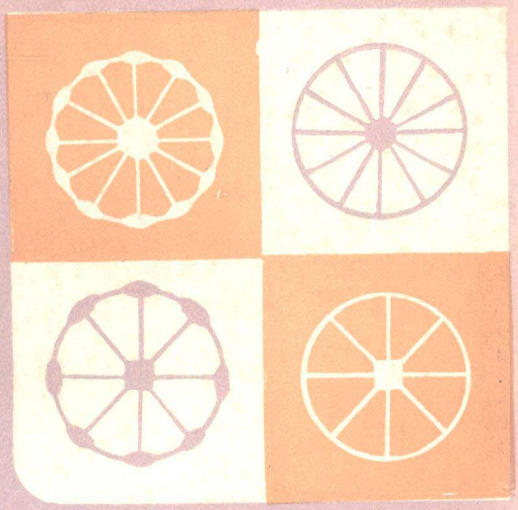
233677

陈 纲
廖理几 编著



晶体物理学基础

科学出版社

需要全本请访问 www.ertongbook.com

233677
O73
C44
191
79

晶体物理学基础

陈 纲 廖理几 编著

科学出版社
1992

（京）新登字 092 号

内 容 简 介

本书从基础理论角度出发，阐明晶体各种宏观物理性质及其与晶体对称性的关系．全书分十二章：前三章介绍张量和晶体宏观对称性的基础知识；第四章介绍晶体的介电性质，包括压电、热释电效应；第五章介绍晶体的弹性及弹性波在晶体中的传播；第六章讨论晶体结构相变引起的晶体对称性和物理性质的变化；第七章从热力学角度出发，讨论晶体各种物理性质之间的相互关系；第八至第十章着重讨论晶体的光学性质；第十一章专门讨论晶体的轴性张量的物理性质，包括旋光和旋声性；第十二章应用群论对张量方法作提高性的总结．每章后面有习题和参考文献，书末还附有 7 个附录．

本书可作为大专院校固体材料、晶体材料、激光材料和器件、无机非金属材料和电介质物理专业的本科生、研究生教材，也可供有关的科技人员和教师参考．

晶 体 物 理 学 基 础

陈 纲 廖理几 编著

责任编辑 李义发

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100707

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1992 年 7 月第 一 版 开本：850×1168 1/32

1992 年 7 月第一次印刷 印张：20 7/8

印数：平 1—1 150 插页：精 2

精 1—600 字数：546 000

ISBN7-03-002699-3/O · 509（平）

ISBN7-03-002701-9/O · 510（精）

定价：平 装 21.10 元

布脊精装：22.80 元

序

长期以来，许多学习固体物理（尤其是晶体物理）的大学生和研究生希望有一本从理论上详细、全面阐述晶体物理性质的书，以供学习，从事固体物理（尤其是晶体物理）研究的同志也希望有一本较好的书，以供参考．详细地阅读了陈纲和廖理几编著的《晶体物理学基础》之后，我们可以欣慰地说，这本书正是大家所盼望的．

1984 年北京硅酸盐学会为全国晶体学方面的科技工作者举办“晶体物理暑期讲习班”，由陈纲、廖理几教授主讲，受到了好评．讲习班的讲义还被北京工业大学和其他几所大学选为教材，受到了学生和教师们普遍欢迎．本书就是在此讲义基础上进行修改、补充、完善而成的．

陈纲和廖理几两位教授，多年来从事晶体物理的教学和科研工作，有着丰富的教学实践经验和扎实的理论基础，本书是他们多年教学和科研实践的结晶．我们认为，本书是近年来在晶体物理方面较为优秀的著作之一．

