



951548

高等学 校  
工 科 电 子 类 规 划 教 材

# 晶 体 物 理 学

闫西林 阮永丰 吴顺华 郭阿强 编

73  
714



電 子 工 業 出 版 社

高等学校工科电子类规划教材

# 晶体物理学

阎西林 阮永丰 编  
吴顺华 郭阿强

电子工业出版社

## 内 容 简 介

本书从晶体结构的对称性、群和张量理论基础起步,在此基础上介绍了电子工程中所需的晶体的主要宏观物理性质及其与对称性的关系。第一章结合实例介绍晶体的宏观对称性、点群及张量基础(12学时)。第二、三、四章分别介绍晶体的弹性、压电、热释电、铁电性质和光学性质(计30学时)。第五章将晶体作为热力学系统,讨论晶体的物理性质之间的关系(8学时)。

本书篇幅少、内容精,重点突出、针对性强,适合教学,可作为电子材料与元器件、应用物理、材料物理等专业的研究生和高年级本科生的教材或参考书,也可供有关的工程技术人员参考。

高等学校工科电子类规划教材

### 晶体物理学

顾西林 阮永丰 吴顺华 郭阿强 编

责任编辑 高平

\*

电子工业出版社出版

北京市海淀区万寿路173信箱(100036)

电子工业出版社发行 各地新华书店经销

中国科学院印刷厂印刷

\*

开本: 787×1092毫米 1/16 印张: 8.375 字数: 208千字

1995年10月第一版 1995年10月北京第一次印刷

印数: 1000册 定价: 6.80元

ISBN 7-5053-2821-2/G·228

## 前 言

本教材系按电子工业部的工科电子类专业教材 1986—1990 年编审出版规划,由电子材料与固体器件教材编委会电子材料与元器件编审小组征稿,推荐出版,责任编委为上海交通大学陈益新教授。

本教材由西安电子科技大学阎西林担任主编,东南大学孙承修教授担任主审。

本课程的参考学时为 50 学时。全书共分五章,第一章结合实例介绍了晶体的宏观对称性、点群、张量基础及确定晶体物理性质张量独立分量的群论方法。第二、三、四章分别介绍晶体的弹性、压电、热释电、铁电性质和光学性质。第五章将晶体作为热力学系统讨论与其力学、电学、热学性质有关的物理效应,给出描述这些效应的参数及它们之间的关系。编者一方面意识到这是一本工科电子类研究生和高年级本科生的教科书,又充分认识到学时少、篇幅短的特点,在保证理论体系及适当深度的前提下,结合专业特点,精选及合理安排内容,力图突出重点,满足教学的需要。对于某些并非不重要的内容和资料只好忍痛割爱而未收入本书,读者如需要可参阅各章所列参考书目。

本教材由天津大学阮永丰编写第一、三章,天津大学吴顺华编写第二、四章,西安电子科技大学郭阿强编写第五章。参加审阅工作的还有徐毓龙、谢道华教授等,为本书提出了许多宝贵意见,谨此表示诚挚的感谢。由于编者水平有限,书中难免存在缺点和错误,殷切希望广大读者批评指正。

编者  
1994 年 8 月

6A009108

# 目 录

<b>第一章 晶体物理学基础</b> .....	( 1 )
§ 1.1 晶体的对称性与对称要素.....	( 1 )
§ 1.2 群的概念与点群.....	( 2 )
§ 1.3 极射赤平投影图与 32 种晶体点群的推演.....	( 4 )
§ 1.4 各向异性晶体的介电系数、张量的概念.....	( 8 )
§ 1.5 张量的变换法则及张量的确切定义.....	( 9 )
§ 1.6 二阶对称张量 $[\epsilon_{ij}]$ 的几何表示及主轴化.....	( 11 )
§ 1.7 诺埃曼原理.....	( 14 )
§ 1.8 实用的张量变换法之一——下标变换法.....	( 16 )
§ 1.9 介电张量 $[\epsilon_{ij}]$ 在不同晶系中的形式.....	( 18 )
§ 1.10 实用的张量变换法之二——循环坐标变换法.....	( 22 )
§ 1.11 群的表示的基础知识.....	( 25 )
§ 1.12 确定张量的非零独立分量的群论方法.....	( 27 )
<b>第二章 晶体的弹性</b> .....	( 33 )
§ 2.1 应力张量.....	( 33 )
§ 2.2 应变张量.....	( 37 )
§ 2.3 胡克 Hooke 定律.....	( 43 )
§ 2.4 声波在晶体中的传播.....	( 47 )
<b>第三章 晶体的压电、热释电和铁电性质</b> .....	( 53 )
§ 3.1 压电效应与反压电效应.....	( 53 )
§ 3.2 压电方程与机电耦合系数.....	( 54 )
§ 3.3 压电晶体的切型、振动模式及应用举例.....	( 56 )
§ 3.4 晶体的热释电和铁电性质.....	( 61 )
§ 3.5 铁电相变的种类与机制.....	( 64 )
<b>第四章 晶体光学性质</b> .....	( 69 )
§ 4.1 单色平面波在晶体中的传播.....	( 69 )
§ 4.2 光率体和折射率曲面.....	( 72 )
§ 4.3 晶体的旋光效应.....	( 84 )
§ 4.4 弹光效应.....	( 88 )
§ 4.5 电光效应.....	( 92 )
<b>第五章 晶体的热力学理论</b> .....	( 97 )
§ 5.1 晶体宏观物理性质的热力学基础.....	( 97 )
§ 5.2 线性状态方程及物性参数.....	( 100 )
§ 5.3 物性参数之间的关系.....	( 107 )
§ 5.4 理论的进一步推广及其局限性.....	( 112 )
<b>附录一 32 种晶体点群的极射赤平投影图</b> .....	( 115 )
<b>附录二 32 种点群的特征标表</b> .....	( 116 )
<b>附录三 晶体物理性能的矩阵表示</b> .....	( 122 )

