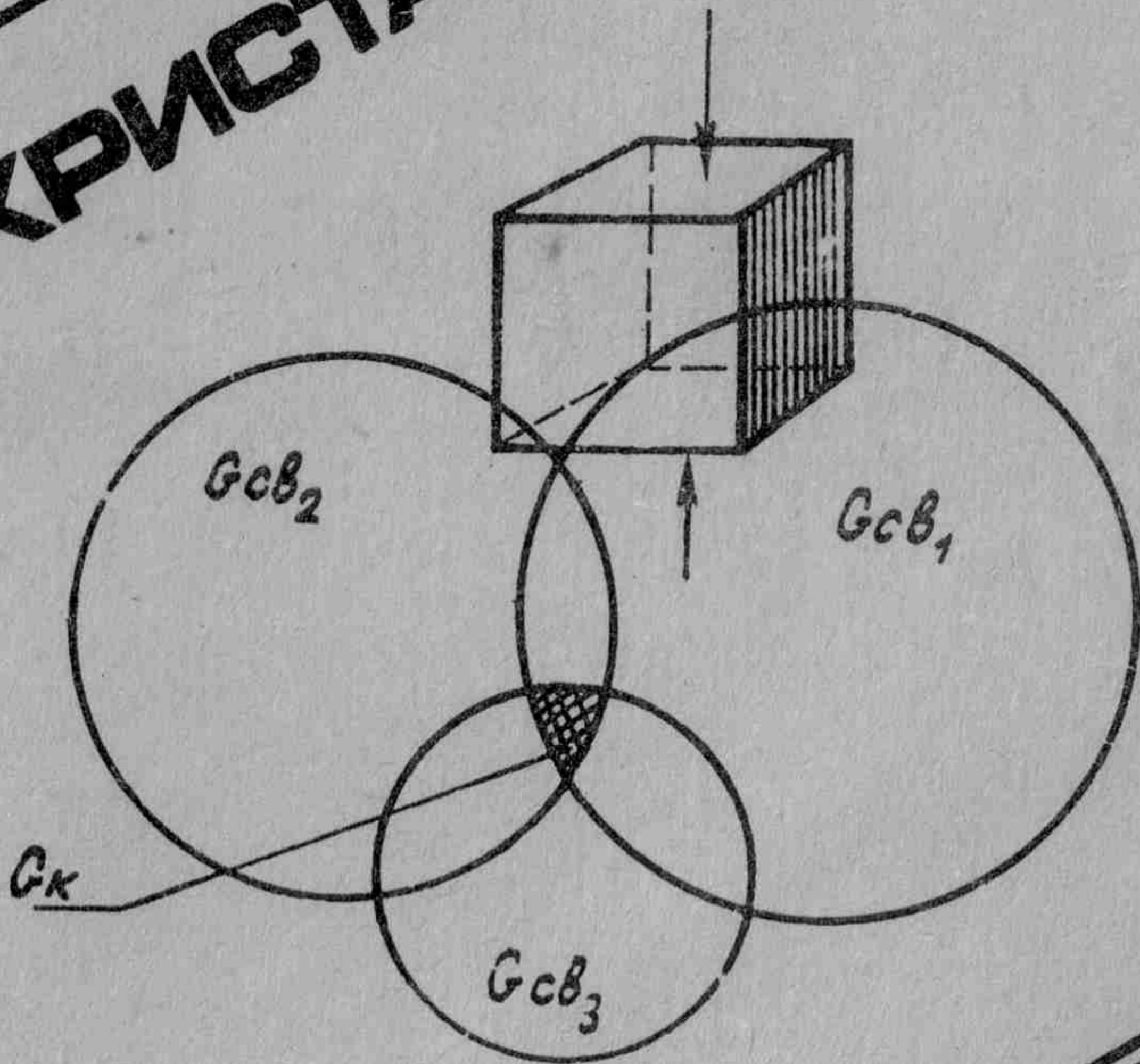


В.Ф. НАЗВАНОВ

ВВЕДЕНИЕ В КРИСТАЛЛОФИЗИКУ



В.Ф. Названов

В.Ф. Названов

ВВЕДЕНИЕ В КРИСТАЛЛОФИЗИКУ

Рекомендовано Комитетом по высшей школе
Миннауки России в качестве учебного по-
собия для студентов высших учебных заве-
дений, обучающихся по направлению "Физика"
и специальностям "Физика твердого тела",
"Квантовая электроника /в том числе опто-
электроника/", "Кристаллофизика"

Издательство Саратовского университета

УДК 539.2:548.0

Н19

Рецензенты:

кафедра физики Саратовского государственного технического университета (заведующий кафедрой профессор Ю.А.Зорькин); доктор физико-математических наук, профессор Э.А.Семенов (НПО "Алмаз"); кандидат технических наук, старший научный сотрудник В.Н.Посадский (НПО "Алмаз").

I604110000-56

Н 64-93
176(02) - 93

© В.Ф. Названов

ISBN 5-292-01402-8

ПРЕДИСЛОВИЕ

Лучше стремиться к знаниям,
чем к деньгам .

Притча

В последние годы быстрое развитие ряда отраслей науки и техники, таких, как квантовая, микро-, опто- и акустоэлектроника, нелинейная оптика, полупроводниковое приборостроение и др., связано с использованием разнообразных физических свойств кристаллов. Этот факт вызывает большую потребность в книгах по кристаллофизике - как монографиях, так и учебных пособиях, в особенности в книгах, пригодных для первоначального ознакомления с предметом.

Этой цели, по замыслу автора, должно служить учебное пособие, написанное им на основе односеместрового курса лекций, читаемого ряд лет на физическом факультете Саратовского госуниверситета.

Пользуясь предоставленной возможностью, я выражаю искреннюю благодарность рецензентам - профессору Ю.А. Зорькину и сотрудникам возглавляемой им кафедры, а также доктору физико-математических наук, профессору Э.А.Семенову и кандидату технических наук В.Н.Посадскому за ценные замечания и советы, способствовавшие улучшению книги. Благодарю также профессора кафедры физики полупроводников СГУ А.Г.Рожка, доцента кафедры физики твердого тела С.Б.Везица и редактора издательства Е.И.Филиппову за все критические замечания в процессе работы над рукописью книги.

С благодарностью будут приняты все замечания и пожелания читателей.

Автор

ВВЕДЕНИЕ

Кристаллофизика исследует закономерности физических явлений в кристаллах, связанные с внутренней симметрией кристаллов и их дискретной атомной структурой.

А.В. Шубнико

Кристаллофизика является частью кристаллографии. Датой рождения кристаллографии и кристаллофизики считается 1669 год — год установления закона постоянства углов кристаллов /Нильс Стенсен/ и открытия эффекта двойного лучепреломления света в кристаллах /Э. Бартоли/. Кристаллография исследует свойства одиночных кристаллов и кристаллических агрегатов различных веществ; явления, протекающие в кристаллической среде; взаимодействие между кристаллом и окружающей средой; изменения, претерпеваемые кристаллом под влиянием тех или иных воздействий. Она занимается изучением многообразия кристаллов аналогично тому, как ботаника, зоология и химия изучают многообразие растений, животных и химических соединений.

Кристаллофизика изучает физические свойства кристаллов как однородной непрерывной и анизотропной среды специфическим методом — симметрией. При этом основными задачами кристаллофизики являются: исследование симметрии физических явлений в кристаллах и установление соотношений между симметрией физического явления и симметрией кристалла. По В. Фойгту "... в кристаллах могут обнаруживаться целые области явлений, которые у других тел совершенно отсутствуют, причем некоторые области, весьма разнообразно и изящно проявляющиеся у кристаллов, выступают у прочих тел лишь в унылых, монотонных средних значениях. Ни в какой другой области гармония физических законо-

мерностей не звучит в столь полных и богатых аккордах, как в кристаллофизике."

Кристаллами называются твердые тела, обладающие упорядоченной трехмерно-периодической пространственной атомной структурой и имеющие вследствие этого при определенных условиях образования форму многогранников. В кристалле мы различаем три вида элементов ограничения: грани, ребра и вершины. Числа элементов ограничения связаны между собой следующей зависимостью, найденной Эйлером:

$$V + G - P = 2, \quad /3.1/$$

где V — число вершин; G — число граней; P — число ребер.

В данном пособии основное внимание уделено идеальным кристаллам /как однородным непрерывным и анизотропным средам или дисконтинууму/. Идеальным считается кристалл, в котором: 1/ каждый атом занимает положение, соответствующее упорядоченной периодической структуре; 2/ нет атомов, не являющихся частью этой структуры. Идеальные кристаллы отличаются наличием как ближнего, так и дальнего порядков в расположении атомов /наличием трансляционной симметрии/..

Твердые тела, у которых нет заметного порядка в расположении атомов, называются некристаллическими /неупорядоченными, в частном случае аморфными/. В последние годы активно изучаются так называемые квазикристаллы — системы, в которых существуют запрещенные для идеального кристалла оси симметрии пятого порядка /см., напр., статья Д. Гратиа¹/.. Особое место в физике конденсированных сред занимает жидкие кристаллы.

В реальных кристаллах могут наблюдаться различные типы дефектов /несовершенств/ структуры: 1/ точечные /или нуль-мерные/ дефекты /вакансии, атомы в междоузлиях, атомы в узлах "чужой" подрешетки, примесные атомы в узлах или междоузлиях, центры окрашивания, парные вакансии/; 2/ линейные /или одномерные/ нарушения периодичности /дислокации, цепочки точечных дефектов/; 3/ поверхностные /или двумерные/ дефекты /границы зерен и блоков, двойниковые границы, дефекты упаковки, поверхность кристалла/; 4/ объемные /или трехмерные/ дефекты /поры, включения другой фазы, примесные скопления/. Условно к дефектам кристалла можно отнести также фононы, электроны и дырки, фотоны, экситоны, магноны, плазмоны и другие квазичастицы.

¹/ Гратиа Д. Квазикристаллы. УФН, 1988. Т. 156. Вып. 2. С.347-364.

Глава I. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОГРАННИКОВ

Наиболее поразительным примером симметрии в неорганическом мире являются кристаллы.

Герман Вейль

I.1. Определение симметрии

Пьер Кюри писал в конце прошлого века: "Я думаю, что в изучение физических явлений представляло бы интерес ввести соображения симметрии, столь привычные для кристаллографов... Физики часто пользуются условиями, вытекающими из симметрии явления, но обычно пренебрегают точным определением симметрии явления, потому что достаточно часто эти условия оказываются простыми и *a priori* почти очевидными." К настоящему времени эпоха игнорирования идей симметрии физиками ушла в прошлое.

По Г. Вейлю "...симметрия - в широком или узком смысле в зависимости от того, как вы определите значение этого понятия, - является той идеей, посредством которой человек на протяжении веков пытался постичь и создать порядок, красоту и совершенство." В "Словаре русского языка" С.И. Ожегова читаем: "Симметрия - соразмерность, пропорциональность частей чего-нибудь, расположенных по обе стороны от середины, центра."

Приведем несколько необходимых для изложения курса определений.

1. Геометрической симметрией кристаллического пространства /или фигуры/ называется свойство пространства /фигуры/ совмещаться с самим собой путем некоторых симметрических преобразований /или операций симметрии/.

2. Операциями или преобразованиями симметрии называются отражения, вращения, переносы, приводящие пространство /фигуру/ в совмещение с самим собой.

3. Симметричной фигурой /или симметричным многогранником/ называется фигура /многогранник/, которая может совмещаться сама с собой в результате симметрических преобразований. Симметричная фигура делится на равные и одинаково расположенные части.

4. Элементы симметрии - это вспомогательные образы /точки, прямые линии, плоскости/, с помощью которых обнаруживается симметрия фигур /или кристаллического пространства/.

5. Части фигуры, которые обмениваются местами при симметрических преобразованиях, называются кристаллографически равными или просто равными /соответственными/.

6. Симметрические преобразования можно разделить на два типа: 1/ конечные или точечные, при которых хотя бы одна точка фигуры /пространства/ остается на месте; 2/ бесконечные или пространственные, при которых не остается на месте ни одна точка фигуры.

Конечные симметрические преобразования соответствуют симметрии идеальных кристаллических многогранников /симметрии внешней формы кристаллов/, бесконечные - симметрии кристаллических структур /внутренней симметрии кристаллов/.

7. Асимметричной фигурой называется фигура, не имеющая ни одного элемента симметрии. Такая фигура не делится на равные части, она совмещается с собой только так называемой единичной операцией /операцией отождествления/, т.е. оставлением фигуры на месте.

Асимметрия является частным случаем диссимметрии.

8. Под диссимметрией будем понимать /по П. Кюри/ совокупность всех элементов симметрии, отсутствующих в фигуре.

Диссимметричной фигурой называется такая фигура, которая не может быть совмещена простым наложением со своим зеркальным изображением. Две диссимметричные фигуры, из которых одна является зеркальным изображением другой, называются энантиоморфными или зеркально-равными. Диссимметрия обнаруживает все те кристаллы, симметрия которых исчерпывается простыми осями /например, кристаллы кварца/.

9. Операции антисимметрии состоят из обыкновенных операций симметрии, сопровождаемых переменной второго знака /цвета/ фигуры.

Понятия об антиравенстве фигур и об операциях и элементах антисимметрии, введенные А.В. Шубниковым, значительно обогатили учение о симметрии кристаллов.

I.2. Элементы симметрии кристаллических многогранников

Симметрия кристаллических многогранников /внешней формы кристаллов/ описывается следующими элементами симметрии:

1/ плоскостью симметрии /обозначение по формуле симметрии Р, международное - m /;

2/ центром симметрии /С или $\bar{1}$ /;

3/ простыми поворотными осями симметрии L_n или n , где $n=1, 2, 3, 4, 6$ /. Оси симметрии пятого, седьмого и более высоких порядков несовместимы с наличием трансляционной симметрии в кристаллах.

