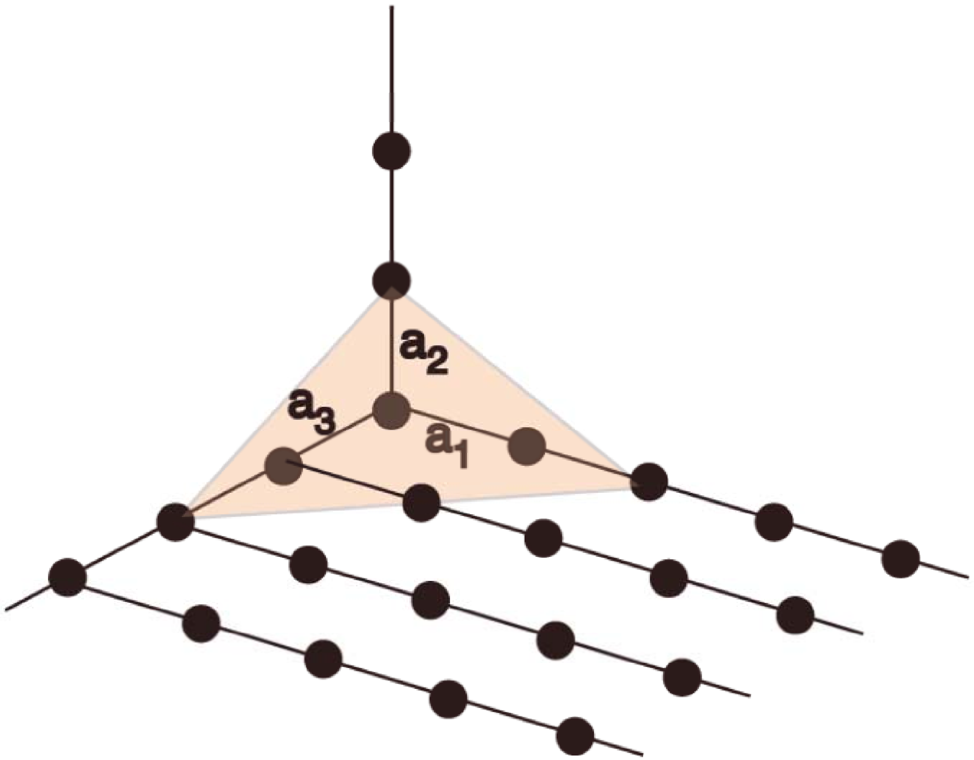


图 1－17　立方晶格中的[100]、[110]、[111]晶向



step 1: (2,1,2)

step 2: ((1/2),1,(1/2))

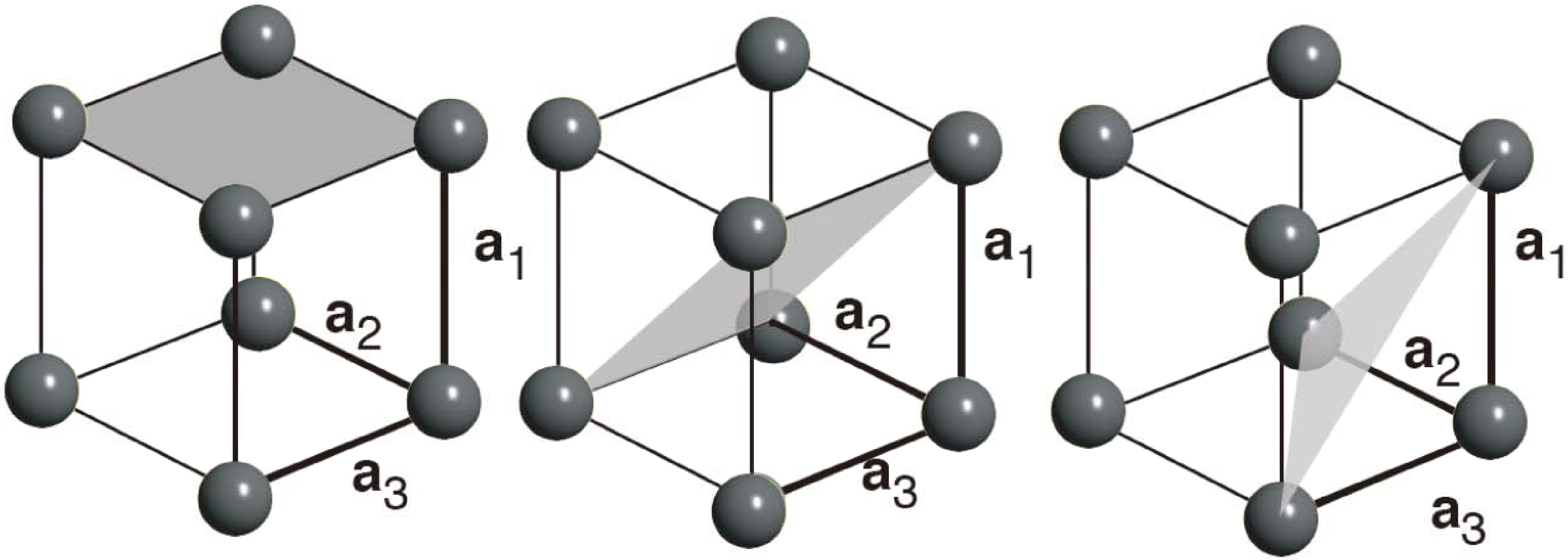
step 3: (1,2,1)

1. determine the intercepts with the axes in units of the lattice vectors

2. take the reciprocal of each number

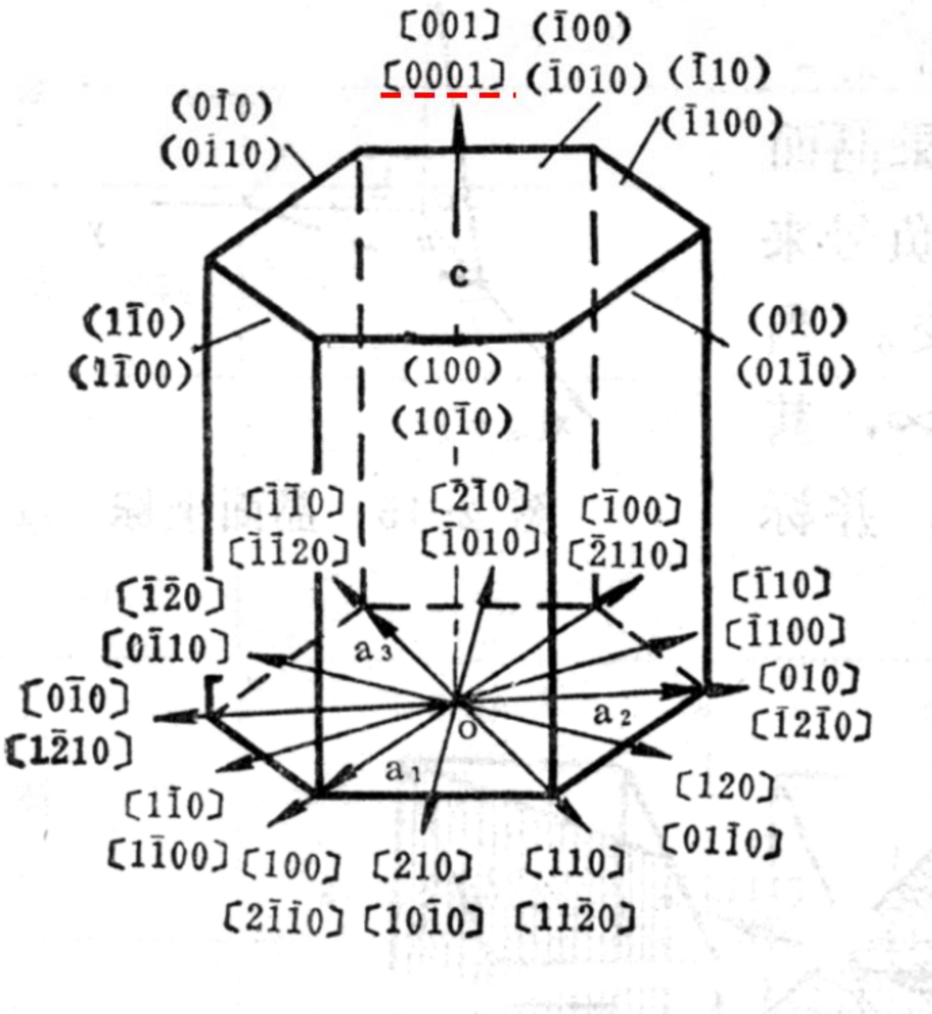
3. reduce the numbers to the smallest set of integers having the same ratio. These are then called the Miller indices.