# 第一章 晶体物理学基础

## § 1.1 晶体的对称性与对称要素

晶体的外形具有规则的对称性。这种对称性是指对晶体进行一定的操作后，晶体能够自身重合。例如把立方体的岩盐晶体以对面中心连线为轴转动  $90^\circ$  后，它能够自身重合。类似这种能使图形自身重合的操作，叫做对称操作。

在对称操作中，有一些假想的、不动的几何要素（如立方体的对面中心连线等），称为对称要素。就保持晶体外形不变的宏观对称性来说，基本的对称操作与对称要素包括：

### 一、反演操作与对称中心

反演操作是指将空间的一点  $P$  相对于某固定点  $O$  连线，并反方向延伸到  $P'$ ，使  $OP' = OP$  的操作，并称  $P'$  是  $P$  相对于  $O$  的反演。参见图 1-1。若取  $O$  点为坐标原点的话，则反演操作就是将  $P(x, y, z)$  变换到  $P'(-x, -y, -z)$  的操作。显然，反演操作的对称要素是点  $O$ ， $O$  点称为对称中心（或反演中心）。对称中心的熊夫利（Schoenflies）符号为  $C_i$ ，国际符号为  $\bar{1}$ 。

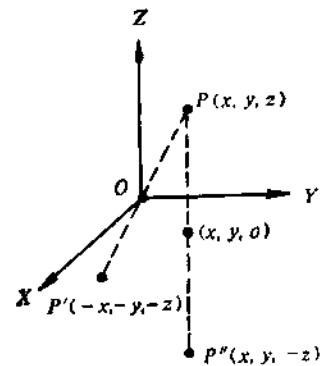


图 1-1 反演操作与反射操作

### 二、反射操作与对称面(镜面)

有些图形(包括晶体的外形)能够被一个假想的镜面分成互成镜象的两个等同部分，这个假想的镜面叫做对称面(或者就叫做镜面)，将图形的镜面外部分变换到镜面内部分的操作，叫做反射。参见图 1-1，如果取  $XOY$  面为镜面的话，则反射操作就是将  $P(x, y, z)$  变换到  $P''(x, y, -z)$  的操作。对称面的熊夫利符号为  $C_s$ ，国际符号为  $m$ 。

### 三、旋转操作与旋转轴

旋转对称操作是图形(或晶体)绕通过其中心的轴旋转一定角度后能够自身重合的操作，其对称要素是该旋转轴。设可使晶体自身重合的最小转角为  $\theta$ ，则晶体在旋转一周内可使自身重合的次数为

$$n = \frac{2\pi}{\theta}$$

相应的旋转轴称为  $n$  次轴。晶体由于受到内部点阵结构的限制。只可能有 1, 2, 3, 4, 6 次旋转轴。它们的熊夫利符号分别为  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$ ，相应的国际符号为 1, 2, 3, 4, 6。

### 四、旋转反演操作与转反轴

旋转反演是指将空间某点旋转一定角度后再对中心进行反演的复合操作。同旋转轴一样，在晶体中也只能存在 1, 2, 3, 4, 6 次转反轴。其国际符号分别为  $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ 。

兹将晶体的宏观对称要素及其符号列于表 1-1 之中。

表 1-1 晶体的宏观对称要素及其表示符号

对称要素		图示	熊夫利符号	国际符号	说明
对称中心		无	$C_i$	$\bar{1}$	
对称面(镜面)		直线或圆	$C_s$	$m$	
旋转轴	1次轴	无	$C_1$	1	
	2次轴	●	$C_2$	2	
	3次轴	▲	$C_3$	3	
	4次轴	■	$C_4$	4	
	6次轴	●	$C_6$	6	
旋转反轴	1次旋转反轴	无	$C_i$	$\bar{1}$	等于对称中心
	2次旋转反轴	直线或圆	$C_s$	$\bar{2}(=m)$	等于对称面
	3次旋转反轴	▲	$C_{3i}$	3	等于3次轴加反演
	4次旋转反轴	■	$S_4$	$\bar{4}$	包含2次轴
	6次旋转反轴	●	$C_{3i}$	$\bar{6}(=\frac{3}{m})$	等于3次轴加水平镜面

## § 1.2 群的概念与点群

为了理解群的概念,我们来考察下述图形的对称性。如图 1-2 所示,设有正三角形  $ABC$  位于  $XOY$  平面上。三角形的中心  $O$  为坐标系原点,  $Z$  轴垂直于纸面(图中未画),则该图形有如下对称性:

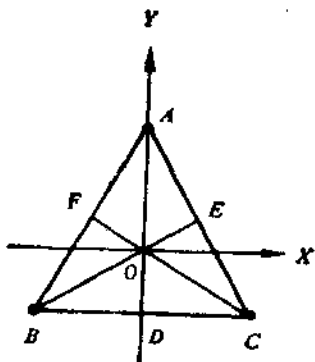


图 1-2 正三角形的对称性

(1)  $E$ —代表使图形绕  $Z$  轴沿逆时针方向旋转一周(等于不动)的对称操作。实际上任何图形都具有这种对称性。

(2)  $C_3^1$ —代表使图形绕  $Z$  轴沿逆时针方向旋转  $\frac{2\pi}{3}$  角的对称操作。

(3)  $C_3^2$ —代表使图形绕  $Z$  轴沿逆时针方向旋转  $\frac{4\pi}{3}$  角的对称操作。

(4)  $\sigma_v$ —代表相对于由  $Y$  轴与  $Z$  轴决定的对称面(即  $YOZ$  面)的对称操作,一般记作  $\sigma_v^{(1)}$ 。

(5)  $\sigma_{yz}^{(2)}$ —代表相对于由  $BE$  与  $Z$  轴决定的对称面的对称操作,一般记作  $\sigma_{yz}^{(2)}$ 。

