应用数学和力学,第 22 卷 第 8 期(2001 年 8 月)
Applied Mathematics and Mechanics

应用数学和力学编委会编
重 庆 出 版 社 出 版

文章编号: 1000_0887(2001)08_0790_16

非均匀材料细观结构的定向分布函数(Ⅱ)——晶体分布函数和各种材料对称性约束下的不可约张量*

郑泉水[1], 傅依斌[2]

(1. 清华大学 工程力学系,北京 100084; 2. 基勒德大学 数学系,斯塔福郡 ST5 86, 英国)

(我刊编委郑泉水来稿)

摘要: 目的是建立三维晶体定向分布函数(CODF)的张量傅立叶展开的显式表示• 与三维 ODF 的傅立叶展开的第 m 项系数仅对应单个 m 阶对称无迹张量不同, 三维 CODF 的傅立叶展开的第 m 项系数一般由 $2m+1$ 个 m 阶对称无迹张量组成• 随后还建立了在各种宏观和微观对称性下三维 CODF 的张量傅立叶展开的约束形式, 表明大多数对称性下的约束形式中的 m 阶不可约张量数目明显少于 $2m+1$• 这些结果是通过对各种点群对称性约束下二维和三维不可约张量的约束形式的研究得到的•

关 键 词: 晶体定向分布函数; 不可约张量; 傅立叶展开; 细观结构; 材料对称性
中图分类号: O331 文献标识码: A

引 言

不可逆过程中材料的微结构将发生变化• 特别地, 多晶材料中单晶的体积分数是反映其微结构变化的可测量(通过 X 射线衍射技术), 它们是定义在旋转群上的标量函数——即晶体定向分布函数(简称 CODF)• 多晶的 CODF 包含晶体内部原子间键的一阶统计信息,它可以与多晶的许多物理和力学性质建立联系(参见[1~4])•

因为二维 CODF 等价于二维 ODF(见第(Ⅰ)部分),这里将集中讨论三维 CODF 的张量傅立叶展开• 对该领域我们特别参照文献[4],他们推导了三维 $\mathscr{O}$类立方多晶 的 CODF 的张量傅立叶展开的主项• 本文采用划分晶类的熊夫利符号(参见[5]或[6])• 此外, 就作者所知, 三维 CODF 张量傅立叶展开的许多问题还是没有解决•

第 1 节通过群表示理论的基本结果(参见[7, 8])建立了三维 CODF 张量傅立叶展开的一般形式• 与三维 ODF 的傅立叶展开的第 m 项系数仅对应于单个 m 阶对称无迹张量相对照, 三维 CODF 的傅立叶展开的第 m 项系数一般由 $2m+1$ 个 m 阶对称无迹张量组成• 如第(Ⅰ)部分引言指出的, 这些张量对应于内变量, 只有大幅度地消减内变量的个数后, 基于内变量框架

* 收稿日期: 2000_10_09; 修订日期: 2001_03_20
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(19525207, 19891180); 霍英东教育基金资助项目
作者简介: 郑泉水(1961—),男, 江西人,教授, 博士,教育部长江特聘教授.

的不可逆过程理论才有可能成为有现实意义的模型•

第2节研究了在宏观和微观的材料对称性下三维CODF张量傅立叶展开的约束形式,第3节构造了各种点群(除了两类三维二十面体群)对称性下二维和三维有限阶不可约张量的约束形式,并以此为基础,得到各种点群下三维CODF张量傅立叶展开的约束形式• 第4节详细列出了立方、四方和六方系中所有19类晶体点群下三维CODF张量傅立叶展开的约束形式• 因为大多数多晶或者是立方的、或者是六方的,这些结果特别具有应用上的重要性•

下面介绍一些记号,并对本文用到的正交张量的Kronecker积的主要性质作一归纳•

第(Ⅰ)部分定义的所有记号都适用本文,为简单记,第(Ⅰ)部分第n节、方程(k)在引用时分别记作第Ⅰ.n节和方程(Ⅰ.k)• 任意$2m$阶张量$\boldsymbol{A}$和$2n$阶张量$\boldsymbol{B}$的Kronecker积$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$定义为一个$2(m+n)$阶张量,使得$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})(\boldsymbol{d}\div\boldsymbol{e})=(\boldsymbol{Ad})\times(\boldsymbol{Be})$对任意$m$阶张量$\boldsymbol{d}$和$n$阶张量$\boldsymbol{e}$成立,其分量形式为

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_{\alpha_1\cdots\alpha_m\gamma_1\cdots\gamma_n\beta_1\cdots\beta_m\delta_1\cdots\delta_n}=A_{\alpha_1\cdots\alpha_m\beta_1\cdots\beta_m}B_{\gamma_1\cdots\gamma_n\delta_1\cdots\delta_n}• \tag{1}$$

由Kronecker积算符×的明显可交换性:$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})$,可以归纳地定义$\boldsymbol{A}$的$m$重Kronecker幂$\boldsymbol{A}^{\times m}$: $\boldsymbol{A}^{\times m}=\boldsymbol{A}^{\times m-1}\times\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{A}^{\times 1}=\boldsymbol{A}$•

设$\mathbf{1}$是二阶单位张量,上标T表示转置,满足$\boldsymbol{QQ}^{\mathrm{T}}=\mathbf{1}$的二阶张量$\boldsymbol{Q}$称为正交张量,若进一步它的行列式等于1则称之为旋转张量• 正交张量的Kronecker幂在研究CODF的张量傅立叶展开和材料对称性约束问题中起着主要作用,比如,设$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{D},\boldsymbol{E})$是$m$阶和$n$阶张量变量$\boldsymbol{D}$、$\boldsymbol{E}$的$l$阶张量值函数• 若有

$$\begin{aligned}&Q_{\alpha_1\gamma_1}\cdots Q_{\alpha_l\gamma_l}F_{\gamma_1\cdots\gamma_l}(D_{\beta_1\cdots\beta_m},E_{\xi_1\cdots\xi_n})=\\&\qquad F_{\alpha_1\cdots\alpha_l}(Q_{\beta_1\delta_1}\cdots Q_{\beta_m\delta_m}D_{\delta_1\cdots\delta_m},Q_{\xi_1\zeta_1}\cdots Q_{\xi_n\zeta_n}E_{\xi_1\cdots\zeta_n}),\end{aligned}\tag{2a}$$

则称正交张量$\boldsymbol{Q}$是$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{D},\boldsymbol{E})$的一个对称变换• 采用Kronecker幂记号,就是:

$$\boldsymbol{Q}^{\times l}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{D},\boldsymbol{E})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{D},\boldsymbol{Q}^{\times n}\boldsymbol{E})• \tag{2b}$$

$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{D},\boldsymbol{E})$的所有对称变换的集合形成一个点群$\mathscr{G}$,称为$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{D},\boldsymbol{E})$的对称点群,或称$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{D},\boldsymbol{E})$是$\mathscr{G}$_对称的• 令$\mathscr{G}_s$为$\mathscr{G}$的任一子群,显然(2)对任意$\boldsymbol{Q}\in\mathscr{G}_s$必成立,于是可称$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{D},\boldsymbol{E})$是$\mathscr{G}_s$_不变的•

Kronecker积的基本性质早就有人做过整理(参见[9]),Zheng和Spencer[10]对二维和三维正交张量的Kronecker幂的性质做过深入的研究,并应用于材料对称性研究中• 例如根据定义对任意$m\in\mathscr{Z}^+$和正交张量$\boldsymbol{Q}$和$\boldsymbol{R}$有性质

$$(\boldsymbol{Q}^{\times m})^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}})^{\times m},\quad \boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{R}^{\times m}=(\boldsymbol{QR})^{\times m}, \tag{3}$$

因此$\mathbf{1}^{\times m}$是m阶张量空间的恒等变换而$\boldsymbol{Q}^{\times m}$是$m$阶张量空间的一个正交变换• 对任意$m$阶张量$\boldsymbol{A}$,$\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{A}$不仅保持它的指标对称性,还保持它的不可约性• 后者的正式写法为:

$$\boldsymbol{Q}^{\times m}\ulcorner\boldsymbol{A}\lrcorner=\ulcorner\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{A}\lrcorner• \tag{4}$$

因此,若$\boldsymbol{A}$是不可约的,则$\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{A}=\ulcorner\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{A}\lrcorner$也是不可约的,即

$$\boldsymbol{A}\in\mathscr{T}_m^N\Rightarrow\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{A}\in\mathscr{T}_m^N• \tag{5}$$

换句话说,对任意正交张量$\boldsymbol{Q}$,N维m阶不可约张量空间$\mathscr{T}_m^N$在m重Kronecker幂$\boldsymbol{Q}^{\times m}$的变换下不变• 本文中,正交变换$\boldsymbol{Q}^{\times m}$在空间$\mathscr{T}_m^N$约束下记作$\ulcorner\boldsymbol{Q}^{\times m}\lrcorner$•

1　三维CODF的张量傅立叶展开

1.1　三维CODF和四维ODF的对应

记 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{n})$ 为绕轴 $\boldsymbol{n}$(单位矢量)旋转角度 φ 的三维旋转张量. 利用4个对称欧拉参数 λ,μ,ν,ρ 或三个欧拉角 α,β,γ 可以把 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{n})$ 等同于一个四维单位矢量(参见[11]): $\boldsymbol{u}=(\lambda,\mu,\nu,\rho)$, 其中

$$\lambda=n_1\sin(\varphi/2),\quad \mu=n_2\sin(\varphi/2),\quad \nu=n_3\sin(\varphi/2),\quad \rho=\cos(\varphi/2), \tag{6a}$$

或

$$\left.\begin{aligned}&\lambda=\sin\frac{\gamma-\alpha}{2}\sin\frac{\beta}{2},\quad \mu=\cos\frac{\gamma-\alpha}{2}\sin\frac{\beta}{2},\\&\nu=\sin\frac{\gamma+\alpha}{2}\cos\frac{\beta}{2},\quad \rho=\cos\frac{\gamma+\alpha}{2}\cos\frac{\beta}{2},\end{aligned}\right\} \tag{6b}$$

这里 n_1, n_2 和 n_3 为单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 的笛卡儿分量.

自然地, 体元 $\mathrm{d}\boldsymbol{R}$ 定义为面元 $\mathrm{d}\boldsymbol{u}$ (参见[11]), 从而有

$$\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\frac{\sin\beta}{4}\mathrm{d}\alpha\Big|_0^{2\pi}\mathrm{d}\beta\Big|_0^{\pi}\mathrm{d}\gamma\Big|_0^{2\pi}=\frac{1-\cos\varphi}{2}\mathrm{d}\varphi\Big|_0^{\pi}\mathrm{d}\boldsymbol{n}. \tag{7}$$

第二个关系也能通过三维球坐标变换到坐标 (α,β,γ) 时体元 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ ($\boldsymbol{r}=\varphi\boldsymbol{n}$) 的变换关系得到

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\varphi^2\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}\boldsymbol{n}=\left|\frac{\partial(r_1,r_2,r_3)}{\partial(\alpha,\beta,\gamma)}\right|\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\gamma=\left|\frac{\varphi^2\sin\beta}{2(1-\cos\varphi)}\right|\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\gamma. \tag{8}$$

这样(7)式定义的 $\mathrm{d}\boldsymbol{R}$ 给出的三维旋转群的体元同样也是四维单位球面的面元 $\Omega^4=2\pi^2$ (见(Ⅰ.50))

$$\oint\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\oint\mathrm{d}\boldsymbol{u}=2\pi^2,$$

对任意旋转张量 $\boldsymbol{Q}$ 和定义在三维旋转群上的平方可积函数 f 它还给出了一个不变积分[8]

$$\oint f(\boldsymbol{QR})\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\oint f(\boldsymbol{RQ})\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\oint f(\boldsymbol{R})\mathrm{d}\boldsymbol{R}, \tag{9}$$

三维旋转群上的任意平方可积函数 f, g 的内积就是

$$\begin{aligned}(f,g)&=\oint fg\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}=2^{-1}\int_0^{\pi}(1-\cos\varphi)\mathrm{d}\varphi\oint fg\,\mathrm{d}\boldsymbol{n}=\\&4^{-1}\int_{\alpha=0}^{2\pi}\int_{\beta=0}^{\pi}\int_{\gamma=0}^{2\pi}fg\sin\beta\,\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\gamma.\end{aligned} \tag{10}$$

