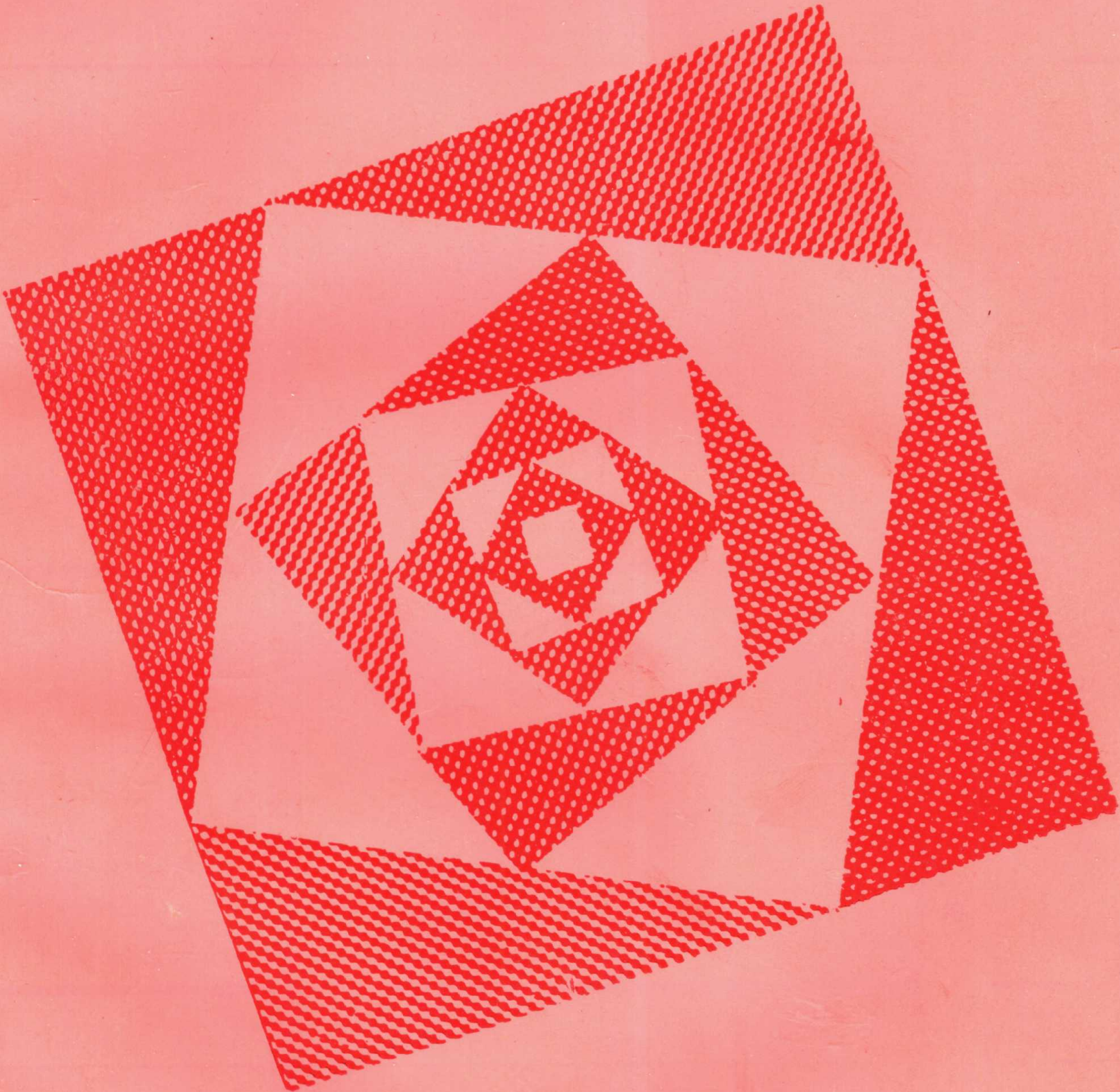
晶体物理学

肖定全 王 民 编著



四川大学出版社

内 容 提 要

本书根据编著者几年来在四川大学和山东大学讲授“晶体物理学”课程的讲义和教学体会编写而成。本着突出重点、形象生动、强调物理概念和介绍最新发展的原则，本书系统地介绍了晶体宏观物理性能的基本知识和器件应用的物理基础，择要地描述了重要晶体材料的有关性能。全书共分七章，第一章介绍张量基础；第二、三章讨论晶体的弹性、介电和压电铁电性质；第四、五、六章阐述晶体的线性光学、非线性光学和外场作用下的光学性质；第七章给出了利用热力学方法综合讨论晶体宏观物理性质的主要结果。

