物理学中的群论

下　册

陶瑞宝　编著

上海科学技术出版社

内 容 提 要

本书论述群的基本理论，对物理学上比较重要的一些对称性群的结构和表示，作了比较详细的论述，介绍了在分子物理和固体物理中的一些应用。全书分两册，上册专门论述有限群和连续群的基本理论，并且详细地论述了一些群（包括点群、空间群、磁群的结构和表示）；下册专门介绍在分子物理和固体物理中的一些应用。

本书上册可以作为综合性大学物理专业高年级学生和研究生的参考教材；下册可作为研究生和专门组的参考和选读材料。本书也可作为有关研究工作者的参考资料。

责任编辑 戴雪文

物 理 学 中 的 群 论

下 册

陶瑞宝 编著

上海科学技术出版社出版
（上海瑞金二路 540 号）
新华书店上海发行所发行　　商务印书馆上海印刷厂印刷
开本 850×1156 1/32 印张 11.75 字数 310,000
1989 年 11 月第 1 版　1989 年 11 月第 1 次印刷
印数 1—1,600

ISBN 7-5323-1427-8/O·131

定价：3.50 元

序

下册是论述群论在具体物理问题中的应用，它所用的基本理论来自上册。由于群论在物理学中的一切领域几乎都有着广泛的应用，所以要写一本群论在各个领域中应用的书，是不太可能的。我只能选择自己较熟悉的领域：分子和固体物理中群论的应用。下册共七章，前四章是点群的应用，有：晶体宏观对称性、分子轨道理论、配位场理论和分子振动；后三章是空间群的应用，有：第二类相变的对称理论、晶体中的电子态和晶格振动。

由于下册是与上册基本原理衔接的，因此学习下册最好先阅读上册有关点群和空间群的章节。但是就各章的物理内容和群论处理方法来说，基本上是各自独立的，读者可以任意挑选其中的有关章节。

在应用部分，我尽量使各章在物理原理的论述上做到比较详细，并通过一个具体的例子来说明群论是如何应用到这些领域，这对进一步想做这方面理论研究的同志是有一定的好处的。

由于本人水平有限，书中缺点和错误难免，恳请读者多提宝贵意见。

陶瑞宝

1983年8月

目　录

第十七章

晶体的宏观对称性

本章着重讨论晶体的宏观对称性。这种对称性仅属于点群的对称性，因此只需点群的知识就可加以讨论。但是本章的许多物理结论，多数可仅用第一章的知识，特别是张量代数的知识得到，很少需要群论的语言。作为张量变换性质和点群在物理上的初步应用，这一章是恰当的。

§17.1 物理量和物理性质量

对一个物体而言，往往二个可测的物理量之间存在着一定的关系。这种关系就表征了该物体的一种物理性质。我们举几个例子来加以说明。一个物体的体积 V 和质量 m 都是可以测量的，它们是物理量。在这两个"可测"量之间存在着一种关系.

$$m=\rho V。 \tag{1-1}$$

ρ 是表征这种关系的量，是此物体的物理性质量。

又如在各向同性的连续媒质中，物体的电极化率 χ 是表征外电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和由它感应产生的电矩 $\boldsymbol{P}$ 之间的一种关系，在线性近似下：

$$\boldsymbol{P}=\chi\boldsymbol{E}。 \tag{1-2}$$

这里 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 都是可测的物理量，χ 是物理性质量。

又如在各向同性的连续媒质中，电流密度 $\boldsymbol{j}$ 和外场 $\boldsymbol{E}$ 是一组物理量，而电导 σ 则是表征物理性质的一个量，在线性近似下是

$$\boldsymbol{j}=\sigma\boldsymbol{E}。 \tag{1-3}$$

在晶体中，由于晶体的各向异性性，物理性质也是各向异性的。这时(1-2)和(1-3)都应改写成如下形式：

$$P_i=\sum_{j=1}^{3}\chi_{ij}E_j,\quad (i=1,\ 2,\ 3),\tag{1-4}$$

$$j_i=\sum_{j=1}^{3}\sigma_{ij}E_j,\quad (i=1,\ 2,\ 3)。\tag{1-5}$$

式中 i, $j=1$, 2, 3 分别表示三个坐标轴方向的分量指标。

在(1-4)、(1-5)式中，可测的物理量 $\boldsymbol{P}$、$\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{E}$ 等，都是一个向量，在坐标变换时(即不同的实验室参考系)它们像位置向量 $\boldsymbol{x}$ 一样变换。而在(1-1)式中的 V 和 m 等都是标量，它们不随坐标系变而变的。