Example



(1,0,0) (1,1,0) (1,1,1)

六角晶系晶面指数的表示与其它晶系不同，晶体学中往往采用四轴定向的方法，这样的晶面指数可以明显地显示出6 次对称的特点。



六方晶系的晶面及晶向指数

1.2 晶体的对称性

什么是对称性？
对称性的研究对我们有什么用？

晶体的对称性

一. 对称性的概念：

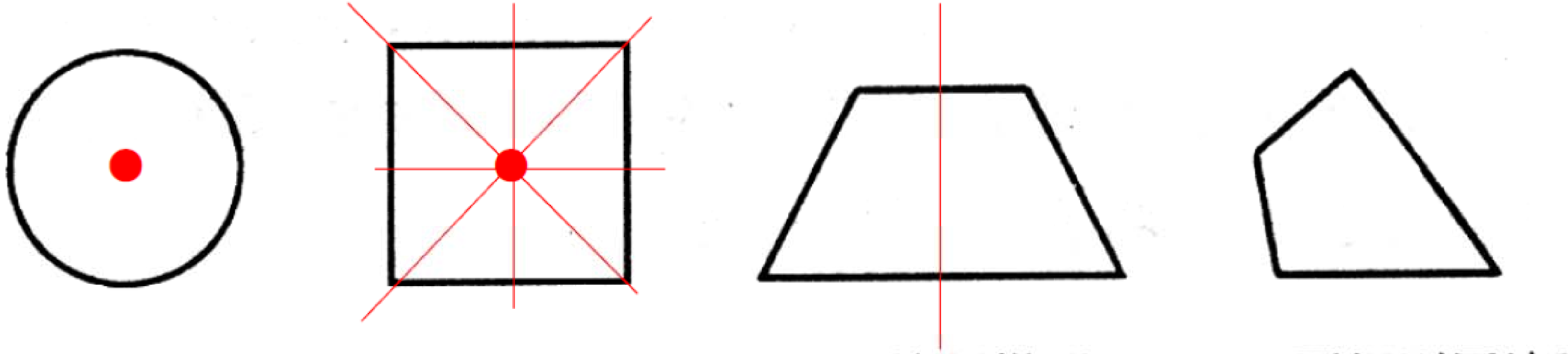
一个物体（或图形）具有对称性，是指该物体（或图形）是由两个或两个以上的部分组成，经过一定的空间操作（线性变换），各部分调换位置之后整个物体（或图形）保持不变的性质。

对称操作：维持整个物体不变而进行的操作称作对称操作。即：操作前后物体任意两点间的距离保持不变的操作。

点对称操作：在对称操作过程中至少有一点保持不动的操作。有限大小的物体，只能有点对称操作。

对称元素：对称操作过程中保持不变的几何要素：点，反演中心；线，旋转轴；面，反映面等。

一些图形的对称操作：



（a）圆 （b）正方形 （c）等腰梯形 （d）不规则四边形

对称形不同的几种图形

如何概括和区别四种图形的对称性？

从旋转来看，圆形对绕中心的任何旋转都是不变的；正方形只能旋转 $\frac{\pi}{2},\pi,\frac{3\pi}{2}$ 才保持不变；后**2**个图形只有 2π 的旋转。

圆形的任一直径都是对称线；正方形只有**4**条连线是对称线；等腰梯形只有两底中心连线是对称线。

晶体宏观对称性的体现Point Group 点群

In geometry, a **point group** is a group of geometric symmetries (isometries) that keep at least one point fixed.
至少保持一个点不动的点对称操作的集合被称为点群

数学上看，群代表一组元素的集合G=｛E,A,B,C,D, ……｝
这些元素被赋予一定的乘法法则，满足下列性质：

1. 若A,B∈G 则AB＝C ∈ G, 这是群的闭合性。
   如果具有两个对称操作A与B，那么这两个对称操作的连续操作也是一个对称操作
2. 存在单位元素E,使所有元素满足： AE=A
   群内必须具有一个不变操作
3. 任意元素A，存在逆元素：$AA^{-1}=E$
   任何对称操作的逆操作也是一个对称操作
4. 元素间满足结合律：A(BC)=(AB)C
   如果A、B、C都是对称操作，那么先操作A，然后操作B和C的组合，与先操作AB组合，然后再操作C是一样的

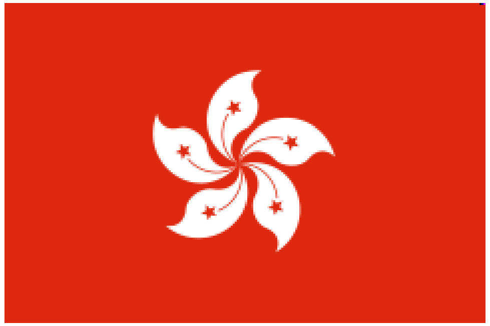
熊夫利记号 **- Schoenflies notation**

赫尔曼**–**莫甘记号 **- Hermann–Mauguin notation**
国际标准记号

旋转（rotation）：若一个物体绕某一个转轴转2π/n以及它的倍数物体保持不变时，便称作n 重旋转轴，国际标准符号记做n, 熊夫利符号计作C_n

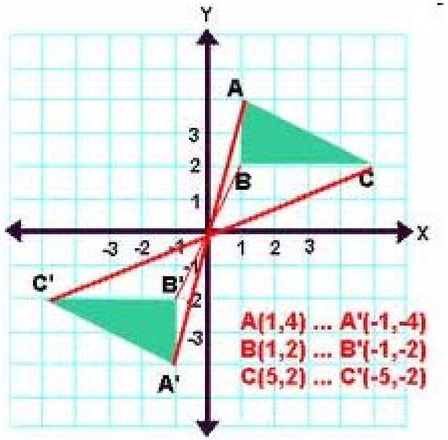
C_1 (1)

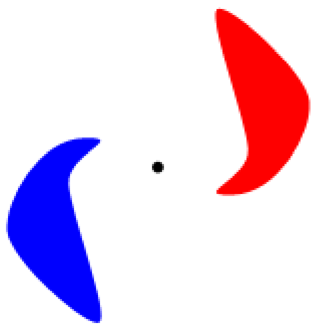
C_3 (3)



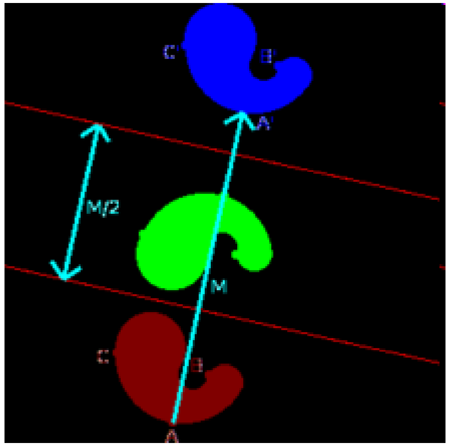
C_5 (5)