本书可供理工科大学物理学、应用物理学、材料科学、电子学和电气工程等专业作“晶体物理学”课程的教材或教学参考书，也可供从事晶体材料与器件研制的科技人员参考。

晶 体 物 理 学

肖定全　王　民　编著

责任编辑　杨守智

封面设计　蒋仲文

※　※　※　※

四川大学出版社出版发行（四川大学校内）

四川省新华书店经销　　郫县犀浦印刷厂印刷

※　※　※　※

开本787×1092毫米 1/1　印张17.87　字数380千字

1989年8月第一版　　1989年8月第一次印刷

印数0001—2000册

ISBN 7-5614-0201-5/O·36　定价：4.90元

绪 论

随着近代科学技术的飞速发展，各种固态晶体材料和晶体器件已广泛地应用于电子、激光、红外、超声、记忆与显示以及其它科学技术领域。新的功能性晶体材料和晶体器件越来越多，性能越来越高，应用越来越广，所有这些都要求从事晶体材料和晶体器件研制工作的人员，对晶体的宏观物理性能及其测量和应用的物理基础具有比较系统、深入的基本知识，也要求从事晶体器件应用的科技人员对晶体的宏观物理性质有一定的了解。正因为如此，近年来我国一些理工科大学相继开设了"晶体物理学"课程。

本书根据编著者几年来在四川大学和山东大学讲授"晶体物理学"课程的讲义和教学体会编写而成。本着突出重点、形象生动、强调物理基础、介绍最新进展的原则，本书系统地介绍了晶体宏观物理性能的基本知识和器件应用的物理基础，择要给出了重要晶体材料的有关性能，侧重于阐明晶体的宏观物理性能与晶体的对称性和外界作用场之间的关系。全书采用国际单位制。

在介绍晶体宏观物理性质的具体内容以前，这里简要指出晶体物理学研究的内容、对象和进一步学习的主要参考资料。

1. 晶体物理学研究的内容

我们知道，晶体的物理性质有多种，如比重、硬度、颜色、光泽、解理、熔点、抗张强度、结构、电导、光电导、压电、介电等等。晶体物理学并非研究晶体所有的物理性能，它研究的是晶体的用张量描述的宏观物理性能，或者说，研究各向异性晶体中与其对称性有关的宏观物理性能，研究晶体中弹性（声学）—热学—电学—磁学—光学等场量间的相互联系和相互作用。

晶体的宏观物理性质是由宏观可测物理量之间的关系来定义的。例如，密度ρ是由可测的两个物理量，质量m和体积V，通过$\rho=m/V$或$m=\rho V$定义的。又如，电极化率χ是由施于晶体上的电场$\boldsymbol{E}$和由之感生的电极化$\boldsymbol{P}$，通过$\boldsymbol{P}=\varepsilon_0\chi\boldsymbol{E}$定义的。一般地说，当两个可测物理量间满足线性关系时，可以用

$$B=CA \tag{0.1}$$

这样的式子表示之。式中A为作用物理量或施感物理量，B为效果物理量或感生物理量。A和B都是可测的场量，C代表A和B之间的关系，即晶体的宏观物理性质。通常，C用各种系数来表示之，例如极化率、介电系数，压电系数等。如果感生场量B与施感场量A间不满足式（0.1）所示的线性关系，而呈更一般的非线性关系时，可以用类似的方法，将非线性关系式中的系数定义为晶体的相应的物理性质。本书中介绍的电致伸缩效应、非线性光学效应等就是这种情形。还需要指出，如果施感场量是两个不同性质的场量共同作用时，类似于式（0.1）有

$$B=CA'A'', \tag{0.2}$$

这里的C仍代表晶体的某种物理性能。第七章中讨论的晶体的交叉耦合效应就是这种情形。

晶体和非晶体材料的宏观物理性质间的主要区别是，非晶体的宏观物理性质一般是各向同性的，即与测量方向无关；晶体的宏观物理性质一般是各向异性的，亦即与测量方向有关。正是由于晶体材料的宏观物理性质具有各向异性，因而需要用张量这样的数学量来描述。例如，式（0.1）可用张量表示为

$$\underbrace{B_{ijk\cdots}}_{p\text{个下标}} = \underbrace{C_{ijk\cdots lmn\cdots}}_{p+q\text{个下标}} \underbrace{A_{lmn\cdots}}_{q\text{个下标}}, \qquad (0.3)$$

其中，$A_{lmn\cdots}$为q阶作用（施感）张量，$B_{ijk\cdots}$为p阶效果（感生）张量，$C_{ijk\cdots lmn\cdots}$为（$p+q$）阶的晶体物理性质张量。这样定义的物理性质张量既反映了该物理性质的数量特征，又表示了其方向特性。因此，张量在晶体物理学中起着重要的作用。本书将首先介绍张量的基础知识。

晶体的宏观物理性质受到两种类型完全不同的对称性的影响。一是晶体本身的对称性(晶体所属的点群)对宏观物理性质的影响；二是物理性质本身的固有对称性对宏观物理性质的影响。前者由晶体结构所确定，后者只由所讨论的物理量本身的定义、物理量间必须满足的热力学关系（诸如各种守恒定律）决定。要了解两类对称性对晶体物理性质的影响，需要晶体学的基本知识和物理学其它分支学科的知识。本书编写时，已假定读者具备有关物理学基本知识。附录Ⅰ所列晶体学基本知识，可供读者查阅使用。