一般情况下，每一个可测的物理量，都可以看作是某种类型的张量。V 和 m 是零级张量，即标量；$\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 等是一阶张量，即向量，它们与坐标相同变换，因此按第一章第 8 节的定义，它们是逆变一阶张量。在固体物理的领域，变换都限于线性正交变换，所以逆变张量与协变张量完全相同，不必区分这两类张量。

也存在一些物理量，像胁强 τ 和胁变 ϵ 是一个二阶张量。在晶体中，它们分量之间的关系式在线性近似下为：

$$\tau_{ij}=\sum_{kl}C_{ij;kl}\epsilon_{kl},\tag{1-6}$$

$C_{ij;kl}$ 是物理性质量，称为弹性模量。现在设有一坐标变换 $\hat{A}$，使坐标按 $\hat{x}'=\hat{A}^T\hat{x}$ 变，写成分量形式为

$$x_i'=\sum_{\alpha=1}^{3}A_{\alpha i}x_\alpha={}_DA_{\alpha i}x_\alpha \quad (\text{规定重复希腊指标求和})。\tag{1-7}$$

至于 ϵ_{ij} 和 τ_{ij} 则按如下变换

$$W_{ij}=A_{\alpha i}A_{\beta j}W_{\alpha\beta},\tag{1-8}$$

这里 W_{ij} 代表 ϵ_{ij} 或 τ_{ij}。

在非线性近似下，一些物理性质本身也可以看作是一个与另一个物理量有关的物理量。例如电感应强度 $\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{E}$ 的关系，一般可写成

$$D_i=\epsilon_{i\alpha}E_\alpha+\epsilon_{i\alpha\beta}E_\alpha E_\beta+\epsilon_{i\alpha\beta\gamma}E_\alpha E_\beta E_\gamma+\cdots\cdots,\tag{1-9}$$

$$\frac{dD_i}{dE_j}=\epsilon_{ij}+2\epsilon_{ij\alpha}E_\alpha+3\epsilon_{ij\alpha\beta}E_\alpha E_\beta+\cdots\cdots。\qquad(1\text{-}10)$$

$\frac{dD_i}{dE_j}$ 可以定义为介电系数，它与电场 $\boldsymbol{E}$ 有关，是一个物理性质量。但由(1-10)可知，它又可看作是一个物理量，与 $\boldsymbol{E}$ 一起建立一种新的关系。ϵ_{ij}，$\epsilon_{ij\alpha}$，$\epsilon_{ij\alpha\beta}$ 是表征物理性质一级、二级、三级效应的物理量。

由于物理方程，也就是联系物理量之间的关系式不应随参考系变而改变，所以物理性质量一定是一个张量，只有这样才能保持方程是协变的。例如电导在各向同性媒质中是一个标量，在晶体中是一个二阶张量；χ_{ij} 和 ϵ_{ij} 等都应是二阶张量；C_{ijkl} 应是四阶张量等等。所有物理张量按空间反演和时间反演时的变换性质，又可分为下面四种类型。

(1) 真张量，记为 PI 张量，有时称为时空真张量。

当坐标变换矩阵是 $\hat{A}^T$ 时，即 $\hat{x}'=\hat{A}^T\hat{x}$，我们定义时空真张量的变换规律如下：

$$W'_{ijk\cdots}=A_{\alpha i}A_{\beta j}A_{\gamma k}\cdots W_{\alpha\beta\gamma\cdots}。\qquad(1\text{-}11)$$

这里我们习惯把求和的指标(α, β, $\gamma\cdots$)写在前面，当然完全可以像有些作者所定义的那样，求和是对后面的指标进行的。这是无关紧要的，只要前后一致就可以了。

(2) 空间膺张量，记为 AI 张量　在坐标变换为 $\hat{A}^T$ 时，定义这种张量的变换服从如下规律：

$$W'_{ijk\cdots}=\det\hat{A}A_{\alpha i}A_{\beta j}A_{\gamma k}\cdots W_{\alpha\beta\gamma}\cdots。\qquad(1\text{-}12)$$