4/ инверсионными осями симметрии $L\bar{n}$ или $\bar{n} = \bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$; при этом $\bar{1}=C$, $\bar{2}=m$ /. В теории групп, в отличие от кристаллографии, вместо инверсионных осей симметрии применяются зеркально-поворотные оси симметрии A_n , где $n=1, 2, 3, 4, 6$.

Приведем краткие определения указанных элементов симметрии.

Плоскость симметрии P/m - плоскость, которая делит фигуру две равные части, расположенные друг относительно друга как предмет и его зеркальное отражение /как правая и левая рука/.

Центр симметрии $\bar{1}$ /C/ - особая точка внутри фигуры, характеризующаяся тем, что любая прямая, проведенная через эту точку, встречает одинаковые /кристаллографически равные/ точки фигуры по обе стороны от точки на равных расстояниях.

Простая ось симметрии n -го порядка - прямая линия, при повороте вокруг которой на некоторый угол $\alpha_n = 360^\circ/n$, где n - порядок оси, фигура совмещается сама с собой. Порядок n оси симметрии называется, сколько раз фигура совместится сама с собой при полном обороте вокруг этой оси. Как уже указывалось, в кристаллических многогранниках могут встречаться оси только первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков. Это является следствием наличия дальнего порядка в кристалле.

Действительно, пусть через две точки /т./ дисконтинуума 2 и /рис. I.1/, отстоящие друг от друга на некоторый вектор трансляции проходят две принадлежат к одному семейству оси симметрии как минимум порядка n .

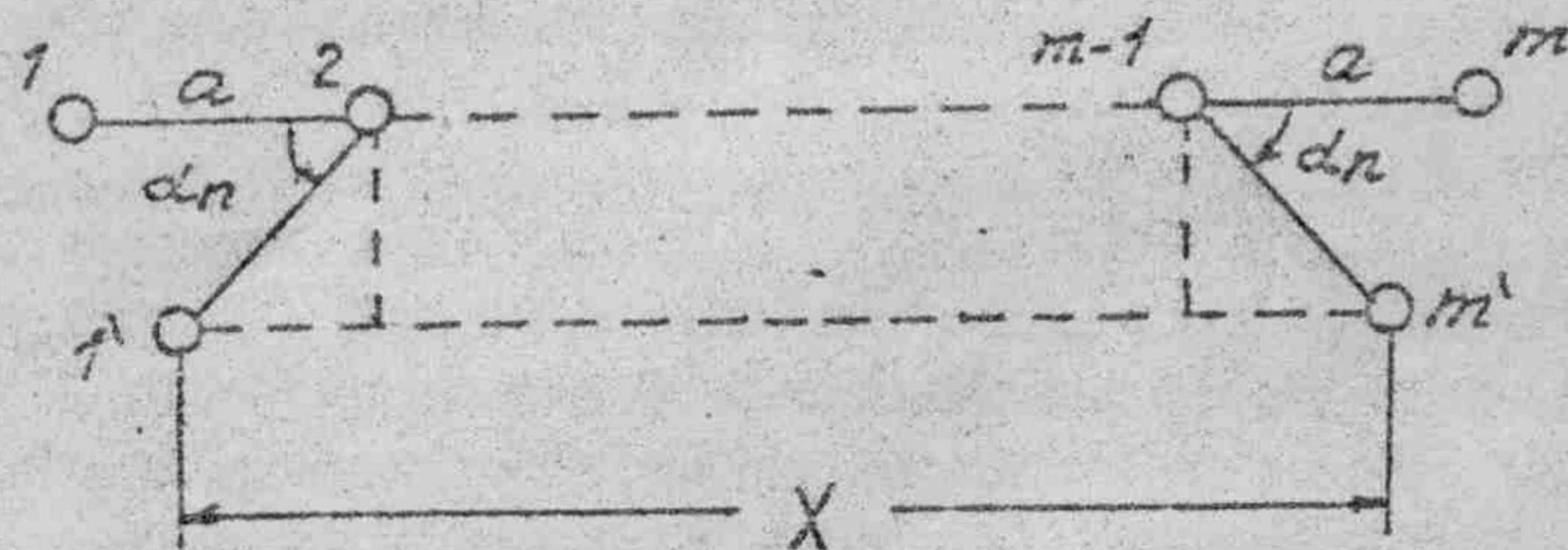


Рис. I.1. Схема кристаллического однородного дисконтинуума

Пусть α_n - минимальный угол, при повороте на который заданных осей кристаллический дисконтинуум совмещается сам с собой. Повернем дисконтинуум на этот угол вокруг оси, проходящей через т. 2. После такого поворота т. 1 займет положение 1'. После пово-

та вокруг оси, проходящей через т. / $m-1$ /, т. m займет положение m' . По условиям построения т. 1' и m' лежат на прямой, параллельной прямой 1- m . Расстояние между этими точками X в однородном дисконтинууме должно быть кратным периоду идентичности a , т.е. $X = pa$, где p - целое число. Из рис. I.1 следует

$$X = pa = (m-3)a + 2a \cos \alpha_n \quad /I.1/$$

откуда

$$p = m - 3 + 2 \cos \alpha_n$$

или

$$\cos \alpha_n = [3 + (p - m)] / 2 \quad /I.2/$$

где p и m - целые числа. Полученная формула определяет возможные значения углов поворота α_n , следовательно, порядок осей симметрии. Соответствующие разным значениям $|p - m|$ величины α_n и n приводятся в табл. I.1.

Таблица I.1

Величины α_n и порядок n осей симметрии кристаллов

$p - m$	$\cos \alpha_n$	α_n	n
-1	1	0	1
-2	1/2	$\pi/3$	6
-3	0	$\pi/2$	4
-4	-1/2	$2\pi/3$	3
-5	-1		2

Из табл. I.1 следует, что в идеальных кристаллах возможны лишь углы, равные $0^\circ + 2k\pi$, $60^\circ + 2k\pi$, $90^\circ + 2k\pi$, $120^\circ + 2k\pi$ и $180^\circ + 2k\pi$. Эти углы определяют соответственно простые оси симметрии первого, шестого, четвертого, третьего и второго порядков.

Инверсионные оси симметрии - это сочетание осей вращения и одновременного отражения /инверсии/ в центре симметрии, находящемся на оси симметрии.

Зеркально-поворотные оси симметрии представляют собой сочетание осей вращения и одновременного отражения в плоскости симметрии, перпендикулярной к оси вращения.

Таким образом, внешняя видимая симметрия кристаллов /кристаллических многогранников/ исчерпывающе описывается следующими элементами симметрии: плоскостью симметрии, центром симметрии, простыми поворотными осями симметрии и инверсионными осями симметрии.

Заметим здесь, что рассмотренные симметрические преобразования можно представить в матричном виде /см. далее в гл. 3/.

1.3. Кристаллографические категории, сингонии и системы осей координат

По симметрии и числу единичных направлений кристаллы делятся на три категории: высшую, среднюю и низшую.

О п р е д е л е н и е. Единичным /или особенным/ направлением называется единственное, не повторяющееся в кристаллическом многограннике направление /например, ось шестого порядка в шестигранной призме/.

У кристаллов высшей категории нет единичных направлений. Это высокосимметричные кристаллы /внешняя форма кристаллов - куб, октаэдр/. Многие физические свойства кристаллов изотропны.

Кристаллы средней категории имеют одно особенное направление, именно - одну ось симметрии порядка выше, чем 2. У этих кристаллов анизотропия физических свойств выражена гораздо сильнее, чем у кристаллов высшей категории. Характерные формы кристаллов средней категории - призмы, пирамиды.

К низшей категории относятся кристаллы, у которых нет осей симметрии порядка выше, чем 2, а единичных направлений несколько. Это наименее симметричные кристаллы с ярко выраженной анизотропией физических свойств.

Три категории кристаллов в свою очередь разделяются на семь сингоний /сингония - сходноугольность/. В сингонии объединяются те кристаллы, для которых одинакова кристаллографическая система координат и симметрия элементарных ячеек их кристаллических структур.

Кристаллографическая трехмерная система осей координат в анизотропной кристаллической среде /дисконтинууме/ выбирается в соответствии с симметрией среды. В общем случае - это косоугольная координатная система, с неодинаковыми масштабными отрезками по осям координат /рис. 1.2/.

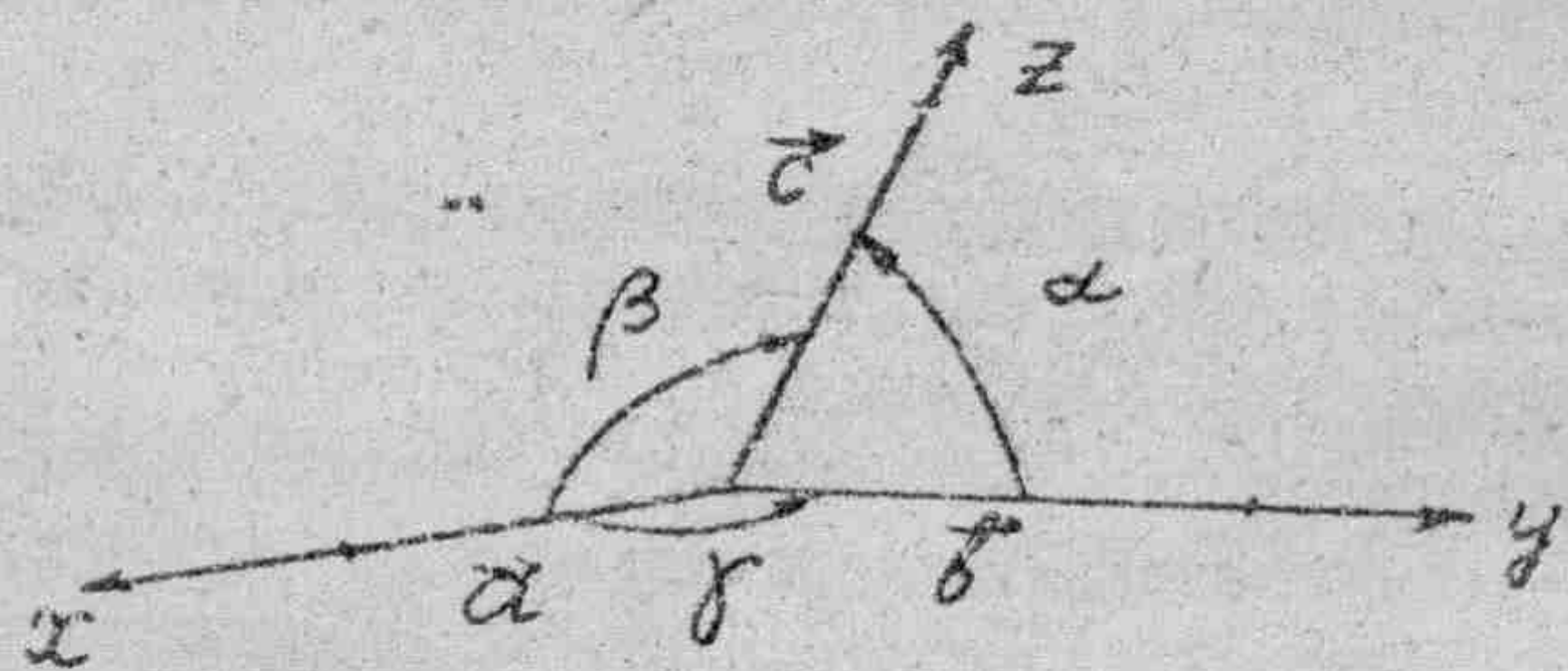


Рис. 1.2. Схема кристаллографической системы осей координат

В кристаллографии пользуются всегда правой системой координат /иногда, при описании энантиоморфных классов, приходится вводить левую систему координат/.

В высшей категории имеется одна сингония - кубическая. Обозначение кристаллографической системы координат для кубической сингонии следующее: $\vec{a} = \vec{b} = \vec{c}, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Элементарная ячейка - куб.

В средней категории имеется три сингонии: тригональная, тетрагональная и гексагональная. Системы координат для три- и гексагональной сингоний: $\vec{a} = \vec{b} \neq \vec{c}, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$; для тетрагональной сингонии: $\vec{a} = \vec{b} \neq \vec{c}, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

В низшей категории содержатся также три сингонии: ромбическая, моноклиновая и триклиновая. Системы координат: для ромбической сингонии - $\vec{a} \neq \vec{b} \neq \vec{c}, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; для моноклиновой - $\vec{a} \neq \vec{b} \neq \vec{c}, \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$; для триклиновой - $\vec{a} \neq \vec{b} \neq \vec{c}, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$.

В кристаллографии используются правила так называемой кристаллографической установки кристаллов, поскольку от расположения осей зависят кристаллографические индексы узлов /точек/, ребер /направлений/ и граней /плоскостей/ кристаллов /см. раздел 1.6/.

1.4. 32 класса /точечные группы/ симметрии кристаллических многогранников

Всё многообразие симметрии кристаллических многогранников и их физических свойств /с учетом лишь рассмотренных в разд. 1.3 элементов симметрии/ описывается 32 классами /точечными группами/ симметрии. Понятие класса симметрии кристалла эквивалентно понятию точечной группы симметрии.

О п р е д е л е н и е. Группа /в математическом смысле/ - множество любых элементов, удовлетворяющих следующим четырем свойствам:

- 1/ произведение двух элементов множества принадлежит тому же множеству: $A \cdot B = C$;
- 2/ для элементов множества справедлив сочетательный /ассоциативный/ закон: $A \cdot (B \cdot C) = (A \cdot B) \cdot C$;
- 3/ существует так называемый единичный элемент множества E, такой, что $A \cdot E = E \cdot A = A$ для любого элемента A;
- 4/ для каждого элемента A множества существует обратный ему элемент A^{-1} , принадлежащий тому же множеству: $A \cdot A^{-1} = E$.