就内容而言，本书讨论的晶体物理学知识主要有四个部份。晶体物理学预备知识，包括晶体学基础和张量基础（第一章和附录Ⅰ）；晶体的压电铁电性质，包括弹性、介电、压电、热释电、铁电、反铁电和光铁电等性质（第二、三章）；晶体的光学性质，包括线性光学性质、非线性光学性质和外场作用下晶体的光学性质(第四、五、六章)；晶体物理性质的热力学综合讨论（第七章）。本书章节基本上按上述内容编排。由于本书主要讨论非磁性各向异性晶体的宏观物理性能，故除在第七章外，未涉及晶体磁学的有关内容。

近年来新出版的一些晶体物理学专著中，将晶体宏观物理性能按张量阶数进行分类，其内容包括晶体物理学预备知识（晶体学基础与张量基础），晶体的用一阶、二阶、三阶、四阶以及高阶张量表示的物理性质，最后讨论晶体的用轴张量表示的物理性质。本书未采用这种编排体制。

晶体物理学的一些专著出版较早，因而晶体物理学的一部份内容比较成熟。但是，晶体物理学的发展与当代最新科学技术的发展息息相关，其内容涉及固体物理学、现代光学、结晶学、材料科学以及电子与电气工程学等，因而晶体物理学仍是一门不断发展的，有强大生命力的交叉学科。晶体物理学中研究的物理效应在激光、电子、通讯、导航、超声、传感等技术中有着非常重要的应用。可以说，从我们身边的石英手表、晶体管收音机，直到支撑着当代所谓信息社会的大型电子计算机以及尖端的宇航技术，都有单晶（或多晶）材料制成的器件活跃在其心脏部份。因此，我们有理由说，晶体物理学又是一门重要的应用基础学科。随着现代科学技术的发展，晶体物理学研究的内容还将不断深入和扩展。

2. 晶体物理学研究的对象

晶体物理学研究的对象主要是固体电介质。

所谓电介质就是指凡是内部能存在电场、并且可以被电极化的物质；或者说，可以赋予一个物理参量——介电常数的任何物质都叫电介质。显然，电介质是范围极广的一类物质的总称。

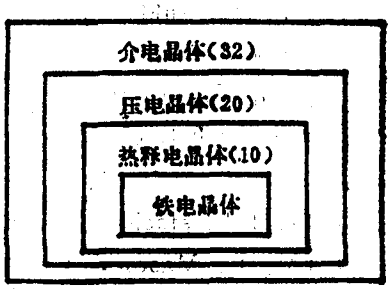


图0.1 电介质的分类及其相互关系（括号中的数字表示属于该类晶体的点群数）

按照晶体的宏观对称性，可以把晶体分为七大晶系，32个点群。再按其物理性质（主要是压电铁电性质）来分，又可以把32个点群的晶体分为如下几个亚类（参见图0.1）：

介电晶体：包括所有32种晶类的晶体，其介电性质一般需用二阶张量来描述。

压电晶体：包括20种没有对称中心的晶类的晶体，其压电性质需用三阶张量来描述。

热释电晶体：包括10种极性晶类的晶体，其热释电性质需用一阶张量（矢量）来描述。

铁电晶体：热释电晶体中自发极化可随外加电场的反向而反向，而且电极化矢量 $\boldsymbol{P}$ 与外加电场 $\boldsymbol{E}$ 成类似铁磁回线那样关系的晶体。

32种晶类的分类见表0.1。

表0.1 32种晶类的分类

介电晶类（32种）	不具有对称中心的晶类（21种）其中压电晶类（20种）*	极性晶类（热释电晶类）（10种）	1，2，3，4，6，m，mm2，4mm，3m，6mm
		非极性晶类（11种）	222，$\bar{4}$，$\bar{6}$，23，$\boxed{432}$，$\bar{4}3m$，422，$\bar{4}2m$，32，622，$\bar{6}m2$
	具有对称中心的晶类（11种）		$\bar{1}$，2/m，4/m，$\bar{3}$，6/m，m3，mmm，4/mmm，6/mmm，m3m，$\bar{3}m$

* 432晶类不具压电性。

需要指出，尽管上述分类是根据压电铁电性质进行的，但是，这种分类法在研究晶体的其它物理性质，如电光性质和其它非线性光学性质时也是十分重要的。我们愿在此特别提请读者注意，无论是在晶体材料的物理性质研究或将晶体材料应用于具体晶体器件时，确定待研究晶体所属的点群是至关重要的。当一种新晶体合成和培育出来之后，第一步的工作就是需要判明其所属的晶类，这样，根据晶体物理学的知识就可以预先确定晶体可能具有的物理性质以及该晶体可能的应用前景。

3. 主要参考资料

在编写本书的过程中，作者参考了近年的一些期刊，并参考了下述教材或专著：

〔1〕蒋民华，晶体物理，山东科学技术出版社，（1980）.

〔2〕孙慷，张福学主编，压电学（上、下册），国防工业出版社，（1984）.

〔3〕陈纲，晶体物理讲义，北京工业大学，（1984）.

〔4〕李荫远，扬顺华，非线性光学，科学出版社，（1974）.