吴乾章

目　录

第一章　张量及其基本运算 …… 1

§ 1.1　晶体物理性质的张量表示法 …… 1

1.1.1　描述物质宏观物理性质的物理量的定义 …… 1

1.1.2　用张量描述晶体的物理性质 …… 2

§ 1.2　张量的变换和定义 …… 6

1.2.1　坐标系的变换 …… 6

1.2.2　张量的变换 …… 15

1.2.3　张量的定义 …… 28

1.2.4　操作矩阵及其变换 …… 30

§ 1.3　张量的基本运算 …… 35

1.3.1　零张量 …… 35

1.3.2　张量的加减法 …… 35

1.3.3　张量的数乘 …… 35

1.3.4　张量的收缩 …… 35

1.3.5　张量的乘积 …… 36

1.3.6　张量的微分 …… 38

§ 1.4　张量的对称性质 …… 39

1.4.1　各阶各类张量所固有的对称性质 …… 39

1.4.2　张量下标置换的对称性 …… 40

§ 1.5　循环坐标系中的张量 …… 42

1.5.1　循环坐标系及其与 Cartesian 直角坐标系的关系 … 44

1.5.2　在循环坐标系中对张量的操作 …… 45

习题 …… 49

参考文献 …… 50

第二章　晶体的对称性 …… 51

§ 2.1　晶体结构和对称性 …… 51

需要全本请访问 www.ertongbook.com

2.1.1 理想晶体及其性质 …… 51
2.1.2 晶格、元胞和基矢 …… 52
§2.2 坐标系、晶系和 Miller 指数 …… 55
2.2.1 Miller 指数 …… 55
2.2.2 晶系 …… 57
2.2.3 六方系和三方系的 4 轴指数 …… 58
§2.3 对称操作 …… 60
2.3.1 物理学坐标系和对称操作矩阵 …… 61
2.3.2 平移对称性对于对称操作的限制 …… 72
§2.4 对称元素 …… 74
§2.5 晶体学点群 …… 79
2.5.1 晶体学点群的导出 …… 79
2.5.2 点群(第一类)操作的可能组合 …… 81
2.5.3 第一类点群 …… 84
2.5.4 中心对称点群 …… 86
2.5.5 由中心对称点群导出新群 …… 87
2.5.6 点群的生群元 …… 88
2.5.7 点群的对称操作总表和对称元素图 …… 88
2.5.8 点群的极射赤平投影图 …… 90
§2.6 晶体微观结构的对称性 …… 92
§2.7 空间群操作 …… 94
§2.8 晶体的宏观物理性质和晶体的对称性 Neumann 原理 …… 96
2.8.1 Neumann 原理 …… 96
2.8.2 Neumann 原理的应用 …… 101
习题 …… 107
参考文献 …… 108
第三章 二阶张量，应力与应变 …… 110
§3.1 二阶张量 …… 110
3.1.1 二阶张量在某给定方向上的值 …… 110
3.1.2 二阶张量的示性面 …… 112
3.1.3 二阶张量的主轴和主值 …… 116

3.1.4 晶体对称性对二阶张量物理性质的影响 …… 118
3.1.5 二阶对称张量的简化下标表示法 …… 119
§3.2 应力张量 …… 120
3.2.1 彻体力和体力矩 …… 121
3.2.2 应力及其标记法 …… 121
3.2.3 应力是二阶对称极张量 …… 124
3.2.4 应力张量的几例 …… 129
§3.3 应变张量 …… 132
3.3.1 对物体形变的一般描述 …… 132
3.3.2 应变张量 …… 139
3.3.3 应变张量数例 …… 147
3.3.4 线性应变张量定义的适用范围 …… 150
§3.4 晶体的热膨胀系数 …… 150
习题 …… 152
参考文献 …… 156
第四章 介电晶体的电学性质 …… 157
§4.1 晶体的介电性质 …… 158
4.1.1 电极化现象 …… 158
4.1.2 晶体的电极化率和介电系数张量 …… 161
4.1.3 极化弛豫与介电损耗 …… 165
§4.2 晶体的压电性和电致伸缩现象 …… 169
4.2.1 概述 …… 169
4.2.2 晶体的压电效应、压电模量 …… 170
4.2.3 电致伸缩效应 …… 189
§4.3 晶体的热释电效应 …… 192
4.3.1 热释电效应和晶体的自发极化 …… 192
4.3.2 热释电系数及晶体对称性的影响 …… 194
4.3.3 电热效应 …… 197
4.3.4 热释电效应的应用 …… 198
习题 …… 199
参考文献 …… 201