反演（point reflection; inversion)：以不动点为原点进行坐标反演：x,y,z – (-x,-y,-z) 国际符号：i，熊夫利符号：C_i



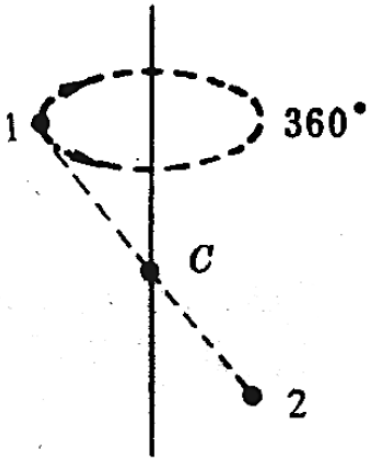


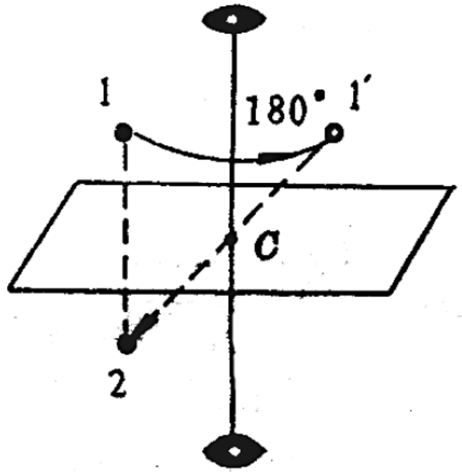
反映（**reflection)**：以某平面做镜面反演; 国际符号m, 熊夫利符号σ



旋转反演（**rotoinversion, rotary inversion)**：一个物体绕某一转轴转2π/n再作反演后保持不变。这个轴被称为旋转反演轴，国际符号：$\overline{n}$ 熊夫利符号：S_n

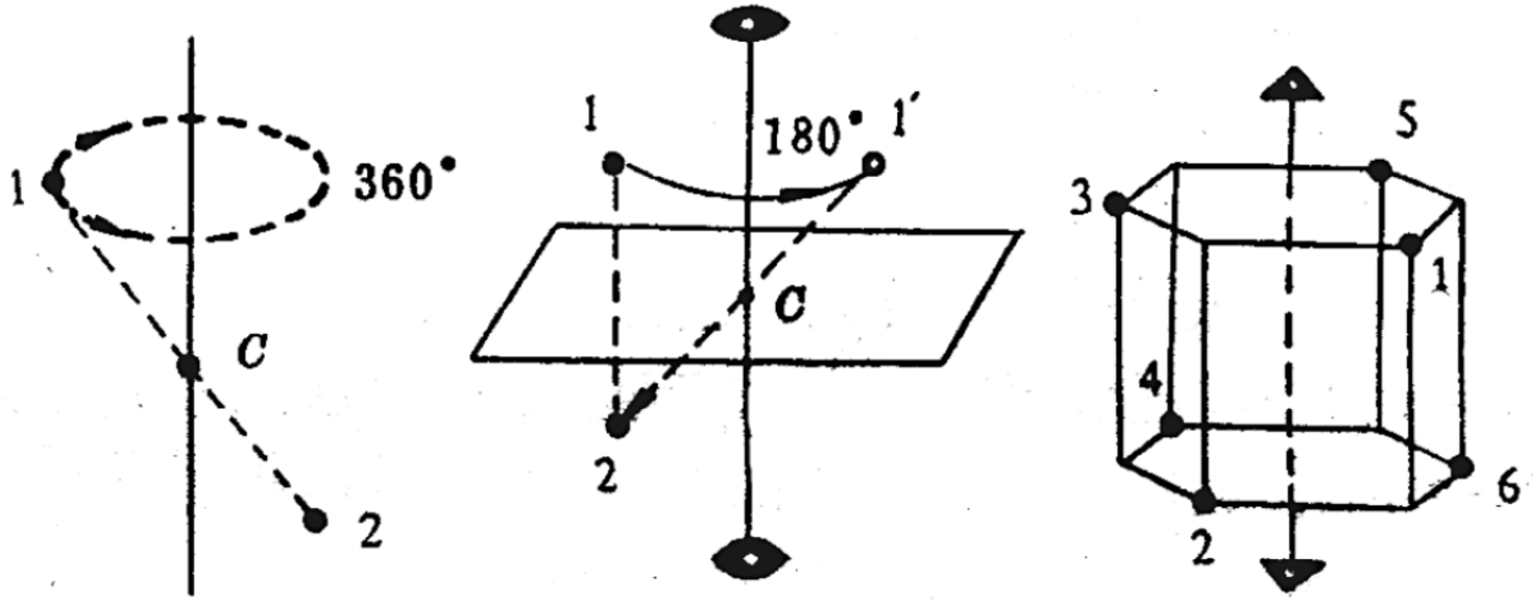
$\overline{1}$ = ?





$\overline{2}$ = ?

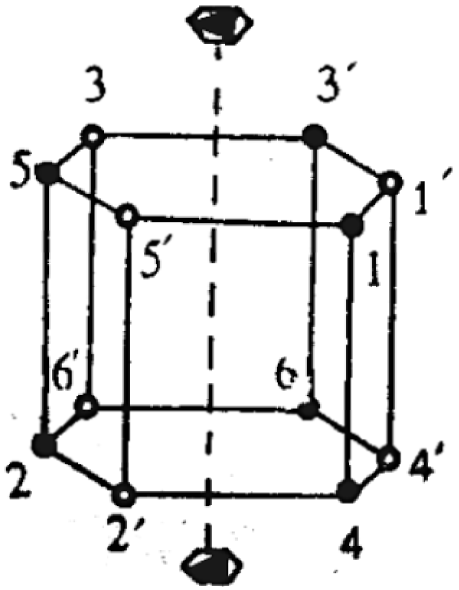
旋转－反演轴的对称操作：



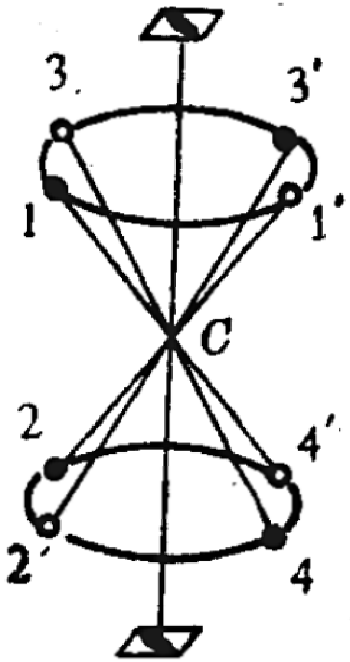
(a) $\bar{1}=i$　(b) $\bar{2}=m$　(c) $\bar{3}=3+i$