〔5〕J. F. Nye, Physical Properties of Crystals, Oxford University Press, (1957); with Corrections and New Materials, (1985).
〔6〕小川智哉著，崔承甲译，应用晶体物理学，科学出版社，(1985).
〔7〕S. Haussühl, Kristal Physika, Physik-Verlag, Weinheim, (1983). (德文)

作者在此特向上述著作的作者致谢。

以上书籍可供读者学习时参考。进一步掌握晶体物理学的知识，还可参考下列文献：

〔8〕H. J. Juretschke, Crystal Physics, W. A. Benjamin Inc., (1974).
〔9〕M. P. Mason, Crystal Physics of Interaction Processes, Academic Press, New York, (1966).
〔10〕W. A. Wooster, Experimental Crystal Physics, Oxford University Press, (1957).
〔11〕W. A. Wooster, Tensors and Group Theory for the Physical Properties of Crystals, Clarendon Press, (1973).
〔12〕M. E. Lines and A. M. Glass, Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials, Clarendon Press, Oxford, (1977); (科学出版社即将出中译本).
〔13〕J. C. Burfoot and G. W. Taylor, Polar Dielectrics and Their Applications, The Macmillian Press Ltd., (1979); (科学出版社已出中译本).
〔14〕V. M. Fridkin, Photoferroelectrics, Springer Verlag, Berlin, (1979); 中译本，福里德金著，肖定全译，光铁电体，科学出版社，(1987).
〔15〕张福学等编著，压电铁电应用285例，国防工业出版社，(1987).
〔16〕Y. R. Shen, The Principles of Nonlinear Optics, John Wiley and Sons, New York, (1984); 中译本，沈元壤著，顾世杰译，非线性光学原理，科学出版社，(1987).
〔17〕J. F. Nye, Physical Properties of Solids, Oxford University Press, London, (1964).
〔18〕张克从，近代晶体学基础，(上、下册)，科学出版社，(1987).

应该指出，从第一本晶体物理学教材(W. A. Wooster, A Text-book on Crystal Physics, Cambridge, 1938)问世至今已有半个世纪。在此期间，尤其是激光技术出现以后，晶体物理学已有很大的发展，并且还正在发展之中。因此，从事晶体材料生长、晶体物理性能研究和晶体器件设计与应用的科技人员，除需掌握晶体物理学的基本知识外，还需特别注意跟踪最新文献、及时了解学科发展，以期做出创造性的研究成果。

本书编写分工为：肖定全绪论、第2、3、4、7章和附录Ⅱ，王民第1、5、6章、附录Ⅰ和附录Ⅲ。两编著者交叉审稿，最后由肖定全修改定稿，王民绘制全书插图。

目　　录

第一章 张 量 基 础

晶体在力、热、电、磁、光等外场作用下将产生各种物理响应。这些响应（感生物理量）与外场（作用物理量）之间的比例系数决定了晶体的宏观物理性质。事实上，晶体的宏观物理性质是晶体的微观结构在宏观上的反映。

晶体是具有对称性的物体。尽管组成晶体的内部成分（原子、离子、原子团或分子等）可能千差万别，但所有晶体在宏观上仅存在32种对称类型，即32种晶类或32种点群。属于同一晶类的晶体必然具有同样的宏观对称性。既然晶体的宏观物理性质和宏观对称性都是晶体微观结构在宏观上的反映，因而属于同一晶类的晶体，其宏观物理性质必然具有同样的规律性。这样，我们就可以避开晶体的具体成分和具体物理性质的数值大小，来研究晶体宏观物理性质随方向变化的规律性。

晶体的绝大多数性质都是各向异性的，描述各向异性的最重要的数学方法就是张量。所以，张量是晶体物理学的数学基础之一。本章着重介绍张量基础知识，以及晶体对称性对晶体物理性质的影响。

§1.1 张量初步概念及其表示方法

1.1.1 标量和矢量

物理学中经常会遇到一些物理量，如晶体的密度、物体的温度等，它们与测量方向毫无关系。例如，若说沿某个方向测定晶体的密度，这是毫无意义的。对于这类物理量，只用给定的某一数值即可确定。我们把这类与方向无关、仅用一个数值即可确定的物理量称为标量，或零阶张量。

矢量是另一类物理量，它不仅具有确定的数值，而且具有确定的方向。例如，机械力就是矢量，为了完全确定作用在某点上的力，不仅应给出力的大小，还应给出作用力的方向。在本书中，矢量用黑体字母表示，例如$\boldsymbol{E}$表示某一点的电场强度。矢量数值的绝对值称为该矢量的长度或模，记为$|\boldsymbol{E}|=E$，并永远为正值。

当用带箭头的线段来表示矢量时，箭头所指方向为矢量方向，线段长度为该矢量的模。在直角坐标系中，矢量还可用它在三个坐标轴上的分量来表示，每个分量是矢量在该坐标轴上的直接投影。例如，若矢量$\boldsymbol{E}$在坐标轴ox_1、ox_2、ox_3上的分量分别为E_1、E_2、E_3，则该矢量可表示为

$$\boldsymbol{E}=[E_1、E_2、E_3]。$$

在参考坐标系选定后，矢量的三个分量随即确定。

矢量往往又称为一阶张量.