(6)  $\sigma_{xz}^{(3)}$ —代表相对于由  $CF$  与  $Z$  轴决定的对称面的对称操作,一般记作  $\sigma_{xz}^{(3)}$ 。

这六个对称操作彼此之间有一定联系。例如将图形绕  $Z$  轴转  $\frac{2\pi}{3}$  后再对  $YOZ$  面作反射,其效果等于直接进行  $\sigma_{yz}^{(2)}$  操作,即有如下“乘法”关系:

$$\sigma_{yz}^{(2)} C_3^1 = \sigma_{yz}^{(2)}$$

这里的“乘法”表示一种联合操作的意思。因此式中不可以写乘号,并且我们规定,先进行的操作写在乘积的右边。注意到在这里相乘不可交换是有意义的。否则将得出不同的结果。例如将上式中两个操作交换位置。则有:

$$C_3^1 \sigma_{yz}^{(2)} = \sigma_{yz}^{(2)}$$

显然,正三角形的各个对称操作具有表 1-2 所示的乘法表,表中第一行操作代表先进行的操作,第一列操作则代表后进行的操作。下面我们将看到,这 6 个操作构成一个群,我们把把这些操作称为群的元素。

表 1-2  $C_{3v}$  群乘法表

	$E$	$C_3^1$	$C_3^2$	$\sigma_{yz}^{(2)}$	$\sigma_{xz}^{(3)}$	$\sigma_{xy}^{(3)}$
$E$	$E$	$C_3^1$	$C_3^2$	$\sigma_{yz}^{(2)}$	$\sigma_{xz}^{(3)}$	$\sigma_{xy}^{(3)}$
$C_3^1$	$C_3^1$	$E$	$C_3^2$	$\sigma_{xz}^{(3)}$	$\sigma_{xy}^{(3)}$	$\sigma_{yz}^{(2)}$
$C_3^2$	$C_3^2$	$C_3^1$	$E$	$\sigma_{xy}^{(3)}$	$\sigma_{yz}^{(2)}$	$\sigma_{xz}^{(3)}$
$\sigma_{yz}^{(2)}$	$\sigma_{yz}^{(2)}$	$\sigma_{xz}^{(3)}$	$\sigma_{xy}^{(3)}$	$E$	$C_3^1$	$C_3^2$
$\sigma_{xz}^{(3)}$	$\sigma_{xz}^{(3)}$	$\sigma_{xy}^{(3)}$	$C_3^2$	$C_3^1$	$E$	$C_3^1$
$\sigma_{xy}^{(3)}$	$\sigma_{xy}^{(3)}$	$\sigma_{yz}^{(2)}$	$\sigma_{xz}^{(3)}$	$C_3^2$	$C_3^1$	$E$

现在,我们可以给出群的定义。

遵从如下条件的元素的集合  $\{E, A, B, C \dots\}$ , 称为群,记为  $G\{E, A, B, C \dots\}$ :

(1) 存在某种代数运算,使这个集合中的任意两个元素  $A, B$  的联合  $C$ , 仍然是集合中的一个元素,即有

$$AB = C$$

群的这一特性,称为封闭性。

(2) 集合中的任意元素  $A, B, C$ , 满足结合律

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

(3) 集合中包含一个恒等元素  $E$  (或称单位元素),它满足:

$$AE = EA = A$$

(4) 集合中的每一个元素  $A$ , 都有对应的逆元素  $A^{-1}$ , 且  $A^{-1}$  也属于这个集合,即:

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

显然,上述正三角形的六个对称操作的集合,构成了一个群,我们称之为  $C_{3v}$  群。

群中元素的数目称为群的阶。若群的阶数有限,就称为有限群,否则称为无限群。若群中任意两个元素可以交换,即若有

$$AB = BA$$



则这个群又叫做交换群,或阿贝尔群。显然,  $C_{3v}$  群的阶数为 6, 它是一个有限群, 而且不是交换群。又如, 下述四个数的集合  $\{1, -1, i, -i\}$  按照普通乘法构成了一个 4 阶的交换群。

如果群的各个对称操作的对称要素(点、线、面)都相交于一点, 这个群就叫做点群。例如, 在  $C_{3v}$  群中, 正三角形的中心  $O$  点就是一个这样的点, 因而,  $C_{3v}$  群是一个点群。

### § 1.3 极射赤平投影图与 32 种晶体点群的推演

晶体点群共有 32 种, 我们要逐个地介绍它们。为了形象地表示出各种点群, 通常采用所谓的极射赤平投影图(简称赤平投影图)。在赤平投影图上, 有一个圆圈(即投影圆)。它代表一个过晶体中心点的平面(即所谓的赤道平面), 如果这个面本身是一个对称面, 则画成实线圆圈, 否则画成虚线圆圈。各种旋转主轴画在圆心处(这意味赤道平面与晶体主轴是垂直的)。圆的直径既可代表通过主轴的对称面, 又可代表一个与主轴垂直的水平旋转轴。赤道面上方的点用“·”表示, 下方的点用“○”表示。

(1) 我们从转动群出发, 如前所述, 在晶体中只能存在 1, 2, 3, 4, 6 五种转动轴, 对应的点群分别是  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$  群, 统称为  $C_n$  群, 它们的赤平投影图如图 1-3 所示。

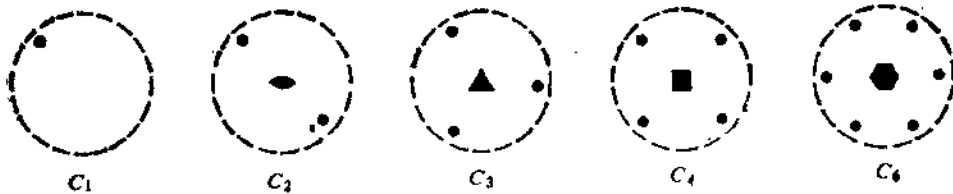


图 1-3  $C_n$  群赤平投影图

(2) 给  $C_n$  群分别增加一个水平的对称面, 又可得到五个群, 它们分别是  $C_{1h}(C_s), C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}$  群, 统称为  $C_{nh}$  群。这里的下标  $h$  表示水平对称面的意思。 $C_{nh}$  群的赤平投影图如图 1-4 所示。