现在考虑三维平方可积的 CODF $\Phi(\boldsymbol{R})$. 从(6a)可知 $-\boldsymbol{u}$ 对应于 $\boldsymbol{R}((\varphi+2\pi)\boldsymbol{n})$, 这与 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{n})$ 完全相同, 换言之, $\boldsymbol{u}$ 和 $-\boldsymbol{u}$ 对应于同一旋转张量 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{n})$. 由此推知与三维 CODF $\Phi(\boldsymbol{R})$ 对应的四维 ODF $\Phi(\boldsymbol{u})$ 一定是中心对称的: $\Phi(-\boldsymbol{u})=\Phi(\boldsymbol{u})$. 这样从第Ⅰ.3节可知 $\Phi(\boldsymbol{u})$ 的傅立叶展开具有形式

$$\Phi=\Phi_0+\Phi_2+\Phi_4+\cdots=\Phi_0+\sum_{m=1}^{\infty}\mathscr{A}_{2m}\cdot\boldsymbol{u}^{\divideontimes 2m}, \tag{11a}$$

其中 $$\Phi_0=(2\pi^2)^{-1}\oint\Phi(\boldsymbol{u})\mathrm{d}\boldsymbol{u},\quad \mathscr{A}_{2m}\in\mathscr{T}_{2m}^4,\quad \Phi_{2m}\in\mathscr{H}_{2m}^4. \tag{11b}$$

由(Ⅰ.24b)式可知, 四维 $2m$ 次球谐函数的线性空间 $\mathscr{H}_{2m}^4$ 和四维 $2m$ 阶不可约张量的线性空间 $\mathscr{T}_{2m}^4$ 有相同的维数

$$\dim\mathscr{H}_{2m}^4=\dim\mathscr{T}_{2m}^4=(2m+1)^2. \tag{12}$$

因为四维不可约张量傅立叶展开(11)不容易通过与三维自然空间的多晶等材料相联系的四维单位矢量 $\boldsymbol{u}$ 理解, 受[4]的启发, 一个替代的三维自然空间的 CODF Φ 的傅立叶展开将在下面给出.

1.2 三维 CODF 的傅立叶展开

由 $\mathrm{d}\boldsymbol{R}$ 对应的不变积分(9) 以及 $\mathscr{T}_m^3(m\in\mathscr{Z})$ 是正交变换 $\boldsymbol{R}^{\times m}$ 下的 m 阶不变张量子空间，根据群表示理论(参见[8] 的 2.4 节)，对任意 $\boldsymbol{T},\boldsymbol{S},\boldsymbol{T}',\boldsymbol{S}'\in\mathscr{T}_m^3$ 和 $\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}\in\mathscr{T}_n^3\ (m\neq n)$ 有如下正交关系

$$\oint(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{R}^{\times m}\boldsymbol{S})(\boldsymbol{T}'\cdot\boldsymbol{R}^{\times m}\boldsymbol{S}')\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\frac{2\pi^2}{2m+1}(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{T}')(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{S}'),\tag{13a}$$

$$\oint(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{R}^{\times m}\boldsymbol{S})(\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{R}^{\times n}\boldsymbol{V})\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}=0,\qquad(\text{如果 } m\neq n)\cdot\tag{13b}$$

记 $\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner$ 是 $\boldsymbol{R}^{\times m}$ 仅作为 m 阶不可约张量的变换的约束形式，(13a) 和(13b) 可以分别进一步整理成如下绝对形式

$$\oint\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner\otimes\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\frac{2\pi^2}{2m+1}\boldsymbol{I}_m\times\boldsymbol{I}_m,\tag{14a}$$

$$\oint\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner\otimes\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times n}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\boldsymbol{0},\qquad(\text{如果 } m\neq n)\cdot\tag{14b}$$

上述这些正交关系在构造线性空间 $\mathscr{H}_{2m}^4$ 的基时起着关键作用· 记 $\left\{\boldsymbol{g}_{m,J}:J=0,1,\cdots,2m\right\}$ 为三维 m 阶不可约张量空间 $\mathscr{T}_m^3$ 的一组基，引入

$$Y_{JK}^m(\boldsymbol{R})=\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{R}^{\times m}\boldsymbol{g}_{m,K}\qquad(J,K=0,1,\cdots,2m)\cdot\tag{15}$$

并考虑正交关系(13a)，有

$$(Y_{JK}^m,Y_{LM}^m)=\oint(\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{R}^{\times m}\boldsymbol{g}_{m,K})(\boldsymbol{g}_{m,L}\cdot\boldsymbol{R}^{\times m}\boldsymbol{g}_{m,M})\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\frac{2\pi^2}{2m+1}g_{JL}^m g_{KM}^m,\tag{16}$$

其中 $g_{JK}^m=\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{g}_{m,L}$· 由于矩阵 $\boldsymbol{g}_{JK}^m$ 是空间 $\mathscr{T}_m^3$ 的一个度量，而矩阵 (Y_{JK}^m,Y_{LM}^m) 构成 $(2m+1)^2$ 维线性空间 $\mathscr{H}_{2m}^4$ 的一个度量，以及 $\left\{Y_{JK}^m:J,K=0,1,\cdots,2m\right\}$ 是空间 $\mathscr{H}_{2m}^4$ 的一组基· 如果选择 $\left\{\boldsymbol{g}_{m,J}\right\}$ 为一组正交基，如(Ⅰ.27) 式所示，则 $\left\{Y_{JK}^m\right\}$ 也是一组正交基，从而傅立叶展开(11a) 可以表示成如下常规形式:

$$\Phi(\boldsymbol{R})=\Phi_0+\sum_{m=1}^{\infty}\left\{\sum_{J,K=0}^{2m}\boldsymbol{A}_{JK}^m Y_{JK}^m(\boldsymbol{R})\right\},\tag{17a}$$

其中 $$\boldsymbol{A}_{JK}^m=(Y_{JK}^m,Y_{JK}^m)^{-1}\oint\Phi(\boldsymbol{R})Y_{JK}^m(\boldsymbol{R})\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}\cdot\tag{17b}$$

将(15) 代入(17) 就得到 $\Phi(\boldsymbol{R})$ 的张量傅立叶展开

$$\Phi(\boldsymbol{R})=\Phi_0+\sum_{m=1}^{\infty}\boldsymbol{A}_m\cdot\boldsymbol{R}^{\times m}=\Phi_0+\frac{1}{2\pi^2}\sum_{m=1}^{\infty}(2m+1)\boldsymbol{M}_m\cdot\boldsymbol{R}^{\times m},\tag{18}$$

其中 $$\boldsymbol{A}_m=\sum_{J,K=1}^{m}A_{JK}^m\boldsymbol{g}_{mJ}\otimes\boldsymbol{g}_{mK}=\frac{2m+1}{2\pi^2}\int\Phi(\boldsymbol{R})\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\frac{2m+1}{2\pi^2}\boldsymbol{M}_m,\tag{19}$$

这样就建立了三维 CODF $\Phi(\boldsymbol{R})$ 的张量傅立叶展开的一般表示·

下面给出两个注记:

(ⅰ) (18) 式的一个直接推导可以给出如下: 用 $\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner$ 乘以(18) 式第一个关系式的两边，再对整个旋转群积分，考虑正交关系(14)，立即得到

$$\oint\Phi(\boldsymbol{R})\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}=\left\{\oint\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner\otimes\ulcorner\boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}\right\}\boldsymbol{A}_m=$$
$$\frac{2\pi^2}{2m+1}(\boldsymbol{I}_m\times\boldsymbol{I}_m)\boldsymbol{A}_m=\frac{2\pi^2}{2m+1}\boldsymbol{A}_m\cdot\tag{20}$$

其中最后一个关系式用到 $\boldsymbol{I}_m\times\boldsymbol{I}_m$ 是 m 阶不可约张量的线性变换空间的恒等变换·

(ⅱ) $2m$ 阶张量 $\boldsymbol{A}_m$ 可以看作是所有三维 m 阶不可约张量的线性空间 $\mathscr{T}_m^3$ 上的线性变换，并可以表示成

$$\boldsymbol{A}_m = \sum_{K=0}^{2m} \boldsymbol{a}_{mK}^{(l)} \otimes \boldsymbol{g}_{mK} = \sum_{J=0}^{2m} \boldsymbol{g}_{mJ} \otimes \boldsymbol{a}_{mJ}^{(r)}, \tag{21a}$$

其中 $$\boldsymbol{a}_{mK}^{(l)} = \sum_{J=0}^{2m} \boldsymbol{A}_{JK}^{m} \boldsymbol{g}_{mJ},\quad \boldsymbol{a}_{mJ}^{(r)} = \sum_{K=0}^{2m} \boldsymbol{A}_{JK}^{m} \boldsymbol{g}_{mK}, \tag{21b}$$

可见 $\boldsymbol{A}_m$ 包含 $2m+1$ 个不可约张量 $\boldsymbol{a}_{mJ}^{(l)}$ 或 $\boldsymbol{a}_{mJ}^{(r)}(J=0,1,\cdots,2m)$，其中 $\boldsymbol{a}_{mJ}^{(l)}$ 和 $\boldsymbol{a}_{mJ}^{(r)}$ 分别称为 $\Phi(\boldsymbol{R})$ 的第 m 个左和右系数张量•

在此后各节中，将导出各种点群对称性下二维和三维不可约张量的约束形式、二维和三维 ODF(包括二维 CODF)张量傅立叶展开的约束形式和三维 CODF 张量傅立叶展开的约束形式，其中大多数情况下 $\boldsymbol{a}_{mJ}^{(l)}$ 和 $\boldsymbol{a}_{mJ}^{(r)}(J=0,1,\cdots,2m)$ 中的非零张量个数将大大减少•

2 宏观和微观的材料对称性约束

2.1 微观的材料对称性约束

本节将表明，作为多晶材料中单晶的体积分数，三维 CODF 不仅包含宏观材料对称性(通常意义下的材料对称性)还包含单晶的晶体点群对称性这样的微观对称性• 作为准备，先简述一下材料对称性约束的主要性质•

设 c^0 为参考晶体，$\mathscr{G}_c^0$ 为其晶体点群，$\boldsymbol{R}$ 为典型晶体 c 相对 c^0 的旋转变换，则根据定义，c 的晶体点群为

$$\mathscr{G}_c = \boldsymbol{R}\mathscr{G}_c^0\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} = \left\{\boldsymbol{R}\boldsymbol{Q}_0\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}: \boldsymbol{Q}_0 \in \mathscr{G}_c^0\right\}• \tag{22}$$

这意味着对每个 $\boldsymbol{Q}_0 \in \mathscr{G}_c^0$，$c$ 具有相应的定向$(\boldsymbol{R}\boldsymbol{Q}_0\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{Q}_0$• 具有定向 $\boldsymbol{R}$ 的晶粒的体积分数 $\Phi(\boldsymbol{R})$ 必须与 $\Phi(\boldsymbol{R}\boldsymbol{Q}_0)$ 相等，即

$$\Phi(\boldsymbol{R}\boldsymbol{Q}_0) = \Phi(\boldsymbol{R}) \qquad 对每个\ \boldsymbol{Q}_0 \in \mathscr{G}_c^0• \tag{23}$$

加上(18)式，可得

$$\Phi(\boldsymbol{R}\boldsymbol{Q}_0) = {}_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_m • (\boldsymbol{R}\boldsymbol{Q}_0)^{\times m} = \Phi_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (\boldsymbol{A}_m (\boldsymbol{Q}_0^{\mathrm{T}})^{\times m}) • \boldsymbol{R}^{\times m}• \tag{24}$$

由(24)式和张量傅立叶展开系数的唯一性，就有所谓的微观对称性约束：

$$\boldsymbol{A}_m (\boldsymbol{Q}_0^{\mathrm{T}})^{\times m} = \boldsymbol{A}_m, \qquad 对每个\ \boldsymbol{Q}_0 \in \mathscr{G}_c^0, \tag{25a}$$

或等价地

$$\boldsymbol{Q}_0^{\times m} \boldsymbol{a}_{mJ}^{(r)} = \boldsymbol{a}_{mJ}^{(r)}, \qquad 对每个\ \boldsymbol{Q}_0 \in \mathscr{G}_c^0• \tag{25b}$$