1.1.2 二阶张量

为了理解二阶张量的物理意义，我们先以电导率为例来说明。假定对某导体施加电

场（电场强度为$\boldsymbol{E}$），该导体中将出现电流（电流密度为$\boldsymbol{J}$），若导体是各向同性体并遵从欧姆定律，则矢量$\boldsymbol{J}$平行于矢量$\boldsymbol{E}$（见图1.1a），$\boldsymbol{J}$的模正比于$\boldsymbol{E}$的模，它们之间

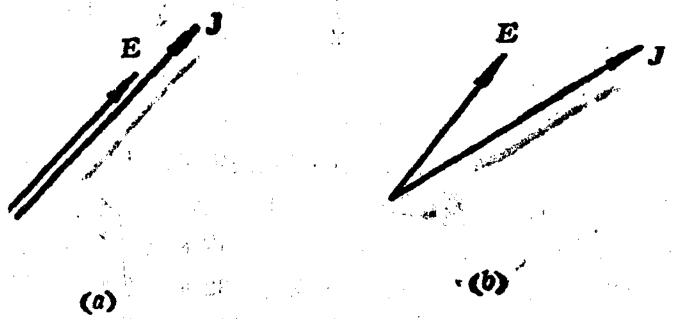


图1.1 电流密度J与电场强度E间的关系
(a) 各向同性体；(b) 各向异性体

的关系可表示为

$$\boldsymbol{J}=\mu\boldsymbol{E}. \tag{1.1}$$

式中，系数μ为电导率。若矢量$\boldsymbol{J}$和$\boldsymbol{E}$用直角坐标系中的三个分量表示，$\boldsymbol{J}=[J_1, J_2, J_3]$，$\boldsymbol{E}=[E_1, E_2, E_3]$，则式（1.1）可改写为

$$J_1=\mu E_1,\ J_2=\mu E_2,\ J_3=\mu E_3. \tag{1.2}$$

式（1.2）表明，$\boldsymbol{J}$的每个分量都以同样的比例因子μ正比于$\boldsymbol{E}$的相应分量。

当导体为晶体时，晶体的电导率是各向异性的。实验表明，$\boldsymbol{J}$与$\boldsymbol{E}$不再平行（见图（1.1b）。这样，$\boldsymbol{J}$的每个分量都与$\boldsymbol{E}$的所有分量线性相关。此时，式（1.2）需改写为

$$\begin{aligned} J_1&=\mu_{11}E_1+\mu_{12}E_2+\mu_{13}E_3,\\ J_2&=\mu_{21}E_1+\mu_{22}E_2+\mu_{23}E_3,\\ J_3&=\mu_{31}E_1+\mu_{32}E_2+\mu_{33}E_3. \end{aligned} \tag{1.3}$$

事实上，式（1.3）右边的每一个系数都有确定的物理意义。例如，当仅沿x_3方向施加电场E_3，即$E_1=E_2=0$，$E_3\neq0$时，由式（1.3）得

$$J_1=\mu_{13}E_3,\quad J_2=\mu_{23}E_3,\quad J_3=\mu_{33}E_3.$$

由此可见，仅沿x_3方向加电场E_3时，不仅x_3方向要产生电流，而且在与其垂直的方向（x_1和x_2）上也要产生电流。纵向电流密度J_3正比于μ_{33}，横向电流密度J_1和J_2分别正比于μ_{13}和μ_{23}。换句话说，μ_{33}表示沿x_3方向加的电场与在x_3方向产生的电流密度的比例系数；μ_{13}表示在x_3方向加的电场与在x_1方向所产生的电流密度的比例系数。以此类推，便可以解释其余系数的物理意义。图1.2给出了沿x_3方向加电场时所产生的电流的示意图。

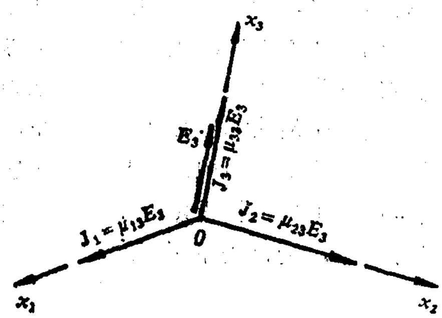


图1.2 电流密度分量Ji与电场强度E3的关系

由式（1.3）可见，为了确定晶体的电导率，需要给出方程组右边的九个系数。这九个系数可以写成一个方形表：

$$\begin{pmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} & \mu_{13} \\ \mu_{21} & \mu_{22} & \mu_{23} \\ \mu_{31} & \mu_{32} & \mu_{33} \end{pmatrix}, \tag{1.4}$$

这个系数表就是二阶张量，而μ_{11}，μ_{12}，，……，μ_{33}就是该张量的分量。分量μ_{ii}表示纵向效应，分量μ_{ij}（$i \neq j$）表示横向效应。上述书写方法要求，二阶张量分量的第一个下标与方程左边的物理量的分量下标一致，第二个下标与方程右边的物理量的分量下标一致（只有个别例外，如表1.1的热膨胀张量〔α_{ij}〕）。