第五章　晶体的弹性性质 …… 202
§5.1　Hooke 定律 …… 203
5.1.1　各向同性固体中的 Hooke 定律 …… 203
5.1.2　晶体中的 Hooke 定律 …… 204
5.1.3　晶体的弹性系数形成四阶极张量 …… 205
5.1.4　Hooke 定律的矩阵形式 …… 208
§5.2　应力的功和静态晶体应变能 …… 209
5.2.1　应力的功 …… 209
5.2.2　晶体的应变能 …… 212
§5.3　弹性系数和晶体对称性 …… 213
5.3.1　弹性是所有晶类都具有的性质 …… 213
5.3.2　弹性系数矩阵推算方法示例 …… 214
5.3.3　均质体的弹性系数 …… 217
5.3.4　应变能的正定性对弹性系数附加的限制 …… 218
5.3.5　实用弹性系数的示例 …… 219
§5.4　晶体中的弹性波 …… 221
5.4.1　弹性波传播的微分方程 …… 222
5.4.2　慢度曲面 …… 225
5.4.3　声波的能量传播方向 …… 231
5.4.4　弹性波的群速 …… 235
5.4.5　慢度曲面和能量速度 …… 237
5.4.6　石英中的弹性波 …… 237
5.4.7　纯模轴 …… 243
§5.5　压电器件中的机械振动及其应用 …… 244
5.5.1　压电振子举例 …… 244
5.5.2　压电换能器举例 …… 246
5.5.3　压电器件的应用 …… 247
习题 …… 249
参考文献 …… 250
第六章　晶体的对称性和相变 …… 251
§6.1　铁电相变和铁电体 …… 251
6.1.1　概述 …… 251

6.1.2 铁电体的宏观特征 …… 253
6.1.3 相变点附近物理性质的变化 …… 257
6.1.4 铁电畴 …… 258
§ 6.2 晶体的结构相变 …… 262
§ 6.3 反铁电相变和反铁电体 …… 263
§ 6.4 铁电体和反铁电体的软模 …… 265
§ 6.5 铁弹相变和铁弹体 …… 267
§ 6.6 铁电相变的 Landau 理论 …… 271
§ 6.7 Curie 原理在结构相变中的应用 …… 278
6.7.1 Curie 原理在铁电相变中的应用 …… 278
6.7.2 Curie 原理在(共线性)反铁电相变中的应用 …… 280
§ 6.8 铁弹相变及声学软模的对称性 …… 286
习题 …… 295
参考文献 …… 295
第七章 晶体平衡性质的热力学 …… 297
§ 7.1 晶体状态参量之间的相互关系 …… 298
7.1.1 状态参量之间关系的图示法 …… 298
7.1.2 主效应 …… 299
7.1.3 交叉效应 …… 300
§ 7.2 晶体平衡性质的热力学关系 …… 302
§ 7.3 在不同条件下测得的系数之间的关系 …… 307
7.3.1 限定物理条件的含意 …… 307
7.3.2 不同条件下主效应系数之间的关系 …… 309
7.3.3 不同条件下交叉效应系数之间的关系 …… 314
7.3.4 数量级的比较 …… 317
习题 …… 318
参考文献 …… 318
第八章 晶体的线性光学性质 …… 319
§ 8.1 各向同性介质中光的传播 …… 320
8.1.1 宏观 Maxwell 方程组 …… 320
8.1.2 波动方程及其单色平面波特解 …… 321