换言之，$\Phi(\boldsymbol{R})$ 的张量傅立叶展开的所有右项系数不可约张量必须是 $\mathscr{G}_c^0$_不变的•

设 $\mathscr{G}$ 为一个三维点群并记 $\mathscr{T}_m^3(\mathscr{G})$ 为所有 $\mathscr{G}$ 不变的 m 阶不可约张量的线性空间，即

$$\mathscr{T}_m^3(\mathscr{G}) = \left\{\boldsymbol{T} \in \mathscr{T}_m^3: \boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{T},\ \boldsymbol{Q} \in \mathscr{G}\right\}• \tag{26}$$

引入 $\mathscr{T}_m^3(\mathscr{G}_c^0)$ 的一组基$\left\{\boldsymbol{s}_{m\Lambda}: \Lambda = 1, 2, \cdots, D_m^c\right\}$，在微观约束(25)下，右系数不可约张量可以表示成如下形式：

$$\boldsymbol{a}_{mJ}^{(r)} = \sum_{K=0}^{2m} a_{JK}^{m} \boldsymbol{g}_{mK} = \sum_{\Lambda=1}^{D_m^c} b_{J\Lambda}^{m} \boldsymbol{s}_{m\Lambda} \in \mathscr{T}_m^3(\mathscr{G}_c^0)• \tag{27}$$

将(27)代入(21a)，可以把 $\Phi(\boldsymbol{R})$ 的傅立叶展开(18)中的第 m 个系数张量 $\boldsymbol{A}_m$ 表示为

$$\boldsymbol{A}_m = \sum_{\Lambda=1}^{D_m^c} \boldsymbol{a}_{m\Lambda} \otimes \boldsymbol{s}_{m\Lambda}, \tag{28a}$$

其中 $$\boldsymbol{a}_{m\Lambda} = \sum_{J=0}^{2m} a_{J\Lambda}^{m} \boldsymbol{g}_{mJ} \in \mathscr{T}_m^3 \qquad (\Lambda = 1, 2, \cdots, D_m^c)• \tag{28b}$$

换言之,第 m 项 $\boldsymbol{A}_m$ 所包含的 m 阶不可约张量个数由 $2m+1$ 减少到 $\mathscr{T}_m^3(\mathscr{G}_c^0)$ 的维数 D_m^c•

下节将具体构造各种点群(除了两类三维二十面体群)对称性下二维和三维 m 阶不可约张量的约束形式•

2.2 宏观对称性约束

另一方面,CODF $\Phi(\boldsymbol{R})$ 还具有通常意义的材料对称性 $\mathscr{G}_\Phi$,即宏观材料对称性• 记 $R_{\alpha\beta}^x$ 和 $R_{\alpha\beta}^y$ 分别是 $\boldsymbol{R}$ 相对两个笛卡儿坐标系 x 和 y 下的分量• 从 x 到 y 的正交变换记为 $Q_{\alpha\beta}$• 若 $\Phi(R_{\alpha\beta}^x)=\Phi(R_{\alpha\beta}^y)$,则称相应的正交变换 $\boldsymbol{Q}=(Q_{\alpha\beta})$ 是 Φ 的一个对称变换, $\Phi(\boldsymbol{R})$ 的所有对称变换的集合构成对称点群 $\mathscr{G}_\Phi$•

根据定义, $\boldsymbol{R}$ 是典型晶体 c 的定向相对 c^0 的变换• 若把它与刚体变形相联系,就类似于连续介质力学里的变形梯度(参见[12])• 如此比喻,立即有关系: $R_{\alpha\beta}^y=Q_{\alpha\gamma}R_{\gamma\beta}^x$• 从而上述对称性条件可转化为如下绝对形式

$$\Phi(\boldsymbol{QR})=\Phi(\boldsymbol{R}),\qquad \text{当且仅当 } \boldsymbol{Q}\in\mathscr{G}_\Phi \tag{29}$$

类似于(25)式的推导,有宏观对称性约束:

$$\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{A}_m=\boldsymbol{A}_m,\qquad \text{对每个 } \boldsymbol{Q}\in\mathscr{G}_\Phi, \tag{30a}$$

或等价地

$$\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{a}_{mJ}^{(1)}=\boldsymbol{a}_{mJ}^{(1)},\qquad \text{对每个 } \boldsymbol{Q}\in\mathscr{G}_\Phi, \tag{30b}$$

或者说,所有左项系数不可约张量必须是 $\mathscr{G}_\Phi$_不变的•

一般情况下,微观对称点群 $\mathscr{G}_c^0$ 和宏观对称点群 $\mathscr{G}_\Phi$ 没有任何关系,比如无论结晶点群 $\mathscr{G}_c^0$ 如何,任何一类晶体随机分布的多晶的宏观对称性 $\mathscr{G}_\Phi$ 均为各向同性• 因此微观和宏观对称性对三维 CODF 的张量傅立叶展开的约束是各自独立的•

2.3 ODF 作为轴对称条件下的特殊 CODF

考虑三维空间的两相材料,它由各向同性基体和具有相同形状和材料相的轴对称夹杂组成,用相对某一参考夹杂 c^0 的体积分数定义 CODF, $\Phi(\boldsymbol{R})$• 因为 c^0 是轴对称的,若记 $\boldsymbol{k}$ 为其对称轴,则 c^0 的对称点群 $\mathscr{G}_c^0$ 就是绕 $\boldsymbol{k}$ 轴的所有旋转张量 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})$• 由变换关系(Ⅰ.41)可知对任一 $m\in\mathscr{Z}^+$,只有 $r=0$ 的 $\boldsymbol{W}_{m,r}$ 在任意旋转 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})$ 下不变,从而约束空间 $\mathscr{T}_m^3(\mathscr{G}_c^0)$ 必须由 $\boldsymbol{W}_{m,0}=\boldsymbol{P}_{m,0}$ 展开

$$\mathscr{T}_m^3(\mathscr{G}_c^0)=\mathrm{span}\left\{\boldsymbol{P}_{m,0}\right\}=\left\{a\boldsymbol{P}_{m,0}\text{: 对任意实数 } a\right\}• \tag{31}$$

另一方面,由(36a)、$\boldsymbol{k}^{\otimes m}\cdot\boldsymbol{G}_m(x)=2^m$ 和(Ⅰ.32),可知 $\boldsymbol{k}^{\otimes m}\cdot\boldsymbol{P}_{m,0}=2^m$ 和 $\boldsymbol{k}^{\otimes m}\cdot\boldsymbol{W}_{m,r}=0$ $(r=1,\cdots,m)$,将这些结果代入(Ⅰ.31)得到

$$\ulcorner\boldsymbol{k}^{\otimes m}\lrcorner=[(m!)^2/(2m)!]\boldsymbol{P}_{m,0}• \tag{32}$$

根据(31)、(32)和(28),第 m 个系数张量 $\boldsymbol{A}_m$ 具有形式 $\boldsymbol{A}_m=\boldsymbol{a}_m\otimes\ulcorner\boldsymbol{k}^{\otimes m}\lrcorner$,其中 $\boldsymbol{a}_m\in\mathscr{T}_m^3$• 注意到对任意旋转张量 $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{Rk}$ 是单位矢量,张量傅立叶展开(18)可简化为

$$\Phi(\boldsymbol{R})=\Phi_0+\sum_{m=1}^{\infty}\boldsymbol{a}_m\cdot\boldsymbol{R}^{\times m}\boldsymbol{k}^{\otimes m}=\Phi_0+\sum_{m=1}^{\infty}\boldsymbol{a}_m\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes m}, \tag{33}$$

它与 ODF 的张量傅立叶展开具有相同的表示•

以上分析证明了 ODF 是 CODF 在轴对称微观对称性下的约化形式• 此外, ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的通常意义下的材料对称性 $\mathscr{G}_\Phi$ 一定是宏观的,并且约束加在系数张量 $\boldsymbol{a}_m$ 上•

2.4 二维和三维点群的分类

对 $m,\cdots,n$ 阶张量 $\boldsymbol{D},\cdots,\boldsymbol{E}$ 满足 $\boldsymbol{Q}^{\times m}\boldsymbol{D}=\boldsymbol{D},\cdots,\boldsymbol{Q}^{\times n}\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}$ 的所有正交张量 $\boldsymbol{Q}$ 的集合 $\mathscr{G}$

构成由 $\boldsymbol{D}, \cdots, \boldsymbol{E}$ 刻划的一个点群, 例如, 5 类立方点群分别由以下张量刻划(参见[6] 或[13]):

$$\mathscr{T}: \boldsymbol{T}_{\mathrm{d}}, \varepsilon;\ \mathscr{T}_{\mathrm{h}}: \boldsymbol{T}_{\mathrm{h}};\ \mathscr{O}: \boldsymbol{O}_{\mathrm{h}}, \varepsilon;\ \mathscr{T}_{\mathrm{d}}: \boldsymbol{T}_{\mathrm{d}};\ \mathscr{O}_{\mathrm{h}}: \boldsymbol{O}; \tag{34}$$

其中

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{h}} = \boldsymbol{e}_1^{\otimes 2} \otimes (\boldsymbol{e}_2^{\otimes 2} - \boldsymbol{e}_3^{\otimes 2}) + \boldsymbol{e}_2^{\otimes 2} \otimes (\boldsymbol{e}_3^{\otimes 2} - \boldsymbol{e}_1^{\otimes 2}) + \boldsymbol{e}_3^{\otimes 2} \otimes (\boldsymbol{e}_1^{\otimes 2} - \boldsymbol{e}_2^{\otimes 2}), \tag{35a}$$

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{d}} = \langle \boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_3 \rangle,\quad \boldsymbol{O}_{\mathrm{h}} = \boldsymbol{e}_1^{\otimes 4} + \boldsymbol{e}_2^{\otimes 4} + \boldsymbol{e}_3^{\otimes 4}, \tag{35b, c}$$

并取正交立方类的 3 个主轴为 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$, ε 为描述旋转群的置换张量, 它的分量取值为: 当 (α, β, γ) 是 $(1, 2, 3)$ 或 $(2, 1, 3)$ 的循环时 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = 1$ 或 -1, 其它情况 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = 0$• 在本文的以下研究中, 将采用点群的熊夫利符号(参见[5])•

文[14](参见[6]建立了一般意义上的分类定理和结构张量定理, 它们指出: (ⅰ) 所有点群可分为紧致点群和非紧致点群, (ⅱ) 每个非紧致点群在连续或混合连续的紧致点群中稠密, (ⅲ) 每个紧致点群可以用单个的张量刻划, (ⅳ) 非紧致点群不能用有限个有限阶的张量刻划• 利用熊夫利符号(参见[5]), [14] 建立所有二维点群的分类如下:

$$\mathscr{C}_1, \mathscr{C}_2, \mathscr{C}_3, \cdots, \{\mathscr{C}_\infty\},\ \mathscr{C}_{1\mathrm{v}}, \mathscr{C}_{2\mathrm{v}}, \mathscr{C}_{3\mathrm{v}}, \cdots, \{\mathscr{C}_{\infty\mathrm{v}}\} \bullet \tag{36}$$

其中 $\mathscr{C}_\infty$ 和 $\mathscr{C}_{\infty\mathrm{v}}$ 分别就是二维旋转群和完全正交群• 记 $\boldsymbol{R}(\varphi)$ 为旋转角度 φ 的旋转张量, 点群 $\mathscr{C}_m$ 由旋转张量 $\boldsymbol{R}(2\pi/m)$ 生成, $\mathscr{C}_{m\mathrm{v}}$ 由 $\boldsymbol{R}(2\pi/m)$ 和一个反射生成, $\{\mathscr{C}_\infty\}$ 和 $\{\mathscr{C}_{\infty\mathrm{v}}\}$ 分别表示在 $\mathscr{C}_\infty$ 和 $\mathscr{C}_{\infty\mathrm{v}}$ 中稠密的所有点群的集合•