比较上述三种物理量（标量、矢量和二阶张量），不难发现，在直角坐标系中，电导率的分量有两个下标，称为二阶张量；矢量的分量只有一个下标，称为一阶张量；标量无下标，称为零阶张量。由此看来，张量分量的下标数目与张量的阶数之间存在一定的关系。在不采用简化下标的情况下，具有三个下标的张量是三阶张量，具有四个下标的张量是四阶张量，余类推。

表1.1　用二阶张量描述的物理性质举例

物理性质〔T_{ij}〕	感生矢量〔p_i〕	作用矢量〔q_j〕	张量关系式 $p_i = T_{ij}q_j$
电导率　〔μ〕	电流密度 J_i	电场强度E_j	$J_i = \mu_{ij}E_j$
电阻率　〔ρ〕	电场强度E_i	电流密度 J_j	$E_i = \rho_{ij}J_j$
介电常数　〔ε〕	电位移　D_i	电场强度E_j	$D_i = \varepsilon_{ij}E_j$
介电隔离率　〔β〕	电场强度E_i	电位移　D_j	$E_i = \beta_{ij}D_j$
介质极化率　〔χ〕	极化强度 p_i	电场强度E_j	$P_i = \varepsilon_0\ \chi_{ij}E_j$
磁导率　〔μ〕	磁感应强度 B_i	磁场强度H_j	$B_i = \mu_{ij}H_j$
热膨胀　〔α〕	应变　S_{ij}	温度改变ΔT	$S_{ij} = \alpha_{ij}\ \Delta T$
热导率　〔K〕	热流密度q_i	温度梯度$-\left(\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)$	$q_i = -K_{ij}\frac{\partial T}{\partial x_j}$

需要指出，具有下标的物理量并非都是张量，在§1.3中我们将给出张量的严格定义。

在晶体物理学中，除电导率外，还有许多物理性质都需要用二阶张量来表示。表1.1给出了一些典型例子。为使式（1.3）具有普遍意义，我们用性质T来联系两个矢量$\boldsymbol{p}=〔p_1，p_2，p_3〕$和$\boldsymbol{q}=〔q_1，q_2，q_3〕$，若$\boldsymbol{p}$与$\boldsymbol{q}$之间的线性关系式为

$$\begin{aligned} p_1 &= T_{11}q_1 + T_{12}q_2 + T_{13}q_3, \\ p_2 &= T_{21}q_1 + T_{22}q_2 + T_{23}q_3, \\ p_3 &= T_{31}q_1 + T_{32}q_2 + T_{33}q_3, \end{aligned} \tag{1.5}$$

则性质T就是二阶张量，九个系数T_{11}，T_{12}，……，T_{33}就是该张量的分量。同前述一样，性质T可以用矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix}. \tag{1.6}$$

当用〔T〕来描述某种物理性质时，〔T〕就称为某物理性质的张量。例如，若用〔T〕代表电导率μ，则〔T〕为电导率张量；若用〔T〕代表介电常数ε，则〔T〕为介电常数

张量。

二阶张量和二阶矩阵都是由九个系数组成的数字表，但它们之间有着严格的区别（见§1.3.2）。为了区别这两者，常常将张量用方括号表示，矩阵用圆括号表示。但是，张量可以用矩阵来表示，并根据矩阵法则进行运算。例如，在数学上线性方程组（1.5）可用矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{33} \\ T_{31} & T_{32} & T_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix}, \tag{1.7}$$

或简写为

$$\boldsymbol{p} = T\boldsymbol{q}. \tag{1.7a}$$

这就是说，二阶张量可以直接化为二阶矩阵来表示，张量分量与矩阵的相应分量完全一致。不过，三阶和三阶以上的高阶张量都不能直接写成矩阵形式，而需要采用简化下标的方法，这将在有关章节中叙述。

线性方程组（1.5）可以更简单地用求和记号表示为

$$p_i = \sum_{j=1}^{3} T_{ij} q_j, \qquad (i, j = 1, 2, 3), \tag{1.8}$$

若舍去求和符号，上式变为

$$p_i = T_{ij} q_j, \qquad (i, j = 1, 2, 3). \tag{1.9}$$

式（1.9）中，i 为自由下标，j 为求和下标。这样表示的求和规则是，如果在同一项中有重复下标存在，就应自动地按该下标求和。根据这一规则，在上述表示法中，用什么字母代表自由下标和求和下标都无关紧要。例如

$$p_i = T_{ij} q_j = T_{ik} q_k = T_{il} q_l,$$

但是，重要的是，下标的位置不能随意调换，因为在一般情况下，$T_{ij} \neq T_{ji}$。

上述简化书写方式还适用于更复杂的方程。例如，在方程

$$A_{ij} + B_{ik} C_{kl} D_{lj} = E_{ik} F_{kj}$$

中，i 和 j 为自由下标，k 和 l 为求和下标。方程左边第二项和方程右边的项实际上都只包含两个下标（i 和 j），因为求和的结果使表示求和的下标消失。还需注意，当有乘积项存在时，每个乘数因子的下标顺序不能随意更换，但乘数因子彼此之间却可以调换位置。例如，上述方程左边第二项写成 $C_{kl} B_{ik} D_{lj}$ 对最终结果不产生任何影响。不过，在书写时人们常常使求和下标尽量靠近。