8.1.3 光波的能流密度矢量 S …… 328
§8.2 光在晶体中传播的 Fresnel 公式 …… 329
8.2.1 晶体各向异性对光传播的影响 …… 329
8.2.2 晶体中光波的 Fresnel 公式 …… 331
8.2.3 光线的 Fresnel 公式 …… 335
8.2.4 描述光在晶体中传播的两种方法之间的相互联系 …… 336
§8.3 描述晶体光学性质的几何方法 …… 337
8.3.1 光率体 …… 338
8.3.2 折射率面 …… 345
8.3.3 其他的几何方法 …… 346
§8.4 不同晶类晶体的光学性质 …… 346
8.4.1 晶体的光学分类 …… 346
8.4.2 单轴晶体的光学性质 …… 349
8.4.3 双轴晶体的光学性质 …… 357
习题 …… 369
参考文献 …… 371
第九章 晶体的非线性光学性质 …… 372
§9.1 晶体的非线性光学极化 …… 372
9.1.1 典型非线性光学的几个实验示例 …… 373
9.1.2 非线性光学极化的物理起源 …… 376
9.1.3 非线性光学极化率是各光场频率的函数 …… 384
§9.2 晶体的二级非线性光学极化 …… 385
9.2.1 二级非线性光学极化率张量 …… 385
9.2.2 二级非线性光学效应的电磁理论——耦合波方程 …… 389
9.2.3 位相匹配问题 …… 394
§9.3 光的二倍频效应 …… 396
9.3.1 光的二次谐波的产生 …… 396
9.3.2 怎样实现位相匹配 …… 399
9.3.3 有效倍频系数 …… 405
9.3.4 限制倍频光强的因素和 90° 相位匹配 …… 413
习题 …… 416

参考文献…… 417
第十章 外界作用对晶体光学性质的影响…… 418
§10.1 晶体的热光效应…… 419
§10.2 线性电光效应…… 421
10.2.1 线性电光效应的机理 …… 422
10.2.2 线性电光系数 …… 424
10.2.3 线性电光效应引起晶体光学性质的变化 …… 426
10.2.4 晶体电光效应的应用中有关的概念 …… 431
§10.3 二次电光效应…… 436
10.3.1 二次电光效应的机理 …… 436
10.3.2 二次电光系数 …… 437
10.3.3 二次电光效应引起介质光学性质的变化 …… 439
§10.4 晶体的弹光效应…… 442
10.4.1 弹光效应的机理 …… 443
10.4.2 弹光系数(压光系数) …… 443
10.4.3 弹光效应对晶体光学性质的影响 …… 445
§10.5 晶体的声光效应…… 448
10.5.1 声光效应的基本概念 …… 449
10.5.2 声光衍射的类型 …… 452
10.5.3 声光器件的品质因素 …… 457
§10.6 光折变效应…… 459
10.6.1 基本现象 …… 459
10.6.2 光折变效应的机制 …… 461
10.6.3 光折变效应的可能应用前景 …… 463
§10.7 外界对晶体光学性质影响的综合讨论…… 464
10.7.1 外界作用影响晶体光学性质的对称性 …… 464
10.7.2 电光效应和弹光效应的相互关系 …… 466
10.7.3 热力学的讨论 …… 468
10.7.4 外界作用下晶体其他效应与光学性质变化的相似性 …… 470
习题…… 471
参考文献…… 472

需要全本请访问 www.ertongbook.com

第十一章　晶体的回旋张量性质…… 474
§11.1　晶体的旋光性质…… 474
11.1.1　旋光现象及其初步理论 …… 474
11.1.2　介电张量的空间色散及旋光张量 g …… 479
11.1.3　旋光晶体中的光学基本方程 …… 484
11.1.4　旋光晶体中折射率和电矢量的修正解 …… 487
§11.2　晶体的旋声性质…… 492
11.2.1　晶体的旋声现象 …… 493
11.2.2　弹性劲度系数张量的空间色散 …… 494
11.2.3　旋声张量及其对称性 …… 495
11.2.4　旋声性与空间色散的关系 …… 497
习题…… 498
参考文献…… 499
第十二章　确定晶体物理性质张量独立分量的群论方法…… 501
§12.1　晶体点群的张量表示…… 501
12.1.1　一阶张量——矢量的操作矩阵构成晶体点群的表示 …… 502
12.1.2　二阶张量表示 …… 504
12.1.3　高阶张量表示 …… 505
§12.2　晶体物理性质张量的非零独立分量数目的计算 …… 507
12.2.1　晶体点群的张量表示的约化 …… 507
12.2.2　张量不变量和恒等表示 …… 509
12.2.3　晶体物理性质张量的非零独立分量数目等于张量表示中所包含恒等表示的数目 …… 512
12.2.4　晶体物理性质张量的非零独立分量数目的计算 … 514
§12.3　张量的非零独立分量的确定…… 520
12.3.1　晶体点群作用下的不变式 …… 520
12.3.2　求晶体点群作用下不变式的方法 …… 525
习题…… 532
参考文献…… 533
附录Ⅰ　球面三角形余弦定理的推导…… 534