1次反轴为对称中心；2次反轴为对称面；
3次反轴为3次轴加对称中心

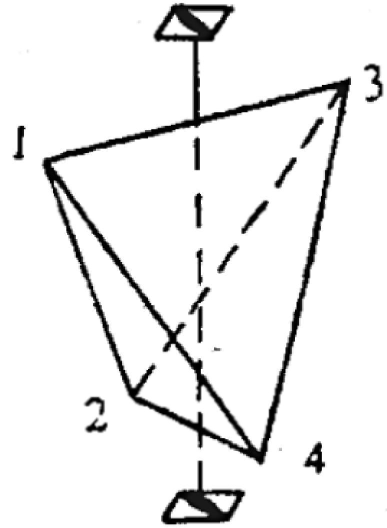
旋转一反演轴的对称操作：



(d) $\bar{6}=3+m$



(e) $\bar{4}$



(e′) $\bar{4}$

6次反轴为3次轴加对称面；4次反轴可以独立存在。

点群的Schönflies符号：

主轴：C_n、D_n、S_n、T和O

C_n：n次旋转轴； S_n：n次旋转－反映轴；

D_n：n次旋转轴加上一个与之垂直的二次轴

T：四面体群； O：八面体群。

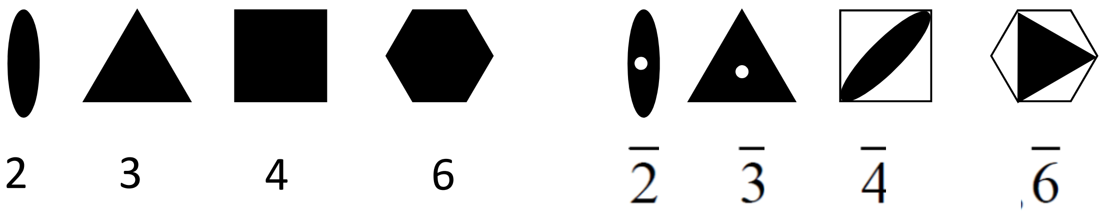
脚标：h、v、d

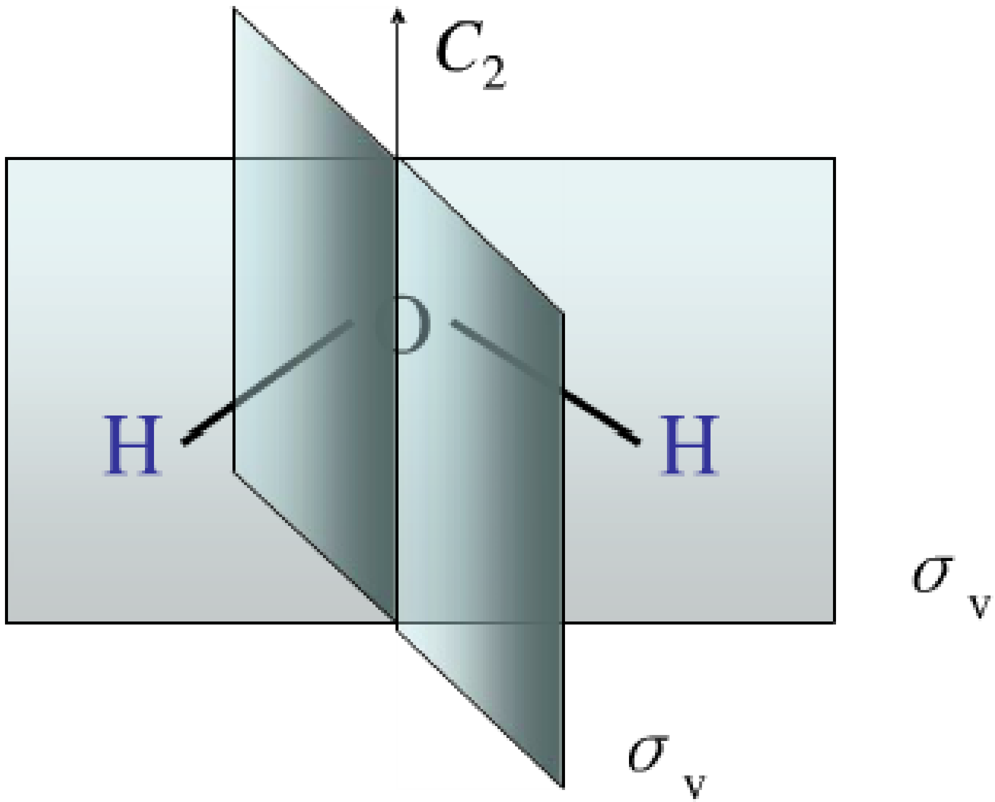
h：垂直于n次轴（主轴）的水平面为对称面；

v：含n次轴（主轴）在内的竖直对称面；

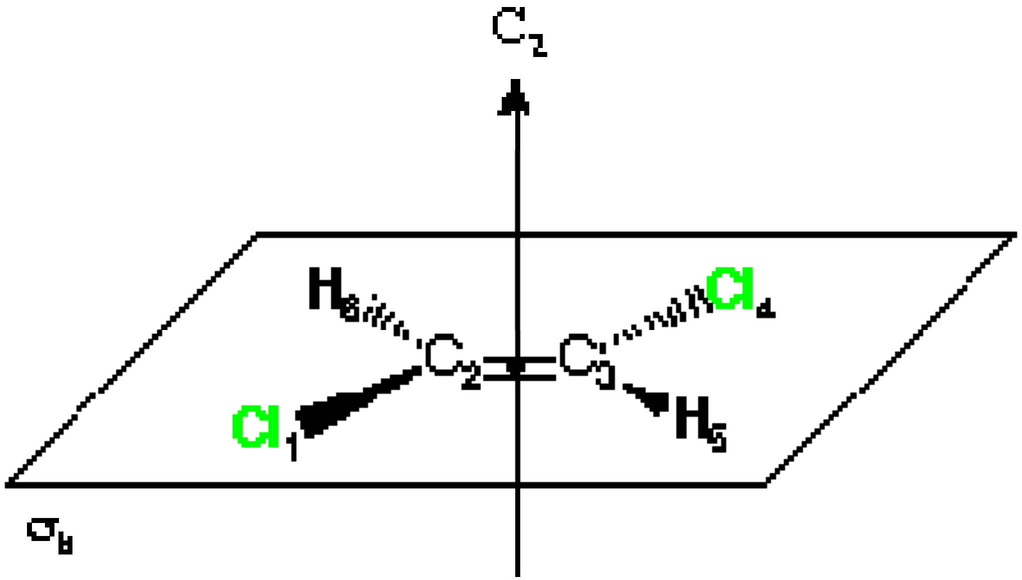
d：垂直于主轴的两个二次轴的平分面为对称面。

对称轴表示符号：





H_2O： C_{2V}



$C_2H_2Cl_2$： C_{2H}

对称操作数学上的描述？

对称操作的数学表示

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\overleftrightarrow{A}_{ij} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

其中 A_{ij} 为正交矩阵

正交变换保持向量的长度不变，也保持两个向量之间的角度不变。

绕z轴转θ角

$$\overleftrightarrow{A}_{ij} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

中心反演

$$\overleftrightarrow{A}_{ij} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

反映，z=0的平面

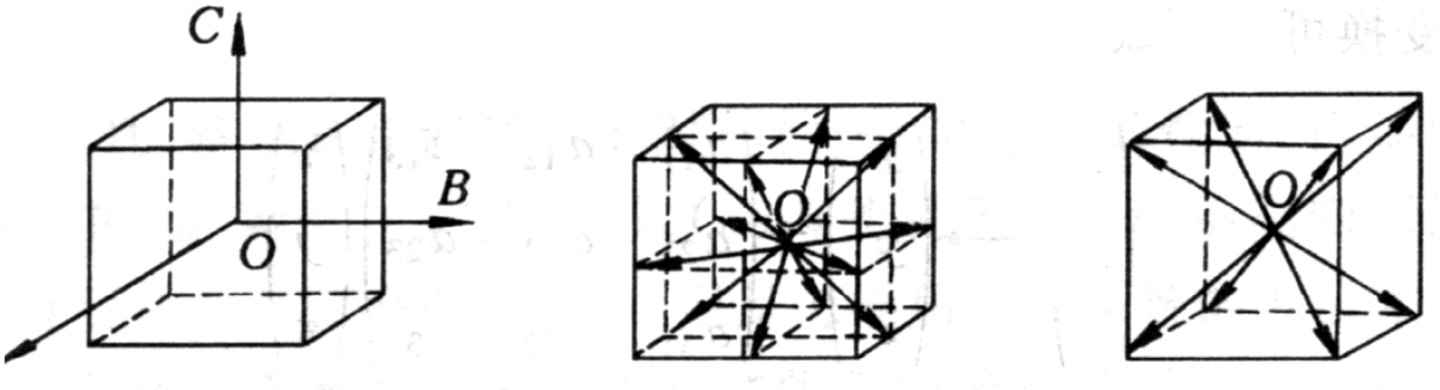
$$\overleftrightarrow{A}_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

