高等学校教材

光电子技术基础

彭江得 主编

清华大学出版社

内 容 简 介

本书从光和物质相互作用的基本规律出发系统地介绍光电子技术的基础理论、器件原理和应用。内容包括强光非线性光学技术，电光、磁光、弹(声)光技术，半导体光电技术，光纤技术及集成光电子技术原理。

本书可作为高等工科院校光电子技术专业的教科书，也可供有关的科技人员及高等院校其它有关专业的师生参考。

光电子技术基础
彭江得　主编
责任编辑　李幼哲
*
清华大学出版社出版
北京　清华园
商务印书馆上海印刷厂印刷
新华书店北京发行所发行
*
开本: 787×1092 1/16　印张: 25 1/2　字数: 650千字
1988年6月第1版　1988年6月第1次印刷
印数: 00001—6000　　定价: 4.05元

ISBN 7-302-00165-0/TN·3(课)

出 版 说 明

根据国务院关于高等学校教材工作分工的规定，我部承担了全国高等学校、中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力，有关出版社的紧密配合，从1978年至1985年，已编审、出版了两轮教材，正在陆续供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工种电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻“努力提高教材质量，逐步实现教材多样化，增加不同品种、不同层次、不同学术观点、不同风格、不同改革试验的教材”的精神，我部所属的七个高等学校教材编审委员会和两个中等专业学校教材编审委员会，在总结前两轮教材工作的基础上，结合教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1986—1990年的“七、五”(第三轮)教材编审出版规划。列入规划的教材、实验教材、教学参考书等共400余种选题。这批教材的评选推荐和编写工作由各编委会直接组织进行。

这批教材的书稿，是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐，由编审委员会(小组)评选择优产生出来的。广大编审者、各编审委员会和有关出版社为保证教材的出版和提高教材的质量，作出了不懈的努力。

限于水平和经验，这批教材的编审、出版工作还会有缺点和不足之处，希望使用教材的单位、广大教师和同学积极提出批评建议，共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

电子工业部教材办公室

前　言

本教材系按电子工业部制定的工科电子类专业教材 1986—1990 年编审出版计划，由《电子物理与器件》教材编审委员会《激光与红外》编审小组评审并推荐出版的。

本教材在清华大学彭江得编写的(1982 年)《光电子学技术基础》讲义的基础上，由编者根据《激光与红外》编审小组审定的编写大纲修改写成。成都电讯工程学院蔡伯荣担任主审。

本课程的参考学时数为 90 学时。其主要内容分为五部分：第一部分(绪论)介绍光电子学与光电子技术；第二部分(第一章)概述光和晶体的基本属性，并从光与物质相互作用的观点阐明光在均匀各向同性、各向异性及非均匀介质中的传播规律，重点介绍微扰介质中非线性光学过程的普适波耦合理论和固体中光吸收和光辐射的量子力学微扰理论；第三部分(第二-五章)分别讨论在强光场、电场、磁场和应变(声)场扰动下光和介电物质相互作用产生的各种非线性光学效应，及其在光频率变换、光调制、光偏转及光信号处理等方面的应用；第四部分(第六章)讨论半导体中的光电效应，介绍光电二极管、光晶体管、发光二极管和激光二极管的工作原理；第五部分(第七、八章)讨论介质光波导原理及光导纤维技术，重点放在导波模式的分析及波导模耦合理论的应用上，这是集成光电子技术的基础。此外，书中还介绍了 80 年代以来新发展的一些光电子技术研究课题，如光学双稳态、光学相位共轭、量子阱光电器件、光纤中的光学孤粒子及光纤传感技术等，这些内容可根据不同的教学要求灵活选用。

本教材采用米-千克-秒(MKS)国际单位制。每章末编有适量习题，供学生练习选用。书末附录中介绍了一些有关的基本知识。

凡具有电磁场理论、固体及半导体物理、量子力学和物理光学等基础知识的读者均可循序渐进地自学本书。

本教材由清华大学彭江得主编并执笔，刘小明编写了习题、第一、六、八章的部分内容。在编写过程中得到周炳琨教授的具体指导，并得到本校无线电电子学系、物理系、微电子学研究所及本教研组许多同志的热情帮助，在此谨向他们表示诚挚的感谢。由于编者水平有限，书中难免存在一些缺点和错误，殷切期望广大读者批评指正。

编者

1987 年 2 月

目　录

绪　论

光电子学的崛起使现代信息科学耳目一新。光电子技术已成为世界各强国竞相发展的现代高技术的重要组成部分。随着人类社会向信息化过渡，光信息科学和技术将遍及国民经济的各个部门以及人类日常的工作和生活。为适应这种技术发展的形势，作为教材改革的尝试，我们为光电子技术专业大学本科生编写了这本专业技术基础教材。为使读者对本课程的教学意图和知识结构有清楚的了解，有必要讲一下什么是光电子学？什么是光电子技术？什么是光电子技术基础？

一、光电子学

光学和电子学相结合形成的光电子学是信息科学发展的一个崭新的领域。

光学是一门古老的学科。关于光的电磁性质及其在介质中的行为，早在上一世纪就已经用麦克斯韦(Maxwell)的经典电磁理论进行了研究；而关于光的吸收和辐射，在1917年爱因斯坦(Einstein)就建立了系统的理论。直到本世纪60年代之前，虽然对光电现象的研究已有了相当的成就，也出现了不少实用的光电子器件，但光学和电子学仍然是两门独立的学科。

到本世纪60—70年代，随着激光的出现，人们对光与物质相互作用过程的研究变得空前的活跃，导致了激光物理学、非线性光学、半导体光电子学、导波光学和相干光学等一系列新学科的涌现。虽然某些学科之间已经有了一定程度的交叉，但基本上还是在各自的研究领域中独立发展的。