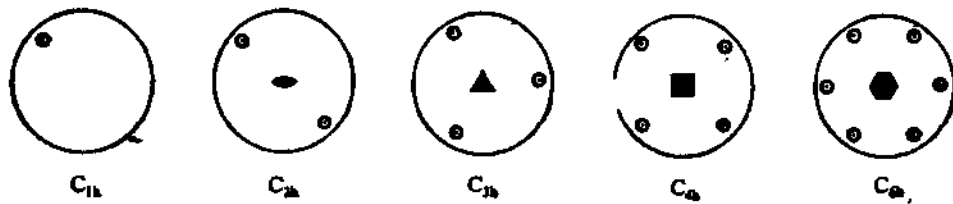


图 1-4  $C_{nh}$  群赤平投影图

(3) 如果给  $C_n$  群各增加一个通过主轴的竖直对称面, 则除  $C_1$  群以外, 又可得到四个新群。它们是  $C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$ , 统称为  $C_{nv}$  群, 这里的下标  $v$  表示通过主轴的竖直对称面。由于“ $C_{1v}$ ”同  $C_{1h}$  没有什么差别, 因而  $C_{1v}$  不算是新群。还应当指出的是, 如果存在一个通过  $n$  次转轴的竖直对称面的话, 则一定还有  $(n-1)$  个竖直对称面存在, 这是群论中的一个定理<sup>[1]</sup>, 我们就不给证明了。 $C_{nv}$  群的赤平投影图如图 1-5 所示。

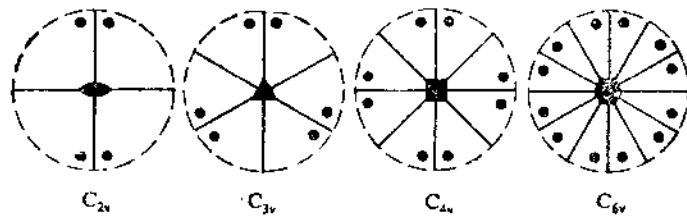


图 1-5  $C_n$  群赤平投影图

(4) 如果给  $C_n$  群各增加一个水平的二次轴, 则除  $C_1$  之外, 又可得到四个新群, 分别记为  $D_2, D_3, D_4, D_6$ , 统称为  $D_n$  群。给  $C_1$  群引入一个水平的二次轴, 实际上就是  $C_2$  群, 没有新群产生。同样应当指出, 如果有一个水平的二次轴与一个  $n$  次转轴垂直, 则必定还有  $(n-1)$  个水平的二次轴存在, 这也是群论中的一个定理<sup>[1]</sup>。  $D_n$  群的赤平投影图如图 1-6 所示。

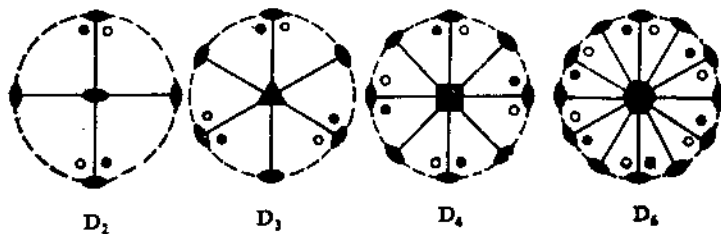


图 1-6  $D_n$  群赤平投影图

(5) 给  $D_n$  群各增加一个水平对称面, 则得到  $D_{nh}$  群, 其赤平投影图见图 1-7。

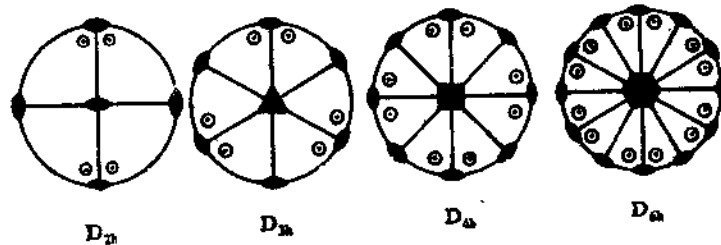


图 1-7  $D_{nh}$  群赤平投影图

没有必要给  $D_n$  群增加一个过主轴的竖直对称面。因为一个水平对称面与一个水平的二次轴的组合, 就相当一个竖直的对称面了, 因而不存在什么“ $D_{nh}$  群”。

(6) 给  $D_n$  群各增加平分两个二次轴夹角的对角对称面(用下标  $d$  表示), 对于  $n=2, 3$ , 又得出两个新群, 分别称为  $D_{2d}$  群和  $D_{3d}$  群, 其赤平投影如图 1-8 所示。

(7) 与三个转反轴  $\bar{1}, \bar{3}, \bar{4}$  相对应, 也有三个群, 熊夫利符号分别记为  $C_i, C_{3i}$  和  $S_6$  群。与转反轴  $\bar{2}, \bar{6}$  对应的其实就是  $C_1$  ( $C_i$ ) 和  $C_{3i}$  群, 我们已经介绍过它们了。  $C_i, C_{3i}, S_6$  群的赤平投影图如图 1-9 所示。

在晶体学中, 将  $n > 2$  的轴称为高次轴。上述 27 个晶体点群中, 或者是没有高次轴, 或者是只有一个高次轴(选作主轴), 它们分别属于低级点群和中级点群。还有 5 个点群, 它们都有