Всем этим условиям удовлетворяет любой из 32 классов симметрии. Элементами множества здесь являются симметрические преобразования, а операцией умножения элементов группы - последовательное применение этих преобразований.

Каждый из 32 классов симметрии обозначается специальным символом. Все символы основаны на теоремах о сочетании элементов симметрии. Формула симметрии состоит из записанных подряд всех элементов симметрии данного объекта. На первом месте принято писать оси симметрии от высших к низшим, на втором — плоскости симметрии, затем центр симметрии, например, для куба: $3L_44L_36L_29PC$.

Международные символы /Германа — Могена/ классов симметрии гораздо компактнее. Здесь пишутся не все, а только основные или так называемые порождающие элементы симметрии, а порожденные элементы симметрии, которые можно вывести из сочетаний порождающих элементов, не пишутся. Так, символ точечной группы куба: $m\bar{3}m$.

Эти группы впервые найдены И. Гесселем в 1830 г. и независимо от него А.В.Гадолиным в 1867 г. /табл. I.2/.

Таблица I.2

32 точечные группы симметрии кристаллических многогранников

Элементы симметрии	Международное обозначение	Обозначение по Шенфлису	Сингония
1	1	C	Триклинная
C	$\bar{1}$	C_i	
2	2	C_2	Моноклинная
m	m	C_s	
$2, m, C$	$2/m$	C_{2h}	
2^3	222	D_2	Ромбическая
$2, m^2$	$mm2$	C_{2v}	
$2^3, m^3, C$	mmm	D_{2h}	
4	4	C_4	Тетрагональная
$4, 2^4$	422	D_4	
$4, m, C$	$4/m$	C_{4h}	
$4, m^4$	$4mm$	C_{4v}	
$4, 2^4, m^5, C$	$4/mmm$	D_{4h}	
$\bar{4}$	$\bar{4}$	S_4	
$\bar{4}, 2^2, m^2$	$\bar{4}2m$	D_{2d}	
3	3	C_3	Тригональная
$3, 2^3$	32	D_3	
$3, m^3$	$3m$	C_{3v}	
$\bar{3}$	$\bar{3}$	C_{3i}	
$3, 2^3, m^3, C$	$\bar{3}m$	D_{3d}	

Элементы симметрии	Международное обозначение	Обозначение по Шенфлису	Сингония
6	6	C_6	Гексагональная
$C, m(\bar{6})$	$\bar{6}$	C_{3h}	
$3, 2^3, m^4$	$\bar{6}m2$	D_{3h}	
$6, 2^6$	622	D_6	
$6, m, C$	$6/m$	C_{6h}	
$6, m^6$	$6mm$	C_{6v}	
$6, 2^6, m^3, C$	$6/mmm$	D_{6h}	
$2^3, 3^4$	23	T	Кубическая
$2^3, 3^4, m^3, C$	$m\bar{3}$	T_h	
$4^3, 3^4, m^6$	$\bar{4}3m$	T_d	
$4^3, 3^4, 2^6$	432	O	
$4^3, 3^4, 2^6, m^3, C$	$m\bar{3}m$	O_h	

В кристаллографии и физике оказались важными группы, в которых три переменные остаются геометрическими координатами пространства, а четвертая имеет иной физический смысл. Такой переменной могут быть время или физические величины, с ним связанные, фаза волновой функции, а в обратном пространстве — фаза комплексной функции. Дискретной четвертой переменной могут быть спин, знак заряда и т.п. Такого рода обобщения симметрии называют антисимметрией и цветной симметрией, они были предложены и развиты в работах Г. Кеела, А.В.Шубникова, Н.В.Голова, А.И.Заморзаева, С.А.Коншика и др.

В антисимметрии имеется четыре вида равенства между геометрически равными объектами: отождествление, зеркальное равенство, антиотождествление, зеркальное антиравенство. Группы антисимметрии состоят как из операций обычной симметрии, так и антисимметрии. Тогда можно получить 58 черно-белых точечных групп антисимметрии, 32 серые /нейтральные/ и 32 одноцветные группы. Всего этих групп вместе 122.

90 групп антисимметрии /58 черно-белых плюс 32 серые группы, содержащие операции антиотождествления/ являются точечными группами магнитной симметрии тех кристаллов, в которых вектор намагниченности может принимать два значения. Этими группами описывается также точечная симметрия обратного пространства с учетом фаз /см.: Современная кристаллография. Т. I, гл. 2/.

1.5. Предельные точечные группы симметрии /группы Кюри/

Кристаллографы исторически предпочитают иметь дело с элементами симметрии, а не с операциями симметрии. Если отвлечься от кристаллических многогранников, то можно видеть, что элементов симметрии бесконечное множество. Если так принять, то, комбинируя элементы симметрии, как и прежде, в соответствии с правилами сочетания элементов симметрии, можно получить бесконечное количество точечных групп симметрии. В кристаллофизике особенно важны так называемые предельные точечные группы симметрии — 7 предельных групп симметрии Кюри: ∞ , ∞m , ∞/m , $\infty 2$, $\infty \infty$, ∞/mmm , $\infty \infty m$. Определяется, что именно они чаще всего описывают то или иное физическое явление в кристаллах.

Группа ∞ — группа симметрии с одной осью бесконечного порядка. Геометрически она представляется вращающимся конусом /в двух энантиоморфных модификациях в виде лево- и правовращающегося конуса/. Ось ∞ всегда полярна, её концы не могут быть совмещены друг с другом. Группа ∞ является предельной для точечных групп 1, 2, 3, 4, 6.

Группа ∞m . Геометрическим образом этой группы является покоящийся конус. В нём параллельно оси ∞ располагается бесконечное количество плоскостей симметрии m , пересекающихся по оси конуса. Данная предельная группа также полярна, как полярны и её десять подгрупп /1, 2, 3, 4, 6, m , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$ /. Симметрией группы ∞m описывается симметрия полярного вектора /например, вектора E напряженности электрического поля/.

Группа ∞/m геометрически представляется вращающимся цилиндром. У цилиндра вдоль оси вращения проходит ось ∞ , перпендикулярно к ней — плоскость симметрии. Кроме того, указанная группа обладает и центром симметрии. Группа ∞/m неполярна, так как концы оси ∞ могут быть совмещены отражением в перпендикулярной ей плоскости. Однако концы оси ∞ всё же неодинаковы: они различаются по характеру вращения. Такие оси, где можно различить северный и южный концы, называются вращательными. Симметрией группы ∞/m описывается симметрия поля постоянного магнита и магнитного поля постоянного тока /симметрия аксиального вектора/.

Группа $\infty 2$. Геометрическим образом данной предельной группы симметрии является закрученный вдоль геометрической оси цилиндр. Ось симметрии ∞ в этом случае неполярна и невращательна. Её часто называют крутильной. Фигуры с крутильными осями могут иметь две энантиоморфные модификации. В качестве примера физического явления, с

метрия которого описывается симметрией группы $\infty 2$, можно привести удельное вращение плоскости поляризации света в анизотропной среде.

Группа ∞/mmm . Её геометрическим образом является покоящийся цилиндр. В указанной группе следующий набор элементов симметрии: ось ∞ , бесконечное число плоскостей симметрии m , пересекающихся вдоль оси ∞ , бесконечное число осей 2, возникающих на пересечениях продольных и поперечной плоскостей симметрии; центр симметрии. Этой предельной группой описывается, в частности, симметрия одноосного механического сжатия или растяжения.

Группа $\infty \infty$. Геометрическим образом данной предельной группы является шар, изготовленный из изотропного вещества, вращающего плоскость поляризации света. Он имеет бесконечное число осей симметрии ∞ , но не имеет плоскостей симметрии. Такая группа допускает две энантиоморфные модификации. Этой предельной группой описывается симметрия такого физического явления, например, как удельное вращение плоскости поляризации света в изотропной среде /в водном растворе свекловичного сахара/.

Группа $\infty \infty m$. Её геометрическим образом является шар из вещества, не вращающего плоскость поляризации света. Указанная группа симметрии содержит бесконечное количество осей симметрии ∞ , бесконечное количество плоскостей симметрии m и центр симметрии. В качестве примера физических явлений, симметрия которых описывается симметрией этой предельной группы Кюри, следует привести такие, как всестороннее /гидростатическое/ сжатие, однородный нагрев, однородный расплав, водяной пар.

В заключение следует заметить, что рассмотренные ранее 32 точечные группы симметрии /одноцветные/ кристаллических многогранников являются подгруппами 7 предельных групп симметрии Кюри.

1.6. Метод кристаллографического индизирования

Для описания кристаллических многогранников /и структур/ применяется метод кристаллографического индизирования, пригодный для всех кристаллографических систем координат /или сингоний/.

Символа вершин /узлов/. Если одну из вершин кристаллического многогранника /или узел решетки/ выбрать в качестве начала координат, то любая другая вершина /узел/ определяется радиусом-вектором \vec{R} :

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c} \quad /1.3/$$

где m, n, p — три целых числа; $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ — периоды идентичности

/масштабные отрезки/ по осям x, y, z . Тогда символ вершины обозначается как $[mnp]$, т.е. индексы m, n, p , взятые в двойные квадратные скобки. Если индекс m, n или p не двузначен, то значки не ставятся; в случае отрицательных индексов минус пишется сверху, например, $[\bar{1}0\bar{1}]$.

Символы ребер /направлений/. Направление ребра /прямой/ можно определить двумя точками: началом координат и любой вершиной /узлом ряда/ многогранника. Символ этой вершины /узла/ принимают за символ ребра /прямой/ и пишут в квадратные скобки $[mnp]$. Например, символы осей координат: $ox - [100], oy - [010], oz - [001]$. Заметим, что символы осей координат одинаковы в любой системе координат /для всех сингоний/. Иногда для характеристики прямой, проходящей через начало координат, необходимо, кроме индексов указать еще и координаты точки пересечения прямой с соответствующей плоскостью. Так, прямую, проходящую через центр грани, параллельной плоскости yz , характеризуют символом $[mnp] \frac{z}{2}$. Иногда прямую, проходящую через начало координат, обозначают с помощью символа $[mnp]^{00}$. Если ребро не проходит через начало координат, то мысленно можно его сдвинуть параллельно самому себе так, чтобы оно прошло через начало координат. Когда прямая пересекает плоскость xz , координаты точки пересечения /в единицах масштабных отрезков/ выписываются в левом верхнем углу, так что символ пишется в виде $^x [mnp]$. Когда прямая пересекает плоскость xy , координаты точки пересечения приписываются в правом нижнем углу - $[mnp]_{AB}$.

Символы граней /плоскостей/. Пусть некая грань пересекает все три оси координат, отсекая от них отрезки, равные ma, nb и pc /рис. 1.3/. Отношение $m:n:p$ характеризует наклон грани к осям координат.

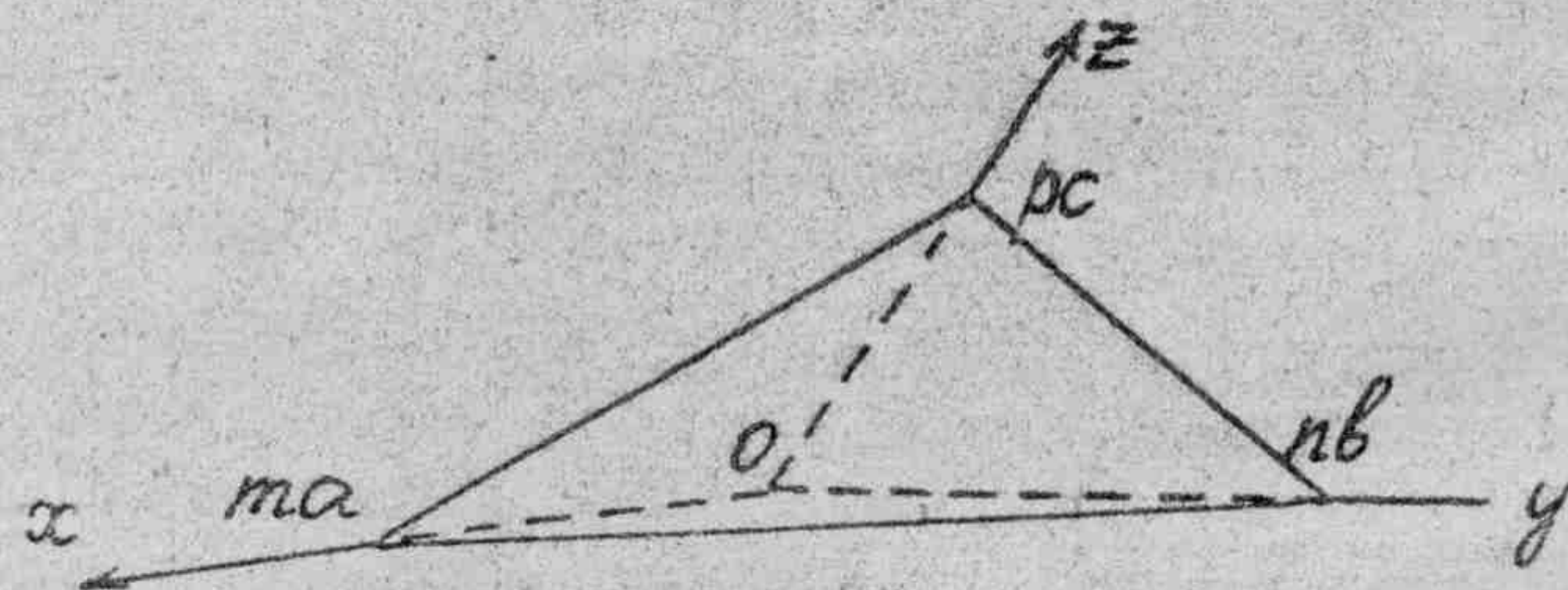


Рис. 1.3. Пересечение грани с осями координат

Таким отношением определяется и ориентация всего семейства параллельных ей граней. Серия отношений рациональных чисел $m:n:p$ для всех параллельных плоскостей можно представить как отношение целых взаимно простых чисел $r:s:t$, так называемых параметров Вейсса /1818г./. Однако в кристаллографии плоскости принято характеризовать индексами Миллера /1839г./. Индексы Миллера являются величинами, обратными параметрам Вейсса и приведенными к целым числам. Если параметры Вейсса грани /плоскости/ r, s, t , то индексы Миллера определяются из соотношения $\frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t} = h:k:l$. Числа h, k и l называются индексами грани /плоскости/, а символ грани обозначается этими индексами, написанными подряд и заключенными в круглые скобки (hkl) . Символом $\{hkl\}$ характеризуется вся совокупность параллельных граней /плоскостей/. Этот символ означает, что система параллельных плоскостей рассекает отрезок a на h частей, b - на k частей и c - на l частей. В качестве примера приведем символы координатных плоскостей: плоскость $xy - (001)$, плоскость $xz - (010)$, плоскость $yz - (100)$.