70年代以来，由于半导体激光器和光导纤维技术的重要突破，导致以光纤通信、光纤传感、光盘信息存储与显示及光信息处理等为代表的光信息技术的蓬勃发展，不仅从深度和广度上促进了相应各学科，特别是半导体光电子学、非线性光学和导波光学的发展和彼此间的知识互相渗透，而且还和数学、物理、材料等基础学科交叉形成新的边缘领域。例如，从异质结半导体激光器的研究中发展了超晶格量子阱(Quantum-well)结构材料，大大促进了对半导体光电物理和材料工艺的深入研究，到80年代出现了超大功率量子阱阵列激光器；又如，非线性光学效应历来只在强激光作用下的介电材料中才能观察到，然而到80年代，人们用弱光激发GaAs一类半导体，尤其是量子阱结构材料观察到极强的三次非线性光学现象，从而导致半导体光学双稳态(Bistability)功能器件的迅速发展；再如，光导纤维原来仅作为光传输介质用于光通信系统，随着对光纤物理特性的深入研究，在80年代出现了利用光纤的偏振和相位敏感特性制成的光纤传感器(Sensor)和由于光纤的非线性光学效应和色散特性形成的光学孤粒子(Soliton)，又进一步推动了对特种光纤的研究，并成功地研制成光纤激光器。尤其是新近出现的单晶光纤，则更有可能将有源和无源光电子功能器件与光纤波导融为一体……。在这种多学科综合发展的推动下，目前光纤通信已形成产业；光纤传感技术日趋成熟，半导体光逻辑功能器件和光集成技术取得重大进展，使光计算机和光信息处理成为举世瞩目的研究课题……。于是，一门新的综合性交叉学科便从现代信息科学领域中脱颖而出，这就是光电子学。它是研究光频电磁波场与物质中的电子相互作用及其能量相互转换的学科，因而也可以把它理解为

"利用光的电子学"。

二、光电子技术

光是一种电磁波。激光的产生则是通过把受激放大技术从电磁波谱的微波波段推广到光学波段而实现的。因此，光电子技术实质上是电子技术在光频波段的延续与扩展。

随着现代化建设的迅速发展，信息技术在社会生活中起着越来越重要的作用。在空间科学、现代防御体系、生命科学、遥感及管理科学等领域中都拥有巨量科学信息，要求在有限的时间、空间、甚至实时地进行准确处理。以智能化超高速计算机系统和综合业务数字通信网为代表的超高速、大容量信息处理和传输将成为未来信息科学发展的两个重大方向。这一战略目标向微电子学提出了挑战。而微电子技术在实现超高速、超大容量、超低功耗的集成系统方面遇到了根本的困难。

由于光的传输速度极快、频率极高，故光载波的信息容量极大。以光通信为例，光波频率比微波频率约高 10^3 倍，如果每个话路的频带宽 4 kHz，则光载波可容纳 100 亿路电话；若一套彩色电视节目的频带宽 10 MHz，则一条光路上可同时播送 1000 万套电视节目。因此，光电子信息技术便成为实现上述战略目标的重要手段。

一个完整的信息系统应包括光载波源、光的控制或信号加载、光信号的传输、光信号的处理与检测等几个基本的部分，每一部分均需大量的光电子器件以实现其各自的功能。如将光纤通信、光纤传感、光计算机、光信息处理等典型光电子信息系统加以解剖，可以粗略地列出几十种不同功能的光电子器件（参见图 1）。这些器件多采用 III—V 族半导体材料及其它电光、