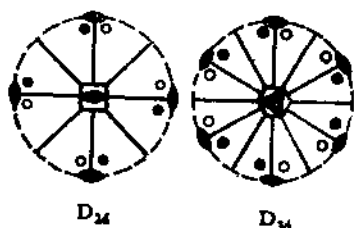


图 1-8  $D_{2d}$  群赤平投影图

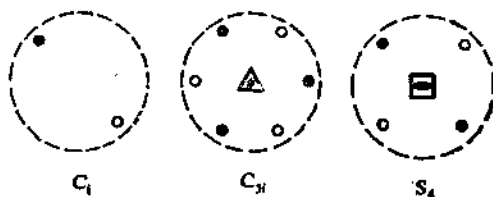


图 1-9  $C_{3h}$  群赤平投影图

一个以上的高次轴。这 5 个点群属于高级点群,下面我们就来简单地介绍它们。

### (8) $O$ 群和 $O_h$ 群

$O$  群是正方体的全部对称操作组成的群,这些对称操作的对称要素都是转动轴,其轴次分别为 4,3,2,它们分别位于每对对面心的连线,每条对角线及每相对两条棱中点的连线上。图 1-10 表示了正方体的对称性及  $O$  群的赤平投影图。

与前面已经见过的 27 种点群的赤平投影图不同,在  $O$  群的赤平投影图的投影圆内出现转动轴,以下将要介绍的其他高级点群有类似情形。这是因为,如已叙述, $O$  群与正方体的对称性有关,而这个正方体实际是投影球面的内接正方体(参见图 1-10),以 3 次轴为例,与每个 3 次轴对应的正方体的对角线的两个顶点,分别位于赤道平面的上、下方,它们与赤道面对方的球极(N 极或 S 极,均称为投影极)的连线,必然与赤道面相交于一点,从而在投影圆内得到了各自的投影。

$O_h$  群是  $O$  群的引伸,它是给  $O$  群增加一个水平对称面的结果。

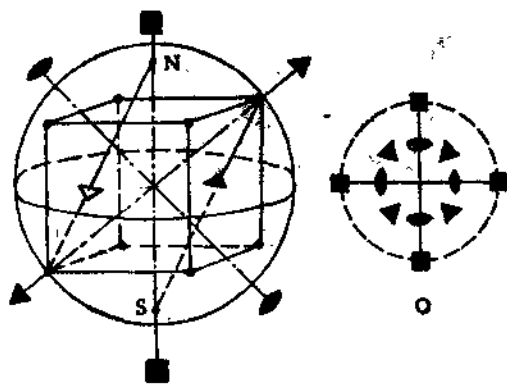


图 1-10 正方体的对称性和  $O$  群的赤平投影图

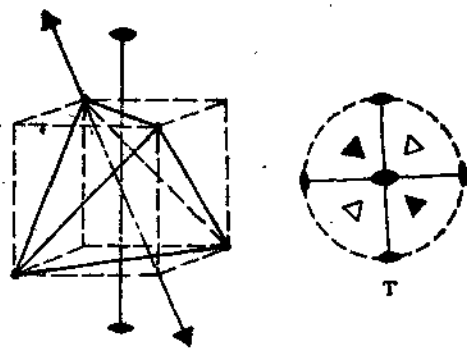


图 1-11 正四面体的对称性和  $T$  群的赤平投影图

### (9) $T$ 群和 $T_h$ 群、 $T_d$ 群

$T$  群是正四面体的全部对称操作的对称要素组成的群,它们也都是些纯转动轴,其轴次分别为 2 和 3,图 1-11 给出了这些轴的位置及  $T$  群的赤平投影图。对于  $T$  群,通常选 2 次轴为主轴。

同样, $T_h$  群是给  $T$  群增加一个水平对称面的引伸结果。而  $T_d$  群则是给  $T$  群增加对角对称面的引伸结果。

对于O群和T群,没有必要再引入竖直对称面了。因为这同引入水平对称面是一回事,并且由于在O<sub>h</sub>群中已经产生了六个对角对称面,因而也不能通过再给O群增加对角对称面来

表 1-3 32 个晶体点群与七大晶系的对应关系

低级晶族		中级晶族			高级晶族
三斜	单斜和正交	三方	四方	六方	立方
$C_1(1)$	$C_2(2)$	$C_3(3)$	$C_4(4)$	$C_6(6)$	$T(23)$
$C_1(\bar{1})$	$C_2(2 \text{ 或 } m)$	$C_{3i}(\bar{3})$	$S_4(\bar{4})$	$C_{6h}(\bar{6})$	
	$C_{2h}(\frac{2}{m})$		$C_{4h}(\frac{4}{m})$	$C_{6h}(\frac{6}{m})$	$T_h(m\bar{3})$
	$C_{2v}(mm2)$	$C_{3v}(3m)$	$C_{4v}(4mm)$	$C_{6v}(6mm)$	
		$D_{3d}(3m)$	$D_{2d}(\bar{4}2m)$	$D_{3h}(\bar{6}2m)$	$T_d(\bar{4}3m)$
	$D_2(222)$	$D_3(32)$	$D_4(422)$	$D_6(622)$	$O(432)$
	$D_{2h}(mmm)$		$D_{4h}(\frac{4}{m}mm)$	$D_{6h}(\frac{6}{m}mm)$	$O_h(m\bar{3}m)$
低级点群		中级点群			高级点群

表 1-4 点群的国际符号中的各位序的符号所代表的晶轴方向

晶系	位序	代表的方向
三斜	1	
单斜	2	2次轴 (b)
正交	1	(a)
	2	三个互相垂直的2次轴 2次轴 (b)
	3	(c)
三方	1	3次轴 (a + b + c)
	2	与3次轴垂直 (a - b)
四方	1	4次轴 (c)
	2	与4次轴垂直 (a)
	3	与4次轴垂直, 并与位2的方向交45°角 (a + b)
六方	1	6次轴 (c)
	2	与6次轴垂直 (a)
	3	与6次轴垂直, 并与位2的方向交30°角 (2a + b)
立方	1	立方体的棱 (a)
	2	立方体的对角线 (a + b + c)
	3	立方体的对角面 (a + b)