记 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{n})$ 为绕 $\boldsymbol{n}$ 轴旋转角度 φ 的三维旋转张量, 文[14] 将所有三维点群分类如下:

$$\left.\begin{array}{l} \mathscr{C}_1, \mathscr{C}_2, \cdots, \{\mathscr{C}_\infty\},\ \mathscr{C}_{1\mathrm{h}}, \mathscr{C}_{2\mathrm{h}}, \cdots, \{\mathscr{C}_{\mathrm{v}}\},\ \mathscr{C}_{1\mathrm{v}}, \mathscr{C}_{2\mathrm{v}}, \cdots, \{\mathscr{C}_{\mathrm{l}}\}, \mathscr{C}_{1\mathrm{i}}, \mathscr{C}_{2\mathrm{i}}, \mathscr{C}_{3\mathrm{i}}, \cdots, \\ \mathscr{D}_2, \mathscr{D}_3, \cdots, \{\mathscr{D}_\infty\},\ \mathscr{D}_{2\mathrm{h}}, \mathscr{D}_{3\mathrm{h}}, \cdots, \{\mathscr{D}_{\mathrm{v}}\},\ \mathscr{D}_{2\mathrm{d}}, \mathscr{D}_{3\mathrm{d}}, \mathscr{D}_{4\mathrm{d}}, \cdots, \\ \mathscr{T}, \mathscr{T}_{\mathrm{h}}, \mathscr{O}, \mathscr{T}_{\mathrm{d}}, \mathscr{O}_{\mathrm{h}}, \mathscr{I}, \mathscr{I}_{\mathrm{h}}, \{\mathscr{K}\}, \{\mathscr{K}_{\mathrm{h}}\} \bullet \end{array}\right\} \tag{37}$$

其中柱坐标系的 $\mathscr{C}_\infty$, $\mathscr{C}_{\mathrm{v}}$, $\mathscr{D}_\infty$, $\mathscr{C}_{\mathrm{l}}$ 和 $\mathscr{D}_{\mathrm{v}}$ 是 5 个横观各向同性群, $\mathscr{K}$ 和 $\mathscr{K}_{\mathrm{h}}$ 分别就是三维旋转群和完全正交群, $\mathscr{I}$ 和 $\mathscr{I}_{\mathrm{h}}$ 对应于二十面体系的两个准晶类• 32个结晶类包括: 三斜系的 $\mathscr{C}_1$、$\mathscr{C}_{\mathrm{i}}$, 单斜系的 $\mathscr{C}_2$、$\mathscr{C}_{1\mathrm{h}}$、$\mathscr{C}_{2\mathrm{h}}$, 正交系的 $\mathscr{D}_2$、$\mathscr{C}_{2\mathrm{v}}$、$\mathscr{D}_{2\mathrm{h}}$, 四方系的 $\mathscr{C}_4$、$\mathscr{C}_{2\mathrm{i}}$、$\mathscr{C}_{4\mathrm{h}}$、$\mathscr{D}_4$、$\mathscr{C}_{4\mathrm{v}}$、$\mathscr{D}_{2\mathrm{d}}$、$\mathscr{D}_{4\mathrm{h}}$, 三方系的 $\mathscr{C}_3$、$\mathscr{C}_{3\mathrm{i}}$、$\mathscr{D}_3$、$\mathscr{C}_{3\mathrm{v}}$、$\mathscr{D}_{3\mathrm{d}}$, 六方系的 $\mathscr{C}_6$、$\mathscr{C}_{3\mathrm{h}}$、$\mathscr{C}_{6\mathrm{h}}$、$\mathscr{D}_6$、$\mathscr{C}_{6\mathrm{v}}$、$\mathscr{D}_{3h}$、$\mathscr{D}_{6\mathrm{h}}$ 和立方系的 $\mathscr{T}$、$\mathscr{T}_{\mathrm{d}}$、$\mathscr{T}_{\mathrm{h}}$、$\mathscr{O}$、$\mathscr{O}_{\mathrm{h}}$•

3 各种点群对称性约束下的不可约张量

3.1 各种点群对称性约束下的二维不可约张量

由二维旋转张量 $\boldsymbol{R}(\varphi)$ 的定义

$$\boldsymbol{R}(\varphi)\boldsymbol{e}_1 = \cos\varphi\, \boldsymbol{e}_1 + \sin\varphi\, \boldsymbol{e}_2,\quad \boldsymbol{R}(\varphi)\boldsymbol{e}_2 = -\sin\varphi\, \boldsymbol{e}_1 + \cos\varphi\, \boldsymbol{e}_2,$$

由(Ⅰ.21) 可得

$$\boldsymbol{R}(\varphi)^{\times n}\boldsymbol{W}_n = \exp(-\mathrm{i}n\varphi)\boldsymbol{W}_n, \tag{38a}$$

或

$$\boldsymbol{R}(\varphi)^{\times n}\boldsymbol{P}_n = \cos(n\varphi)\boldsymbol{P}_n + \sin(n\varphi)\boldsymbol{Q}_n,\ \boldsymbol{R}(\varphi)^{\times n}\boldsymbol{Q}_n = -\sin(n\varphi)\boldsymbol{P}_n + \cos(n\varphi)\boldsymbol{Q}_n \bullet \tag{38b}$$

从(38) 可以看出, 当且仅当 $n\varphi = 2k\pi$(k 为某些整数) 时, $\boldsymbol{R}(\varphi)^{\times n}\boldsymbol{P}_n = \boldsymbol{P}_n$ 和 $\boldsymbol{R}(\varphi)^{\times n}\boldsymbol{Q}_n = \boldsymbol{Q}_n$ 成立• 因此, 当且仅当 n/m 为整数时非零 n 阶不可约张量是 $\mathscr{C}_m$_ 不变的• 更进一步, 由(Ⅰ.7) 可知, $\boldsymbol{P}_n(n > 0)$ 具有关于 $\boldsymbol{e}_2$ 的反射对称性而 $\boldsymbol{Q}_n$ 没有, 若把 $\mathscr{C}_m$ 看作是由 $\boldsymbol{R}(2\pi/m)$ 和关于 $\boldsymbol{e}_2$ 的反射生成的, 则 $\boldsymbol{Q}_n$ 不是 $\mathscr{C}_{m\mathrm{v}}$ 不变的, $\boldsymbol{P}_n$ 当且仅当 n/m 为整数时是 $\mathscr{C}_{m\mathrm{v}}$ 不变的• 上述分析导出点群约束下的不可约张量的表示如下:

$$\mathscr{T}_n^2(\mathscr{C}_m) = \mathscr{T}_m^2(\mathscr{C}_{m\mathrm{v}}) = \{\boldsymbol{0}\},\qquad \text{如果 } n/m \notin \mathscr{Z}^+, \tag{39a}$$

$$\mathscr{T}_n^2(\mathscr{C}_m) = \mathrm{span}\left\{\boldsymbol{P}_n, \boldsymbol{Q}_n\right\} \text{和} \mathscr{T}_n^2(\mathscr{C}_{m\mathrm{v}}) = \mathrm{span}\left\{\boldsymbol{P}_n\right\}, \qquad \text{如果 } n/m \in \mathscr{Z}^+, \tag{39b}$$

$$\mathscr{T}_n^2(\mathscr{C}_\infty) = \mathscr{T}_n^2(\mathscr{C}_1) = \left\{\boldsymbol{0}\right\}, \qquad \text{对任一 } n \in \mathscr{Z}^+ . \tag{39c}$$

在 ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$ 张量傅立叶展开的各项中,(39) 式可以表示成如下形式:

$$\mathscr{C}_m: \qquad \Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{q=1}^{\infty}(a_q \boldsymbol{P}_{qm} + b_q \boldsymbol{Q}_{qm}) \cdot \boldsymbol{n}^{\neq qm}, \tag{40a}$$

$$\mathscr{C}_{m\mathrm{v}}: \qquad \Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{q=1}^{\infty} a_q \boldsymbol{P}_{qm} \cdot \boldsymbol{n}^{\neq qm}, \tag{40b}$$

$$\left\{\mathscr{C}_\infty\right\} \& \left\{\mathscr{C}_{\infty\mathrm{v}}\right\}: \qquad \Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 . \tag{40c}$$

注意到 $\mathscr{C}_{2\mathrm{v}}$ 对应于通常的正交对称群,(Ⅰ.18) 和(Ⅰ.19) 给出的结果正是这些各种二维点群下统一表示的两个特例.

3.2 各种横观各向同性子群 $\mathscr{D}_{\mathrm{v}}$ 约束下的三维不可约张量

按照定义,绕 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_3$ 轴旋转角度 φ 的三维旋转张量记为 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})$,于是

$$\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})\boldsymbol{e}_1 = \cos\varphi\boldsymbol{e}_1 + \sin\varphi\boldsymbol{e}_2, \quad \boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})\boldsymbol{e}_2 = -\sin\varphi\boldsymbol{e}_1 + \cos\varphi\boldsymbol{e}_2, \quad \boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k},$$

由(Ⅰ.41),可得

$$\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})^{\times n}\boldsymbol{W}_{n,r} = \exp(-\mathrm{i}r\varphi)\boldsymbol{W}_{n,r}, \tag{41a}$$

或

$$\begin{cases} \boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})^{\times n}\boldsymbol{P}_{n,r} = \cos(r\varphi)\boldsymbol{P}_{n,r} + \sin(r\varphi)\boldsymbol{Q}_{n,r}, \\ \boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})^{\times n}\boldsymbol{Q}_{n,r} = -\sin(r\varphi)\boldsymbol{P}_{n,r} + \cos(r\varphi)\boldsymbol{Q}_{n,r} . \end{cases} \tag{41b}$$

再由(41)得到:对任意 $n \in \mathscr{Z}^+$ 都有 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})^{\times n}\boldsymbol{P}_{n,0} = \boldsymbol{P}_{n,0}$,以及当且仅当 $r\varphi = 2k\pi$(k 为某些整数) 时 $\boldsymbol{R}(\varphi\boldsymbol{k})^{\times n}\boldsymbol{W}_{n,r} = \boldsymbol{W}_{n,r}$ 成立.

记 $\boldsymbol{R}_2$ 为关于 $\boldsymbol{e}_2$ 的反射并引入奇偶指标函数:当 n 为偶数或奇数时,$e(n) = 1$ 或 0, $o(n) = 0$ 或 1. 类比于(40),可得除了立方系的 5 类和二十面体系的两类对称性的所有其它点群对称性下,三维 ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的张量傅立叶展开的约束. 结果如下:

$\mathscr{C}_m(m \in \mathscr{Z}^+)$,由 $\boldsymbol{R}(2\pi/m\boldsymbol{k})$ 生成:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left\{a_{n,0}\boldsymbol{P}_{n,0} + \sum_{q=1}^{[n/m]}(a_{n,q}\boldsymbol{P}_{n,qm} + b_{n,q}\boldsymbol{Q}_{n,qm})\right\} \cdot \boldsymbol{n}^{\neq n} . \tag{42}$$

$\mathscr{C}_{m\mathrm{v}}(m \in \mathscr{Z}^+, m \geqslant 2)$,由 $\boldsymbol{R}(2\pi/m\boldsymbol{k})$, $\boldsymbol{R}_2$ 生成:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left\{a_{n,0}\boldsymbol{P}_{n,0} + \sum_{q=1}^{[n/m]} a_{n,q}\boldsymbol{P}_{n,qm}\right\} \cdot \boldsymbol{n}^{\neq n} . \tag{43}$$

$\mathscr{C}_{m\mathrm{h}}(m = \text{偶数} \in \mathscr{Z}^+)$ 和 $\mathscr{C}_{m\mathrm{i}}(m = \text{奇数} \in \mathscr{Z}^+)$,由 $\boldsymbol{R}(2\pi/m\boldsymbol{k})$, -1 生成:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}\left\{a_{2l,0}\boldsymbol{P}_{2l,0} + \sum_{q=1}^{[2l/m]}(a_{2l,q}\boldsymbol{P}_{2l,qm} + b_{2l,q}\boldsymbol{Q}_{2l,qm})\right\} \cdot \boldsymbol{n}^{\neq 2l} . \tag{44}$$

$\mathscr{C}_{m\mathrm{h}}(m = \text{奇数} \in \mathscr{Z}^+)$ 和 $\mathscr{C}_{m\mathrm{i}}(m = \text{偶数} \in \mathscr{Z}^+)$,由 $-\boldsymbol{R}(\pi/m\boldsymbol{k})$ 生成:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}\left\{a_{2l,0}\boldsymbol{P}_{2l,0} + \sum_{q=1}^{[l/m]}(a_{2l,q}\boldsymbol{P}_{2l,2qm} + b_{2l,q}\boldsymbol{Q}_{2l,2qm})\right\} \cdot \boldsymbol{n}^{\neq 2l} +$$
$$\sum_{l=0}^{\infty}\left\{\sum_{q=0}^{(2l+1-m)/2}(a_{2l+1,q}\boldsymbol{P}_{2l+1,(2q+1)m} + b_{2l+1,q}\boldsymbol{Q}_{2l+1,(2q+1)m})\right\} \cdot \boldsymbol{n}^{\neq 2l+1} . \tag{45}$$