如果，一个物体在某一正交变换下保持不变，我们就称这个变换为物体的一个对称操作。

绕 x 轴转 θ 角？

对称性

一个物体可能的对称操作越多，它的对称性就越高。立方体具有较高的对称性，它有48个对称操作：绕4 条体对角线可以旋转2/3 π和4/3 π共8个对称操作；绕3 个立方边可以旋转π/2， π，3 π/2共9个对称操作；绕6 条棱对角线可以转动π ，共6 个对称操作；加上恒等操作共24个。立方体体心为中心反演，所以以上每一个操作加上中心反演后，仍为对称操作，因此立方体共有48个对称操作。

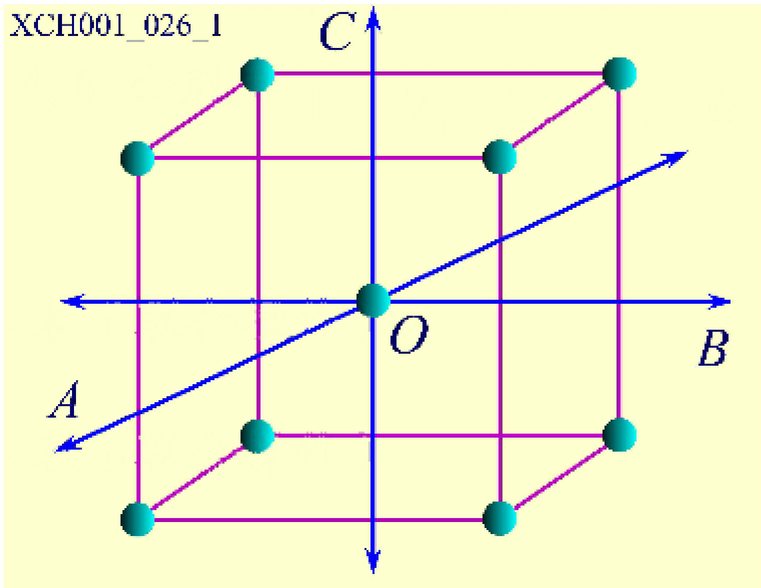


1 立方体的对称操作

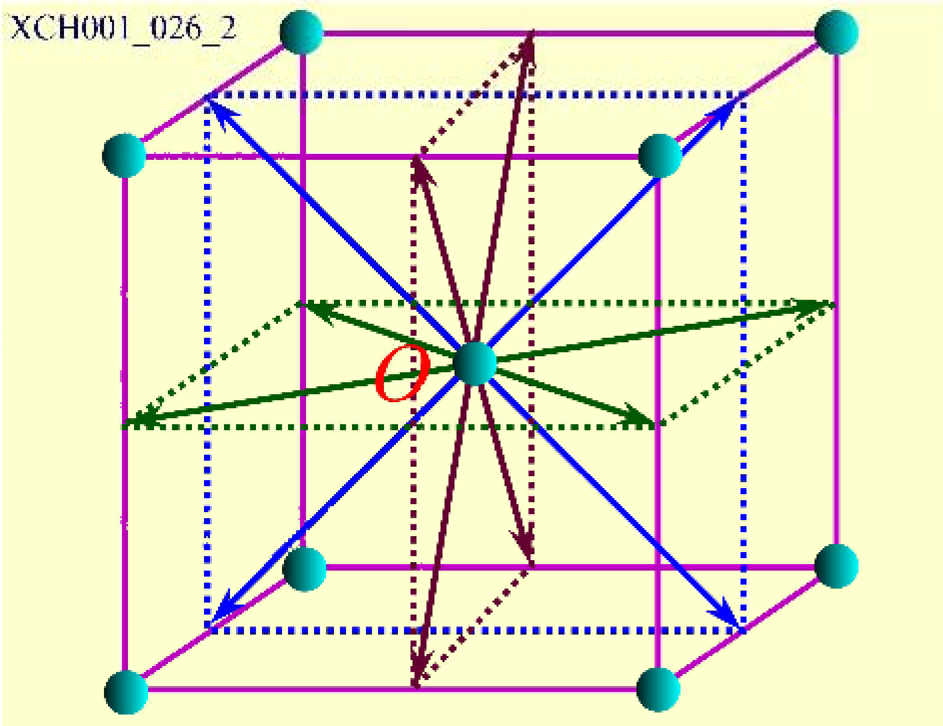
1) 绕三个立方轴转动

$$\frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$$

—— **9**个对称操作



2) 绕6条面对角线轴转动 —— 共有6个对称操作



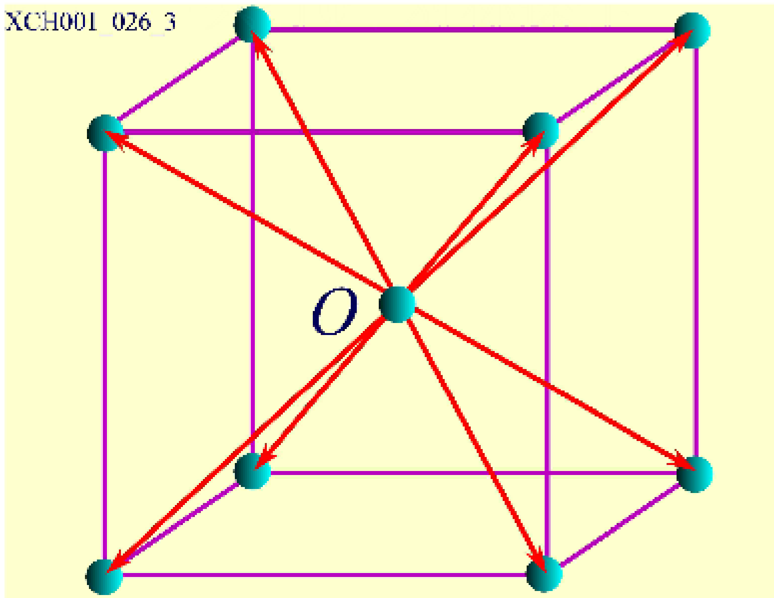
3) 绕**4**个立方体对角线轴转动 $\dfrac{2\pi}{3}, \dfrac{4\pi}{3}$