1.1.3 高阶张量

三阶和三阶以上的张量称为高阶张量。

三阶张量可由一个矢量与一个二阶张量线性相关而形成，也可由一个矢量与另两个矢量的乘积线性相关而形成，当然还有其它方法，这里不再列举。下面以三阶张量联系一个矢量与一个二阶张量的情形来说明。

假定矢量 $\boldsymbol{B}$ 与二阶张量〔A〕线性相关，则 $\boldsymbol{B}$ 的每一个分量都与〔A〕的九个分量线性相关，其间的关系为

$$
\begin{aligned}
B_1 = {} & C_{111}A_{11} + C_{112}A_{12} + C_{113}A_{13} + C_{121}A_{21} + C_{122}A_{22} + C_{123}A_{23} \\
& + C_{131}A_{31} + C_{132}A_{32} + C_{133}A_{33}, \\
B_2 = {} & C_{211}A_{11} + C_{212}A_{12} + C_{213}A_{13} + C_{221}A_{21} + C_{222}A_{22} \\
& + C_{223}A_{23} + C_{231}A_{31} + C_{232}A_{32} + C_{233}A_{33}, \\
B_3 = {} & C_{311}A_{11} + C_{312}A_{12} + C_{313}A_{13} + C_{321}A_{21} + C_{322}A_{22} + C_{323}A_{23} \\
& + C_{331}A_{31} + C_{332}A_{32} + C_{333}A_{33}.
\end{aligned}
\tag{1.10}
$$

式中，C_{111}，C_{112}，……，C_{333}是系数，这27个系数组成三阶张量，每一系数C_{ijk}（i，j，k= 1，2，3）就是三阶张量的分量。三阶张量不能简单地写成一个方形表，也不能直接用矩阵来表示。采用简化下标时，三阶张量可用 3 × 6 的矩阵来表示，这将在第三章中讨论。

式（1.10）也可用简化书写方式表示为

$$
B_i = C_{ijk}A_{jk}, \quad (i, j, k = 1, 2, 3), \tag{1.11}
$$

上式中，i为自由下标，j、k为求和下标。按下标展开规则，式（1.11）的展开式即为式（1.10）。

本书将详细讨论几种用三阶张量描述的物理性质。表1.2给出了几个典型的例子。

类似于三阶张量，当一个矢量与一个三阶张量线性相关，或两个二阶张量间线性相关，或一个二阶张量与两个矢量的乘积线性相关等等，它们之间的比例系数都形成四阶张量。由二个二阶张量间线性相关而形成的四阶张量可用方程

表1.2 用三阶张量描述的物理性质举例

物理性质〔C_{ijk}〕	作用物理量	感生物理量	张量方程式
压电模量〔d_{ijk}〕	应力〔σ_{jk}〕	极化强度 P_i	$P_i = d_{ijk}\sigma_{jk}$
	电强强度 E_i	应变〔S_{jk}〕	$S_{jk} = d_{ijk}E_i$
线性电光系数〔r_{ijk}〕	电场强度 E_k	介电隔离率〔$\Delta\beta_{ij}$〕	$\Delta\beta_{ij} = r_{ijk}E_k$
非线性光学系数〔χ_{ijk}〕	（光频）电场强度E_j（ω）	非线性极化强度 P_i^{NL}	$P_i^{NL} = \varepsilon_0 \chi_{ijk}(2\omega)E_i(\omega)E_k(\omega)$

$$
B_{ij} = C_{ijkl}A_{kl}, \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) \tag{1.12}
$$