$\mathscr{D}_m(m \in \mathscr{Z}^+, m \geqslant 2)$, 由 $\boldsymbol{R}(\pi/m\boldsymbol{k})$, $-\boldsymbol{R}_2$ 生成:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left\{e(n)\,a_{n,0}\boldsymbol{P}_{n,0} + \sum_{q=1}^{[n/m]}[e(n)\,a_{n,q}\boldsymbol{P}_{n,qm} + o(n)\,b_{n,q}\boldsymbol{Q}_{n,qm}]\right\}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes n}. \tag{46}$$

$\mathscr{D}_{mh}(m=$ 偶数 $\in \mathscr{Z}^+)$ 和 $\mathscr{D}_{md}(m=$ 奇数 $\in \mathscr{Z}^+, m \geqslant 3)$, 由 $\boldsymbol{R}(2\pi/m\boldsymbol{k})$, $\boldsymbol{R}_2$, $-\boldsymbol{1}$ 生成:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}\left\{a_{2l,0}\boldsymbol{P}_{2l,0} + \sum_{q=1}^{[2l/q]}a_{2l,q}\boldsymbol{P}_{2l,qm}\right\}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes 2l}. \tag{47}$$

$\mathscr{D}_{mh}(m=$ 奇数 $\in \mathscr{Z}^+, m \geqslant 3)$ 和 $\mathscr{D}_{md}(m=$ 偶数 $\in \mathscr{Z}^+)$, 由 $-\boldsymbol{R}(\pi/m\boldsymbol{k})$, $\boldsymbol{R}_2$ 生成:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}\left\{a_{2l,0}\boldsymbol{P}_{2l,0} + \sum_{q=1}^{[l/m]}a_{2l,q}\boldsymbol{P}_{2l,2qm}\right\}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes 2l} + \sum_{l=0}^{\infty}\left\{\sum_{q=0}^{(2l+1-m)/2}a_{2l+1,q}\boldsymbol{P}_{2l+1,(2q+1)m}\right\}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes 2l+1}. \tag{48}$$

$\{\mathscr{C}_\infty\}$ 和 $\{\mathscr{C}_{\infty v}\}$:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{n=1}^{\infty}a_{n,0}\boldsymbol{P}_{n,0}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes n}. \tag{49}$$

$\{\mathscr{C}_{\infty h}\}$, $\{\mathscr{D}_\infty\}$ 和 $\{\mathscr{D}_{\infty h}\}$:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}a_{2l,0}\boldsymbol{P}_{2l,0}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes 2l}. \tag{50}$$

通过(42) ~ (50)这些ODF张量傅立叶展开的约束表示可以直接得到各阶三维不可约张量在各种点群对称性下的约束表示, 例如, 从(42)可得

$$\mathscr{T}_n^3(\mathscr{C}_m) = \operatorname{span}\{\boldsymbol{P}_{n,0}, \boldsymbol{P}_{n,m}, \boldsymbol{Q}_{n,m}, \boldsymbol{P}_{n,2m}, \boldsymbol{Q}_{n,2m}, \cdots, \boldsymbol{P}_{n,[n/m]m}, \boldsymbol{Q}_{n,[n/m]m}\}. \tag{51}$$

因为 $\boldsymbol{P}_{n,0}$, $\boldsymbol{P}_{n,m}$, $\boldsymbol{Q}_{n,m}$, $\cdots$, $\boldsymbol{P}_{n[n/m]m}$, $\boldsymbol{Q}_{n,[n/m]m}$ 是互相正交的, $\mathscr{T}_n^3(\mathscr{C}_m)$ 的维数等于 $2[n/m]+1$. 与此相似, 表示(42) ~ (50)中的所有不可约张量都是互相正交、线性独立的.

3.3 立方类约束下的不可约张量

点群 $\mathscr{G}$ 下单个矢量 $\boldsymbol{x}$ 的整基是一组 $\mathscr{G}$ 不变的多项式(称为不变量), $\boldsymbol{x}$ 的所有 $\mathscr{G}$_不变的多项式函数都可以用这些整基表示. 一个整基称为不可约的, 如果它的任一一个子集都不能形成整基. 多年前[15, 16], 32个晶类下单个矢量 $\boldsymbol{x}$ 的不可约整基就建立起来了.

为了推导5类立方系下的三维不可约张量的约束形式, 利用相应的整基是非常方便的. 表1列出了五类立方系下的单个矢量 $\boldsymbol{x}$ 的不可约整基的坐标形式和绝对形式, 其中符号 $\sum$ 表示对指标1, 2, 3的求和, 比如 $\sum x_1^4 = x_1^4 + x_2^4 + x_3^4$, 张量 $\boldsymbol{T}_d$、$\boldsymbol{T}_h$ 和 $\boldsymbol{O}_h$ 由(35)定义, $\boldsymbol{H}_h$ 和 $\boldsymbol{L}_h$ 的定义如下

$$\boldsymbol{H}_h = \boldsymbol{O}_h\cdot\boldsymbol{O}_h = \sum \boldsymbol{e}_1^{\otimes 6}, \tag{52a}$$

$$\boldsymbol{L}_h = \boldsymbol{O}_h\cdot\boldsymbol{T}_h = \sum \boldsymbol{e}_1^{\otimes 4}\otimes(\boldsymbol{e}_2^{\otimes 2} - \boldsymbol{e}_3^{\otimes 2}). \tag{52b}$$

首先考虑如下ODF张量傅立叶展开在群 $\mathscr{O}_h$ 下的约束形式

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \Phi_1(\boldsymbol{n}) + \Phi_2(\boldsymbol{n}) + \Phi_3(\boldsymbol{n}) + \cdots, \tag{53a}$$

其中 $$\Phi_m(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{a}_m\cdot\boldsymbol{n}^{\times m}, \qquad \boldsymbol{a}_m \in \mathscr{T}_m^3. \tag{53b}$$

由定义, 齐次函数 $\Phi_m(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{a}_m\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes m}$ 必然可以表示成下列不变量

$$I_2 = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n} = \boldsymbol{1}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 2},\quad I_4 = \boldsymbol{O}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 4},\quad I_6 = \boldsymbol{H}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 6} \tag{54}$$

的关于 $\boldsymbol{n}$ 的 m 齐次多项式函数· 比如, 一个一般的 6 次 $\mathscr{O}_{\rm h}$ 不变的齐次函数 $P(\boldsymbol{n})$ 具有表达形式

$$\begin{aligned}P(\boldsymbol{n}) &= a_6I_6 + b_6I_2I_4 + c_6I_2^3 = \\ &(a_6\boldsymbol{H}_{\rm h} + b_6\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{O}_{\rm h} + c_6\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{1})\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 6},\end{aligned} \tag{55a}$$

表 1　　5 种立方类下单个矢量的整基[15, 16]

类	坐标形式的整基	绝对形式的整基
$\mathscr{T}$	$\sum x_1^2,\ x_1x_2x_3,\ \sum x_1^4,\ \sum x_1^4(x_2^2-x_3^2)$	$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{T}_{\rm d}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes3},\ \boldsymbol{O}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes4},\ \boldsymbol{L}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes6}$
$\mathscr{T}_{\rm d}$	$\sum x_1^2,\ x_1x_2x_3,\ \sum x_1^4$	$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{T}_{\rm d}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes3},\ \boldsymbol{O}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes4}$
$\mathscr{T}_{\rm h}$	$\sum x_1^2,\ \sum x_1^4,\ \sum x_1^6,\ \sum x_1^4(x_2^2-x_3^2)$	$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{O}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes4},\ \boldsymbol{H}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes6},\ \boldsymbol{L}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes6}$
$\mathscr{O}$	$\sum x_1^2,\ \sum x_1^4,\ \sum x_1^6,\ x_1x_2x_3\sum x_1^4(x_2^2-x_3^2)$	$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{O}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes4},\ \boldsymbol{H}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes6},\ (\boldsymbol{T}_{\rm d}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes3})(\boldsymbol{L}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes6})$
$\mathscr{O}_{\rm h}$	$\sum x_1^2,\ \sum x_1^4,\ \sum x_1^6$	$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{O}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes4},\ \boldsymbol{H}_{\rm h}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes6}$

其中 a_6, b_6 和 c_6 是自由常数· 注意到 $\Phi_6(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{a}_6\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 6}$, 其中 $\boldsymbol{a}_6$ 为不可约张量, 故

$$\Phi_6(\boldsymbol{n}) = \ulcorner a_6\boldsymbol{H}_{\rm h} + b_6\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{O}_{\rm h} + c_6\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{1}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 6}\cdot \tag{55b}$$

由于对任意张量 $\boldsymbol{A}$, 张量积 $\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{A}$ 的对称无迹部分恒等于零, (55b) 给出约束形式:

$$\Phi_6(\boldsymbol{n}) = a_6\ulcorner\boldsymbol{H}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 6}\cdot \tag{55c}$$

这一过程指明了怎样利用不可约整基得到张量傅立叶展开的约束形式· 事实上, 为了推导 $\Phi_m(\boldsymbol{n})$ 的约束形式, 可以从表 1 中检除不变量 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x} = \boldsymbol{1}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes 2}$ 并列出相应的整基中除 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}$ 外其它所有可能的 m 次齐次不变量· 例如构造 24 次 $\mathscr{O}_{\rm h}$ 不变的 $\Phi_{24}(\boldsymbol{x})$ 约束形式, 用 I_4 和 I_6 表示的可能的 24 次齐次项及其对应的不可约张量为

$$I_4^6\to\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 6}\lrcorner,\quad I_4^3I_6^2\to\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 3}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner,\quad I_6^4\to\ulcorner\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 4}\lrcorner\cdot \tag{56}$$

通过与上述做法相似的步骤, 利用表 1 可得下列约束形式:

$$\begin{aligned}\mathscr{O}_h:\quad \Phi(\boldsymbol{n}) =\ & \Phi_0 + a_4\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 4} + a_6\ulcorner\boldsymbol{H}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 6} + a_8\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 8} + \\ & a_{10}\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 10} + \ulcorner a_{12}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 3} + b_{12}\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 12} + a_{14}\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 2}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 14} + \\ & \ulcorner a_{16}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 4} + b_{16}\boldsymbol{O}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 16} + \ulcorner a_{18}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 3}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h} + b_{18}\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 3}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 18} + \\ & \ulcorner a_{20}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 5} + b_{20}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 2}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 20} + \ulcorner a_{22}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 4}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h} + b_{22}\boldsymbol{O}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 3}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 22} + \\ & \ulcorner a_{24}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 6} + b_{24}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 3}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 2} + c_{24}\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 4}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 24} + \cdots,\end{aligned} \tag{57}$$

$$\begin{aligned}\mathscr{O}:\quad \Phi(\boldsymbol{n}) =\ & \Phi_0 + a_4\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 4} + a_6\ulcorner\boldsymbol{H}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 6} + a_8\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 8} + \\ & a_9\ulcorner\boldsymbol{T}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{L}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 8} + a_{10}\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 10} + \ulcorner a_{12}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 3} + b_{12}\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 12} + \\ & a_{13}\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{T}_{\rm d}\otimes\boldsymbol{L}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 13} + a_{14}\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 2}\otimes\boldsymbol{H}_h\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 14} + \\ & a_{15}\ulcorner\boldsymbol{H}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{T}_{\rm d}\otimes\boldsymbol{L}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 15} + \ulcorner a_{16}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 4} + b_{16}\boldsymbol{O}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 16} + \\ & a_{17}\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 2}\otimes\boldsymbol{T}_{\rm d}\otimes\boldsymbol{L}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 17} + \ulcorner a_{18}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 3}\otimes\boldsymbol{H}_{\rm h} + b_{18}\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 3} + \\ & c_{18}\boldsymbol{T}_{\rm d}^{\otimes 2}\otimes\boldsymbol{L}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 18} + \cdots,\end{aligned} \tag{58}$$

$$\begin{aligned}\mathscr{T}_h:\quad \Phi(\boldsymbol{n}) =\ & \Phi_0 + a_4\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 4} + \ulcorner a_6\boldsymbol{H}_{\rm h} + b_6\boldsymbol{L}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 6} + a_8\ulcorner\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 2}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 8} + \\ & \ulcorner a_{10}\boldsymbol{O}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{H}_h + b_{10}\boldsymbol{O}_{\rm h}\otimes\boldsymbol{L}_{\rm h}\lrcorner\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 10} + \ulcorner a_{12}\boldsymbol{O}_{\rm h}^{\otimes 3} + b_{12}\boldsymbol{H}_{\rm h}^{\otimes 2} + c_{12}\boldsymbol{L}_{\rm h}^{\otimes 2} +\end{aligned}$$