当空间没有反演时，$\det\hat{A}=1$，所以对没有空间反演的变换来说，AI 张量像一个 PI 真张量一样。但当空间存在反演时，$\det\hat{A}=-1$，它的变换与同级真张量相差一个负号。像真标量，在空间反演时是不变的，但空间膺标量却不是一个不变量，它要改变符号。而向量情况正好相反，真向量在空间反演时应该改变符号，可是空间膺向量却不改变符号。这种 AI 张量相对于纯旋转来说，它如同真张量，可是相对于具有空间反演的旋转来说($\det\hat{A}=-1$)，却

不同于真张量。所以我们称它为空间赝张量。

(3) 时间赝张量，记为 PO 张量　当存在时间反演操作 R 时，定义时间赝张量的变换规律如下：

$$W'_{ijk\cdots}=\|\boldsymbol{R}\|A_{\alpha i}A_{\beta j}A_{\gamma k}\cdots W_{\alpha\beta\gamma\cdots}, \tag{1-13}$$

式中 $\|R\|$ 定义为

$$\|\boldsymbol{R}\|=\begin{cases}1, & \text{没有时间反演操作时,}\\ -1, & \text{有时间反演操作时。}\end{cases} \tag{1-14}$$

这种赝张量仅在时间反演时才与真张量不一样的变换。

(4) 时空赝张量，记为 AO 张量　这种张量定义为：

$$W'_{ijk\cdots}=\det\hat{A}\cdot\|\boldsymbol{R}\|\cdot A_{\alpha i}A_{\beta j}A_{\gamma k}\cdots\cdots W_{\alpha\beta\gamma\cdots}。 \tag{1-15}$$

所有物理张量都可按上述四种张量分类。下面让我们来列举一些物理张量的分类例子。

真张量的例子有：位置向量、速度向量、电场 $\boldsymbol{E}$、电矩 $\boldsymbol{P}$ 等。两个真向量的向量积 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ 是一个空间赝张量，因为空间反向时：$\boldsymbol{A}\to-\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}\to-\boldsymbol{B}$，结果这个向量 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ 不变。

由方程 $\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$，由于 ∇ 和 $\boldsymbol{E}$ 都是真向量，所以 $\nabla\times\boldsymbol{E}$ 是一个空间赝向量，但相对于时间反演来说，它是一个真向量，不变号。所以 $\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 一定是属于空间赝向量。又 $\frac{\partial}{\partial t}$ 是一个时间赝标量，时间反演要改变符号，所以 $\boldsymbol{B}$ 也一定是一个时间赝向量，结果磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 是一个时空赝向量。

不难知道电荷密度 ρ 是一个真标量；电流密度 $\boldsymbol{j}$ 是时间赝向量；磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 一样是时空赝向量，这一点也可以由麦克斯韦方程 $\nabla\times\boldsymbol{H}=\frac{1}{c}\left[\frac{\partial D}{\partial t}+4\pi\boldsymbol{j}\right]$ 来判定。

§17.2　一些物理性质张量和内部热力学对称性

物理性质张量分为平衡态性质张量和非平衡态性质张量两大类。这里讨论的非平衡性质张量仅限于稳定的非平衡性质张量。

(一)平衡态物理性质张量

描写平衡态的物理量是成对的，像：温度 T 和熵 S；胁强 τ_{ij} 和胁变 ϵ_{ij}；磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 和磁感应强度 $\boldsymbol{B}$；电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和电位移强度 $\boldsymbol{D}$；压强 p 和体积 V 等等。平衡态时物理量 S、$\boldsymbol{D}$、$\boldsymbol{B}$、ϵ 和 V 等是物理量 T、$\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{H}$、$\boldsymbol{\tau}$ 和 p 的函数。记 $\boldsymbol{i}_n$($n=T$, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{\tau}$ 和 p) 代表 $\{T, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}, \boldsymbol{\tau}$ 和 $p\}$；$\boldsymbol{e}_n$($n=S$, $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{B}$, ϵ 和 V)代表$\{S, \boldsymbol{D}, \boldsymbol{B}, \epsilon$ 和 $V\}$。令在平衡态时作准静态的变更，则在线性近似下有

$$de_p^{ijk\cdots l}=\sum_q O_{pq}^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta;ijk\cdots l}\,di_q^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta}。\tag{2-1}$$

这里我们已明显地写出张量分量的指标，因为一般 $\boldsymbol{e}_p$, $\boldsymbol{i}_p$ 等是张量。由(1-6)式可定义 $\hat{O}$ 矩阵

$$O_{pq}^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta;ijk\cdots l}=D\frac{\delta e_p^{ijk\cdots l}}{\delta i_q^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta}}\tag{2-2}$$