Символы Миллера - Браве для кристаллов тригональной и гексагональной сингоний. Для описания кристаллов тригональной и гексагональной сингоний трехосная кристаллографическая система координат неудобна. Получается, что различные грани одной и той же простой формы описываются разнотипными символами. От этого неудобства можно избавиться, введя четырехосную систему координат, а именно введя четвертую координатную ось z , составляющую с осями x и y углы 120° и перпендикулярную к оси z , с масштабным отрезком \bar{c} , равным $\bar{a} = \bar{b}$ и не равным \bar{c} . В этой системе координат индексы грани будут равны h, k, i, l , причем индекс i зависит от первых двух: $i = -(h+k)$ или $h+k+i=0$. Обозначение граней кристаллов указанных сингоний с помощью символов Миллера - Браве будет иметь вид $(hkil)$. Так, например, соответствующие грани для шестигранной призмы - символом $\{1\bar{1}00\}$.

1.7. Упражнения

1. Куб имеет шесть осей второго порядка. Через какие точки куба они проходят?
2. Какова симметрия: 1/ бабочки, 2/ трехлопастного пропеллера, 3/ кирпича, 4/ полумесяца, 5/ гантели, 6/ бублика, 7/ ромки?
3. Перечислить подгруппы, входящие в следующие точечные группы: 1/ $m\bar{3}m$; 2/ $3m$; 3/ $6/m$; 4/ $12/m$; 5/ 422 .
4. Рассмотреть точечную симметрию жидких кристаллов /по книге А.С. Сонина "Введение в физику жидких кристаллов"/.

Глава 2. СИММЕТРИЯ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ

Так как каждое твердое вещество содержит кристаллические элементы, а многие из них являются совокупностью кристаллов, то понятно, каким образом строение этих кристаллов часто позволяет объяснить различные свойства вещества.

У. Брэгг

2.1. Структура кристаллов и пространственная решетка

Структура кристаллов - это конкретное расположение частиц /атомов, ионов/ в пространстве; она является, следовательно, физической реальностью.

Однако структуру кристалла можно представить себе как бесконечные симметричные ряды, сетки и решетки чередующихся частиц /точек/. Кратчайшее расстояние между одинаковыми точками в ряду называется периодом идентичности /периодом трансляции или параметром ряда/. Повторяя какую-либо точку с помощью трансляции $\vec{T} = m\vec{a} / m=1, 2, 3, \dots$ получим бесконечный периодический ряд идентичных точек на расстояниях $a, 2a, \dots, ma$. Одинаковые точки, связанные между собой трансляциями в бесконечном ряду, называются узлами ряда.

Приложим теперь к произвольной точке /узлу ряда/ три некопланарные элементарные трансляции \vec{a}, \vec{b} и \vec{c} и повторим её бесконечно в пространстве: $\vec{T} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$. Тогда получим пространственную решетку - трехмерную сетку эквивалентных узлов. Следовательно, пространственная решетка представляет собой способ представления периодичности повторения отдельных материальных частиц или групп частиц. Это геометрическое построение, помогающее выявить закон симметрии или наборы симметрических преобразований кристаллической структуры.

2.2. Элементарная ячейка пространственной решетки. Ячейки Браве

Элементарной ячейкой решетки называется параллелепипед, построенный на трех элементарных трансляциях $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Прimitives элементарной ячейкой называется ячейка, внутри которой нет узлов. Объем primitives элементарной ячейки $V_0 = (\vec{a} [\vec{b} \times \vec{c}])$ не зависит

от её формы и является величиной, постоянной для данной решетки. Он равен объему, приходящемуся на один узел.

Таким образом, пространственную решетку можно рассматривать также как систему параллельных элементарных ячеек, которые касаются друг друга целыми гранями и заполняют пространство без промежутков. Основную тройку трансляций /так называемую трансляционную группу/ для пространственной решетки можно выбрать по-разному. Однако принято выбрать трансляции кратчайшими и соответствующими симметрии решетки.

О. Браве /1848 г./ показал, что всё многообразие кристаллических структур /без учета антисимметрии/ можно описать с помощью 14 типов решеток, отличающихся по формам элементарных ячеек, по симметрии и подразделяющихся на 7 кристаллографических сингоний. Эти решетки были названы решетками Браве.

Каждая решетка Браве - это группа трансляций, характеризующих расположение материальных частиц в пространстве. Имеются три условия для выбора ячейки Браве:

1/ симметрия элементарной ячейки должна соответствовать наиболее высокой симметрии /т.е. голоэдри/ той сингонии, к которой относится кристалл. Рёбра элементарной ячейки должны быть трансляциями решетки;

2/ элементарная ячейка должна содержать максимально возможное число прямых углов или равных углов и равных рёбер;

3/ элементарная ячейка должна иметь минимальный объём.

Указанные условия должны выполняться последовательно - от первого до третьего.

В кристаллической решетке с каждой точкой пространственной решетки связана группа атомов, называемая базисом. Базис элементарной ячейки - это совокупность координат узлов, входящих в элементарную ячейку.

По характеру взаимного расположения основных трансляций или по расположению узлов все кристаллические решетки по Браве классифицируются по 4 типам: primitives /P/, базоцентрированные /C, B или A/, объемноцентрированные /I/, гранецентрированные /F/.

В primitives ячейке P узлы решетки располагаются лишь по вершинам ячейки, а в сложных ячейках имеются ещё узлы: в объемноцентрированной - один узел в центре ячейки, в гранецентрированной - по одному в центре каждой грани, в базоцентрированных C-, B-, A-ячейках - по одному узлу в центрах пар параллельных граней, пересекающихся трансляции \vec{c}, \vec{b} и \vec{a} , соответственно.

Primitives ячейки Браве - это те основные ячейки, по которым они характеризованы сингонии кристаллов.

2.3. Элементы симметрии кристаллических структур

В кристаллических структурах, как и в многогранниках, возможны рассмотренные в гл. I элементы симметрии: плоскость симметрии, центр симметрии, простые и инверсионные оси симметрии. Кроме того имеются также элементы симметрии, присущие только кристаллическим структурам, рассматриваемым нами как бесконечно повторяющиеся ряды, сетки и решетки из частиц, связанных между собой симметрическими преобразованиями. Такими элементами симметрии являются: 1/ трансляция /перенос/, 2/ плоскости скользящего отражения и 3/ винтовые оси симметрии.

Трансляция, как было показано ранее, представляет собой параллельный перенос на определенное расстояние.

Сочетание трансляции с плоскостями и осями симметрии дает еще два новых указанных элемента симметрии — плоскости скользящего отражения и винтовые оси симметрии.

Плоскости скользящего отражения — совокупности совместно действующих плоскости симметрии и параллельной ей трансляции — на величину, равную половине периода трансляции.

Различают плоскости скользящего отражения типов *a*, *b*, *c*, *n* /"клиноплоскость"/ и *d* /"алмазная"/.

В случае плоскостей скользящего отражения типов *a*, *b* и *c* скольжение направлено соответственно вдоль осей *x*, *y*, *z*, а величина его составляет *a*/2, *b*/2 и *c*/2 /см. на примере шахматной доски/.

Плоскость скользящего отражения типа *n* /присущая объемноцентрированной кубической решетке — ОЦК/ — это плоскость скользящего отражения, у которой компонента скольжения направлена по диагонали параллелограмма, построенного на элементарных трансляциях, лежащих в плоскости, параллельной плоскости симметрии, и равна 1/2 длины этой диагонали /для ОЦК-решетки: $(a+b)/2$, $(b+c)/2$, $(a+c)/2$ /.

Плоскость скользящего отражения типа *d* /характерная для границентрированной решетки алмаза/ — это плоскость скользящего отражения, у которой компоненты скольжения направлены вдоль диагонали элементарного параллелепипеда, расположенного в плоскости, параллельной плоскости отражения, а величина переноса составляет 1/4 длины диагонали: $(a+b)/4$, $(a+c)/4$, $(b+c)/4$.

Винтовые оси симметрии представляют собой совокупности поворотов осей симметрии и параллельных им переносов, действующих совместно. Различают правые и левые винтовые оси. Винтовые оси симметрии в кристаллических структурах могут быть только двойными, тройными, четверными и шестерными: 2_1 , 3_1 , 3_2 , 4_1 , 4_2 , 4_3 , 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4 , 6_5 .

Здесь большая цифра указывает порядок оси. Частное от деления цифры, стоящей в индексе, на большую, например, 1/6, дает величину переноса вдоль оси, выраженную через элементарную трансляцию. Правая ось 2_1 эквивалентна левой 2_1 или, иначе говоря, ось 2_1 нейтральна. Левая ось 3_1 эквивалентна правой оси 3_2 , левая 3_2 — правой 3_1 . Правая ось 4_1 эквивалентна левой оси 4_3 , правая 4_3 — левой 4_1 , ось 4_2 нейтральна, она же является одновременно простой осью 2. Левая ось 6_1 эквивалентна правой 6_5 и наоборот, левая 6_5 — правой 6_1 и наоборот, ось 6_3 нейтральна. Оси 6_2 и 6_4 являются одновременно простыми осями 2, а ось 6_3 есть одновременно ось 3.

2.4. Пространственные группы симметрии

Пространственная группа симметрии характеризует симметрию структуры кристаллов так же, как точечная группа симметрии характеризует симметрию внешней формы кристалла и его физических свойств.

На основе рассмотренных элементов симметрии кристаллических структур /без элементов антисимметрии/ в 1890 — 1894 гг. было выведено 230 пространственных групп симметрии одновременно и независимо Е.С. Федоровым и А. Шенфлисом — за двадцать лет до того, как удалось экспериментально доказать существование кристаллической структуры /1912 г./.

Для обозначения пространственных групп симметрии применяют международные символы /иногда в литературе по физике твердого тела, оптике, реже в кристаллографии — символы Шенфлиса/. В международном символе пространственной группы симметрии на первом месте всегда стоит буква, обозначающая тип решетки Браве, далее — порождающие элементы симметрии, каждый на определенном месте. Нарушение порядка записи меняет смысл символа. Например, символ пространственной группы симметрии структуры $NaCl - Fm\bar{3}m$; пространственная группа симметрии структуры типа алмаза — $Fd\bar{3}m$.

Если учесть элементы антисимметрии, то число пространственных групп антисимметрии /А.В. Шубников/ достигнет 1651, из них: 230 — одноцветных, 230 — серых, 517 — с антипереносом, 674 — без антипереноса, т.е. 1191 черно-белая группа.

Реальной физической функцией, описываемой шубниковскими группами антисимметрии, является, например, пространственное расположение спинов атомов в кристаллах с магнитными свойствами.

2.5. Обратная решетка

Если прямая решетка построена на векторах $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, то ненулевые оси обратной решетки определяются уравнениями:

$$\vec{A} = [\vec{b} \times \vec{c}], \quad \vec{B} = [\vec{c} \times \vec{a}], \quad \vec{C} = [\vec{a} \times \vec{b}] \quad /2.1/$$

Как видно, $|\vec{A}|, |\vec{B}|, |\vec{C}|$ представляют собой площади элементарных параллелограммов в координатных плоскостях прямой решетки.

Оси обратной решетки можно нормировать так, чтобы они были посредственно равны обратным межплоскостным расстояниям.

Тогда нормированные оси обратной решетки будут иметь вид:

$$\vec{a}^* = \frac{[\vec{b} \times \vec{c}]}{a[\vec{b} \times \vec{c}]}, \quad \vec{b}^* = \frac{[\vec{c} \times \vec{a}]}{b[\vec{c} \times \vec{a}]}, \quad \vec{c}^* = \frac{[\vec{a} \times \vec{b}]}{c[\vec{a} \times \vec{b}]} \quad /2.2/$$

причем $|\vec{a}^*| = 1/d_{100}, |\vec{b}^*| = 1/d_{010}, |\vec{c}^*| = 1/d_{001}$. Заметим здесь, что в физике твердого тела в качестве векторов обратной решетки - в \vec{k} -пространстве - используются величины, отличающиеся от таковых в формулах /2.2/ в 2π раз.

Нормированные оси обратной решетки могут быть введены и с помощью других уравнений:

$$[\vec{a}_i^* \cdot \vec{a}_k] = \delta_{ik} \quad /2.3/$$

где $\vec{a}_i^* = \vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$, $\vec{a}_k = \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, а δ_{ik} равна нулю при $k \neq i$ и единице при $k = i$. Формула /2.3/ показывает, что две решетки /прямая обратная/ всегда сопряжены одна с другой взаимно.