$$d_{12}H_{\mathrm{h}}\otimes L_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 12}+\cdots, \tag{59}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{\mathrm{d}}:\quad \Phi(n)=\;&\Phi_0+a_3\lfloor T_{\mathrm{d}}\rfloor\cdot n^{\otimes 3}+a_4\lfloor O_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 4}+a_6\lfloor T_{\mathrm{d}}^{\otimes 2}\rfloor\cdot n^{\otimes 6}+\\&a_7\lfloor T_{\mathrm{d}}\otimes O_h\rfloor\cdot n^{\otimes 7}+a_8\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\cdot n^{\otimes 8}+a_9\lfloor T_{\mathrm{d}}^{\otimes 3}\rfloor\cdot n^{\otimes 9}+\\&a_{10}\lfloor T_{\mathrm{d}}^{\otimes 2}\otimes O_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 10}+a_{11}\lfloor T_{\mathrm{d}}\otimes O_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\cdot n^{\otimes 11}+\lfloor a_{12}T_{\mathrm{d}}^{\otimes 4}+b_{12}O_{\mathrm{h}}^{\otimes 3}\rfloor\cdot n^{\otimes 12}+\\&a_{13}\lfloor T_{\mathrm{d}}^{\otimes 3}\otimes O_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 13}+a_{14}\lfloor T_{\mathrm{d}}^{\otimes 2}\otimes O_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\cdot n^{\otimes 14}+\cdots,\end{aligned} \tag{60}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{T}\quad \Phi(n)=\;&\Phi_0+a_3\lfloor T_{\mathrm{d}}\rfloor\cdot n^{\otimes 3}+a_4\lfloor O_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 4}+\lfloor a_6T_{\mathrm{d}}^{\otimes 2}+b_6L_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 6}+\\&a_7\lfloor T_{\mathrm{d}}\otimes O_h\rfloor\cdot n^{\otimes 7}+a_8\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\cdot n^{\otimes 8}+\lfloor a_9T_{\mathrm{d}}^{\otimes 3}+b_9T_{\mathrm{d}}\otimes L_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 9}+\\&\lfloor a_{10}\lfloor T_{\mathrm{d}}^{\otimes 2}\otimes O_{\mathrm{h}}+b_{10}O_{\mathrm{h}}\otimes L_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 10}+a_{11}\lfloor T_{\mathrm{d}}\otimes O_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\cdot n^{\otimes 11}+\\&\lfloor a_{12}T_{\mathrm{d}}^{\otimes 4}+b_{12}O_{\mathrm{h}}^{\otimes 3}+c_{12}L_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}+d_{12}T_{\mathrm{d}}^{\otimes 2}\otimes L_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot n^{\otimes 12}+\cdots.\end{aligned} \tag{61}$$

这些约束形式,比如(57)表明三维 $\mathcal{O}_{\mathrm{h}}$ 不变的 m 阶不可约张量的线性空间 $\mathcal{T}^3_m(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})$ 具有如下表示:

$$\mathcal{T}^3_2(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})\text{ 和所有 }\mathcal{T}^3_m(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})\qquad (m\text{ 是奇数})\text{ 均为空集,} \tag{62a}$$

和

$$\begin{cases}\mathcal{T}^3_4(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}\rfloor\},\ \mathcal{T}^3_6(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor H_{\mathrm{h}}\rfloor\},\\ \mathcal{T}^3_8(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\},\ \mathcal{T}^3_{10}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}\otimes H_{\mathrm{h}}\rfloor\},\\ \mathcal{T}^3_{12}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 3}\rfloor,\lfloor H_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\},\ \mathcal{T}^3_{14}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\otimes H_{\mathrm{h}}\rfloor\},\\ \mathcal{T}^3_{16}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 4}\rfloor,\lfloor O_{\mathrm{h}}\otimes H_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\},\\ \mathcal{T}^3_{18}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 3}\otimes H_{\mathrm{h}}\rfloor,\lfloor H_{\mathrm{h}}^{\otimes 3}\rfloor\},\\ \mathcal{T}^3_{20}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 5}\rfloor,\lfloor O_{\mathrm{h}}^{2}\otimes H_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor\},\\ \mathcal{T}^3_{22}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 4}\otimes H_{\mathrm{h}}\rfloor,\lfloor O_{\mathrm{h}}\otimes H_{\mathrm{h}}^{\otimes 3}\rfloor\},\\ \mathcal{T}^3_{24}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})=\mathrm{span}\{\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 6}\rfloor,\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 3}\otimes H_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor,\lfloor H_{\mathrm{h}}^{\otimes 4}\rfloor\},\end{cases} \tag{62b}$$

等等.

类似地,利用(58)~(61)可立即写出 $\mathcal{G}=\mathcal{T},\mathcal{T}_{\mathrm{d}},\mathcal{T}_{\mathrm{h}}$ 或 $\mathcal{O}$ 时 $\mathcal{T}^3_m(\mathcal{G})$ 的表示.

3.4 线性无关性

尽管利用表1的不可约整基可以构造出如(57)~(62)的约束形式,我们还没有论证这些约束形式的线性独立性. 例如,没有论证展成约束的24阶不可约张量空间 $\mathcal{T}^3_{24}(\mathcal{O}_{\mathrm{h}})$ 的 $\mathcal{O}_{\mathrm{h}}$_不变24阶不可约张量 $\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 6}\rfloor$、$\lfloor O_h^{\otimes 3}\otimes H_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor$ 和 $\lfloor H_{\mathrm{h}}^{\otimes 4}\rfloor$ 是否线性无关.

通过4个基本的生成多项式

$$\begin{cases}P_T(x)=\lfloor T_{\mathrm{d}}\rfloor\cdot G_3(x),\ P_O(x)=\lfloor O_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot G_4(x),\\ P_H(x)=\lfloor H_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot G_6(x),\ P_L(x)=\lfloor L_{\mathrm{h}}\rfloor\cdot G_6(x),\end{cases} \tag{63a}$$

其中 $G_m(x)$ 是由(Ⅰ.25)定义的生成函数,将(35)和(52)代入(63),得到

$$\begin{cases}P_T(x)=6(e_1\otimes e_2\otimes e_3)\cdot G_3(x)=12\mathrm{i}(x^2-x^{-2}),\\ P_O(x)=O_{\mathrm{h}}\cdot G_4(x)=28+2(x^4+x^{-4}),\\ P_H(x)=H_{\mathrm{h}}\cdot G_6(x)=24-2(x^4+x^{-4}),\\ P_L(x)=L_{\mathrm{h}}\cdot G_6(x)=66(x^2+x^{-2})-2(x^6+x^{-6}).\end{cases} \tag{63b}$$

要论证诸如 $\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 6}\rfloor$, $\lfloor H_{\mathrm{h}}^{\otimes 4}\rfloor$ 和 $\lfloor O_{\mathrm{h}}^{\otimes 3}\otimes H_{\mathrm{h}}^{\otimes 2}\rfloor$ 的线性无关,可以等价地论证

$$
\begin{cases}
f_1(x) = \lceil \boldsymbol{O}_h^{\otimes 6} \rfloor \cdot \boldsymbol{G}_{24}(x) = [\boldsymbol{O}_h \cdot \boldsymbol{G}_4(x)]^6 = P_{\boldsymbol{O}}(x)^6 = \\
\qquad [28 + 2(x^4 + x^{-4})]^6, \\
f_2(x) = \lceil \boldsymbol{H}_h^{\otimes 4} \rfloor \cdot \boldsymbol{G}_{24}(x) = [\boldsymbol{H}_h \cdot \boldsymbol{G}_6(x)]^4 = P_{\boldsymbol{H}}(x)^4 = \\
\qquad [24 - 2(x^4 + x^{-4})]^4, \\
f_3(x) = \lceil \boldsymbol{O}_h^{\otimes 3} \otimes \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2} \rfloor \cdot \boldsymbol{G}_{24}(x) = P_{\boldsymbol{O}}(x)^3 P_{\boldsymbol{H}}(x)^2 = \\
\qquad [28 + 2(x^4 + x^{-4})]^3 [24 - 2(x^4 + x^{-4})]^2
\end{cases}
\tag{64}
$$

的线性无关性• 由于 $f_1(x)$、$f_2(x)$ 和 $f_3(x)$ 中 $X_4 = x^4 + x^{-4}$ 的最高次数分别为 6、4 和 5, 它们的线性无关性是显然的• 从而不可约张量 $\lceil \boldsymbol{O}_h^{\otimes 6} \rfloor$、$\lceil \boldsymbol{H}_h^{\otimes 4} \rfloor$ 和 $\lceil \boldsymbol{O}_h^{\otimes 3} \otimes \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2} \rfloor$ 是线性无关的并构成 $\mathscr{T}_{24}^3(\mathscr{O}_h)$ 的一组基•

由约束傅立叶展开(57) ~ (61) 的结构和(64), 容易证明它们都是线性无关的, 由于篇幅所限, 不再列出详细证明•

还可以看出, 对所有点群对称性, 利用不可约整基构造 ODF 张量傅立叶展开的约束形式都是很方便的• 与上述线性无关表示(57) ~ (61) 相对照, 下面说明利用 $\mathscr{D}_{\infty h}$ 的子群(比如 $\mathscr{C}_6$) 下单个矢量的整基所构造的 ODF 不可约张量傅立叶展开表示是线性相关的•

首先把 $\mathscr{C}_6$ 下矢量 $\boldsymbol{x}$ 的整基不变量[15, 16] 整理成绝对形式

$$
I_1 = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{k},\quad I_2 = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x},\quad p_6 = \boldsymbol{P}_{6,6} \cdot \boldsymbol{x}^{\otimes 6},\quad q_6 = \boldsymbol{Q}_{6,6} \cdot \boldsymbol{x}^{\otimes 6} \cdot \tag{65}
$$

类似于得到(56) 的方法, 对任一给定正整数 m, 列出用 $\boldsymbol{x}$ 的不变量 I_1、p_6 和 q_6 构成的所有可能 m 次齐次项, 比如 $m = 12$ 时的 6 个齐次项为

$$
\begin{cases}
I_1^{12} \to \lceil \boldsymbol{k}^{\otimes 12} \rfloor,\quad p_6^2 \to \lceil \boldsymbol{P}_{6,6}^{\otimes 2} \rfloor,\quad q_6^2 \to \lceil \boldsymbol{Q}_{6,6}^{\otimes 2} \rfloor, \\
I_1^6 p_6 \to \lceil \boldsymbol{k}^{\otimes 6} \otimes \boldsymbol{P}_{6,6} \rfloor,\quad I_1^6 q_6 \to \lceil \boldsymbol{k}^{\otimes 6} \otimes \boldsymbol{Q}_{6,6} \rfloor,\quad p_6 q_6 \to \lceil \boldsymbol{P}_{6,6} \otimes \boldsymbol{Q}_{6,6} \rfloor \cdot
\end{cases}
\tag{66}
$$

检查上述 6 项是否线性无关等价于检查相应的生成函数

$$
\begin{cases}
g_1(x) = \boldsymbol{k}^{\otimes 12} \cdot \boldsymbol{G}_{12}(x) = 2^{12} = \begin{pmatrix} 24 \\ 12 \end{pmatrix}^{-1} \boldsymbol{P}_{12,0} \cdot \boldsymbol{G}_{12}(x), \\
g_2(x) = \boldsymbol{P}_{6,6}^{\otimes 2} \cdot \boldsymbol{G}_{12}(x) = [\boldsymbol{P}_{6,6} \cdot \boldsymbol{G}_6(x)]^2 = 2^{10}(2 + x^{12} + x^{-12}), \\
g_3(x) = \boldsymbol{Q}_{6,6}^{\otimes 2} \cdot \boldsymbol{G}_{12}(x) = [\boldsymbol{Q}_{6,6} \cdot \boldsymbol{G}_6(x)]^2 = 2^{10}(2 - x^{12} - x^{-12}), \\
g_4(x) = [\boldsymbol{k}^{\otimes 6} \cdot \boldsymbol{G}_6(x)][\boldsymbol{P}_{6,6} \cdot \boldsymbol{G}_6(x)] = 2^{11}(x^6 + x^{-6}) = \\
\qquad \begin{pmatrix} 24 \\ 6 \end{pmatrix}^{-1} \boldsymbol{P}_{12,6} \cdot \boldsymbol{G}_{12}(x), \\
g_5(x) = [\boldsymbol{k}^{\otimes 6} \cdot \boldsymbol{G}_6(x)][\boldsymbol{Q}_{6,6} \cdot \boldsymbol{G}_6(x)] = \mathrm{i}2^{11}(x^6 - x^{-6}) = \\
\qquad - \begin{pmatrix} 24 \\ 6 \end{pmatrix}^{-1} \boldsymbol{Q}_{12,6} \cdot \boldsymbol{G}_{12}(x), \\
g_6(x) = [\boldsymbol{P}_{6,6} \cdot \boldsymbol{G}_6(x)][\boldsymbol{Q}_{6,6} \cdot \boldsymbol{G}_6(x)] = \mathrm{i}2^{10}(x^{12} - x^{-12}) = \\
\qquad 2^{-1} \boldsymbol{Q}_{12,12} \cdot \boldsymbol{G}_{12}(x)
\end{cases}
\tag{67}
$$