当然也可定义 $\hat{O}$ 矩阵的逆。记

$$di_p^{ijk\cdots l}=\sum_q R_{pq}^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta;ijk\cdots l}\,de_q^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta},\tag{2-3}$$

$$R_{pq}^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta;ijk\cdots l}=(\hat{O}^{-1})_{pq}^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta;ijk\cdots l}=\frac{\delta i_p^{ijk\cdots l}}{\delta e_q^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta}}。\tag{2-4}$$

热力学上，体系内能的变化为

$$du=i_p^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta}\,de_p^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta},$$

$$\Rightarrow R_{pp'}^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta;\alpha'\beta'\gamma'\cdots\delta'}=\frac{\partial^2 u}{\partial e_p^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta}\partial e_{p'}^{\alpha'\beta'\gamma'\cdots\delta'}}=R_{p'p}^{\alpha'\beta'\gamma'\cdots\delta';\alpha\beta\gamma\cdots\delta}。\tag{2-5}$$

亦存在如下对称关系

$$R_{pq}^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta;\alpha\beta\gamma\cdots\delta}=R_{qp}^{\alpha\beta\gamma\cdots\delta;\alpha\beta\gamma\cdots\delta}。\tag{2-6}$$

关系(2-5)和(2-6)的对称性来自热力学，所以称为内部对称性。它是不同于晶体的宏观对称性对物理性质张量的限制。容易证明 O 张量亦有这样的对称关系。

现在我们给出平衡态体系的一个例子。当同时考虑热、电、磁和弹性的效应及其相互作用时，则由(2-1)式可写成：

$$\begin{cases} dS=C\,dT+p_\alpha\,dE_\alpha+q_\alpha\,dH_\alpha+e_{\alpha\beta}\,d\tau_{\alpha\beta} \\ dP_i=p_i'\,dT+\alpha_{i\alpha}\,dE_\alpha+\lambda_{i\alpha}\,dH_\alpha+d_{i\alpha\beta}\,d\tau_{\alpha\beta} \\ dI_i=q_i'\,dT+\lambda_{i\alpha}'\,dE_\alpha+\mu_{i\alpha}\,dH_\alpha+Q_{i\alpha\beta}\,d\tau_{\alpha\beta} \\ d\epsilon_{ij}=e_{ij}'\,dT+d_{ij\alpha}'\,dE_\alpha+Q_{ij\alpha}'\,dH_\alpha+S_{ij\alpha\beta}\,d\tau_{\alpha\beta} \end{cases}\tag{2-7}$$

(2-7)式中的系数是物理性质量。P_i 和 I_i 是电矩和磁矩的分量。下面列出这些系数的名称和所属张量的性质。

C	比热	PI 标量
α_{ij}	电极化率	二阶 PI 张量
μ_{ij}	磁化率	二阶 PI 张量
S_{ijkl}	弹性柔度	四阶 PI 张量
Q_{ijk}	压磁系数	三阶 AO 张量
Q'_{ijk}	倒压磁系数	三阶 AO 张量
d_{ijk}	压电率	三阶 PI 张量
d'_{ijk}	倒压电率	三阶 PI 张量
λ_{ij}	磁电极化率	二阶 AO 张量
λ'_{ij}	倒磁电极化率	二阶 AO 张量
e_{ij}	压热效应系数	二阶 PI 张量
e'_{ij}	热膨胀系数	二阶 PI 张量
q_i	磁热效应系数	一阶 AO 张量
q'_i	焦热磁效应系数	一阶 AO 张量
p_i	电热效应系数	一阶 PI 张量
p'_i	焦热电效应系数	一阶 PI 张量

(二)非平衡态物理性质张量

限于靠近平衡态附近的稳定的非平衡态，我们讨论一般统计物理书中所讨论的由于温度梯度引起的扩散、电场引起导电体中的电流、浓度梯度引起的扩散等物理现象。体系的物理性质量是一些输运系数。

作为一个例子，我们讨论存在磁场 $\boldsymbol{H}$ 时的温差电现象。在靠近平衡态附近，用线性近似，有

$$\left\{\begin{aligned} E_i &= \rho_{i\alpha}(\boldsymbol{H})j_\alpha + \alpha_{i\alpha}(\boldsymbol{H})\frac{dT}{dx_\alpha}, \\ q_i &= -\beta_{i\alpha}(\boldsymbol{H})j_\alpha - K_{i\alpha}(\boldsymbol{H})\frac{dT}{dx_\alpha}。\end{aligned}\right. \tag{2-8}$$