Если углы α, β, γ - углы между векторами прямой решетки, то обратной решетке соответствующие углы будут $\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$, причем

$$\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cdot \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \cdot \sin \gamma}, \quad \cos \beta^* = \frac{\cos \alpha \cdot \cos \gamma - \cos \beta}{\sin \alpha \cdot \sin \gamma} \quad /2.4/$$

$$\cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cdot \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \cdot \sin \beta}$$

Кратко рассмотрим некоторые геометрические свойства обратной решетки.

I/ Важное свойство обратной решетки состоит в следующем:

Если провести радиус-вектор из начала координат обратной решетки в ближайшую к началу координат узловую точку этой решетки (hkl) а именно вектор

$$\vec{H}_{hkl}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad /2.5/$$

то этот вектор: а/ окажется перпендикулярным к плоскости (hkl) в

прямой решетке; б/ по величине будет равен обратному межплоскостному расстоянию $1/d_{hkl}$, т.е.

$$|\vec{H}_{hkl}^*| = 1/d_{hkl} \quad /2.6/$$

Докажем это свойство. Напишем уравнение плоскости (hkl) в прямой решетке в векторной форме в виде /рис. 2.1/

$$(\vec{r} \cdot \vec{n}) = d_{hkl} \quad /2.7/$$

где \vec{r} - радиус-вектор, проведенный к любой точке плоскости из начала координат; \vec{n} - единичный вектор нормали к плоскости, $|\vec{n}| = 1$; d_{hkl} - расстояние плоскости от начала координат.

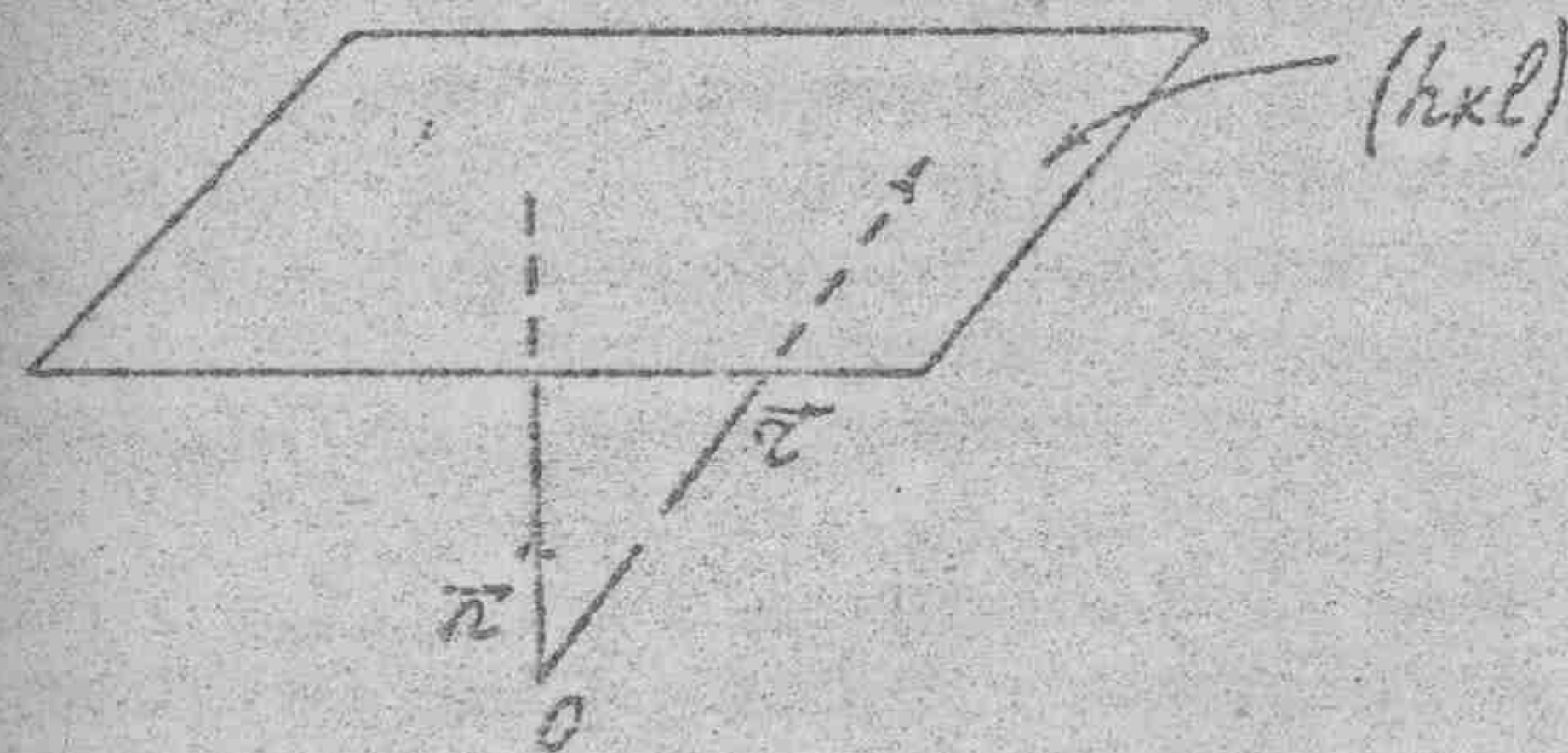


Рис. 2.1. Положение плоскости (hkl) в прямой решетке

Рассмотрим ближайшую к началу координат плоскость с данными индексами Миллера, вследствие чего d_{hkl} одновременно представляет собой межплоскостное расстояние /для семейства плоскостей (hkl) /. Отрезки, которые плоскость (hkl) отсекает на координатных осях прямой решетки, равны $a/h, b/k, c/l$. Подставив в уравнение /2.7/ значения радиус-векторов точек, в которых плоскость пересекается с осями, получим такие равенства:

$$\begin{aligned} (\vec{a} \cdot \vec{n}) &= d_{hkl} \cdot h \\ (\vec{b} \cdot \vec{n}) &= d_{hkl} \cdot k \\ (\vec{c} \cdot \vec{n}) &= d_{hkl} \cdot l \end{aligned} \quad /2.8/$$

Умножим теперь скалярно каждое из трех равенств /2.8/ на \vec{a}^*, \vec{b}^* и \vec{c}^* , соответственно, и сложим все три произведения в левых и правых частях. Воспользуемся тождеством

$$\vec{a} \cdot \vec{a}^* = 1, \quad \vec{b} \cdot \vec{b}^* = 1, \quad \vec{c} \cdot \vec{c}^* = 1 \quad /2.9/$$

найдем, что

$$\vec{n} = d_{hkl} (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \quad /2.10/$$

или

$$\vec{n} = d_{hkl} \cdot \vec{H}_{hkl}^* \quad /2.11/$$

Полученная формула показывает, что радиус-вектор \vec{H}_{hkl}^* обратной решетки по направлению совпадает с вектором нормали к плоскости (hkl) в прямой решетке. Кроме того, поскольку вектор нормали \vec{n} является единичным, абсолютную величину вектора \vec{H}_{hkl}^* запишем следующим образом:

$$|\vec{H}_{hkl}^*| = |\vec{n}| / d_{hkl} = 1 / d_{hkl}, \quad /2.12/$$

что и требовалось доказать. Читателю предоставляется возможность рассмотреть другие способы доказательства данного свойства.

Рассмотренным свойством радиуса-вектора \vec{H}_{hkl}^* устанавливается соответствие между плоскостями прямой решетки (hkl) и узлами обратной решетки, обладающими теми же индексами. В силу взаимного сопряжения решеток друг с другом такое же соответствие имеется между плоскостями обратной решетки и узлами прямой.

Таким образом, каждый вектор обратной решетки перпендикулярен к некоторому множеству плоскостей прямой решетки. Так, например, если провести вектор обратной решетки в узловую точку $[mhmkm\ell]$, то

$$\vec{H}_{mhmkm\ell}^* = m\vec{n} / d_{hkl}, \quad /2.13/$$

где m - целое число и, следовательно, вектор $\vec{H}_{mhmkm\ell}^*$ перпендикулярен множеству $\{hkl\}$ плоскостей прямой решетки /с межплоскостным расстоянием, равным d_{hkl} /.

Перейдем к другим свойствам обратной решетки.

2/ Объем элементарной ячейки обратной решетки обратно пропорционален объему элементарной ячейки прямой решетки.

Это следует из простых формул векторного анализа. Элементарная ячейка обратной решетки представляет собой параллелепипед, построенный на векторах $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$. Согласно формулам /2.2/, её объем определяется как

$$\begin{aligned} V_0^* &= \frac{[\vec{a}^*[\vec{b}^*, \vec{c}^*]]}{([\vec{a}[\vec{b}, \vec{c}])^3} = \\ &= 1/([\vec{a}[\vec{b}, \vec{c}]] = 1/V_0, \quad /2.14/ \end{aligned}$$

где V_0 - объем элементарной ячейки, построенный на векторах $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.

3/ Прямая решетка является обратной по отношению к своей обратной решетке.

Это подразумевается уже в названии и может быть показано путем построения, например, вектора $[\vec{a}^*, \vec{b}^*] / (\vec{a}^*[\vec{b}^*, \vec{c}^*])$ и доказательства того, что он совпадает с вектором \vec{c} .

4/ Элементарная ячейка обратной решетки не обязательно представляет собой параллелепипед.

Указанные свойства обратной решетки широко используются в структурной кристаллографии, а также в физике твердого тела.

2.6. Упражнения

1. Рассмотреть элементарную ячейку решетки алмаза. Указать базис этой ячейки.

2. Объяснить, почему в кристаллических структурах отсутствуют винтовые оси пятого порядка.

3. Показать, что пространственной решеткой, обратной кубической гранцентрированной решетки, будет кубическая объемноцентрированная и наоборот.

4. Рассмотреть упорядочение молекул в различных типах жидких кристаллов /нематических, холестерических, смектических/.

Глава 3. МАТРИЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СИММЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ

Мы строим для себя изображения событий
Людвиг Витгенштейн

3.1. Кристаллофизические системы координат

Операции симметрии аналитически описываются операциями преобразования кристаллофизической системы координат. В кристаллофизической установке для кристаллов всех сингоний используется в основном правая прямоугольная система координат x_1, x_2, x_3 , правила выбора которых указаны в табл. 3.1.

Таблица 3.1

Правила выбора кристаллофизических осей координат

Сингония	Оси системы координат		
	x_3	x_2	x_1
Триклинная	[001]	В плоскости, перпендикулярной к направлению [001]	
Моноклинная	[001]	[010]	В плоскости (100)
Ромбическая	[001]	[010]	
Тетрагональная	[001]	[010]	[100]

Сингония	Оси системы координат		
	x_3	x_2	x_1
Тригональная и гексагональная	[0001]	[0110]	[2110]
Кубическая	[001]	[010]	[100]

Заметим, что для ромбической, тетрагональной и кубической сингоний оси этой системы координат совпадают с кристаллографическими осями x, y, z . В общем случае в кристаллофизической установке за координатные оси всегда выбираются либо оси симметрии, либо нормали к плоскостям симметрии. Там, где их нет (триклинная сингония), оси привязывают к постоянно встречающимся ребрам или граням кристалла.

3.2. Преобразование осей кристаллофизической системы координат

При преобразованиях симметрии мы имеем как бы две системы координат: старую /неподвижную/, - x_1, x_2, x_3 и новую, жестко связанную с материальной фигурой - x'_1, x'_2, x'_3 . Эта последняя, в соответствии с требованиями тех или иных элементов симметрии, поворачивается в пространстве. Если при этом начало координат остается на месте то эти преобразования могут быть точно определены косинусами углов между старыми и новыми осями c_{ij} /табл. 3.2/. Они определяют направления новых осей по отношению к старым и поэтому называются направляющими косинусами: $c_{ij} = \cos(x'_i, x_j)$.

Таблица 3.2

Соотношение между новыми и старыми осями координат

Ось	x_1	x_2	x_3
x'_1	c_{11}	c_{12}	c_{13}
x'_2	c_{21}	c_{22}	c_{23}
x'_3	c_{31}	c_{32}	c_{33}

Как видно из таблицы, направляющие косинусы c_{ij} являются элементами матрицы

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} \quad /3.1/$$

где $c_{ij} \neq c_{ji}$. Эти девять элементов связаны двумя группами соотношений: 1/ сумма квадратов элементов строк или столбцов равна 1; 2/ сумма произведений элементов пары строк или столбцов равна нулю. Кроме того, детерминант $|c_{ij}|$ матрицы при переходе от правой к правой и от левой к левой системам координат равен +1, а при переходе от правой к левой и наоборот равен -1. Поэтому каждый элемент матрицы /3.1/ может быть вычислен через детерминант $|c_{ij}|$:

$$c_{ij} = (-1)^{i+j} \cdot A_{ij} \cdot |c_{ij}| \quad /3.2/$$

где A_{ij} - дополнительный минор элемента c_{ij} , который получается вычеркиванием i -й строки и j -го столбца.

Приведем примеры матричного представления некоторых симметрических операций:

1/ операция отождествления /I/:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

2/ центр симметрии /I/:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

3/ операция поворота вокруг оси 2, параллельной оси x_2 :

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Другие примеры матричного представления операций симметрии предлагаем рассмотреть читателю самостоятельно /см. упражнения в конце гл. 3/.

3.3. Преобразование компонент вектора

Как известно, вектор можно определить заданием его величины и направления: \vec{P} . Или же можно выбрать три взаимно перпендикулярных оси x_1, x_2 и x_3 и задать компоненты вектора вдоль них. Компоненты вектора \vec{P} - это проекции вектора на заданные оси: $\vec{P} = P_1, P_2, P_3$.

Предположим теперь, что мы имеем некоторый вектор \vec{P} с компонентами P_1, P_2, P_3 в системе осей координат /старой/ x_1, x_2, x_3 . Требуется найти его компоненты P'_1, P'_2, P'_3 в новой системе x'_1, x'_2, x'_3 /после некоторого симметрического преобразования/.