是否线性相关• 显然 $g_1 = 2(g_2 + g_3)$, 故 g_1、g_4、g_5、g_6 和 $g_2(x) - g_3(x) = \boldsymbol{P}_{12,12} \cdot \boldsymbol{G}_{12}(x)$ 是线性无关的, 相应的有 $\boldsymbol{P}_{12,0}$、$\boldsymbol{P}_{12,6}$、$\boldsymbol{Q}_{12,6}$、$\boldsymbol{P}_{12,12}$ 和 $\boldsymbol{P}_{12,12}$ 为线性无关• 该结果与(42) 相同•

最后, 注意到当且仅当 $\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0$ 时三维 ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$ 是 $\{\mathscr{K}\}$ 和 $\{\mathscr{K}_h\}$ 不变的, 即要求 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 是常数• 为完备记, 给出

$$
\{\mathscr{K}\} \text{ 和 } \{\mathscr{K}_h\}:\ \Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 \cdot \tag{68}
$$

4 各种点群对称性约束下的三维 CODF 的张量傅立叶展开

由(42)~(50)、(57)~(61)和(68)给出的三维不可约张量和三维 ODF 不可约张量傅立叶展开的约束形式，可以直接地得到各种宏观点群对称性(除了两类二十面体系对称性)下三维 CODF 张量傅立叶展开的约束形式。

例如，由约束形式(58)的线性无关性，$\left\{\ulcorner O_h \lrcorner\right\}$、$\left\{\ulcorner H_h \lrcorner\right\}$、$\left\{O_h^{\otimes 3}, H_h^{\otimes 2}\right\}$等分别构成 $\mathscr{T}_4^3(\mathscr{O})$、$\mathscr{T}_6^3(\mathscr{O})$、$\mathscr{T}_{12}^3(\mathscr{O})$ 等的一组基。 考虑到(28)，可以把系数张量 $\boldsymbol{A}_4$、$\boldsymbol{A}_6$、$\boldsymbol{A}_{12}$ 等表示成 $\boldsymbol{A}_4 = a_4 \otimes \ulcorner O_h \lrcorner$、$\boldsymbol{A}_6 = a_6 \otimes \ulcorner \boldsymbol{H}_h \lrcorner$、$\boldsymbol{A}_{12} = a_{12} \otimes \ulcorner O_h^{\otimes 3} \lrcorner + b_{12} \otimes \ulcorner \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2} \lrcorner$ 等，其中 $\boldsymbol{a}_4 \in \mathscr{T}_4^3$、$\boldsymbol{a}_6 \in \mathscr{T}_6^3$ 以及 $\boldsymbol{a}_{12}$、$\boldsymbol{b}_{12} \in \mathscr{T}_{12}^3$ 是不可约张量。 于是从(58)、(28)和(24)，可以将 $\mathscr{O}$ 型多晶的 CODF 张量傅立叶展开的约束形式写成：

$$
\begin{aligned}
\mathscr{O}:\quad \Phi(\boldsymbol{R}) = {} & \Phi_0 + \boldsymbol{a}_4 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 4} \boldsymbol{O}_h + \boldsymbol{a}_6 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 6} \boldsymbol{H}_h + \boldsymbol{a}_8 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 8} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} + \boldsymbol{a}_9 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 9} (\boldsymbol{T}_h \otimes \boldsymbol{L}_h) + \\
& \boldsymbol{a}_{10} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 10} (\boldsymbol{O}_h \otimes \boldsymbol{H}_h) + (\boldsymbol{a}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 3} + \boldsymbol{b}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2}) + \\
& \boldsymbol{a}_{13} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 13} (\boldsymbol{O}_h \otimes \boldsymbol{T}_d \otimes \boldsymbol{L}_h) + \boldsymbol{a}_{14} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 14} (\boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} \otimes \boldsymbol{H}_h) + \boldsymbol{a}_{15} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 15} (\boldsymbol{H}_h \boldsymbol{T}_d \otimes \boldsymbol{L}_h) + \\
& [\boldsymbol{a}_{16} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 16} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 4} + \boldsymbol{b}_{16} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 16} (\boldsymbol{O}_h \otimes \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2})] + \boldsymbol{a}_{17} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 17} (\boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} \boldsymbol{T}_d \otimes \boldsymbol{L}_h) + \\
& [\boldsymbol{a}_{18} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 18} (\boldsymbol{O}_h^{\otimes 3} \otimes \boldsymbol{H}_h) + \boldsymbol{b}_{18} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 18} \boldsymbol{H}_h^{\otimes 3} + \boldsymbol{c}_{18} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 18} (\boldsymbol{T}_d^{\otimes 2} \otimes \boldsymbol{L}_h^{\otimes 2})] + \cdots
\end{aligned}
\tag{69}
$$

形式上，仅仅是把(58)中的系数标量 a_4、a_6、a_{12}、b_{12} 等分别换成系数不可约量 $\boldsymbol{a}_4 \in \mathscr{T}_4^3$、$\boldsymbol{a}_6 \in \mathscr{T}_6^3$、$\boldsymbol{a}_{12} \in \mathscr{T}_{12}^3$、$\boldsymbol{b}_{12} \in \mathscr{T}_{12}^3$ 等。 值得注意的是，(69)中张量主项 $\boldsymbol{A}_1$、$\boldsymbol{A}_2$、$\boldsymbol{A}_3$、$\boldsymbol{A}_7$ 和 $\boldsymbol{A}_{11}$ 不再出现，各非零主项 $\boldsymbol{A}_4$、$\boldsymbol{A}_6$、$\boldsymbol{A}_8$、$\boldsymbol{A}_9$、$\boldsymbol{A}_{10}$、$\boldsymbol{A}_{13}$、$\boldsymbol{A}_{14}$、$\boldsymbol{A}_{15}$ 和 $\boldsymbol{A}_{17}$ 都仅包含一个简单不可约张量，非零主项 $\boldsymbol{A}_{12}$ 和 $\boldsymbol{A}_{16}$ 也只包含两个简单不可约张量。

Adams[4] 等给出 $\mathscr{O}$ 型多晶的 CODF 张量傅立叶展开的 12 个主项(到 $\boldsymbol{A}_{12}$ 为止)。 而通过本文的研究，可以确定约束形式(69)中的任意前有限项。

将(42)~(50)、(57)、(59)~(61)和(68)中的标量系数换成不可约张量系数，可以直接得到各种点群(除了两类二十面体群)对称性下三维 CODF 张量傅立叶展开的约束形式

$$
\begin{aligned}
\mathscr{O}_h:\quad \Phi(\boldsymbol{R}) = {} & \Phi_0 + \boldsymbol{a}_4 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 4} \boldsymbol{O}_h + \boldsymbol{a}_6 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 6} \boldsymbol{H}_h + \boldsymbol{a}_8 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 8} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} + \boldsymbol{a}_{10} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 10} (\boldsymbol{O}_h \otimes \boldsymbol{H}_h) + \\
& (\boldsymbol{a}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 3} + \boldsymbol{b}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2}) + \boldsymbol{a}_{14} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 14} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} + [\boldsymbol{a}_{16} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 16} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 4} + \\
& \boldsymbol{b}_{16} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 16} (\boldsymbol{O}_h \otimes \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2})] + [\boldsymbol{a}_{18} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 18} (\boldsymbol{O}_h^{\otimes 3} \otimes \boldsymbol{H}_h) + \boldsymbol{b}_{18} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 18} (\boldsymbol{H}_h^{\otimes 3})] + \\
& [\boldsymbol{a}_{20} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 20} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 5} + \boldsymbol{b}_{20} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 20} (\boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} \otimes \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2})] + \\
& [\boldsymbol{a}_{22} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 22} (\boldsymbol{O}_h^{\otimes 4} \otimes \boldsymbol{H}_h) + \boldsymbol{b}_{22} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 22} (\boldsymbol{O}_h \otimes \boldsymbol{H}_h^{\otimes 3})] + \\
& [\boldsymbol{a}_{24} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 24} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 6} + \boldsymbol{b}_{24} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 24} (\boldsymbol{O}_h^{\otimes 3} \otimes \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2}) + \boldsymbol{c}_{24} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 24} (\boldsymbol{H}_h^{\otimes 4})] + \cdots,
\end{aligned}
\tag{70}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathscr{T}_h:\quad \Phi(\mathrm{R}) = {} & \Phi_0 + \boldsymbol{a}_4 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 4} \boldsymbol{O}_h + (\boldsymbol{a}_6 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 6} \boldsymbol{H}_h + \boldsymbol{b}_6 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 6} \boldsymbol{L}_h) + \boldsymbol{a}_8 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 8} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} + \\
& [\boldsymbol{a}_{10} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 10} (\boldsymbol{O}_h \otimes \boldsymbol{H}_h) + \boldsymbol{b}_{10} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 10} (\boldsymbol{O}_h \otimes \boldsymbol{L}_h)] + [\boldsymbol{a}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 3} + \\
& \boldsymbol{b}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{H}_h^{\otimes 2} + \boldsymbol{c}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{L}_h^{\otimes 2} + \boldsymbol{d}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} (\boldsymbol{H}_h \otimes \boldsymbol{L}_h)] + \cdots,
\end{aligned}
\tag{71}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathscr{T}_d:\quad \Phi(\boldsymbol{R}) = {} & \Phi_0 + \boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 3} \boldsymbol{T}_d + \boldsymbol{a}_4 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 4} \boldsymbol{O}_h + \boldsymbol{a}_6 \boldsymbol{R}^{\otimes 6} \boldsymbol{T}_d^{\otimes 2} + \boldsymbol{a}_7 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 7} (\boldsymbol{T}_d \otimes \boldsymbol{O}_h) + \\
& \boldsymbol{a}_8 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 8} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} + \boldsymbol{a}_9 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 9} \boldsymbol{T}_d^{\otimes 3} + \boldsymbol{a}_{10} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 10} (\boldsymbol{T}_d^{\otimes 2} \otimes \boldsymbol{O}_h) + \\
& \boldsymbol{a}_{11} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 11} (\boldsymbol{T}_d \otimes \boldsymbol{O}_h^{\otimes 2}) + (\boldsymbol{a}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{T}_d^{\otimes 4} + \boldsymbol{b}_{12} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 12} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 3}) + \\
& \boldsymbol{a}_{13} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 13} (\boldsymbol{T}_d^{\otimes 3} \otimes \boldsymbol{O}_h) + \boldsymbol{a}_{14} \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 14} (\boldsymbol{T}_d^{\otimes 2} \otimes \boldsymbol{O}_h^{\otimes 2}) + \cdots,
\end{aligned}
\tag{72}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathscr{T}:\quad \Phi(\mathrm{R}) = {} & \Phi_0 + \boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 3} \boldsymbol{T}_d + \boldsymbol{a}_4 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 4} \boldsymbol{O}_h + (\boldsymbol{a}_6 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 6} \boldsymbol{T}_d^{\otimes 2} + \boldsymbol{b}_6 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 6} \boldsymbol{L}_h) + \\
& \boldsymbol{a}_7 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 7} (\boldsymbol{T}_d \boldsymbol{O}_h) + \boldsymbol{a}_8 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 8} \boldsymbol{O}_h^{\otimes 2} + [\boldsymbol{a}_9 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 9} \boldsymbol{T}_d^{\otimes 3} + \boldsymbol{b}_9 \cdot \boldsymbol{R}^{\otimes 9} (\boldsymbol{T}_d \otimes \boldsymbol{L}_h)] +
\end{aligned}
$$

$$[a_{10}\cdot R^{\otimes 10}(T_d^{\otimes 2}\otimes O_h)+b_{10}\cdot R^{\otimes 10}(O_h\otimes L_h)]+a_{11}\cdot R^{\otimes 11}(T_d\otimes O_h^{\otimes 2})+$$
$$[a_{12}\cdot R^{\otimes 12}T_d^{\otimes 4}+b_{12}\cdot R^{\otimes 12}O_h^{\otimes 3}+c_{12}\cdot R^{\otimes 12}L_h^{\otimes 2}+d_{12}\cdot R^{\otimes 12}(T_d^{\otimes 2}\otimes L_h)]+\cdots \tag{73}$$