式中 E_i 为电场分量, $\frac{dT}{dx_k}$ 为温度梯度的 k 分量。 $\rho_{ik}(\boldsymbol{H})$ 称为有磁场的电阻率, $K_{ik}(\boldsymbol{H})$ 称为有磁场的热导率。用 Onsager 定理,可以证明,现在这里的系数存在如下的热力学的对称性:

$$
\begin{cases}
\rho_{ik}(\boldsymbol{H}) = \rho_{ki}(-\boldsymbol{H}), \\
K_{ik}(\boldsymbol{H}) = K_{ki}(-\boldsymbol{H}), \\
\alpha_{ik}(\boldsymbol{H}) = \Gamma^{-1}\beta_{ki}(\boldsymbol{H})_{\circ}
\end{cases}
\tag{2-9}
$$

在不太高的磁场下,我们展开上式:

$$
\begin{cases}
\rho_{ik}(H) = \rho_{ik}^0 + \rho_{ik\alpha}H_\alpha + \rho_{ik\alpha\beta}H_\alpha H_\beta + \cdots, \\
K_{ik}(H) = K_{ik}^0 + K_{ik\alpha}H_\alpha + K_{ik\alpha\beta}H_\alpha H_\beta + K_{ik\alpha\beta\gamma}H_\alpha H_\beta H_\gamma + \cdots, \\
\alpha_{ik}(H) = \alpha_{ik}^0 + \alpha_{ik\alpha}H_\alpha + \alpha_{ik\alpha\beta}H_\alpha H_\beta + \alpha_{ik\alpha\beta\gamma}H_\alpha H_\beta H_\gamma + \cdots, \\
\beta_{ik}(H) = \beta_{ik}^0 + \beta_{ik\alpha}H_\alpha + \beta_{ik\alpha\beta}H_\alpha H_\beta + \beta_{ik\alpha\beta\gamma}H_i H_\beta H_\gamma + \cdots_{\circ}
\end{cases}
\tag{2-10}
$$

这些系数都是物理性质量,是张量。由 $\rho_{ik}(H)$, $K_{ik}(\boldsymbol{H})$, $\alpha_{ik}(H)$ 和 $\beta_{ik}(H)$ 都是真张量这一点,以及注意到 $\boldsymbol{H}$ 是时空赝张量,即 AC 一阶张量,可以得出等式右边的各张量的类别。如 ρ_{ik}^0(电阻率)、K_{ik}^0 热导率、α_{ik}^0(温差电动势)、β_{ik}^0 等都是真二阶张量;ρ_{ikl}(霍耳效应)、β_{ikl}(Ettingshausen 效应)、K_{ikl}(Leduc-Righi 效应)、α_{ikl}(Nernst 效应)等都是三阶时空赝张量; ρ_{iklm}(磁阻)是四阶真张量,等等。

§17.3 晶体对称性对物理张量的影响

由于晶体存在一定的宏观对称性,因此物理性质也会具有一定的对称性。表征晶体宏观对称性和物理性质对称性之间关系的是 Neumann 原理。

Neumann 原理:晶体的每一个物理性质一定具有它所属点群的一切对称性。

这个原理是说:若 $\hat{A}$ 是晶体的一个对称操作,使坐标经历如下变换

$$x_i' = A_{\alpha i} x_\alpha, \quad A_{ic} = (\hat{A}(g))_{i\alpha}。 \tag{3-1}$$

那末由于物理性质量 $d_{ijk\cdots l}$ 是张量，所以一定经历如下变换：

$$d'_{ijk\cdots l} = \begin{cases} A_{\alpha i} A_{\beta j} A_{\gamma k} \cdots A_{\delta l} d_{\alpha\beta\gamma\cdots\delta} & (\text{PI}), \\ \det \hat{A}(g) \cdot A_{\alpha i} A_{\beta j} A_{\gamma k} \cdots A_{\delta l} d_{\alpha\beta\gamma\cdots\delta} & (\text{AI}), \\ \|\boldsymbol{R}\| \cdot \det \hat{A}(g) \cdot A_{\alpha i} A_{\beta j} A_{\gamma k} \cdots A_{\delta l} d_{\alpha\beta\gamma\cdots\delta} & (\text{AC}), \\ \|\boldsymbol{R}\| \cdot A_{\alpha i} A_{\beta j} A_{\gamma k} \cdots A_{\delta l} d_{\alpha\beta\gamma\cdots\delta} & (\text{PC})。 \end{cases} \tag{3-2}$$