附录 II 晶体物理性质张量的操作矩阵 …… 536
§ II.1 矢量性质的操作矩阵 …… 536
§II.2 二阶对称张量性质的操作矩阵 …… 536
II.2.1 应力型二阶对称张量的操作矩阵 …… 538
II.2.2 应变型二阶对称张量的操作矩阵 …… 540
§ II.3 对三阶张量的操作 …… 541
II.3.1 三阶张量与二阶张量的内积等于一个矢量 …… 541
II.3.2 三阶张量与矢量的内积构成一个二阶张量 …… 543
§ II.4 对四阶张量的操作 …… 544
II.4.1 弹性劲度系数和应变弹光系数 …… 544
II.4.2 应力弹光系数和二次电光系数 …… 545
II.4.3 弹性顺服系数和电致伸缩系数 …… 546
习题 …… 547
参考文献 …… 548
附录 III 晶体点群表示理论概要 …… 549
§ III.1 晶体点群特征标 …… 549
III.1.1 对称操作对张量元的作用 …… 549
III.1.2 张量变换和点群的对称性质，不可约表示 …… 550
§III.2 广义矢量空间及其约化 …… 557
§III.3 点群表示理论 …… 567
§III.4 矩阵的直积和点群的张量表示 …… 570
III.4.1 矩阵的直积 …… 570
III.4.2 点群的张量表示 …… 571
§III.5 对称操作对函数的作用 …… 578
§III.6 晶体点群的特征标表 …… 581
§III.7 不变量（式） …… 588
参考文献 …… 590
附录 IV 平面声波的性质 …… 591
§IV.1 各向同性固体和各向异性固体的 Christoffel 方程 …… 591
IV.1.1 各向同性体和立方晶系 …… 591

IV.1.2 六方晶系 …… 592
IV.1.3 三方晶系 …… 592
IV.1.4 四方晶系 …… 593
IV.1.5 正交晶系 …… 593
IV.1.6 单斜晶系 …… 593
IV.1.7 三斜晶系 …… 593
§ IV.2 各向同性固体和各向异性固体的慢度曲面 …… 594
IV.2.1 各向同性材料 …… 594
IV.2.2 立方晶系 …… 594
IV.2.3 六方晶系 …… 597
IV.2.4 三方晶系 …… 500
IV.2.5 四方晶系 …… 604
IV.2.6 正交晶系 …… 610
参考文献 …… 614
附录 V 晶体物理性质矩阵表 …… 615
§ V.1 晶体的一阶张量性质(热释电系数) …… 615
§ V.2 晶体的二阶对称极张量性质(线性电极化率，介电和逆介电系数 ε 和 β，热膨胀系数.) …… 615
§ V.3 晶体的二阶对称轴张量性质(旋光张量) …… 616
§ V.4 晶体的三阶极张量性质(压电模量 d，二级非线性极化率 $\chi^{(2)}$，线性电光系数 γ) …… 618
§ V.5 具有 Kleinman 全对称性的晶体的二级非线性极化率张量 …… 621
§ V.6 晶体的四阶极张量性质 …… 623
§ V.7 晶体的弹性劲度系数和弹性顺服系数 …… 627
参考文献 …… 630
附录 VI 二阶张量的主轴化 …… 631
§ VI.1 二阶张量主轴化的解析方法 …… 631
§ VI.2 矩阵与数值解法 …… 635
VI.2.1 用矩阵方法由实验数据求解 $[\alpha_{ij}]$ 的各独立分量 … 635
VI.2.2 利用逐步逼近法求主轴和主系数 …… 639
参考文献 …… 641