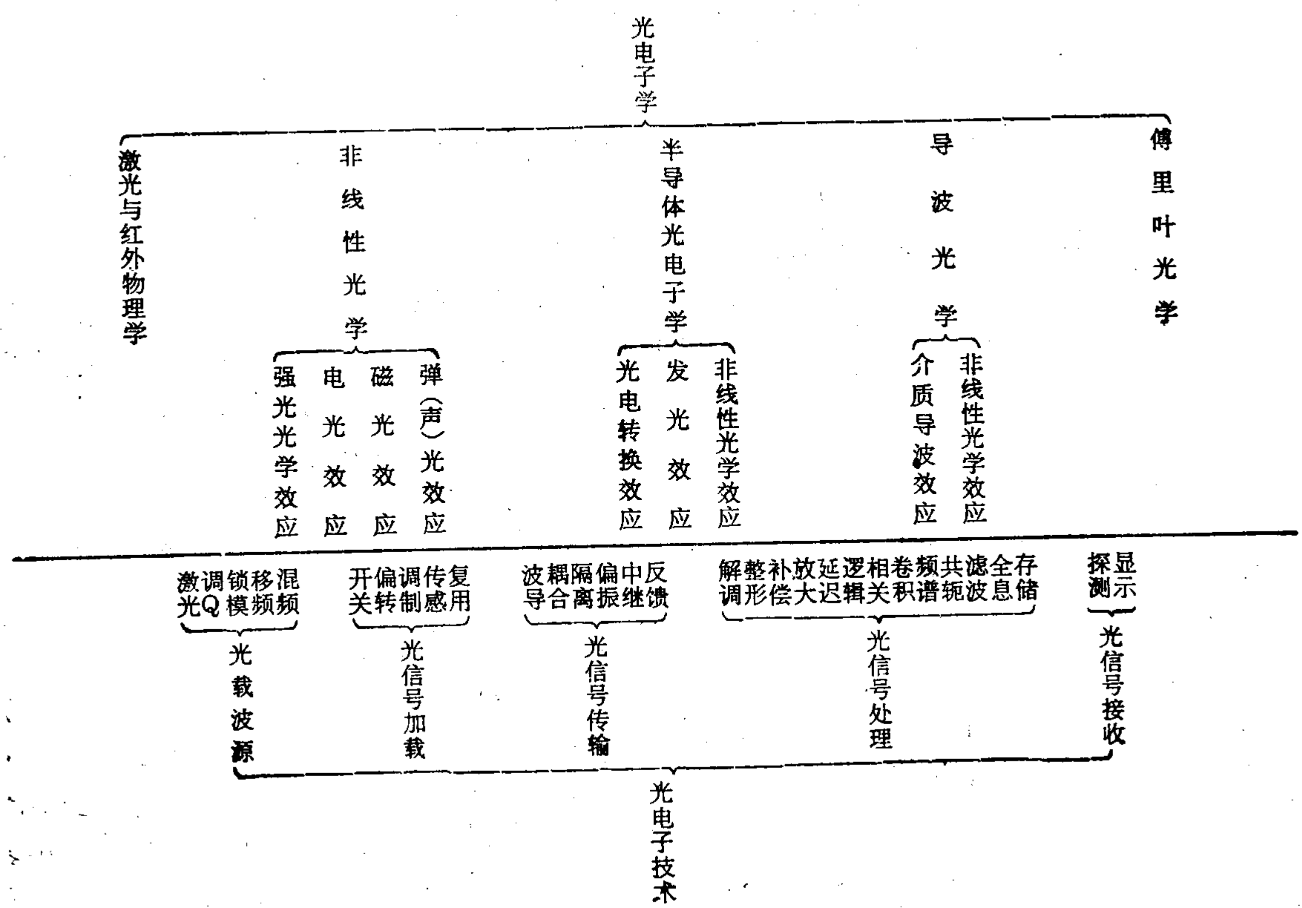

图 1 光电子学与光电子技术

磁光、声光介电材料做成。

光电子技术发展的重要趋势是与微电子学技术相结合，进行光电结合的信息传输与处理，充分利用 III—V 族半导体材料在制作高速激光器、高速光探测器、高速光开关、高速光逻辑功能器件、大容量光波导与光波导器件以及高速电子器件等方面的巨大优越性，发展新一代的集成光电子器件与技术。

三、光电子技术基础

光电子技术作为现代信息技术的一个分支，它形成了一个知识高度密集、发展更新极快的技术领域。因此，单纯从技术观点考虑，试图通过一门课或一本书面面俱到地讲清楚它的全貌是异常困难的，更何况在技术飞速发展的今天，也许刚写进书本的东西过不多久就被更新的技术所取代。

然而，如果从光电子学的基本原理着眼，尽管各种光电子器件名目繁多，功能各异，但它们都是基于在外界物理场（电场、磁场、应变场等）扰动下光和各种物质相互作用所产生的物理效应；尽管技术的变迁日新月异，不断更新换代，但引导这种技术革新的基本规律却是不变的。因此，掌握这些物理规律就抓住了光电子技术的本质。

本书就是根据光电子学的学科性质和技术特点，从光和物质相互作用的基本规律出发，将光电子技术中所涉及到的非线性光学、半导体光电子学和导波光学的基本物理内容归纳为①：强光非线性光学效应、电光效应、磁光效应、弹（声）光效应、半导体光电效应、介质光波导原理和光纤传输与传感原理，并以光和物质相互作用的微扰理论贯穿全书，以阐明各种物理效应间的内在联系。因此，本书便于读者对光电子技术的全貌有清晰的了解，并形成比较系统、完整、合理的知识结构。

本书着重讲解基础知识——基本的物理概念，基本的技术原理和基本的理论方法，因为基础知识反映科学的基本规律，包含有将要发展的新东西；本书又尽可能结合实际，因为实际的知识是这些基础知识溶合的结晶，能诱发人的创造思维。因此，书中除了选取一些比较成熟的光电子技术作为基本教学内容之外，还介绍了若干 80 年代以来新发展的光电子技术研究课题，如光学双稳态、光学相位共轭、量子阱光电器件、光纤中的光学孤粒子和光纤传感技术等，试图在读者的脑海里播下一些未来光电子技术的种子。

最后，我们将光电子学的学科内容及其相应的技术功能列成图表，示于图 1。读者在学完本课程之后，不妨将每种光电物理效应与各种可能的光电子功能一一联系起来。当你看到光电子学科中错综复杂的知识交叉情况时，是否觉得本书所设计的知识结构有助于你在令人眼花瞭乱的光电子世界中找到某些清楚的线索呢？

① 光电子学还包括激光与红外物理学及相干光学等学科知识，因另有教材专门介绍，本书中不涉及这两部分内容。

第一章　光和物质相互作用的基本理论

光和物质的相互作用是贯穿于所有光电过程的基本规律，是光电子学理论的核心。

光和物质的相互作用实质上是光波电场与物质中电子的相互作用，它一般可分为两大类：(1) 当光波频率(ω)远离原子谐振频率(ω_0)时，原子中电子的本征状态(因而原子的内能)并不发生改变，形式上只是光波与光波之间交换能量，称为非共振相互作用，可按经典电磁理论进行分析。在本书中将要讨论的各种介电物质(晶态或非晶态)中大量线性和非线性光学过程均属这种情况；(2) 当光波频率等于原子谐振频率($\omega=\omega_0$)时，原子中电子的本征状态将发生改变，称为共振相互作用，必须借助量子力学的方法处理。材料的光吸收和光辐射过程即属此类问题。

为使读者便于掌握光电子技术的基本理论及其内在的基本规律，在具体讲解各种物理问题之前，本章系统地介绍关于光和物质相互作用的基本概念和理论处理方法，包括光和固态物质的基本属性，光与物质相互作用的经典电子论，线性光学过程的经典电磁理论，非线性光学过程的经典微扰理论，固体中光吸收和光辐射的量子力学微扰理论。

§1.1　晶体及其物理常数

在光电子技术中最常用固体材料。固体可分为晶态和非晶态两大类。作为光传输和传感介质的光导纤维通常采用非晶态的熔融石英拉制而成，但大多数无源和有源的光电子器件则常采用固态晶体材料。因此，这里主要介绍晶体的物理属性，并着重于晶体的宏观对称性以及这种对称性在晶体的物理性质中如何反映出来。