并且：

$$d'_{ijk\cdots l} = d_{ijk\cdots l}。 \tag{3-3}$$

由于此 Neumann 原理的存在，使原来许许多多的张量分量之间存在一定的关系，大大减少了张量的独立分量的数目。例如 O_h ($m3m$) 点群，有 48 个对称操作，形式上可提供 48 个等式，当然独立的等式只有几个，也就是说只有几个对称操作可以提供最大数目的独立等式。这些操作对应的旋转矩阵称为产生矩阵。以 C_{6h} ($6/m$) 为例。它有 12 个对称操作：e，$c_6^k(k=1, 2, \cdots 5)$，i，$ic_6^k(k=1, 2, \cdots 5)$。对应的矩阵为：(取 z 轴为主轴)

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{i} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{C}_6^3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_6^2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{C}_6^1 = \hat{C}_6^7 = \hat{C}_6^3 \hat{C}_6^2 \hat{C}_6^2, \quad \hat{C}_6^5 = \hat{C}_6^3 \hat{C}_6^2, \quad \hat{C}_6^4 = \hat{C}_6^2 \cdot \hat{C}_6^2,$$

$$\hat{i}\hat{C}_6^k \quad (k=1, 2, 3, 4, 5)$$

这 12 个矩阵，由 4 个产生矩阵 ($\hat{e}$, $\hat{C}_6^2$, $\hat{C}_6^3$, $\hat{i}$) 构成。

记

$$
\left\{
\begin{aligned}
&\sigma^{(1)}=\hat{i}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(2)}=\hat{C}_2(y)=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(3)}=\hat{C}_2(z)=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(4)}=\hat{i}\hat{C}_2(y)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(5)}=\hat{i}\hat{C}_2(z)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(6)}=\hat{C}_3^1(z)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(7)}=\hat{C}_4(z)=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(8)}=\hat{i}\hat{C}_4(z)=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(9)}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix},\qquad \sigma^{(0)}=\hat{I}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\\
&\sigma^{(k)}=\boldsymbol{R}\sigma^{(k)}\quad(k=0,1,\cdots 9),\ \boldsymbol{R}\text{是时间反演操作。}
\end{aligned}
\right.
\tag{3-4}
$$

表 17-1 给出了所有 90 个磁点群的产生矩阵。

现在我们来仔细讨论晶体的宏观对称性对物理性质张量的影响。

1. D_{2h} 晶体中的二阶真张量 α_{ij}

由表 17-1 中可查知，此点群的产生矩阵是 $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(2)}$, $\sigma^{(3)}$ 和 $\sigma^{(0)}$。$\sigma^{(0)}$ 并不提供有意义的关系。所以只需讨论 $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(2)}$ 和 $\sigma^{(3)}$ 对二阶张量 α_{ij} 之影响。因为是二阶真张量，所以 $\sigma^{(1)}$ 亦不提供新的等式。剩下只需讨论 $\sigma^{(2)}$, $\sigma^{(3)}$ 的贡献。由上节 $\sigma^{(2)}$, $\sigma^{(3)}$ 矩阵之定义，我们有

1) $\alpha_{ij}=\sigma^{(2)}_{\alpha i}\sigma^{(2)}_{\beta j}\alpha_{\alpha\beta}$,

$$\alpha_{12}=\sigma^{(2)}_{11}\sigma^{(2)}_{22}\alpha_{12}=-\alpha_{12}\Rightarrow\alpha_{12}=0,$$

$$\alpha_{23}=\sigma^{(2)}_{22}\sigma^{(2)}_{33}\alpha_{23}=-\alpha_{23}\Rightarrow\alpha_{23}=0。$$

2) $\alpha_{ij}=\sigma^{(3)}_{\alpha i}\sigma^{(3)}_{\beta j}\alpha_{\alpha\beta}$,

$$\alpha_{13}=\sigma^{(3)}_{11}\sigma^{(3)}_{33}\alpha_{13}=-\alpha_{13}\Rightarrow\alpha_{13}=0。$$