产生新群了。

在图 1-10 和图 1-11 中,为了清楚起见,我们省去了赤平投影图中的代表点,  $O$  群、 $T$  群及它们的引伸群  $O_h$ 、 $T_d$ 、 $T_h$  群的详细的赤平投影图,请参见附录一。

$O$  群和  $T$  群也可以看作是  $C_4$  和  $C_2$  群分别各增加一个 3 次轴的引伸结果。

这样,我们就从  $C_n$  群出发,推演出了 32 种晶体点群。

32 种点群与七大晶系的对应关系列于表 1-3 中。表 1-3 中每个点群的国际符号同时号标在括号中。采用国际符号来标记点群,可以把点群的对称性清楚地显示出来。国际符号中各位序字母所代表的晶轴方向,汇集表 1-4 之中。在表 1-4 中凡对称面的方向,则是指该面的法线方向。

### § 1.4 各向异性晶体的介电系数、张量的概念

本节以各向异性晶体的介电系数为例,引出张量的概念,同时也引出本书重点研究的张量之一——介电张量。在普通物理学和固体物理学中,我们已建立了电位移矢量  $D$ 、电场强度  $E$  和极化强度  $P$  的概念。它们之间满足:

$$D = \epsilon_0 E + P = \epsilon_0 \epsilon E \quad (1-1)$$

$$P = \epsilon_0 \chi E \quad (1-2)$$

$$\epsilon = 1 + \chi \quad (1-3)$$

式中,  $\chi$  称为极化系数,  $\epsilon$  称为介电系数。上述三式表明,  $P$ 、 $E$ 、 $D$  三者在同一方向上,  $\chi$  和  $\epsilon$  是一个纯数(标量)。在本课程中,我们要牢固建立如下概念:  $P$ 、 $E$ 、 $D$  处在同一方向,仅仅是一种特殊情况,它只对各向同性介质适合,在一般情况下,  $P$ 、 $E$ 、 $D$  三者处于不同方向,  $\chi$ 、 $\epsilon$  不是纯数(标量),而是我们下面将要引入的所谓张量。

以方解石 ( $\text{CaCO}_3$ ) 晶体为例,它的结构中有一个由三个  $\text{O}^{2-}$  组成的正三角形,设外电场方向在正三角形平面上(如图 1-12(a)所示),我们来讨论它们的极化。三个  $\text{O}^{2-}$  都有一个由外电场引起的基本极化,同时每个  $\text{O}^{2-}$  又都受到另外两个  $\text{O}^{2-}$  引起的附加极化。可以定性地看到,  $A$ 、 $C$  两个  $\text{O}^{2-}$  的沿外电场方向的附加极化基本抵消,而  $B$  在外电场方向上的附加极化则互相加强了。当外电场方向垂直于氧离子平面(如图 1-12(b)所示),则三者都在外电场相反方向上出现了附加极化。由此说明,对晶体来说,在一般情况下,外

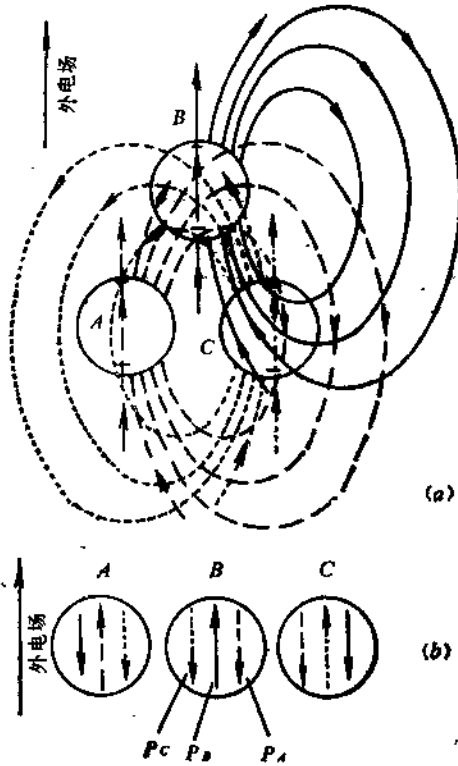


图 1-12 在外电场中  $\text{CaCO}_3$  分子的三个  $\text{O}^{2-}$  的各向异性极化

电场在不同方向引起的极化效果各不相同,从而表现出各向异性。而且,由于晶体中原子(或离子)的极化不仅受外加电场影响,而且也受到周围不同方向的原子(或离子)的极化场的影响,因而总体来说,晶体沿某一方向的极化强度,不仅与该方向的电场有关,而且同时与其他方

向的电场有关。一般来说,  $P$ 、 $E$  的关系为:

$$\begin{cases} P_1 = \epsilon_0(\chi_{11}E_1 + \chi_{12}E_2 + \chi_{13}E_3) \\ P_2 = \epsilon_0(\chi_{21}E_1 + \chi_{22}E_2 + \chi_{23}E_3) \\ P_3 = \epsilon_0(\chi_{31}E_1 + \chi_{32}E_2 + \chi_{33}E_3) \end{cases} \quad (1-4)$$

或简写为:

$$P_i = \epsilon_0\chi_{ij}E_j \quad (1-5)$$

这里,我们采用了 Einstein 求和惯例,即如果在同一项中下标重复两次,则表示对该下标求和。本书以后将均采用这种写法。

(1-4)也可以写成矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{bmatrix} = \epsilon_0 \begin{bmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} & \chi_{13} \\ \chi_{21} & \chi_{22} & \chi_{23} \\ \chi_{31} & \chi_{32} & \chi_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix} \quad (1-6)$$