附录 VII 压电振子计算…… 642
参考文献…… 648
后 记…… 649

第一章　张量及其基本运算

本章主要介绍晶体的宏观物理性质是如何用张量来描述的，同时通过物理量在不同坐标系之间的变换来对张量作出准确定义，并区分极性和轴性张量．此外，还要介绍张量的一些基本运算方法，并讨论张量的对称性问题．

§1.1　晶体物理性质的张量表示法

1.1.1　描述物质宏观物理性质的物理量的定义

描述物质宏观物理性质的物理量是由宏观的可测量的物理量之间的关系来定义．例如，物质的密度 ρ 是由质量 m 和体积 V 之间的关系

$$\rho = m/V$$

或

$$m = \rho V$$

来定义．又如电极化率 χ 则由施加于材料上的电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和由此感生的电极化强度 $\boldsymbol{P}$ 之间的关系

$$\boldsymbol{P} = \varepsilon_0 \chi \boldsymbol{E}^{1)}$$

来定义．上述的 $m, V, \boldsymbol{P}, \boldsymbol{E}$ 等都是可测物理量．

一般而言，若可测物理量之间的关系为线性时，则可采用如

$$B = CA \tag{1.1}$$

这样的公式来表示，其中 A 称为作用物理量，代表所施于材料的各种类型的作用，如上述的电场强度；B 称为感生物理量或效果物理量，是在该材料中对 A 的响应而产生的物理量，如受电场作用而产生的电极化强度．A 和 B 只描述对材料施加的作用及由此所产生

1）本书采用有理化实用单位制．

的响应，都是可测的量，但它们并不表示材料本身所具有的任何性质，故一般称之为场量；C 则代表 A 与 B 之间的关系，不同的材料，虽受到相同的 A 的作用，但会得到不同的效果量 B，这是由于不同材料有不同的 C 值而造成的. 因此，C 表示了材料本身所具有的特性，即材料的物理性质，也称为物质量. 通常，C 是用物质系数来表示，例如电极化率、介电系数，等等. 确定它们的数值都是通过测量 A 值和 B 值，然后再由式 (1.1) 得到.

1.1.2 用张量描述晶体的物理性质

(1) *场量和物质量都是张量* 从上面所举各量可知，有些物理量(如质量、体积、密度等)，其数值与测量的方向无关，这样的量没有方向性，称为各向同性量，也称为标量. 由于材料不均匀，密度可能会在不同点有不同的数值，即密度为点坐标 (x_1, x_2, x_3) 的函数，但各点的数值仍然是与方向无关的. 有些量(如电场强度 $\boldsymbol{E}$、电极化强度 $\boldsymbol{P}$ 等)，其值不仅有一定大小，而且还具有一定的方向性. 这些有方向性的物理量，在直角坐标系中可用三个分量(如 E_1, E_2, E_3 和 P_1, P_2, P_3 等)数值的大小来表示出其方向性，其中每个分量仍是点坐标的函数，这类量被称为矢量. 如果某种材料受到不均匀电场的作用，材料本身又不均匀，则各点的电场强度和电极化强度可能既有不同的方向，也有不同的数值. 除矢量外，还有些物理量，如作用于材料上的应力和由之感生的应变，它们既具有一定量值，又具有一定的方向性，在直角坐标系中，它们已不能只由三个分量而必须由九个分量的组合才能描述，每个分量具有两个下标. 这样的物理量称为二阶张量，如应力可以写成

$$[T_{ij}] = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix} \tag{1.2}$$

的形式. 与此类似. 晶体中的电极化率 χ 也是一个二阶张量. 由于晶体的各向异性，在某点的电极化强度 $\boldsymbol{P}$ 并不与该点的电场强度 $\boldsymbol{E}$ 有相同的方向，如图 1.1 所示，它们之间的关系可写成如

需要全本请访问 www.ertongbook.com