加上热力学的内部对称性 $\alpha_{ij}=\alpha_{ji}$，得

$$\hat{\alpha}=(\alpha_{ij})=\begin{pmatrix}\alpha_{11}&0&0\\0&\alpha_{22}&0\\0&0&\alpha_{33}\end{pmatrix}\tag{3-5}$$

2. 四阶真张量——弹性张量 由弹性公式

$$\tau_{ij}=C_{ij;\alpha\beta}\epsilon_{\alpha\beta}\tag{3-6}$$

按物理定义，胁变张量 ϵ_{kl} 和胁强张量 τ_{ij} 是一个对称张量：$\tau_{ij}=\tau_{ji}$, $\epsilon_{kl}=\epsilon_{lk}$，这导至对物理性质张量 $\tau_{ij;kl}$ 有如下对称性：

$$\begin{cases}C_{ij;kl}=C_{ji;kl},\\C_{ij;kl}=C_{ij;lk}。\end{cases}\tag{3-7}$$

再加上热力学对称性

$$C_{ij;kl}=C_{kl;ij}。\tag{3-8}$$

结果仅存在如下 21 个独立的分量：

$$\begin{cases}C_{11;11},\ C_{22;22},\ C_{33;33},\ C_{23;23},\ C_{13;13},\ C_{12;12},\ C_{11;22},\ C_{11;33},\\C_{11;23},\ C_{11;13},\ C_{11;12},\ C_{22;33},\ C_{22;23},\ C_{22;12},\ C_{22;13},\ C_{33;23},\\C_{33;12},\ C_{33;33},\ C_{23;13},\ C_{23;12},\ C_{13;12}。\end{cases}\tag{3-9}$$