1.1-1　晶体结构、分类及符号表示

众所周知，晶体由晶胞有规则地周期性堆积构成。晶胞堆积的方向称为晶轴，通常用不共面的三个矢量 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$ 来表示。因此，构成晶体的任意一个晶胞的位置可由下式表示：

$$\boldsymbol{L}=u\boldsymbol{a}+v\boldsymbol{b}+w\boldsymbol{c}$$

式中的 u, v, w 为整数。通过晶胞有规则的平移，就能构成具有各种外形的晶体。

一、晶体点阵和晶系

若用一个点(如晶胞的中心点)来代表一个晶胞，则这些点将在三维空间中有规则地排列起来，形成所谓晶体点阵。含有不在同一直线上的三个以上阵点的平面称为晶格面。任取一阵点，当连结它和另外三个阵点的三条直线不在同一平面上时，这三条直线所在的方向即成为晶轴，通常选用对称性最高的一组作为晶轴坐标系，用 X, Y, Z 表示。

设晶轴方向的单位长度分别为 a, b, c, 它们之间的夹角分别为 α, β, γ。由于受空间对称性的限制，只存在 14 种晶胞，如图 1.1 所示。由这 14 种晶胞形成的空间点阵称为布喇菲(Bravais)点阵。

若以点阵参数表征，这 14 种晶胞可归纳为表 1.1 所示的 7 种晶系。只包含 1 个原子的晶

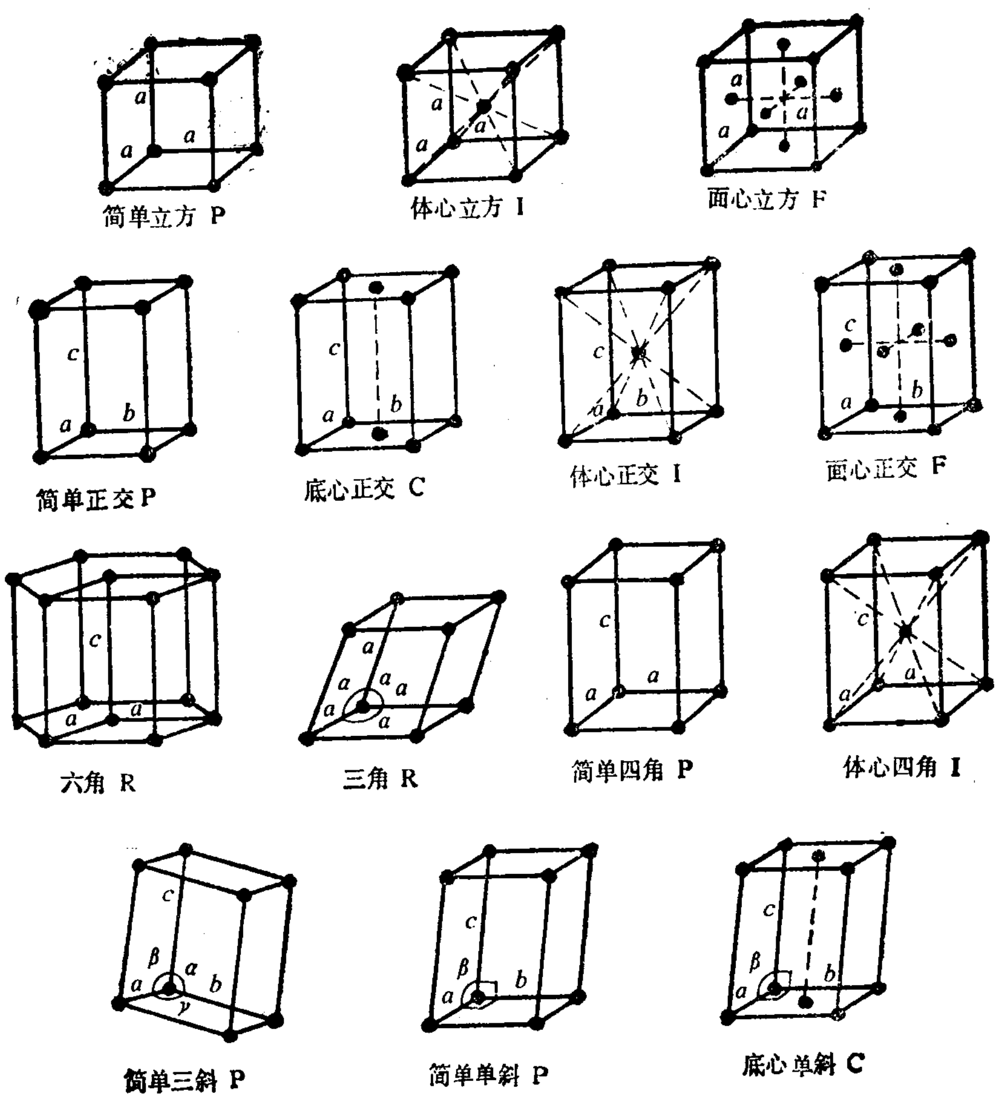

图1.1 布喇菲点阵

表1.1 三维空间中的十四种点阵类型

晶 系	晶系中的点阵数目	点阵符号	对标志的晶胞轴与角的限制
三斜	1	P	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
单斜	2	P, C	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$
正交(斜方)	4	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
正方(四角)	2	P, I	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
立方	3	P 或 sc I 或 bcc F 或 fcc	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
三角	1	R	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma<120^\circ$ $\neq 90^\circ$
六角	1	P	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$