—— **8**个对称操作

4) 正交变换(不动)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

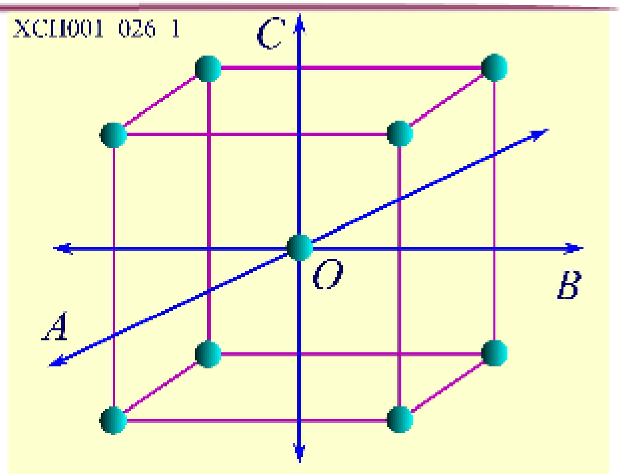
—— **1**个对称操作

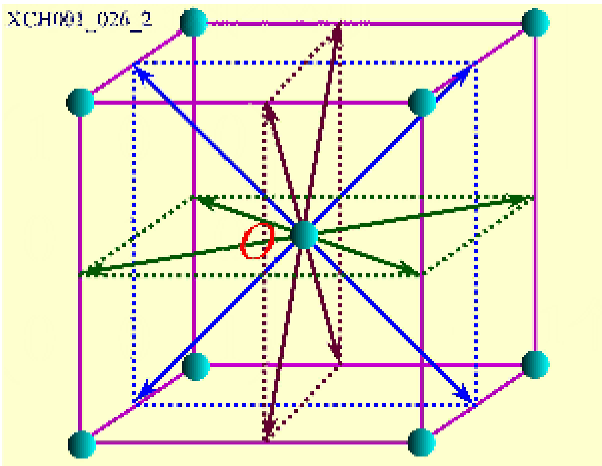


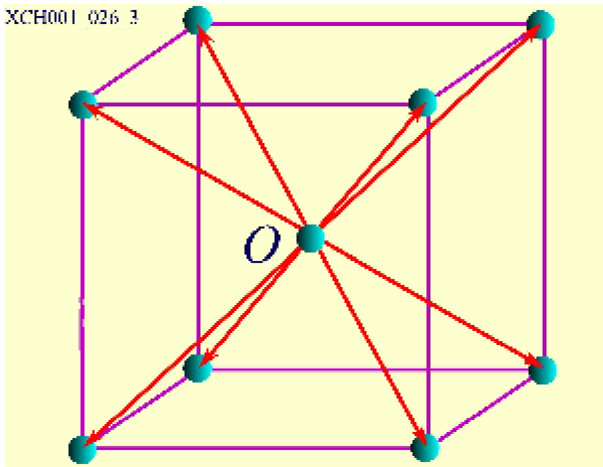
5) 以上**24**个对称操作

加中心反演仍是对称操作

—— 立方体的对称操作共有**48**个

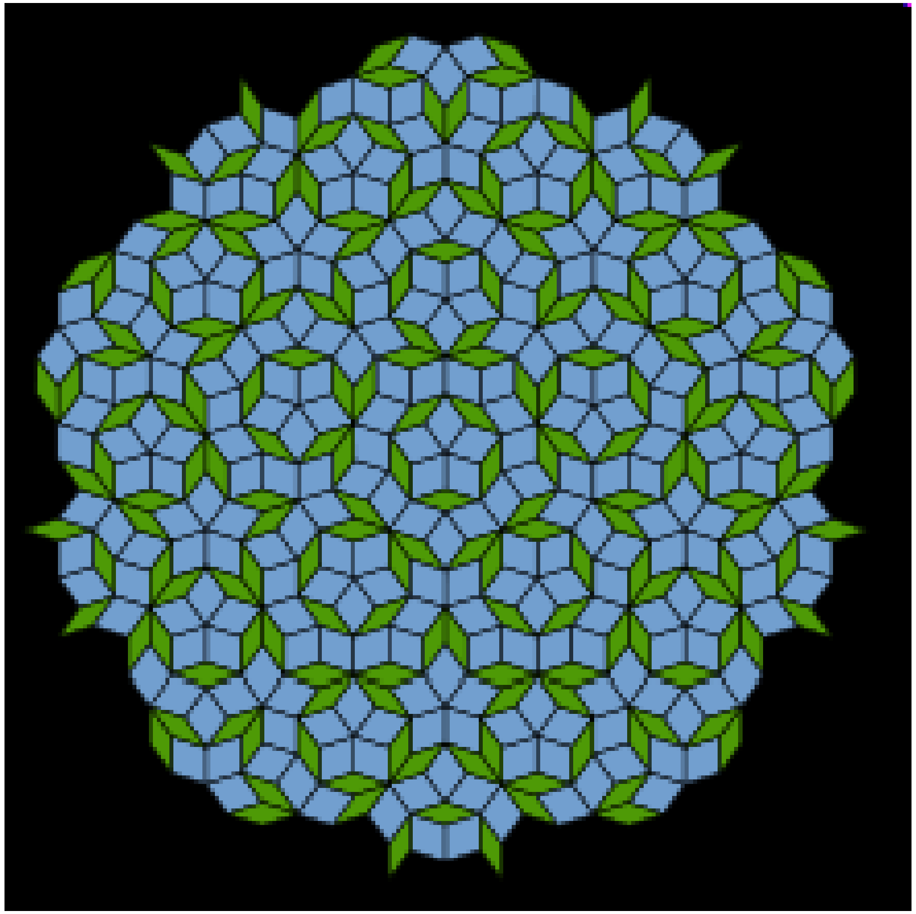




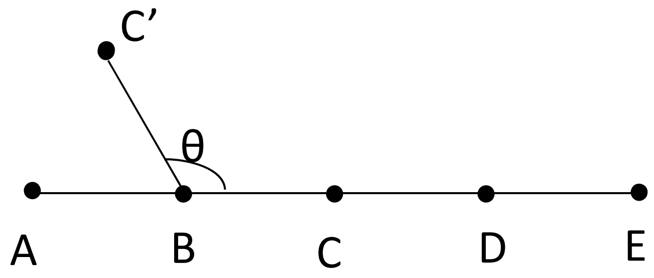


Point Group in Crystal 晶体中的点群

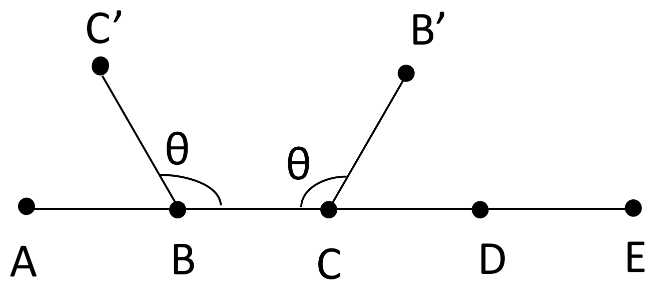
是否所有对称操作都会在晶体中存在？



晶体许可的旋转对称轴



设A、B、C、D、E在同一晶列上，通过B轴有一个通过平面的对称轴，C点通过对称轴旋转角度θ，得到的C’点应该仍然是晶体点阵中的格点



由于晶格点阵中的每个点都是等价的，因此通过C点也有一个对称轴，B点绕这个对称轴旋转θ的n倍，应该同样可以得到晶格中的一个点，取n=-1，也就是B绕通过C的对称轴旋转角度- θ，可以得到B’

由于BC和B’C’平行，属于同一方向的晶列，周期性要求他们有同样或整数倍的间距，即：BC=mB’C’,其中m为整数

由图可知：B’C’=BC(1-2cos θ)，可以得到m=1-2cos θ

将m=-1,0,1,2,3代入，可以得到θ=0, 2π /6, 2π/4, 2π/3, 2π/2，也就是说只有2、3、4、6这四种旋转轴存在，5度转轴不存在！

晶体本身对称操作后不变，其晶体点阵在对称操作后也应该保持不变，晶体点阵的周期性限制了晶体所可能有的点对称操作数目，可以证明不论任何晶体，它的宏观对称元素最多只可能有10种（一说8种）对称元素：

$$1, 2, 3, 4, 6, \bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$$

说明：$\bar{2}$ 是反映面 m，而 $\bar{3} = 3 + i, \bar{6} = 3 + m$ 不是独立的。

8种说法指：$1, 2, 3, 4, 6, i, m, \bar{4},$

实际晶体的对称性就是由以上八种独立点对称元素的各种可能组合之一，由对称元素组合成对称操作群时，可以证明总共只能有32种不同的组合方式，称为32 种点群。形形色色的晶体就宏观对称性而言，总共只有这32 种类型，每种晶体一定属于这32 种点群之一。点群是晶体宏观对称性的体现。