同样,  $E$ 、 $D$  之间也有如下关系式:

$$\begin{cases} D_1 = \epsilon_0(\epsilon_{11}E_1 + \epsilon_{12}E_2 + \epsilon_{13}E_3) \\ D_2 = \epsilon_0(\epsilon_{21}E_1 + \epsilon_{22}E_2 + \epsilon_{23}E_3) \\ D_3 = \epsilon_0(\epsilon_{31}E_1 + \epsilon_{32}E_2 + \epsilon_{33}E_3) \end{cases} \quad (1-7)$$

或简写为:

$$D_i = \epsilon_0\epsilon_{ij}E_j \quad (1-8)$$

(1-7)式也可以写成矩阵形式

$$\begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{bmatrix} = \epsilon_0 \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix} \quad (1-9)$$

(1-4)~(1-9)式表明,对于各向异性介质,极化率和介电系数不再象(1-2)、(1-3)式中那样是一个纯数(标量)了,在这里,完整地表示出极化率和介电系数需要 9 个分量,这样一物理量,我们称之为二阶张量。简言之,在晶体物理中,我们所讨论的极化率和介电系数一般都是二阶张量,只有对立方晶系(属各向同性介质),它们才蜕化为纯数(标量)。从张量分析的角度看,标量实际上是零阶张量,矢量(有 3 个分量)实际上是一阶张量。此外,还有三阶张量、四阶张量等更高阶的张量,它们的分量数目越来越多,对应的表示矩阵也越来越复杂,我们将陆续地介绍它们。

## § 1.5 张量的变换法则及张量的确切定义

为了给出张量的确切定义,需要讨论张量的变换法则。我们仍以二阶张量为例。由(1-4)~(1-9)式可见,二阶张量是描写两个有线性关系的矢量(一阶张量)之间的联系的物理量,为此,我们先讨论在坐标系变换时矢量的变换法则。

如图 1-13,设在直角坐标系  $O-X_1X_2X_3$  中,有矢量  $R(x_1, x_2, x_3)$ , 今将该坐标系绕  $O$  点旋转一角度,使之成为  $O-X'_1X'_2X'_3$ , 则在新坐标系  $O-X'_1X'_2X'_3$  中,矢量  $R$  的坐标为  $(x'_1, x'_2, x'_3)$ , 又设新坐标轴  $X'_i (i=1, 2, 3)$  与老坐标轴  $X_1, X_2, X_3$  之间的夹角的余弦分别是  $a_{i1}, a_{i2}, a_{i3}$ , 由于  $x'_i$  应是  $R$  在  $X'_i$  轴上的投影, 它可以由  $R$  在老坐标系的三个分量  $x_1, x_2, x_3$  分别在

$X_i$  轴上的投影之和求得,如此类推,则有:

$$\begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (1-10)$$

或简写为:

$$x'_i = a_{ij}x_j \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1-11)$$

反过来,也可以由  $R$  在新坐标系中的分量求得它在老坐标系中的分量,即

$$x_i = a_{ji}x'_j \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1-12)$$

(1-11)式与(1-12)式的区别在于求和下标的位置变了。如前所述,  $a_{ij}$  代表第  $i$  个新坐标轴  $X'_i$  与第  $j$  个老坐标轴  $X_j$  之间的夹角的方向余弦,故矩阵  $A = (a_{ij})$  描述了新、老坐标系之间的变换关系,由于我们进行的是一个正交变换,因而  $A = (a_{ij})$  是一个正交矩阵,满足

$$\tilde{A} = A^{-1}$$

或

$$A\tilde{A} = 1 \quad (\text{这里, } 1 \text{ 表示单位矩阵,以下同})$$

亦即满足

$$a_{im}a_{in} = \delta_{mn} \quad (1-13)$$

作为正交变换的例子,我们来讨论如 1-14(a) 所示的矢量  $R$  围绕  $X_3$  轴沿顺时针(对着  $X_3$  轴看去)转  $\theta$  角的旋转变换。在图 1-14(b) 中,我们画出了在  $X_1OX_2$  平面上的坐标变换

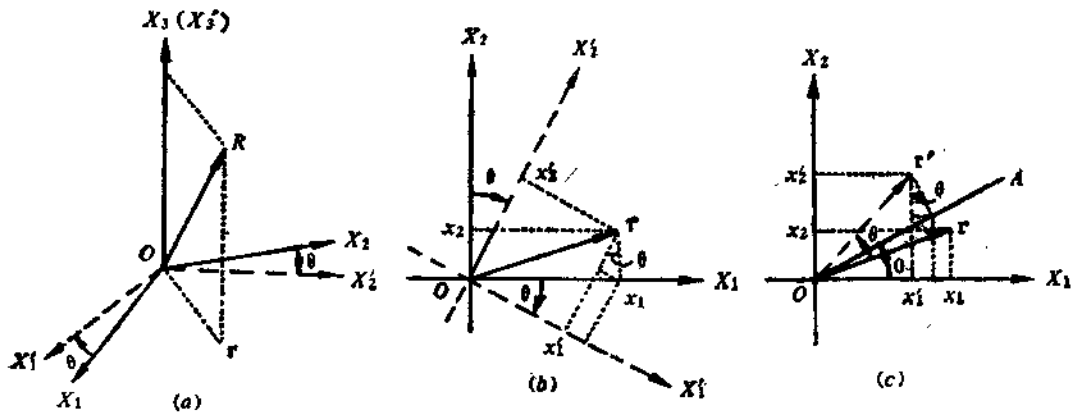


图 1-14 直角坐标系  $O-X_1, X_2, X_3$  的定轴 ( $X_3$  轴)旋转变换

情形。无论由(1-10)式还是由图 1-14(b) 直接观察,都不难得到,新老坐标之间的变换关系如下:

$$\begin{cases} x'_1 = x_1 \cos \theta - x_2 \sin \theta \\ x'_2 = x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta \\ x'_3 = x_3 \end{cases}$$