胞记作 P，包含2个原子的体心晶胞记作 I，包含4个原子的面心晶胞记作 F，只含3个原子的面心晶胞用 C 表示，R 表示斜方（菱形）晶胞。

二、晶体的对称性

晶体外形的规则性是其内部周期结构的宏观反映。对晶体施以某种适当的操作，可使其自身重合，晶体的这种特性叫对称性，相应的操作叫对称操作。

由于晶格的周期性质，晶体只能有为数不多的对称类型，每种对称类型由少数几种基本对称操作组合而成。除平移以外的基本对称操作有以下几种①：

(1) 恒等操作(E)：绕任何轴旋转0或 2π 角度，它是一切点阵的一个对称元。

(2) n 次旋转(C_n)：绕一个轴旋转 $p\left(\frac{2\pi}{n}\right)$ 角度，p 和 n 为整数，n 称为对称轴次数。由于受内部点阵结构的限制，只能取 $n=1, 2, 3, 4, 6$。显然，1次轴 C_1 即恒等操作 E。

(3) 中心反演(I)：将一切相对于反演中心半径为 r 的点变换到 $-r$ 位置上。所有布喇菲点阵都是中心对称的。

(4) 镜象(σ)：相应于对称面的操作，将点变换到其镜象位置上。

(5) n 次旋转反演(S_n)：经 n 次旋转后再通过旋转轴的一点中心反演。同理，旋转轴也只能取 $n=1, 2, 3, 4, 6$。显然，S_1 就是中心反演 I，而 S_2 是垂直于该轴的镜象 σ。

综上所述，在晶体中只有10种基本对称操作，相应的宏观对称元表示为：

$$E(C_1),\ C_2,\ C_3,\ C_4,\ C_6,\ I(\equiv S_1),\ \sigma(\equiv S_2),\ S_3,\ S_4,\ S_6$$

其中包含 σ, I, S_n 在内的操作可使右手坐标系变成左手坐标系，或者反之。E 和 C_n 则没有左、右手坐标改变的问题。

三、点群及其符号表示

前述晶体中的10种宏观对称元可以单独存在，也可以组成各种不同的对称类型。以最简单的立方布喇菲点阵为例，其对称操作包括：恒等操作(E_1)；中心反演(I)；绕〈111〉等效方向的3次轴各旋转 $\frac{2\pi}{3}$ 和 $\frac{4\pi}{3}$，组成8种 C_3 操作($8C_3$)，相应地存在8种 S_3 操作($8S_3$)；绕〈110〉等效方向2次轴各旋转 π，组成6种 C_2 操作($6C_2$)，以垂直于这些轴的平面可进行6种镜象操作(6σ)；以〈100〉等效方向的2次轴旋转 π，组成3种 C_2 操作($3C_2$)，而绕这些轴旋转 $\frac{\pi}{2}$ 和 $\frac{3\pi}{2}$ 组成6种 C_4 操作($6C_4$)，相应地存在6种 S_4 操作($6S_4$)，以垂直于这些轴的平面可进行3种镜象操作(3σ)。总计48种对称操作，记作

$$E,\ 8C_3,\ 3C_2,\ 6C_2,\ 6C_4,\ I,\ 8S_3,\ 3\sigma,\ 6\sigma,\ 6S_4$$

这些对称元形成一个数学"群"，其中两个或多个操作的组合则是该群的另一个元。此外，因该群的所有对称元都通过一个共同的阵点，在这些操作下该点保持固定。因此，这些共点宏观对称元的集合构成对称群，称为点群。同样，可写出其他13种布喇菲点阵的点群。显然，其对称性将相应降低（即对称元减少）。

由多个相同或不同原子组成的基元所构成的复杂晶体可看成由基元中各原子构成的布喇菲亚点阵套构而成。因而其点群可由14种布喇菲点阵演变出来，其对称性一般会降低。用这种方法从14种布喇菲点阵可构成的点群数共32个，故晶体共有32种宏观对称类型。

① 因光波波长（约为 $1\mu m$）比晶胞线度（约为 $10\,\text{Å}$）约大3个数量级，无限大点阵沿着几个晶格常数的位移不会显著改变其物理性质及相应的数学表示。因此，在光学波段内，可不考虑平移。

每种晶体点群用一个国际符号或熊夫利(Schönflies)符号标记。国际符号规定：把轴外和镜象面外的一点移到初始位置或其等效位置所需要的对称元列举出来，用数字表示对称轴(旋转轴用 1, 2, 3, 4, 6 表示，旋转反演轴用 $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ 表示。)，用字母m表示对称面，由数字和字母组成的分数表示该方向的旋转轴和垂直于该方向的对称面同时存在。以常见的 KDP 晶体为例，它属于四角晶系，点群符号为 $\bar{4}2m$，其中 $\bar{4}$ 是主对称元素，表示在 $Z(\boldsymbol{c})$ 轴方向有 4 次旋转反演轴；数字 2 是副对称元，表示在等效的 $X(\boldsymbol{a})$ 和 $Y(\boldsymbol{b})$ 轴方向各有一个 2 次轴；而字母m则表示在 X 和 Y 的角平分线方向有一个与该方向垂直的对称面。表 1.2 列出了 7 个晶系所对应的 32 种晶体点群及两种符号的对应关系，同时还给出了各点群相应的对称元。每个晶系的最后一个点群所具有的对称元数目最大，并与该布喇菲点阵相对应。