表 17-1　90 个磁点群的产生矩阵

G'	生产矩阵	G'	产生矩阵	G'	产生矩阵
1	σ^0	$4\underline{2}\underline{2}$	$\sigma^0, \sigma^7, \underline{\sigma}^2$	$\underline{6}/\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^6, \underline{\sigma}^3$
$\bar{1}$	σ^0, σ^1	$4mm$	$\sigma^0, \sigma^4, \sigma^7$	$6/\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^6, \underline{\sigma}^1$
$\underline{\bar{1}}$	$\sigma^0, \underline{\sigma}^1$	$\underline{4}m\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^4, \underline{\sigma}^7$	$\underline{6}/m$	$\sigma^0, \sigma^5, \sigma^6, \underline{\sigma}^1$
2	σ^0, σ^3	$4\underline{m}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^7, \underline{\sigma}^4$	622	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^3, \sigma^6$
$\underline{2}$	$\sigma^0, \underline{\sigma}^3$	$\bar{4}2m$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^8$	$\underline{6}2\underline{2}$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^6, \underline{\sigma}^3$
m	σ^0, σ^5 或 σ_4	$\underline{\bar{4}}2\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^3$, [illegible]	$6\underline{2}\underline{2}$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^6, \underline{\sigma}^2$
$\underline{m}$	$\sigma^0, \underline{\sigma}^5$	$\underline{\bar{4}}\underline{2}m$	σ^0, σ^3, [illegible], [illegible]	$6mm$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^4, \sigma^6$
$2/m$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^3$	$\bar{4}\underline{2}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^8, \underline{\sigma}^4$	$\underline{6}m\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^4, \sigma^6, \underline{\sigma}^3$
$\underline{2}/\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \underline{\sigma}^3$	$4/mmm$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^7$	$6\underline{m}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^6, \underline{\sigma}^4$
$2/\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^3, \underline{\sigma}^1$	$4/mmm$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^8, \underline{\sigma}^7$	$\bar{6}m2$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^5, \sigma^6$
$\underline{2}/m$	$\sigma^0, \sigma^5, \underline{\sigma}^1$	$4/m\underline{m}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^7, \underline{\sigma}^2$	$\underline{\bar{6}}\underline{m}2$	$\sigma^0, \sigma^4, \sigma^6, \underline{\sigma}^5$
222	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^3$	$4/\underline{m}\underline{m}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^7, \underline{\sigma}^1$	$\underline{\bar{6}}m\underline{2}$	$\sigma^0, \sigma^4, \sigma^6, \underline{\sigma}^2$
$2\underline{2}\underline{2}$	$\sigma^1, \sigma^3, \underline{\sigma}^2$	$4/\underline{m}mm$	$\sigma^0, \sigma^4, \sigma^7, \underline{\sigma}^1$	$\bar{6}\underline{m}\underline{2}$	$\sigma^0, \sigma^5, \sigma^6, \underline{\sigma}^2$
$mm2$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^4$	$\underline{4}/\underline{m}m\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^8$, [illegible]	$6/mmm$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^3, \sigma^6$
$m\underline{m}2$	$\sigma^0, \sigma^3, \underline{\sigma}^4$	3	σ^0, σ^6	$\underline{6}/\underline{m}m\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^6, \underline{\sigma}^2$
$\underline{m}m\underline{2}$	$\sigma^0, \sigma^4, \underline{\sigma}^3$	$\bar{3}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^6$	$6/m\underline{m}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^3, \sigma^6, \underline{\sigma}^2$
mmm	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^3$	$\underline{\bar{3}}$	$\sigma^0, \sigma^6, \underline{\sigma}^1$	$6/\underline{m}mm$	$\sigma^6, \sigma^2, \sigma^3, \sigma^6, \underline{\sigma}^1$
$mm\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^3, \underline{\sigma}^2$	32	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^6$	$6/\underline{m}\underline{m}m$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^4, \sigma^6, \underline{\sigma}^1$
$\underline{m}\underline{m}m$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^3, \underline{\sigma}^1$	$3\underline{2}$	$\sigma^0, \sigma^6, \underline{\sigma}^2$	$\underline{6}/mm\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^5, \sigma^6, \underline{\sigma}^1$
$\underline{m}\underline{m}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^4, \underline{\sigma}^1$	$3m$	$\sigma^0, \sigma^6, \sigma^4$	23	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^9$
4	σ^0, σ^7	$3\underline{m}$	$\sigma^0, \underline{\sigma}^4, \sigma^6$	$m3$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^3, \sigma^9$
$\underline{4}$	$\sigma^0, \underline{\sigma}^7, \sigma^3$	$\bar{3}m$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^6$	$\underline{m}3$	$\sigma^0, \underline{\sigma}^1, \sigma^3, \sigma^9$
$\bar{4}$	σ^0, σ^8	$\bar{3}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^6, \underline{\sigma}^3$	432	$\sigma^0, \sigma^7, \sigma^9$
$\underline{\bar{4}}$	$\sigma^0, \sigma^3, \underline{\sigma}^8$	$\underline{\bar{3}}\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^6, \underline{\sigma}^1$	$\underline{4}32$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^9, \underline{\sigma}^7$
$4/m$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^7$	$\underline{\bar{3}}m$	$\sigma^0, \sigma^4, \sigma^6, \underline{\sigma}^1$	$\bar{4}3m$	$\sigma^0, \sigma^8, \sigma^9$
$4/\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^8, \underline{\sigma}^7$	6	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^6$	$\underline{\bar{4}}3\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^3, \sigma^9, \underline{\sigma}^8$
$4/m$	$\sigma^0, \sigma^7, \underline{\sigma}^1$	$\underline{6}$	$\sigma^0, \sigma^6, \underline{\sigma}^3$	$m3\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^7, \sigma^9$
$\underline{4}/m$	$\sigma^0, \sigma^8, \underline{\sigma}^1$	$\bar{6}$	$\sigma^0, \sigma^5, \sigma^6$	$m3m$	σ^0, σ^1
422	$\sigma^6, \sigma^2, \sigma^7$	$\underline{\bar{6}}$	$\sigma^0, \sigma^6, \underline{\sigma}^5$	$\underline{m}3m$	$\sigma^0, \sigma^7, \sigma^9, \underline{\sigma}^1$
$\underline{4}2\underline{2}$	$\sigma^0, \sigma^2, \sigma^3, \underline{\sigma}^7$	$6/m$	$\sigma^0, \sigma^1, \sigma^3, \sigma^6$	$\underline{m}3\underline{m}$	$\sigma^0, \sigma^8, \sigma^9, \underline{\sigma}^1$

现在考虑 O 群(432)的对称性对 C 张量的影响。由表 17-1 可知 O 群的产生矩阵是 $\sigma^{(0)}$, $\sigma^{(7)}$, $\sigma^{(9)}$。

由

$$C_{ij;kl}=\sigma^{(7)}_{\alpha i}\sigma^{(7)}_{\beta j}\sigma^{(7)}_{\gamma k}\sigma^{(7)}_{\delta l}C_{\alpha\beta;\gamma\delta} \qquad (3\text{-}10)$$