32种点群

不动操作：C_1

只包含有一个旋转轴的：C_2, C_3, C_4, C_6
包含一个n重轴和与之垂直的二重轴：D_2, D_3, D_4, D_6

上述点群加上反演中心或镜面：

C_1+反演中心=C_i　C_1+镜面=C_s

C_n+与n重轴垂直的镜面=C_{nh}, 四个
C_n+包含n重轴的镜面=C_{nv}, 四个

D_n+与n重轴垂直的镜面=D_{nh}
D_n+通过n重轴和两根二重轴角平分线的镜面：D_{nd}，　两个

只包含旋转反演轴的：S_n，S_4, S_6

立方体群O_h, O_h群中24个纯转动操作O
正四面体群T_d, T_d群中12个纯转动操作T，T+中心反演T_h

7个晶系

根据某些特征对称元素，把32 种点群归并为7个晶系。这是对晶体对称性更概括的分类。相应于这7个晶系的点阵及选择出的点阵原胞（通过对晶轴相对取向的选择）也应该体现这些晶系的对称性，我们称之为惯用晶胞。

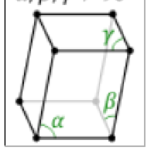
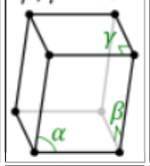
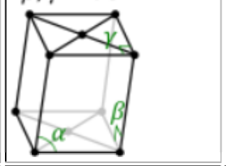
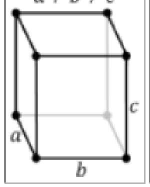
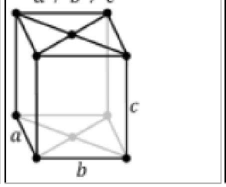
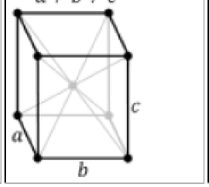
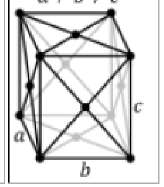
1. 三斜晶系 **Triclinic**
   除了**1**次轴或中心反演外无其他对称元素
2. 单斜晶系 **Monoclinic**
   最高对称元素是一个**2**次轴或镜面
3. 正交晶系 **Orthorhombic**
   最高对称元素是**2**个以上的**2**次轴或镜面
4. 四方晶系 **Tetragonal**
   最高对称元素是一个**4**次轴或一个**4**次旋转**-**反演轴
5. 立方晶系 **Cubic**
   具有 **4** 个**3**次轴
6. 三方晶系 **Trigonal** **(**菱方晶系 **Rhombohedral)**
   最高对称具有唯一的**3**次轴或**3**次旋转**-**反演轴
7. 六方晶系 **Hexagonal**
   最高对称具有唯一的**6**次轴或**6**次旋转**-**反演轴

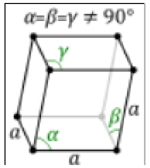
14 种 Bravais 格子：

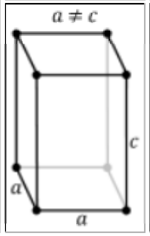
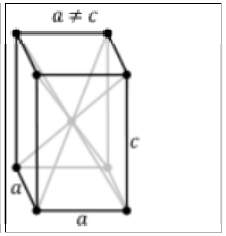
根据晶体的对称性特征，我们已经将晶体划分成七个晶系，每个晶系都有一个能反映其对称性特征的晶胞，每个晶胞的端点安放一个阵点，就是一种晶体点阵的原胞，共形成 7 种点阵。现在考虑在原胞体心、面心和单面心上增加阵点的可能，**新的图像必须符合平移对称性和晶系对称性的要求，且又不同于上述 7 种简单点阵，结果又给出 7 种新的点阵类型，所以既能反映平移对称性又能反映所属晶系对称性特征的晶体点阵共有14种**，它们的惯用晶胞如下页所示：P：简单格子；C：底心格子；I：体心格子；F：面心格子，三方晶系的菱形原胞用 R 表示。

晶系	对称性特征	晶胞参数	所属点群	Bravais格子
三斜	只有C_1或C_i	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	C_1、C_i	P
单斜	唯一C_2或C_S	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^o \neq \beta$	C_2、C_S、C_{2h}	P、C
正交	三个C_2或C_S	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$	D_2、C_{2V}、D_{2h}	P、C、I、F
三方	唯一C_3或S_6	$a=b=c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^o$	C_3、S_6、D_3 C_{3V}、D_{3d}	R
四方	唯一C_4或S_4	$a=b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$	C_4、S_4、C_{4h}、D_4 C_{4V}、D_{2d}、D_{4h}	P、I
六方	唯一C_6或S_3	$a=b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^o \gamma = 120^o$	C_6、C_{3h}、C_{6h}、 D_6、C_{6V}、D_{3h}、 D_{6h}	H
立方	四个C_3	$a=b=c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$	T、T_h、T_d O、O_h	P、I、F

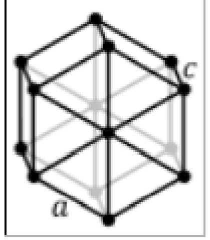
14 Bravais lattices (3D)

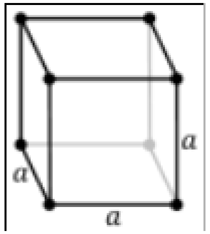
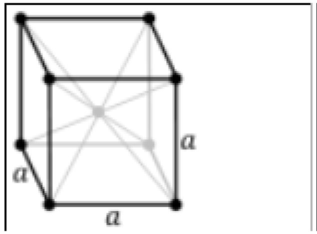
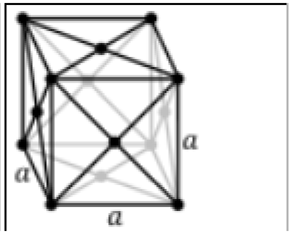
The 7 lattice systems (From least to most symmetric)	**The 14 Bravais Lattices**				**Examples**
1. triclinic (none) 三斜晶系	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 		简单三斜		
	simple	base-centered			
2. monoclinic (1 diad) 单斜晶系	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 			
	简单单斜	底心单斜			
	simple	base-centered	body-centered	face-centered	
3. orthorhombic (3 perpendicular diads) 正交晶系	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	
	简单正交	底心正交	体心正交	面心正交	

4. rhombohedral (1 triad) 三角晶系		简单三角

	simple	body-centered
5. tetragonal (1 tetrad) 四方晶系		

简单四方　体心四方

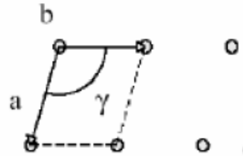
6. hexagonal (1 hexad) 六角晶系		六角

	simple (SC)	body-centered (bcc)	face-centered (fcc)
7. cubic (4 triads) 立方晶系			
	简单立方 sc	体心立方 bcc	面心立方 fcc