Компонента P'_1 получается при проекции компонент P_1, P_2, P_3 на новую ось координат x'_1 , т.е.

$$P'_1 = P_1 \cos(x'_1, x_1) + P_2 \cos(x'_1, x_2) + P_3 \cos(x'_1, x_3) \quad /3.3/$$

или

$$P_1^i = c_{11} P_1 + c_{12} P_2 + c_{13} P_3 \quad /3.4/$$

Аналогично находим

$$P_2^i = c_{21} P_1 + c_{22} P_2 + c_{23} P_3 \quad /3.5/$$

$$P_3^i = c_{31} P_1 + c_{32} P_2 + c_{33} P_3 \quad /3.6/$$

Таким образом, соотношения /3.4/ - /3.6/ можно записать в виде

$$P_i^i = c_{ij} P_j \quad /3.7/$$

где $i, j = 1, 2, 3$ /в кристаллофизике знак суммирования \sum принято опускать/.

Соотношение /3.7/ представляет собой закон преобразования компонент полярного вектора /или компонент тензора первого ранга/.

Для компонент аксиального вектора \vec{q} закон преобразования имеет вид

$$\vec{q}_i^i = \pm c_{ij} q_j \quad /3.8/$$

где знак "плюс" ставится в случае, когда старая и новая системы координат одинаковы, а знак "минус" - в случае различных систем координат /например, "старая" - правая, а "новая" - левая или наоборот/. Соотношения /3.7/ и /3.8/ для полярного и аксиального векторов отражают их симметрию.

3.4. Преобразование координат точки

Координаты $/x_1, x_2, x_3/$ точки P относительно осей OX_1, OX_2 и OX_3 /рис. 3.1/ являются одновременно компонентами вектора \vec{OP} .

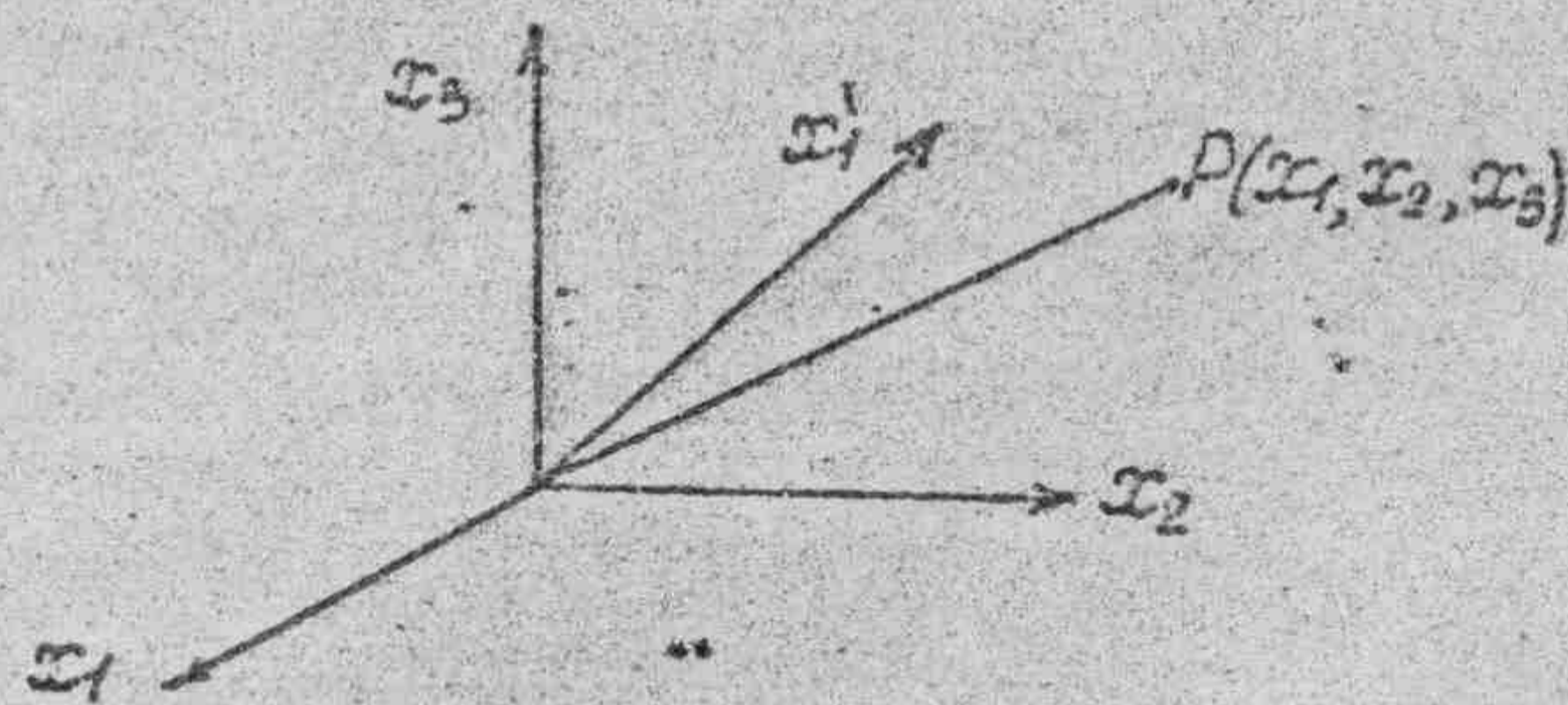


Рис. 3.1. Положение точки P в системе координат

Следовательно, на основании уравнений /3.4/ - /3.6/ для полярного вектора получим, что новые координаты x_1^i, x_2^i, x_3^i точки P в новой системе координат будут задаваться уравнениями:

$$x_1^i = c_{11} x_1 + c_{12} x_2 + c_{13} x_3$$

$$x_2^i = c_{21} x_1 + c_{22} x_2 + c_{23} x_3 \quad /3.9/$$

$$x_3^i = c_{31} x_1 + c_{32} x_2 + c_{33} x_3$$

или

$$x_i^i = c_{ij} x_j \quad /3.10/$$

где $i, j = 1, 2, 3$, как и ранее.

Для дальнейшего изложения материала важно остановиться на законах преобразования двойного, тройного и других произведений координат. Нетрудно показать на основании соотношений /3.10/, что закон преобразования произведения координат будет иметь вид

$$x_i^i \cdot x_j^i = c_{ik} c_{jl} x_k x_l \quad /3.11/$$

где $i, j, k, l = 1, 2, 3$.

Если ввести величины $T_{ij}^i = x_i^i \cdot x_j^i$ и $T_{kl} = x_k x_l$, то формула /3.11/ примет вид

$$T_{ij}^i = c_{ik} c_{jl} T_{kl} \quad /3.12/$$

Данное соотношение можно рассматривать как закон преобразования компонент тензора /полярного/ второго ранга.

Аналогично для тройного произведения координат закон преобразования запишется следующим образом:

$$x_i^i x_j^i x_k^i = c_{il} c_{jm} c_{kn} x_l x_m x_n \quad /3.13/$$

и для компонент тензора третьего ранга

$$T_{ijk}^i = c_{il} c_{jm} c_{kn} T_{lmn} \quad /3.14/$$

Подобные рассуждения можно продолжить для тензоров более высоких рангов /четвертого, пятого и др./.

3.5. Упражнения

1. Какими матрицами описываются повороты на 180° и 60° вокруг оси x_3 ?
2. Какая матрица отвечает плоскости симметрии, проходящей через биссектрису внутреннего угла между плоскостями $x_1 O x_3$ и $x_2 O x_3$?
3. Каким симметрическим операциям соответствуют следующие матрицы:
 1/ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 2/ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 3/ $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ 4/ $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
4. Даны матрица $c_{ij}/x_3, 90^\circ/$, соответствующая повороту на 90° вокруг оси x_3 , и матрица $c_{ij}/x_1, 130^\circ/$, соответствующая повороту на 130° вокруг оси x_1 . Найти матрицу c_{ij} , являющуюся произведением заданных матриц.

... Кристаллы принимают форму кубов, параллелепипедов, тетраэдров, у них могут быть лишь им присущие оси симметрии и особенности в расположении частиц, но они, как сама жизнь, как люди, несут на себе неизгладимый отпечаток тех мест, куда им случается попасть...
Дорен Эйсли

4.1. Основной закон кристаллофизики /принцип Неймана/

Симметрия физических свойств кристалла связана с его точечной группой симметрии. Эта связь устанавливается фундаментальным законом кристаллофизики - принципом Неймана /Ф. Нейман, 1788 - 1895 гг./

Приведем несколько формулировок этого принципа.

1/ Группа симметрии любого физического свойства кристалла должна включать в себя точечную группу симметрии кристалла.

Этот закон утверждает, что группа симметрии физического свойства кристалла /обозначим через G_{cb} /, определяемая независимо от симметрии его формы, может быть более высокой, нежели точечная группа симметрии кристалла /обозначим через G_k /, т.е.

$$G_k \subseteq G_{cb} \quad /4.1/$$

Формулировку принципа Неймана, данную соотношением /4.1/, где знак \subseteq - включение группы, можно значительно усилить, если добавить соотношение между симметрией физического свойства и симметрией тензора $/G_T$ /, описывающего это свойство, а именно:

$$G_k \subseteq G_{cb} \subseteq G_T \quad /4.2/$$

Таким образом, класс симметрии G_k кристалла либо совпадает с группой симметрии физического свойства, либо является её подгруппой. В свою очередь, в случае $G_{cb} \neq G_T$ данной группе G_{cb} отвечает группа G_T , являющаяся ближайшей её надгруппой, если групп G_T несколько.

2/ Более конкретную формулировку принципу Неймана придал Кюри: Явление может существовать в среде, обладающей своей характеристической симметрией или симметрией одной из подгрупп его характеристической симметрии. Иными словами, некоторые элементы симметрии могут сосуществовать с некоторыми явлениями, но это не обязательно. Необходимо, чтобы некоторые элементы симметрии отсутствовали. Это и есть та диссимметрия, которая создает явление.

В указанной формулировке Кюри под характеристической симметрией явления назван максимальную симметрию, совместимую с существованием физического явления /см. предельные группы симметрии Кюри/.

Для примера, иллюстрирующего принцип Неймана, приведем пьезоэлектрический эффект /группа симметрии явления cm / в кристаллах турмалина $/G_k = 3m/$, а также возможность проявления данного объекта в кристаллах, группа симметрии которых входит в число десяти полярных групп симметрии. Общим свойством всех этих групп является то, что в них отсутствуют определенные элементы симметрии: центр симметрии, поперечная плоскость симметрии и бесконечное множество осей симметрии /простых и зеркальных/, расположенных перпендикулярно и косо по отношению к существующей оси. Указанная диссимметрия и "теорит" явление пьезоэффекта в кристаллах.

В качестве второго примера следует привести группы симметрии кристаллов, в которых возможно наблюдение спонтанной намагниченности /группа симметрии явления cm /: $1, 2, 3, 4, 6, \bar{1}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}, m, 2/m, 4/m, 6/m$.

Из приведенных примеров можно заметить, что симметричные условия являются лишь необходимыми, но не достаточными для реализации того или иного физического явления. Невыполнение принципа Неймана является необходимым и достаточным условием отсутствия у кристалла данного свойства.

Но если физические явления, не одно, а несколько, уже реализуются в кристалле, как тогда связаны между собой группы симметрии физических явлений и среды? Ответ на этот вопрос дает закон Кюри-Шубникова, который можно считать ещё одной формулировкой принципа Неймана:

3/ Морфологическая симметрия кристалла, т.е. симметрия его внешней формы, является общей подгруппой групп симметрии, описывающих все его физические свойства, при заданном расположении элементов симметрии этих групп.

Суть данной формулировки наглядно представлена на рис. 4.1.

4/ В ряде практических случаев весьма полезной является ещё одна формулировка принципа Неймана, приведенная Г. Вустером:

При измерении в направлении, заданном относительно фиксированной

в пространстве системы координат, физическое свойство сохраняет свой знак и величину, если ориентацию кристалла изменять путем поворота, отражения или инверсии соответственно любому его элементу симметрии.

Это положение широко используется при нахождении вида тензора физического свойства для кристаллов заданного класса симметрии.