$\mathscr{C}_m(m\in\mathscr{Z}^+)$, 由 $R(2\pi/mk)$ 生成:

$$\Phi(R)=\Phi_0+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{a_{n,0}\otimes P_{n,0}+\sum_{q=1}^{[n/m]}(a_{n,q}\otimes P_{n,qm}+b_{n,q}\otimes Q_{n,qm})\right\}\cdot R^{\times n}. \tag{74}$$

$\mathscr{C}_{m\mathrm{v}}(m\in\mathscr{Z}^+,\ m\geqslant 2)$, 由 $R(2\pi/mk)$, R_2 生成:

$$\Phi(R)=\Phi_0+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{a_{n,0}\otimes P_{n,0}+\sum_{q=1}^{[n/m]}a_{n,q}\otimes P_{n,qm}\right\}\cdot R^{\times n}. \tag{75}$$

$\mathscr{C}_{m\mathrm{h}}(m=$ 偶数 $\in\mathscr{Z}^+)$ 和 $\mathscr{C}_{m\mathrm{i}}(m=$ 奇数 $\in\mathscr{Z}^+)$, 由 $R(2\pi/mk)$, $-\mathbf{1}$ 生成:

$$\Phi(R)=\Phi_0+\sum_{l=1}^{\infty}\left\{a_{2l,0}\otimes P_{2l,0}+\sum_{q=1}^{[2l/m]}(a_{2l,q}\otimes P_{2l,qm}+b_{2l,q}\otimes Q_{2l,qm})\right\}\cdot R^{\times 2l}. \tag{76}$$

$\mathscr{C}_{m\mathrm{h}}(m=$ 奇数 $\in\mathscr{Z}^+)$ 和 $\mathscr{C}_{m\mathrm{i}}(m=$ 偶数 $\in\mathscr{Z}^+)$, 由 $-R(\pi/mk)$ 生成:

$$\Phi(R)=\Phi_0+\sum_{l=1}^{\infty}\left\{a_{2l,0}\otimes P_{2l,0}+\sum_{q=1}^{[l/m]}(a_{2l,q}\otimes P_{2l,2qm}+b_{2l,q}\otimes Q_{2l,2qm})\right\}\cdot R^{\times 2l}+$$
$$\sum_{l=0}^{\infty}\left\{\sum_{q=0}^{(2l+1-m)/2}(a_{2l+1,q}\otimes P_{2l+1,(2q+1)m}+b_{2l+1,q}\otimes Q_{2l+1,(2q+1)m})\right\}\cdot R^{\times 2l+1}. \tag{77}$$

$\mathscr{D}_m(m\in\mathscr{Z}^+,\ m\geqslant 2)$, 由 $R(\pi/mk)$, $-R_2$ 生成:

$$\Phi(R)=\Phi_0+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{e(n)a_{n,0}\otimes P_{n,0}+\right.$$
$$\left.\sum_{q=1}^{[n/m]}[e(n)a_{n,q}\otimes P_{n,qm}+o(n)b_{n,q}\otimes Q_{n,qm}]\right\}\cdot R^{\times n}. \tag{78}$$

$\mathscr{D}_{m\mathrm{h}}(m=$ 偶数 $\in\mathscr{Z}^+)$ 和 $\mathscr{D}_{m\mathrm{d}}(m=$ 奇数 $\in\mathscr{Z}^+,\ m\geqslant 3)$, 由 $R(2\pi/mk)$, R_2, $-\mathbf{1}$ 生成:

$$\Phi(R)=\Phi_0+\sum_{l=1}^{\infty}\left\{a_{2l,0}\otimes P_{2l,0}+\sum_{q=1}^{[2l/q]}a_{2l,q}\otimes P_{2l,qm}\right\}\cdot R^{\times 2l}. \tag{79}$$

$\mathscr{D}_{m\mathrm{h}}(m=$ 奇数 $\in\mathscr{Z}^+,\ m\geqslant 3)$ 和 $\mathscr{D}_{m\mathrm{d}}(m=$ 偶数 $\in\mathscr{Z}^+)$, 由 $-R(2\pi/mk)$, R_2 生成:

$$\Phi(R)=\Phi_0+\sum_{l=1}^{\infty}\left\{a_{2l,0}\otimes P_{2l,0}+\sum_{q=1}^{[l/m]}a_{2l,q}\otimes P_{2l,2qm}\right\}\cdot R^{\times 2l}+$$
$$\sum_{l=0}^{\infty}\left\{\sum_{q=0}^{(2l+1-m)/2}a_{2l+1,q}\otimes P_{2l+1,(2q+1)m}\right\}\cdot R^{\times 2l+1}. \tag{80}$$

其它的, 分别由(33)式给出 $\{\mathscr{C}_\infty\}$ 和 $\{\mathscr{C}_{\infty\mathrm{v}}\}$ 下CODF的约束张量傅立叶展开, 在(33)中取 $a_m=0$(m 为奇数 $\in\mathscr{Z}$) 给出了 $\{\mathscr{C}_{\infty\mathrm{h}}\}$, $\{\mathscr{D}_\infty\}$ 和 $\{\mathscr{D}_{\infty\mathrm{h}}\}$ 下的约束展开; 对 $\{\mathscr{K}\}$ 和 $\{\mathscr{K}_\mathrm{h}\}$ 则恒有 $\Phi(R)=\Phi_0$ 是常数. 从(74)~(80)还可以简单地写出在7类六方系 $\mathscr{C}_6$、$\mathscr{C}_{3\mathrm{h}}$、$\mathscr{C}_{6\mathrm{h}}$、$\mathscr{D}_6$、$\mathscr{C}_{6\mathrm{v}}$、$\mathscr{D}_{3\mathrm{h}}$、

$\mathscr{D}_{6h}$ 和 7 类四方系 $\mathscr{C}_4$、$\mathscr{C}_{2i}$、$\mathscr{C}_{4h}$、$\mathscr{D}_4$、$\mathscr{C}_{4v}$、$\mathscr{D}_{2d}$、$\mathscr{D}_{4h}$ 下 CODF 的约束张量傅立叶展开•

大多数金属材料属于立方或六方多晶,其中铁电金属在高科技中更具有日益增长的重要性• 例如,钡钛合金是最常用的铁电体之一,它的晶体点群是六方的• 当钡钛合金加热到它的铁电居里温度(120℃)时,它的晶体点群变成立方的并且铁电性质消失• 因此,研究六方、四方和立方多晶的 CODF 张量傅立叶展开具有特别重要的意义•

5 结 论

本文建立了三维晶体定向分布函数(CODF)张量傅立叶展开的一般形式,构造了各类点群对称性(除了两类二十面体系对称性)下(i)各阶二维和三维不可约张量、(ii)二维和三维定向分布函数(ODF)的张量傅立叶展开和(iii)二维和三维 CODF 的张量傅立叶展开的约束形式• 这些结果构成了内变量框架下研究非均匀材料不可逆行为的理性基础•

在这两部分组成的文章中,还深入研究了不可约张量,包括它的简单而统一的结构和在各种点群对称性下的约束形式• 这些丰富的结果非常有用,对涉及高阶张量的问题甚至是不可缺少的•

准晶由于其非凡的物理性质,已经引起越来越多人的注意• 二十面体系的两类对称性 $\mathscr{I}$ 和 $\mathscr{I}_h$ 对应于准晶的对称性,研究这类材料对称性约束问题(比如整基、张量函数表示、不可约张量、ODF 和 CODF)变得日益重要•

[参 考 文 献]

[1] Molinari A, Canova G R, Ahzi S. A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity[J]. Acta Metall Mater, 1987, **35**(12): 2983—2994.

[2] Harren S V, Asaro R J. Nonuniform deformations in polycrystals and aspects of the validity of the Taylor model[J]. J Mech Phys Solids, 1989, **37**(2): 191—232.

[3] Adams B L, Field D P. A statistical theory of creep in polycrystalline materials[J]. Acta Metall Mater, 1991, **39**(10): 2405—2417.

[4] Adams B L, Boehler J P, Guidi M, et al. Group theory and representation of microstructure and mechanical behaviour of polycrystals[J]. J Mech Phys Solids, 1992, **40**(4): 723—737.

[5] Hahn T. Space_Group Symmetry[M]. In: International Tables for Crystallography, Vol. A, 2nd Ed. Dordrecht: D Reidel. 1987.

[6] Zheng Q S. Theory of representations for tensor functions: A unified invariant approach to constitutive equations[J]. Appl Mech Rew, 1994, **47**(11): 554—587.

[7] Barut A O, Raczka R. Theory of Group Representations and Applications[M]. 2nd Ed. Warszawa: Polish Scientific Publishers, 1980.

[8] Br cker T, Tom Dieck T. Representations of Compact Lie Groups[M]. New York: Springer_Verlag, 1985.

[9] Murnagham F D. The Theory of Group Representations[M]. Baltimore, MD: Johns Hopkins Univ Press, 1938.

[10] Zheng Q S, Spencer A J M. On the canonical representations for Kronecker powers of orthogonal tensors with applications to material symmetry problems[J]. Int J Engng Sci, 1993, **31**(4): 617—635.

[11] Korn G A, Korn T M. Mathematical Handbook for Scientists and Engineers[M]. 2nd Ed. New York: McGraw_Hill, 1968.

[12] Eringen A C. Mechanics of Continua[M]. 2nd Ed. New York: Wiley, 1980.

[13] Zhang J M, Rychlewski J. Structural tensors for anisotropic solids[J]. Arch Mech, 1990, **42**: 267—277.

[14] Zheng Q S, Boehler J P. The description, classification, and reality of material and physical symmetries[J]. Acta Mech, 1994, **102**(1_4): 73—89.

[15] Smith G F, Smith M M, Rivlin R S. Integrity bases for a symmetric tensor and a vector_ the crystal classes[J]. Arch Ratl Mech Anal, 1963, **12**(1): 93—133.

[16] Smith G F. Constitutive Equations for Anisotropic and Isotropic Materials[M]. Amsterdam: North_Holland, 1994.

[17] Spencer A J M. A note on the decomposition of tensors into traceless symmetric tensors[J]. Int J Engng Sci, 1970, **8**(8): 475—481.

[18] Hannabuss K C. The irreducible components of homogeneous functions and symmetric tensors[J]. J Inst Maths Applics, 1974, **14**(11): 83—88.

Orientation Distribution Functions for Microstructures of Heterogeneous Materials (Ⅱ)—Crystal Distribution Functions and Irreducible Tensors Restricted by Various Material Symmetries

ZHENG Quan_shui[1], FU Yi_bin[2]

(1. Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, P R China;
2. Department of Mathematics, University of Keele, Staffordshire, ST5 5BG, UK)

Abstract: The explicit representations for tensorial Fourier expansion of 3_D crystal orientation distribution functions (CODFs) are established. In comparison with that the coefficients in the m th_term of the Fourier expansion of a 3_D ODF make up just a single irreducible m th order tensor, the coefficients in the m th term of the Fourier expansion of a 3_D CODF constitute generally so many as $2m+1$ irreducible m th order tensors. Therefore, the restricted forms of tensorial Fourier expansions of 3_D CODFs imposed by various micro_ and macro_scopic symmetries are further established, and it is shown that in most cases of symmetry the restricted forms of tensorial Fourier expansions of 3_D CODFs contain remarkably reduced numbers of m th order irreducible tensors than the number $2m+1$. These results are based on the restricted forms of irreducible tensors imposed by various point_group symmetries, which are also thoroughly investigated in the present part in both 2_ and 3_D spaces.

Key words: crystal orientation distribution function; irreducible tensor; Fourier expansion; microstructure; material symmetry