表 1.2　点　群

晶　系	分类符号 国际符号	分类符号 Schönflies 符号	对称元
三斜晶系	1	C_1	E
	$\bar{1}$	C_i	EI
单斜晶系	m	C_3	$E\sigma_h$
	2	C_2	EC_2
	$2/m$	C_{2h}	$EC_2I\sigma_h$
正交(斜方)系	$2mm$	$C_{2\nu}$	$EC_2\sigma'_\nu\sigma''_\nu$
	222	D_2	$EC_2C'_2C''_2$
	mmm	D_{2h}	$EC_2C'_2C''_2I\sigma_h\sigma'_\nu\sigma''_\nu$
正方(四角)晶系	4	C_4	$E2C_4C_2$
	$\bar{4}$	S_4	$E2S_4C_2$
	$4/m$	C_{4h}	$E2C_4C_2I2S_4\sigma_h$
	$4mm$	$C_{4\nu}$	$E2C_4C_22\sigma'_\nu2\sigma''_h$
	$\bar{4}2m$	D_{2d}	$EC_2C'_2C''_2\sigma'_\nu2S_4\sigma''_\nu$
	422	D_4	$E2C_4C_22C'_22C''_2$
	$4/mmm$	D_{4h}	$E2C_4C_22C'_22C''_2I2S_4\sigma_h2\sigma'_h2\sigma''_h$
三角晶系	3	C_3	$E2C_3$
	$\bar{3}$	C_{3i}	$E2C_3I2S_3$
	$3m$	$C_{3\nu}$	$E2C_33\sigma_\nu$
	32	D_3	$E2C_33C_2$
	$\bar{3}m$	D_{3d}	$E2C_33C_2I2S_33\sigma_\nu$
六角晶系	6	C_6	$E2C_62C_3C_2$
	$\bar{6}$	C_{3h}	$E2C_3\sigma_h2S_6$
	$6/m$	C_{6h}	$E2C_62C_3C_2I2S_32S_6\sigma_h$
	$\bar{6}m2$	D_{3h}	$E2C_33C_2\sigma_h2S_63\sigma_\nu$
	$6mm$	$C_{6\nu}$	$E2C_62C_33\sigma'_\nu3\sigma''$
	622	D_6	$E2C_62C_3C_23C'_23C''_2$
	$6/mmm$	D_{6h}	$E2C_62C_3C_23C'_22C''_2I2S_32S_6\sigma_h2\sigma'_\nu3\sigma''_\nu$
立方晶系	23	T	$E8C_33C_2$
	$m3$	T_h	$E8C_33C_2I8S_33\sigma$
	$\bar{4}3m$	T_d	$E8C_33C_26\sigma6S_4$
	432	O	$E8C_33C_26C_26C_4$
	$m3m$	O_h	$E8C_33C_26C_26C_4I8S_33\sigma6\sigma6S_4$

1.1-2 晶体的物理常数[1-1]

由于晶体中原子的周期性规则排列，所以晶体的宏观物理性质一般是各向异性的，通常需要用张量描述。张量是在直角坐标系中定义的，而晶体的三个晶轴并不一定正交，因此，为了表示晶体物理常数的张量性质，需要按各类晶体选取适当的物理参考坐标系，本书中用 x_1, x_2, x_3 表示①。有关张量的基本知识在附录 A 中详细叙述，这里仅介绍在物理参考系中晶体物理常数的定义及各类晶体的高阶张量矩阵表示。

一、晶体物理常数的定义

考虑一块处于外界物理场中的单位质量的晶体，取应力张量 $\boldsymbol{\sigma}$、电场强度矢量 $\boldsymbol{E}$、磁场强度矢量 $\boldsymbol{H}$ 及温度 T 为场变量，称为内涵量。根据固体热力学(附录 B)理论，晶体中的吉布斯(Gibbs)自由能为

$$G=U-S_{ij}\sigma_{ij}-D_iE_i-B_iH_i-S^TT \tag{1.1-1}$$

式中 U 为内能，$\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{B}$ 和 S^T 分别为应变张量、电位移矢量、磁感应强度矢量和熵，这些物理量称为外延量。由(1.1-1)式求得

$$S_{ij}=-\left(\frac{\partial G}{\partial \sigma_{ij}}\right)_{EHT} \tag{1.1-2}$$

$$D_i=-\left(\frac{\partial G}{\partial E_i}\right)_{\sigma HT} \tag{1.1-3}$$

$$B_i=-\left(\frac{\partial G}{\partial H_i}\right)_{\sigma ET} \tag{1.1-4}$$

$$S^T=-\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{\sigma EH} \tag{1.1-5}$$

式中角标表示求偏微商时应保持不变的物理量。外延量与各内涵量的关系写成

$$dS_{ij}=\left(\frac{\partial S_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\right)d\sigma_{kl}+\left(\frac{\partial S_{ij}}{\partial E_k}\right)dE_k+\left(\frac{\partial S_{ij}}{\partial H_k}\right)dH_k+\left(\frac{\partial S_{ij}}{\partial T}\right)dT \tag{1.1-6}$$

$$dD_i=\left(\frac{\partial D_i}{\partial \sigma_{kl}}\right)d\sigma_{kl}+\left(\frac{\partial D_i}{\partial E_k}\right)dE_k+\left(\frac{\partial D_i}{\partial H_k}\right)dH_k+\left(\frac{\partial D_i}{\partial T}\right)dT \tag{1.1-7}$$

$$dB_i=\left(\frac{\partial B_i}{\partial \sigma_{kl}}\right)d\sigma_{kl}+\left(\frac{\partial B_i}{\partial E_k}\right)dE_k+\left(\frac{\partial B_i}{\partial H_k}\right)dH_k+\left(\frac{\partial B_i}{\partial T}\right)dT \tag{1.1-8}$$

$$dS^T=\left(\frac{\partial S^T}{\partial \sigma_{kl}}\right)d\sigma_{kl}+\left(\frac{\partial S^T}{\partial E_k}\right)dE_k+\left(\frac{\partial S^T}{\partial H_k}\right)dH_k+\left(\frac{\partial S^T}{\partial T}\right)dT \tag{1.1-9}$$

这些关系也可看作在平衡点附近按泰勒(Taylor)级数展开后的一阶近似表示式。通常可以测得的物理量就是离平衡点的偏移(即式中的 dS_{ij}, $d\sigma_{kl}$, dD_i, dE_k, dB_i, dH_k 等)，故可直接用物理量符号 S_{ij}, σ_{kl}, D_i, E_k, B_i, H_k 表示。但温度已有规定的绝对标度，所以按热力学常规，保留其变量的原来形式(即 dS^T 和 dT)。