来表示。式中，i，j为自由下标，k，l为求和下标。将式（1.12）按i、j、k、l展开后的展式见式（1.13）：

$$
\begin{aligned}
B_{11} = {} & C_{1111}A_{11} + C_{1112}A_{12} + C_{1113}A_{13} + C_{1121}A_{21} + C_{1122}A_{22} + C_{1123}A_{23} \\
& + C_{1131}A_{31} + C_{1132}A_{32} + C_{1131}A_{33}, \\
B_{12} = {} & C_{1211}A_{11} + C_{1212}A_{12} + C_{1213}A_{13} + C_{1221}A_{21} + C_{1222}A_{22} + C_{1223}A_{23} \\
& + C_{1231}A_{31} + C_{1232}A_{32} + C_{1233}A_{33}, \\
B_{13} = {} & C_{1311}A_{11} + C_{1312}A_{12} + C_{1313}A_{13} + C_{1321}A_{21} + C_{1322}A_{22} + C_{1323}A_{23} \\
& + C_{1331}A_{31} + C_{1332}A_{32} + C_{1333}A_{33}, \\
B_{21} = {} & C_{2111}A_{11} + C_{2112}A_{12} + C_{2113}A_{13} + C_{2121}A_{21} + C_{2122}A_{22} + C_{2123}A_{23} \\
& + C_{2131}A_{31} + C_{2132}A_{32} + C_{2133}A_{33}, \\
B_{22} = {} & C_{2211}A_{11} + C_{2212}A_{12} + C_{2213}A_{13} + C_{2221}A_{21} + C_{2222}A_{22} + C_{2223}A_{23}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\quad +C_{2231}A_{31}+C_{2232}A_{32}+C_{2233}A_{33},\\
B_{23}&=C_{2311}A_{11}+C_{2312}A_{12}+C_{2313}A_{13}+C_{2321}A_{21}+C_{2322}A_{22}+C_{2323}A_{23}\\
&\quad +C_{2331}A_{31}+C_{2332}A_{32}+C_{2333}A_{33},\\
B_{31}&=C_{3111}A_{11}+C_{3112}A_{12}+C_{3113}A_{13}+C_{3121}A_{21}+C_{3122}A_{22}+C_{3123}A_{23}\\
&\quad +C_{3131}A_{31}+C_{3132}A_{32}+C_{3133}A_{33},\\
B_{32}&=C_{3211}A_{11}+C_{3212}A_{12}+C_{3213}A_{13}+C_{3221}A_{21}+C_{3222}A_{22}+C_{3223}A_{23}\\
&\quad +C_{3231}A_{31}+C_{3232}A_{32}+C_{3233}A_{33},\\
B_{33}&=C_{3311}A_{11}+C_{3312}A_{12}+C_{3313}A_{13}+C_{3321}A_{21}+C_{3322}A_{22}+C_{3323}A_{23}\\
&\quad +C_{3331}A_{31}+C_{3332}A_{32}+C_{3333}A_{33}.
\end{aligned}
\tag{1.13}
$$

显然，这是由九个线性方程所组成的方程组，等式右边共有 $9\times 9=81=3^4$ 个系数。在特殊条件下，当引入某些人为规定之后，可将$_{ijkl}$用 6×6 的矩阵来表示，其规则将在第二章中介绍。表1.3给出了一些由四阶张量描述的物理性质。

表1.3 用四阶张量描述的物理性质举例

物理性质 $[C_{ijkl}]$	作用物理量	感生物理量	张量方程式
弹性顺服系数 $[\lambda_{ijkl}]$	应力 $[\sigma_{kl}]$	应变 $[S_{ij}]$	$S_{ij}=\lambda_{ijkl}\sigma_{kl}$
弹力劲度系数 $[c_{ijkl}]$	应变 $[S_{kl}]$	应力 $[\sigma_{ij}]$	$\sigma_{ij}=c_{ijkl}S_{kl}$
二次电光系数 $[h_{ijkl}]$	电场强度 E_kE_l	介电隔离率 $[\Delta\beta_{ij}]$	$\Delta\beta_{ij}=h_{ijkl}E_kE_l$
弹光系数 $[\pi_{ijkl}]$	应力 $[\sigma_{kl}]$	介电隔离率 $[\Delta\beta_{ij}]$	$\Delta\beta_{ij}=\pi_{ijkl}\sigma_{kl}$
$[p_{ijkl}]$	应变 $[S_{kl}]$	介电隔离率 $[\Delta\beta_{ij}]$	$\Delta\beta_{ij}=p_{ijkl}S_{kl}$
电致伸缩系数 $[v_{ijkl}]$	电场强度 E_kE_l	应变 $[S_{ij}]$	$S_{ij}=v_{ijkl}E_kE_l$

用类似的方法可以得出其它高阶张量，不过，高于四阶的张量所描述的物理效应一般都非常小。本书中介绍的方法，可以推广用来讨论高于四阶的张量所描述的物理性质。

§1.2 张量的变换定律

要用张量描述物理性质，首先必须选定坐标系。在晶体物理学中规定选取右手直角坐标系作为原始参考坐标系，即三个坐标轴 x_1、x_2、x_3 按右手螺旋规则定向。式(1.5)和(1.9)就是在选定的 x_i 坐标系中，作用矢量 $\boldsymbol{q}$ 的三个分量与感生矢量 $\boldsymbol{p}$ 的三个分量在该坐标系中的相互关系式，方程右边的九个系数就是二阶张量 $[T_{ij}]$ 在该坐标系中的分量。如果选取另一直角坐标系 x_i'(x_1', x_2', x_3')作为新坐标系，那么 $\boldsymbol{q}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 在新坐标系中的分量值将变为 q_i' 和 p_i'. 相应地，$[T_{ij}]$ 的分量也将改变为 $[T_{ij}']$. 由于晶体的物理性质仅与晶体本身有关，与坐标系的选择无关，而张量 $[T_{ij}]$ 和 $[T_{ij}']$ 都描述晶体的同一物理性质，因此，这两套分量之间必然存在着某种固定的、并且应当是唯一的关系。本节将着重阐述在坐标系发生变化时，各阶张量是如何变换的，即推导出张量的变换定律。