显然,这里的正交变换矩阵为

$$A = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1-14)$$

不难验算,(1-14)式满足(1-13)式。

习惯上,经常从坐标系不动而矢量旋转的角度讨论坐标变换,从这个角度看图 1-14(a)、(b)所示的变换,相当于矢量  $R$  的水平分量  $r$  在  $X_1OX_2$  平面上逆时针转动了  $\theta$  角,即如图 1-14(c)所示,所得到变换矩阵仍为 (1-14)式(推导中,作辅助线  $OA$ ,使  $\angle AOX_1 = \theta$ )。特别是,当  $\theta = \frac{2\pi}{n}$  时,由(1-14)式就可以得到  $n$  次旋转轴的变换矩阵。这是今后要经常用到的。

现在讨论二阶张量的变换法则。设在  $O-X_1X_2X_3$  坐标系中,有两个矢量  $D$  和  $E$ ,它们之间满足(1-8)式,即

$$D_i = \epsilon_0 \epsilon_{ij} E_j$$

则在坐标系变换时,矢量  $D$ 、 $E$  都遵循着(1-11)式和(1-12)式变换,即有

$$\begin{aligned} D_i &= a_{ik} D'_k \\ E_i &= a_{ji} E'_j \end{aligned}$$

从而,

$$\begin{aligned} D'_i &= a_{ik} D_k = a_{ik} (\epsilon_0 \epsilon_{kj} E_j) \\ &= \epsilon_0 a_{ik} \epsilon_{kj} a_{ji} E'_j \end{aligned}$$

但在  $O-X'_1X'_2X'_3$  中,应有

$$D'_i = \epsilon_0 \epsilon'_{ij} E'_j$$

以上两式相比较,可得

$$\epsilon'_{ij} = a_{ik} a_{jl} \epsilon_{kl} \quad (1-15)$$

上式给出了在坐标系变换时,二阶张量  $[\epsilon_{ij}]$  的变换法则。现在,我们可以给出二阶张量的确切定义了,即二阶张量是包括 9 个分量的物理量,在坐标系变换时,这 9 个分量按照(1-15)式变换。三阶、四阶等阶张量的定义也可以类似地给出来。

最后应当指出,(1-10)式的系数矩阵与(1-6)、(1-9)式的系数矩阵,虽然有相同的形式,但它们的意义是不同的,前者描写了新、老两个坐标系之间的变换关系,9 个数组成一个矩阵,但它不是张量,一般用  $(a_{ij})$  表示。后者描写的是在同一坐标系中两个矢量的线性关系,这种关系通常反映了一定的物理规律,每一个完整的系数有 9 个分量,它们构成一个二阶张量,为了与前者区别,通常用方括号表示,如  $[\chi_{ij}]$ 、 $[\epsilon_{ij}]$  等等。张量  $[\chi_{ij}]$ 、 $[\epsilon_{ij}]$  与  $(a_{ij})$  之间的联系由(1-15)式给出。

## § 1.6 二阶对称张量 $[\epsilon_{ij}]$ 的几何表示及主轴化

### 一、二阶张量 $[\epsilon_{ij}]$ 的对称性

由(1-3)式,介电张量  $[\epsilon_{ij}]$  与极化张量  $[\chi_{ij}]$  之间的联系为:



$$\begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \chi_{11} & \chi_{12} & \chi_{13} \\ \chi_{21} & 1 + \chi_{22} & \chi_{23} \\ \chi_{31} & \chi_{32} & 1 + \chi_{33} \end{bmatrix} \quad (1-16)$$

我们知道,极化是在外加电场的作用下进行的,一般来说,这是一个恒温过程,根据热力学定律,在恒温过程中,外力对系统所作的功,等于其自由能的增加。写出极化介质系统的自由能如下:

$$\begin{aligned} F &= U - TS \\ dF &= dU - TdS - SdT \end{aligned} \quad (1-17)$$

式中,  $U$  是系统的内能,由热力学基本定律知:

$$dU = TdS + dA \quad (1-18)$$

这里,  $dA (> 0)$  表示外力对系统完成的功,它包括两部分,即在介质内部建立电场所完成的功  $dA_1$ , 和使介质极化所完成的功  $dA_2$ 。前者不考虑介质极化,由真空中静电场能量密度公式

$$W_e = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2$$

有

$$dA_1 = dW_e = \epsilon_0 \mathbf{E} \cdot d\mathbf{E}$$

后者只考虑介质极化,由于束缚电荷面密度  $\sigma$  等于极化强度的法向分量,故

$$dA_2 = \mathbf{E} \cdot d\sigma = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{P}$$

于是

$$\begin{aligned} dA &= dA_1 + dA_2 = \epsilon_0 \mathbf{E} \cdot d\mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot d\mathbf{P} \\ &= \mathbf{E} \cdot (\epsilon_0 d\mathbf{E} + d\mathbf{P}) = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D} \end{aligned} \quad (1-19)$$

将(1-18),(1-19)式代入(1-17)式中,则得到

$$dF = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{P} - SdT$$

考虑  $dT = 0$ , 则有

$$dF = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D} \quad (1-20)$$

上式表明,在极化过程中,外加电场对介质系统完成的功 ( $dA = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D}$ ) 等于系统自由能的增加。将(1-8)式代入上式,得

$$\begin{aligned} dF &= \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D} = E_i dD_i \\ &= \epsilon_0 \epsilon_{ij} E_j dE_j \end{aligned} \quad (1-21)$$

于是

$$\epsilon_0 \epsilon_{ij} E_j = \frac{\partial F}{\partial E_i}$$

上式再对  $E_i$  求导数,可得

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial^2 F}{\partial E_i \partial E_j} \quad (1-22)$$

与此类似,又可得到:

$$\epsilon_{ji} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial^2 F}{\partial E_j \partial E_i} \quad (1-23)$$