关系式(1.1-6)—(1.1-9)式右边的偏微商反映了外延量和内涵量之间的比例关系，由其比例系数即定义出一系列物理常数(或系数)，它们分别称为：

弹性系数

---

① 晶体物理参考坐标系 x_1, x_2, x_3 不是任意选择的，它们与晶轴坐标系 X, Y, Z 的关系遵循如下规则：
正交和立方晶系：$x_1 /\!/ X$, $x_2 /\!/ Y$, $x_3 /\!/ Z$;
四角、三角和六角晶系：$x_3 /\!/ Z$, $x_1 /\!/ X$;
单斜晶系：$x_2 /\!/ Y$。

$$\lambda_{ijkl}=\frac{\partial S_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial \sigma_{kl}\partial \sigma_{ij}}\right)_{EHT}=\frac{\partial S_{kl}}{\partial \sigma_{ij}}=\lambda_{klij} \tag{1.1-10}$$

介电系数

$$\varepsilon_{ij}=\frac{\partial D_i}{\partial E_j}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial E_j\partial E_i}\right)_{\sigma HT}=\frac{\partial D_j}{\partial E_i}=\varepsilon_{ji} \tag{1.1-11}$$

导磁系数

$$\mu_{ij}=\frac{\partial B_i}{\partial H_j}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H_j\partial H_i}\right)_{\sigma ET}=\frac{\partial B_j}{\partial E_i}=\mu_{ji} \tag{1.1-12}$$

压电系数

$$d_{ikl}=\frac{\partial D_i}{\partial \sigma_{kl}}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial \sigma_{kl}\partial E_i}\right)_{HT}=\frac{\partial S_{kl}}{\partial E_i} \tag{1.1-13}$$

压磁系数

$$g_{ikl}=\frac{\partial B_i}{\partial \sigma_{kl}}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial \sigma_{kl}\partial H_i}\right)_{ET}=\frac{\partial S_{kl}}{\partial H_i} \tag{1.1-14}$$

电热系数

$$p_i=\frac{\partial D_i}{\partial T}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T\partial E_i}\right)_{\sigma H}=\frac{\partial S^T}{\partial E_i} \tag{1.1-15}$$

热胀系数

$$\alpha_{ij}=\frac{\partial S_{ij}}{\partial T}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T\partial \sigma_{ij}}\right)_{HE}=\frac{\partial S^T}{\partial \sigma_{ij}} \tag{1.1-16}$$

热磁系数

$$q_i=\frac{\partial B_i}{\partial T}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T\partial H_i}\right)_{\sigma E}=\frac{\partial S^T}{\partial H_i} \tag{1.1-17}$$

磁电系数

$$m_{ij}=\frac{\partial D_i}{\partial H_j}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H_j\partial E_i}\right)_{\sigma T}=\frac{\partial B_j}{\partial E_i} \tag{1.1-18}$$

热容量(C):

$$\frac{\rho C}{T}=\frac{\partial S^T}{\partial T}=-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{\sigma HE}(\rho\text{ 为密度}) \tag{1.1-19}$$

将(1.1-10)—(1.1-19)式代入(1.1-6)—(1.1-9)式，即得

$$S_{ij}=\lambda_{ijkl}^{EHT}\sigma_{kl}+d_{kij}^{HT}E_k+g_{kij}^{ET}H_k+\alpha_{ij}^{HE}\delta T \tag{1.1-20}$$

$$D_i=d_{ikl}^{HT}\sigma_{kl}+\varepsilon_{ik}^{\sigma HT}E_k+m_{ik}^{\sigma T}H_k+p_i^{\sigma H}\delta T \tag{1.1-21}$$

$$B_i=g_{ikl}^{ET}\sigma_{kl}+m_{ki}^{\sigma T}E_k+\mu_{ik}^{\sigma ET}H_k+q_i^{\sigma E}\delta T \tag{1.1-22}$$

$$\delta S^T=\alpha_{kl}^{HE}\sigma_{kl}+p_k^{\sigma H}E_k+q_k^{\sigma E}H_k+\frac{\rho C^{\sigma EH}}{T}\delta T \tag{1.1-23}$$

这就是热力学状态方程，也就是外延物理量和内涵物理量之间的响应关系。

应当注意的是，当某一物理量改变时，有可能使若干个物理量随之改变。因此，为准确求得晶体的物理常数，必须明确规定测量状态，并正确考虑其他有关物理量的变化。

二、晶体物理常数的张量矩阵

晶体的各种物理常数应为各阶张量，为今后学习方便起见，这里统一给出晶体三阶和四阶张量的矩阵表示。

1. 三阶张量　三阶张量包含 27 个独立分量，一般不能用矩阵表示。但在许多情况下，三阶张量的三个角标(i, j, k)中总有两个并列角标(ij 或 jk)是对称的，可以按照一定的缩写规则将它化为矩阵形式。

以(1.1-21)式中压电物理量间的关系为例：

$$D_i = d_{ijk}\sigma_{jk} \tag{1.1-24}$$

因 σ_{jk} 为对称二阶张量(参见§5.1)，可不必区别角标 j 和 k 的顺序(jk 或 kj)，故可引入下述缩写角标：

$$\left.\begin{array}{lcccccc} jk= & 11 & 22 & 33 & 23(32) & 13(31) & 12(21) \\ \nu= & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array}\right\} \tag{1.1-25}$$

并令

$$F_\nu = \left(1-\frac{1}{2}\delta_{jk}\right)(\sigma_{jk}+\sigma_{kj}) \tag{1.1-26}$$

于是，(1.1-24)式写成

$$D_i = d_{i\nu}F_\nu \tag{1.1-27}$$

以矩阵表示，则为

$$\begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ 2\sigma_4 \\ 2\sigma_5 \\ 2\sigma_6 \end{bmatrix} \tag{1.1-28}$$