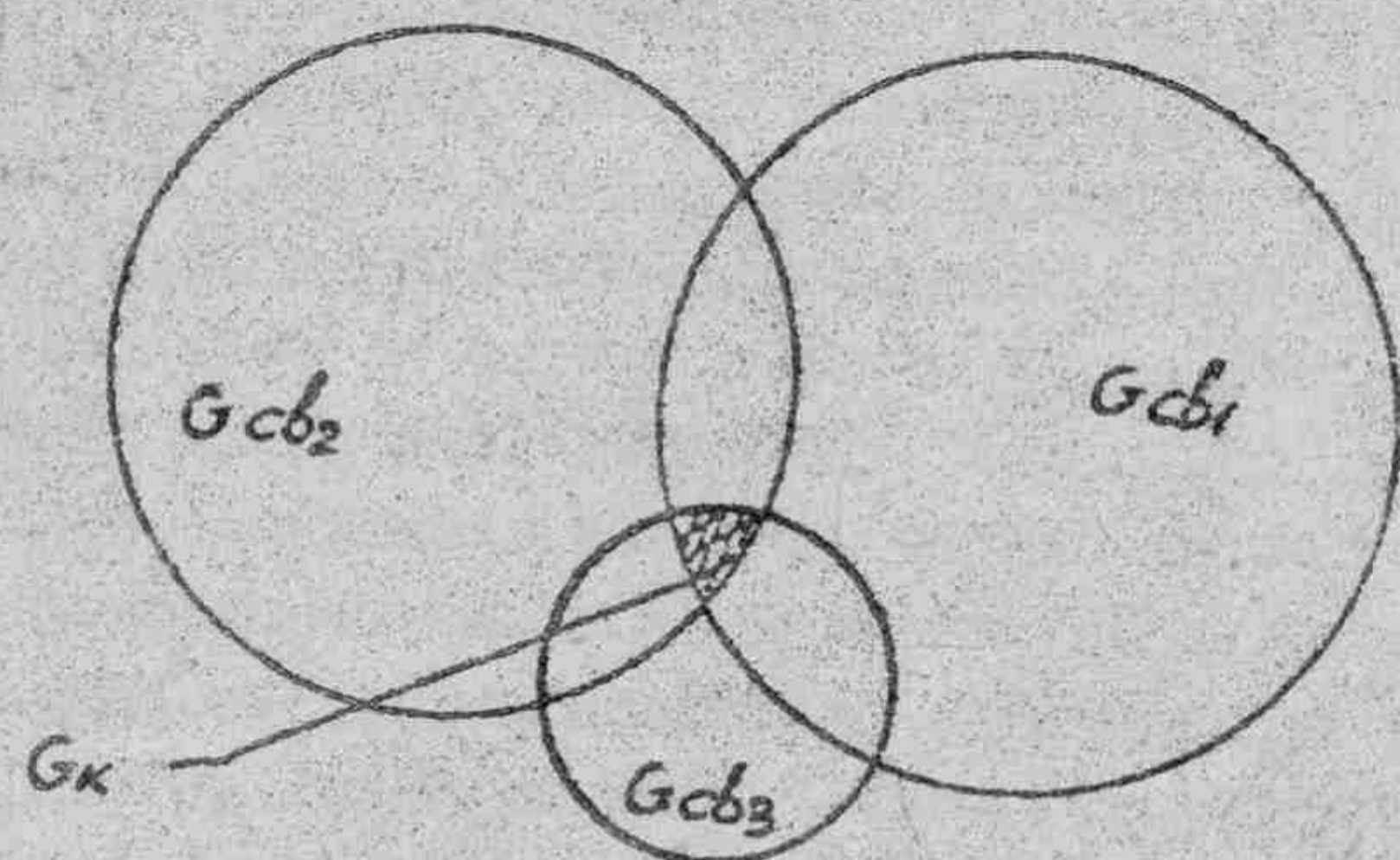


Рис. 4.1. Пересечение групп симметрии физических свойств кристалла

В качестве примера, иллюстрирующего применимость указанного положения, рассмотрим невозможность наблюдения векторного свойства в кристалле, имеющем центр симметрии.

Почти очевидно, что кристалл, обнаруживающий векторное свойство, не может иметь центра симметрии, так как полярность /типа "плюс - минус"/ несовместима с центром симметрии. Действительно, если бы такой кристалл обладал центром симметрии, то на его противоположных гранях непременно должны были бы располагаться одинаковые полюса, и если говорить, например, о зарядах, то их распределение было бы типа "плюс - плюс" или "минус - минус", что, конечно, физически невозможно.

Приведенная по Вустеру формулировка принципа Неймана позволяет доказать это утверждение аналитически.

Как было показано ранее, центру симметрии отвечает следующая матрица направляющих косинусов:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

С помощью данной матрицы и выражения /3.7/ для закона преобразования компонент полярного вектора устанавливаем, что $P'_1 = -P_1$, $P'_2 = -P_2$, $P'_3 = -P_3$. Однако, согласно принципу Неймана требуется, чтобы $P'_1 = P_1$, $P'_2 = P_2$, $P'_3 = P_3$. Оба набора равенств совместны лишь в том случае, когда все три компонента равны нулю, а значит, никакими векторными свойствами пентросимметричный кристалл обладать не может, что и утверждалось ранее.

В качестве других примеров читателю предоставляется рассмотреть упражнения в конце данной главы.

4.2. Принцип суперпозиции симметрий /принцип Кюри/

Когда какие-либо причины порождают некоторые эффекты, элементы симметрии причин должны обнаруживаться в этих эффектах. Когда какие-либо эффекты проявляют некоторую диссимметрию, то эта диссимметрия должна обнаруживаться и в причинах, их породивших.

Положения, обратные этим двум, несправедливы, по крайней мере практически, т.е. эффекты могут быть более симметричными, чем причины, породившие их.

Указанный принцип симметрии, впервые сформулированный П. Кюри /около 1890 г./, имеет важное значение в кристаллофизике.

Действительно, ранее нами уже отмечалась ограниченность принципа Неймана, особенно в случае, когда в кристалле реализуется не одно, а несколько физических явлений. Принцип суперпозиции симметрий Кюри устанавливает связь между симметрией причины и симметрией следствия. Это дает уникальную возможность, зная исходную симметрию физического объекта и симметрию внешнего воздействия, найти измененную воздействием симметрию как общую высшую подгруппу указанных двух групп. Данный принцип поистине всеобщий. Он, в частности, хорошо работает при поиске новых физических эффектов в кристаллах.

Рассмотрим некоторые примеры использования принципа Кюри.

1/ Приложение принципа к явлениям:

При наложении нескольких явлений различной природы в одной и той же системе их диссимметрии складываются. Элементами симметрии системы остаются только те, которые являются общими для каждого явления, взятого отдельно.

Для иллюстрации данного положения рассмотрим пример, приведенный самим П. Кюри. Предположим, например, что мы наложили бы друг на друга в одном теле электрическое поле (∞/m) и магнитное поле (∞/m) с тем же направлением; тогда сохраняется только ось ∞ ; наличие электрического поля несовместимо с существованием центра

и плоскости симметрии, перпендикулярной к этой оси, а наличие магнитного поля сделало бы неизбежным исчезновение плоскостей симметрии, проходящих через ось ∞ . Таким образом, получается симметрия ∞ , следовательно, мы имеем в теле диссимметрию кручения. Если, например, взять железную проволоку, намагнитить её в направлении длины, а потом пропускать по ней ток, то проволока закрутится / Видемана/.

Читателю предоставлю самостоятельно рассмотреть симметрию эффов Магнуса, а также Колла в металле / $\vec{E} \perp \vec{H}$ /.

2/ Приложение принципа Кюри к кристаллу:

Кристалл, находящийся под влиянием внешнего воздействия, обладает теми элементами симметрии, которые являются общими для кристалла в отсутствие воздействия и воздействия в отсутствие кристалла.

Эту формулировку можно выразить в виде соотношения

$$G_x \cap G_B = G_x$$

где G_x - точечная группа симметрии кристалла / в отсутствие воздействия/; G_B - группа симметрии воздействия; G_x - группа симметрии кристалла при воздействии / в определенном расположении элементов симметрии/.

Для иллюстрации принципа возьмем в качестве кристалла кварц, класс симметрии 32 , а в качестве воздействия - одноосное сжатие / растяжение/, группа симметрии ∞ / mmm . Воздействие направим вдоль двойной оси:

$$32 \cap \infty / mmm = ?$$

Кварц имеет тройную главную ось и три оси симметрии второго порядка, перпендикулярные первой. При сжатии / растяжении / вдоль оси второго порядка к диссимметрии кварца добавляется цилиндрическая диссимметрия ∞ / mmm : из общих элементов симметрии остается только ось второго порядка. Следовательно, $32 \cap \infty / mmm = 2$.

Читателю предоставлю самостоятельно решить случай, когда одноосное сжатие направлено вдоль главной оси кварца: $32 \cap \infty / mmm = ?$

Первым понял важность работ П. Кюри по симметрии академик В. Вернадский. В одной из своих работ он писал: "... Пьер Кюри ... впервые указал, что принцип симметрии является основным для всех физических явлений. Он также необходим для их понимания, как правило. Другими словами, что он является таким же по своему значению для физического пространства, каким является измерение для пространства геометрического. Симметрия определяет физическое состояние пространства".

Много сделал для пропаганды идей П. Кюри академик А.В. Шубников.

4.3. Упражнения.

1. Используя принцип Неймана, найти ненулевые компоненты вектора, описывающего свойство в кристалле, имеющем ось симметрии шестого порядка, параллельную x_3 .
2. Какие ненулевые компоненты вектора, описывающего физическое свойство, возможны в кристалле, имеющем плоскость симметрии, проходящую параллельно x_3 через биссектрису угла между осями x_1 и x_2 ?
3. Какую симметрию приобретает однородная непрерывная изотропная среда / например, расплав /: а/ в электрическом поле; б/ в магнитном поле?
4. Как с использованием симметричных закономерностей можно объяснить обязательную поляризацию диэлектрических кристаллов во внешнем электрическом поле независимо от их симметрии?
5. Кристаллы какой симметрии обнаруживают пьезоэлектрический эффект при всестороннем сжатии?
6. Можно ли кристаллы кварца использовать в качестве датчиков гидростатического давления? Почему?

Глава 5. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ПЕРВОГО РАНГА

Все-таки странно, что существует слово для обозначения того, чего, строго говоря, не существует в природе, - именно покоя.

Макс Гори

Для тензорного описания физических свойств кристаллов весьма полезным является представление взаимной связи между внешним воздействием, одноосным изменением какого-либо свойства кристалла, и достигнутым эффектом, т.е. измеряемым явлением, в виде следующего соотношения:

$$\text{ЭФФЕКТ} = \text{СВОЙСТВО} \times \text{ВОЗДЕЙСТВИЕ} \quad /5.1/$$

Если воздействие и вызванное им явление изотропны / скалярны /, то соответствующее свойство кристалла скалярно. Скалярные величины не меняются при переходе от одной системы координат к другой. Таковы, в частности, масса, плотность, температура, теплоемкость и другие величины. В данной книге они не рассматриваются.

Если при скалярном воздействии на кристалл возникающий эффект имеет векторный характер, то, как можно видеть из соотношения /5.1/ физическое свойство кристалла является векторным. Подобные рассуждения можно продолжить и для случаев, когда физические свойства кристаллов будут описываться тензорами второго, третьего и более высоких рангов.

В настоящей главе рассмотрим эффекты в кристаллах, описываемые тензорами первого ранга / прямой и обратный пьезоэлектрические эффекты/.

5.1. Прямой пьезоэлектрический эффект в кристаллах

5.1.1. Сущность пьезоэлектрического эффекта

Пьезоэлектрический эффект в кристаллах заключается в изменении спонтанной электрической поляризации кристалла при нагревании.

В рассматриваемом случае воздействие скалярно, эффект имеет векторный характер, следовательно, согласно /5.1/ физическое свойство кристалла является векторным. Тогда для пьезоэффекта в кристалле в векторной форме можно записать / в первом приближении/:

$$\Delta \vec{P} = \vec{\gamma} \Delta T \quad /5.2/$$

Здесь $\Delta \vec{P}$ - изменение вектора спонтанной поляризации; $\vec{\gamma} = [\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3]$ - вектор пьезоэлектрических коэффициентов; ΔT - изменение температуры.

Соотношение /5.2/ в тензорной форме запишет вид:

$$\Delta P_i = \gamma_{ij} \Delta T \quad /5.3/$$

$$\gamma_{ij} = dP_i / dT \quad /5.4/$$

Пьезоэлектрический коэффициент γ считается положительным, если повышение температуры приводит к увеличению спонтанной поляризации кристалла.

5.1.2. Ограничения, налагаемые симметрией кристалла на пьезоэффект

В соответствии с принципом Неймана пьезоэлектрический эффект может наблюдаться лишь в тех кристаллах, точечная группа симметрии которых является подгруппой группы симметрии эффекта / ∞m /, т.е. в кристаллах десяти поллярных классов симметрии: 1, 2, 3, 4, 6, m , $3m$, $4mm$, $6mm$.

5.1.3. Указательная поверхность пьезоэлектрического эффекта и её антисимметрия

О п р е д е л е н и е. Указательная поверхность физического свойства кристалла - это поверхность, радиус-вектор которой в некотором

направлении равен величине, характеризующей свойство в данном направлении. В случае пьезоэффекта указательной поверхностью будет являться индикатриса плотности заряда, так как поверхностная плотность заряда равна нормальной компоненте вектора поляризации: $P_n = \epsilon_0 \cdot E_n$.

Построим указанную индикатрису для пьезоэффекта в кристаллах тетрагонального класса симметрии $4mm$. Представим себе шар, выточенный из такого кристалла. Если его нагреть, то одна сторона шара зарядится положительно, другая - отрицательно /рис. 5.1, а/. Плотность зарядов будет наибольшей в полюсах шара, определяемых концами диаметра, совпадающего по направлению с вектором поляризации \vec{P}_c /рис. 5.1, б/. По экватору шара плотность заряда равна нулю. По всем другим направлениям плотность заряда будет дана соотношением $P = P_c \cos \alpha$. Если теперь из одной точки откладывать отрезки прямой, равные и параллельные P , то получим количественную картину распределения плотности зарядов по поверхности шара, т.е. индикатрису плотности заряда.