二维情形：

10个晶体学点群，4个晶系，5种布拉维格子

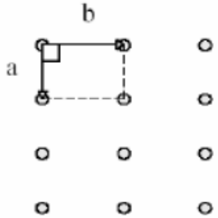
斜方



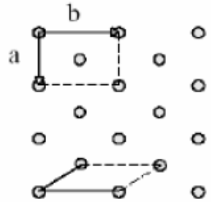
Oblique

$$a \neq b, \gamma \neq 90^{\circ}$$

长方



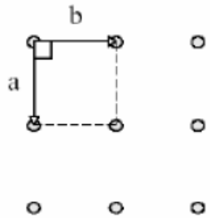
Rectangular



Centered Rectangular

$$a \neq b, \gamma = 90^{\circ}$$

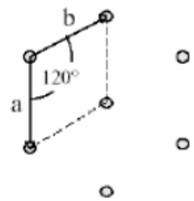
正方



Square

$$a = b, \gamma = 90^{\circ}$$

六角



Hexagonal

$$a = b, \gamma = 120^{\circ}$$

晶体微观对称性的体现Space Group 空间群

14 种晶体点阵各有它们自己的惯用晶胞，同样也可以选出它们各自的原胞和基矢，每一个点阵都可以用其基矢表示的点阵矢量来表示：

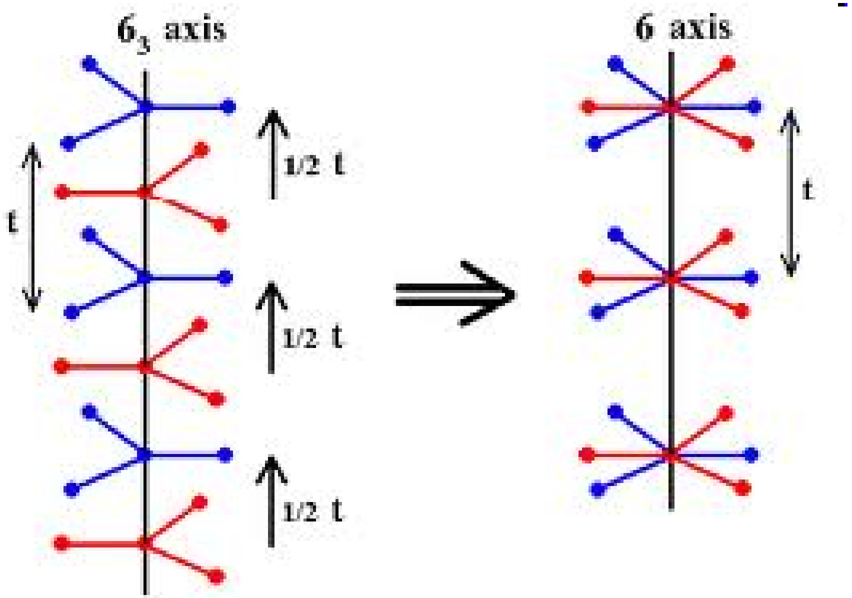
$$\overline{R}_n = n_1\overline{a}_1 + n_2\overline{a}_2 + n_3\overline{a}_3$$

每一个点阵的全部平移矢量之和构成平移操作群。所以**晶体共有14个平移操作群**。使晶体复原的全部转动、平移操作群的集合构成**空间群**。

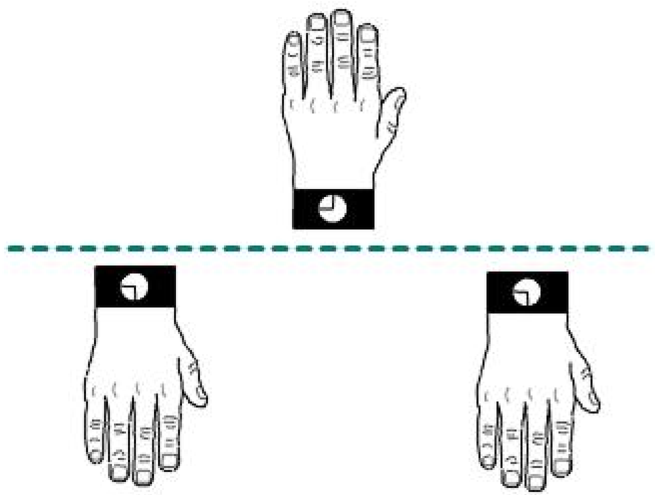
晶体的微观结构必须考虑与平移有关的对称元素：

1. 平移操作与平移轴。
2. 螺旋旋转与螺旋轴。
3. 滑移反映与滑移面

32种点群，再加上这3类可能的操作就可以导出230种空间群。



6度螺旋轴 (screw axis)
n度螺旋轴是旋转2π/n 与沿轴向平移的复合操作



滑移面 (Glide plane)
滑移反映：平移+反映

空间群是对晶体对称性更细致的分类，反映了晶体中各原子的位置及环境特点，对于深入分析晶体的性质，非常重要。

所有的晶体结构，就它的对称性而言，共有230种类型，这是理论上的分析结果，至目前为止，还有几十种空间群尚未找到具体晶体的例子。

点群对称性和晶体的物理性质：

物体的物理性质，常通过两个物理量之间的关系来定义，例如以下关系分别给出密度、电导率和介电常数：

$$M = \rho_m V, \overline{j} = \sigma \overline{E}, \overline{D} = \varepsilon \varepsilon_0 \overline{E}$$

晶体的很多物理性质是各向异性的，均依赖于测量方向，数学上表示为二阶张量：$D_i = \varepsilon_0 \sum_j \varepsilon_{ij} E_j$

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

Neumann定理：**晶体的任一宏观物理性质一定具有它所属点群的一切对称性**。因而点群的对称性将会大大减少独立张量元的数目。通常，可以通过选择坐标轴为主轴，使张量对角化来达到。

（1）若晶体物理性质的对称性高于晶体所属点群对称性，则高出的部分是由该物理性质张量的固有对称性所决定的。

（2）晶体物理性质的对称性不能低于晶体所属点群的对称性。

设对称操作对应的正交变换矩阵为：

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

坐标变换满足：

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}\bullet\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

则二阶张量T相应的变换为：$T'=ATA^{-1}$，其中A^{-1}为A的逆矩阵

对于正交变换矩阵，有：$A^{-1}=A^{T}$，其中A^{T}是A的转置矩阵

所以有$T'=ATA^{T}$，即：$T_{ij}'=\sum_{mn} a_{im}a_{jn}T_{mn}$

由于对称操作前后晶体还原，应有：$T'=T$，即 $T=ATA^{T}$

$$T_{ij}=\sum_{mn} a_{im}a_{jn}T_{mn}$$

这要求张量T的分量间存在一定的关系，因此晶体的点群对称性大大减少了独立分量数目

参考阎守胜书

例子：对于具有立方对称的晶体，其介电常数可以表示为：$\varepsilon_{ij}=\varepsilon_0\delta_{ij}$
即只有非零且相等的对角分量

我们取两个对称操作：绕x轴转180°，绕z轴转90°

其相应变换矩阵为：$A_x=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$ $A_z=\begin{pmatrix}0 & -1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$

先考虑绕x轴转180°：

$$\begin{pmatrix}\varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13}\\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23}\\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13}\\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23}\\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

由此得到： $\varepsilon_{12}=0,\varepsilon_{13}=0,\varepsilon_{21}=0,\varepsilon_{31}=0$

$$\varepsilon=\begin{pmatrix}\varepsilon_{11} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23}\\ 0 & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33}\end{pmatrix}$$

再绕z轴转90 °：

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ 0 & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ 0 & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

由此得到： $\varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} = 0, \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22}$

同理，若绕y轴转90 °，将得到 $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{33}$

因此 $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = \varepsilon_0$

即： $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_0 \delta_{ij}$

习题

1.5（黄昆书1.10）找出立方体中保持x轴不变的所有对称操作，并指出它们中任意两个操作乘积的结果。

1.6 （阎守胜书2.5）如将布拉维格子的格点位置在直角坐标系中用一组数（n_1,n_2,n_3）表示，证明（1）对于体心立方格子，n_i全部为偶数或奇数；（2）对于面心立方格子，n_i的和为偶数。

1.7（阎守胜书2.9）证明六角晶体的介电常数张量为 $\begin{pmatrix} \varepsilon_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\perp} \end{pmatrix}$