这样，三阶张量 d_{ijk} 即以(3×6)的矩阵表出。

现讨论晶体对称性的影响。为此，将张量 d_{ijk} 的 27 个分量按(1.1-28)式中的矩阵规则写成阵列

$$\begin{array}{ccccccccc} \underline{d_{111}} & \underline{d_{122}} & \underline{d_{133}} & d_{123} & d_{132} & \underline{d_{113}} & \underline{d_{131}} & \underline{\underline{d_{112}}} & \underline{\underline{d_{121}}} \\ \underline{\underline{d_{211}}} & \underline{\underline{d_{222}}} & \underline{\underline{d_{233}}} & \underline{d_{223}} & \underline{d_{232}} & d_{213} & d_{231} & \underline{d_{212}} & \underline{d_{221}} \\ \underline{d_{311}} & \underline{d_{322}} & \underline{d_{333}} & \underline{\underline{d_{323}}} & \underline{\underline{d_{332}}} & \underline{d_{313}} & \underline{d_{331}} & d_{312} & d_{321} \end{array} \tag{1.1-29}$$

当对晶体施以某种对称操作(即坐标变换)时，根据附录 A 表 A-1 给出的张量变换规则，应有

$$d'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn}d_{lmn} \tag{1.1-30a}$$

式中上标“′”代表新坐标系中的张量元，a_{il}(及 a_{jm}，a_{kn})为坐标变换矩阵元(即新、老坐标轴间夹角的方向余弦)。但在对称操作下晶体的物理性质及表征相应物理量的张量矩阵应保持不变，故有

$$d'_{ijk} = d_{ijk} \tag{1.1-30b}$$

先考虑对称中心的影响，相应的变换矩阵为

$$[a_{ij}] = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = -[\delta_{ij}]$$

将其代入(1.1-30)式，则得到

$$d'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn}d_{lmn} = -\delta_{il}\delta_{jm}\delta_{kn}d_{lmn} = -d_{ijk} = d_{ijk} = 0 ①$$

由此可见，凡具有对称中心的晶体不可能具有三阶张量表示的物理量。

对于非中心对称的晶体，原则上也可利用(1.1-30)式来简化张量矩阵。但对于除三角和六角以外的其他晶系，因物理参考系与晶轴坐标系一致，因而利用张量变换与坐标乘积变换的相似性(参见附录 A)，采用所谓变换角标的方法更为简便、直观。

例 1 单斜晶体(2) 只有 x_2 方向的 C_2 轴，其坐标变换关系为

① 一个数的正、负值相等，该数只能为零。

$$x_1' \to -x_1,\ x_2' \to x_2,\ x_3' \to -x_3$$

以元素 d_{111}, d_{112} 的变换为例:

$$\because\quad x_1'x_1'x_1' = -x_1x_1x_1 \qquad \therefore\quad d_{111}' = -d_{111} = d_{111} = 0$$

$$\because\quad x_1'x_1'x_2' = x_1x_1x_2 \qquad \therefore\quad d_{112}' = d_{112} \neq 0$$

依此类推,凡角标 1 或 3 分别出现奇数次或两者同时出现奇数次的分量均等于零,如阵列(1.1-29)中标记"——"的分量。于是张量矩阵简化为

$$[d_{iv}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & 0 & d_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{34} & 0 & d_{36} \end{bmatrix} \tag{1.1-31}$$

例 2 $\bar{4}2m$ 晶体 在 x_1 和 x_2 方向均有 C_2 轴,因此除(1.1-31)式中已消去的分量以外,再考虑 x_1 方向的 C_2 操作,即

$$x_1' \to x_1,\ x_2' \to -x_2,\ x_3' \to -x_3$$

按前述的方法推知,凡角标 2 或 3 分别出现奇数次或同时出现奇数次的分量均应为零,这样又消去阵列(1.1-29)中画有"="的七个分量。

再考虑 x_3 方向的 $\bar{S}_4$ 操作,即

$$x_1' \to -x_2,\ x_2' \to x_1,\ x_3' \to -x_3$$

张量矩阵只剩下三个独立分量:

$$d_{213} = d_{123},\ d_{231} = d_{132},\ d_{321} = d_{312}$$

这一结果也可从考虑 x_1 和 x_2 轴的角平分面上的镜象操作得出。

最后,考虑到 d_{ijk} 的角标 j 和 k 的对称性,则只剩下二个独立分量

$$d_{213} = d_{231},\ d_{123} = d_{132}$$

于是,张量矩阵简化为

$$[d_{iv}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{36} \end{bmatrix} \tag{1.1-32}$$

例 3 立方晶体 $\bar{4}3m$ 除了(1.1-32)式矩阵中消去的分量外,再考虑[111]方向的 C_3 操作:

$$x_1' \to x_2,\ x_2' \to x_3,\ x_3' \to x_1$$

可得到 $d_{312} = d_{123}$(即 $d_{36} = d_{14}$),张量矩阵则简化为

$$[d_{iv}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} \end{bmatrix} \tag{1.1-33}$$

只剩下一个独立分量。

上述变换角标的方法虽然直观易懂,但对于三角及六角晶系,由于晶轴不构成正交坐标系,因而不能使用。为简化张量矩阵,只能根据选定的 6 次轴或 3 次轴(x_3 轴)写出坐标变换矩阵 $[a_{ij}]$,再根据(1.1-30)式计算。由于该计算过程较繁,这里不再举例。

32 种晶体的简化三阶张量矩阵可在附录 C 中找到。

2. 四阶张量 四阶张量包含 81 个分量,一般也不能用矩阵表示。但如果四阶张量联系两个对称二阶张量,则其角标是两两对称的。仿照与(1.1-25)式类似的缩写规则,也可将它化