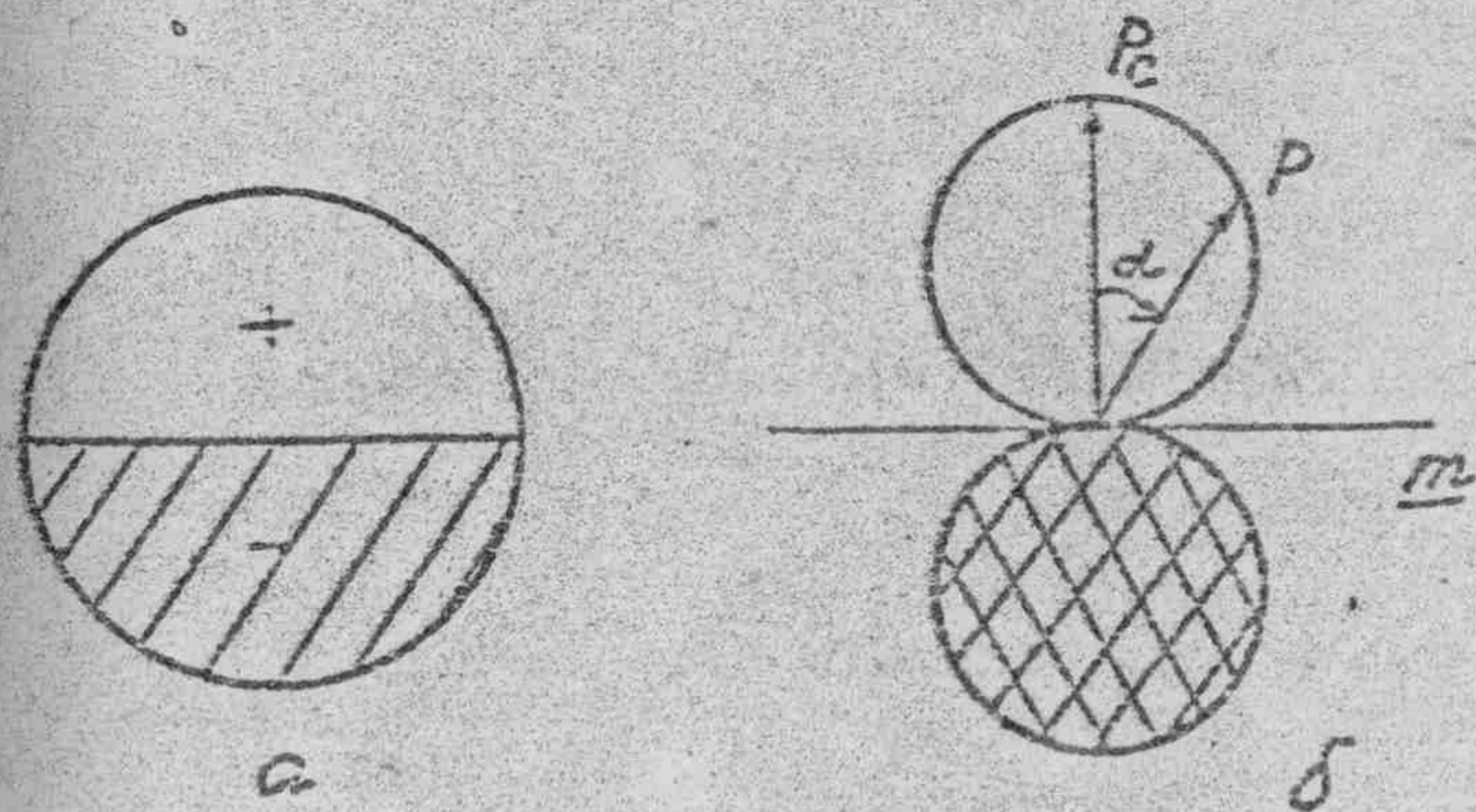


Рис. 5.1. Указательная поверхность пьезоэффекта

Она будет представлять собой пару соприкасающихся сфер диаметром P_c . Одна сфера /белая/ будет соответствовать распределению положительных зарядов, другая /черная/ - отрицательных зарядов.

Фигура, представленная на рис. 5.1, б, имеет симметрию ∞ / mm , если учитывать только её форму. Если же учесть и цвета, которые здесь обозначают положительные и отрицательные заряды, то между двумя сферами следует провести антиплоскость антисимметрии m . Таким образом, симметрия, точнее антисимметрия указательной поверхности пьезоэффекта определяется группой $\infty / m m$.

Уравнение указательной поверхности пьезоэлектрического эффекта можно найти аналитически.

Пусть в координатной системе x_1, x_2, x_3 вдоль полнорного направления \vec{OA} пьезоэлектрический эффект определяется вектором $\vec{A} = [A_1, A_2, A_3]$ / рис. 5.2/.

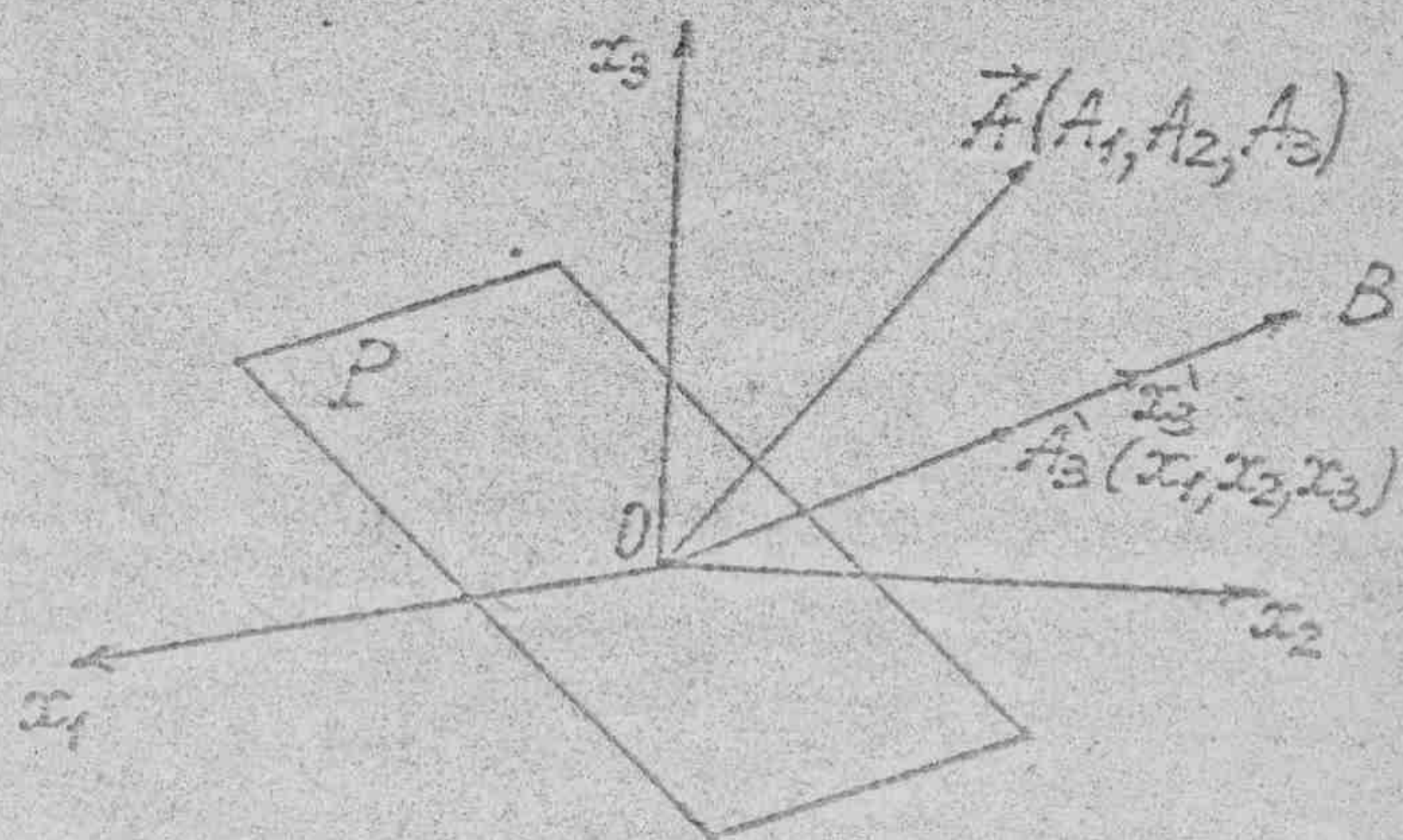


Рис. 5.2. К выводу уравнения указательной поверхности пьезоэффекта

Введем новое направление \vec{OB} и совместим с ним ось x_3' новой координатной системы. По этому направлению величина пьезоэффекта определяется как A_3' . Тогда вектор $\vec{A}_3' = [x_1', x_2', x_3']$ запишем следующим образом:

$$A_3'^2 = x_1'^2 + x_2'^2 - x_3'^2 \quad /5.6/$$

Выразим A_3' через компоненты исходного вектора $\vec{A} = [A_1, A_2, A_3]$ с помощью закона преобразования компонент полнорного вектора:

$$A_3' = c_{31}A_1 + c_{32}A_2 + c_{33}A_3 \quad /5.7/$$

$$c_{31} = x_1/A_3, \quad c_{32} = x_2/A_3, \quad c_{33} = x_3/A_3 \quad /5.8/$$

$$A_3' = x_1 A_1 / A_3 + x_2 A_2 / A_3 + x_3 A_3 / A_3 \quad /5.9/$$

$$A_3'^2 = x_1 A_1 + x_2 A_2 + x_3 A_3 \quad /5.10/$$

Из формул /5.6/ и /5.10/ получим выражение

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = x_1 A_1 + x_2 A_2 + x_3 A_3 \quad /5.11/$$

которое является уравнением указательной поверхности пьезоэффекта. Приведем его к другой форме:

$$x_1^2 - x_1 A_1 + x_2^2 - x_2 A_2 + x_3^2 - x_3 A_3 = 0 \quad /5.12/$$

Введем преобразование типа $x_i' - x_i A_i = (x_i - A_i/2)^2 - A_i^2/4$. Тогда уравнение /5.12/ примет окончательный вид:

$$(x_1 - A_1/2)^2 + (x_2 - A_2/2)^2 + (x_3 - A_3/2)^2 = A_1^2/4 + A_2^2/4 - A_3^2/4 \quad /5.13/$$

который описывает сферу с центром, лежащим на половине вектора \vec{A} . Заметим, что уравнение /5.13/ получено для точек $A_3(x_1, x_2, x_3)$, лежащих выше плоскости P. Для точек, лежащих ниже плоскости, уравнение, соответствующее /5.11/, имеет вид

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = -x_1 A_1 - x_2 A_2 - x_3 A_3 \quad /5.14/$$

Следовательно, для "нижней" сферы будем иметь

$$(x_1 + A_1/2)^2 + (x_2 + A_2/2)^2 + (x_3 + A_3/2)^2 = A_1^2/4 + A_2^2/4 + A_3^2/4 \quad /5.15/$$

5.1.1. С применением пьезоэлектрических кристаллов

Пьезоэлектрические кристаллы используют в качестве датчиков, регистрирующих изменение температуры, для изготовления чувствительных приемников инфракрасного излучения /лазерного в том числе/ и других применений. В настоящее время в основном применяются так называемые сегнетоэлектрические кристаллы.

5.2. Обратный пьезоэлектрический эффект

Суть обратного пьезоэлектрического или электрокалорического эффекта сводится к изменению температуры кристалла, вызванному изменением приложенного к нему электрического поля:

$$\Delta T = \bar{q} \Delta E \quad /5.16/$$

где ΔT - изменение температуры; $\bar{q} = dT/dE$ - электрокалорический коэффициент; ΔE - изменение электрического поля.

Из соотношения /5.16/ можно видеть, что, поскольку в рассматриваемом эффекте воздействие является векторным, а само явление скалярное, физическое свойство должно быть векторным. Следовательно, \bar{q} можно назвать вектором электрокалорических коэффициентов. На основе термодинамических соображений можно показать, что он связан с вектором $\vec{\gamma}$ пьезоэлектрических коэффициентов соотношением

$$\bar{q} = -\vec{\gamma} T / \rho c \quad /5.17/$$

где T - температура; ρ - плотность кристалла; c - теплоемкость кристалла; J - механический эквивалент тепла, равный $4.18 \cdot 10^7$ эрг/кал. Покажем это. При термодинамическом рассмотрении пьезоэлектрического кристалла со спонтанной поляризацией P_0 будем считать, что изменение последней отразится лишь на изменении теплосодержания кристалла, описываемого энтропией S . Внутренняя энергия кристалла U в этом случае остается неизменной: $dU = 0$. Тогда

откуда $dU=0=E dP + T dS$ /5.18/

Далее, из этого уравнения следует $T = -E dP/dS$ /5.19/

Но $\partial T/\partial E = \alpha$ и $\partial P/\partial T = \beta$. Известно из термодинамики, что $\partial T/\partial E = -\partial P/\partial S = -\partial P/\partial T \cdot \partial T/\partial S$ /5.20/

Известно из термодинамики, что $dS = dQ/T$ /5.21/

где dQ - приращение тепла, причем $dQ = dT \rho c J$ /5.22/

Тогда из /5.20/ с учетом /5.21/ и /5.22/ получим искомое соотношение /5.17/:

$$\vec{\eta} = -\vec{\gamma} T / \rho c J$$

Электрокалорический эффект за счет внешних электрических полей может привести как к нагреву, так и к охлаждению кристалла. Результат зависит при этом как от знака $\vec{\eta}$, так и от направления поля \vec{E} . При положительном $\vec{\eta}$ и поле \vec{E} , параллельном вектору спонтанной поляризации \vec{P}_s , температура кристалла повышается; при положительном $\vec{\eta}$ и поле \vec{E} , противоположном вектору \vec{P}_s , кристалл охлаждается. Величина электрокалорического эффекта мала. Так, пластинка турмалина толщиной 1 мм при приложении 500 В меняет свою температуру всего на $5 \cdot 10^{-4}$.

5.3. Упражнения

- Используя принцип Неймана, определить ненулевые компоненты векторного свойства кристалла $4mm$.
- Будут ли обнаруживать пьезоэлектрический эффект кристаллы: а/ кварца; б/ арсенида галлия / классе $3m$ / ?
- Почему у кубических кристаллов невозможен пьезоэффект?
- Почему наличие в кристалле пьезоэффекта заставляет предполагать и наличие пьезоэффекта, но не наоборот?
- Кристалл кварца растянули: а/ вдоль направления $[0001]$; б/ вдоль направления $[10\bar{1}0]$. В каком из указанных случаев в кристалле может наблюдаться изменение поляризации при нагревании?
- Выдержит ли пластинка из кристалла триглицинсульфата / TGS / резкое понижение температуры от 49°C / точки Кюри / до 39°C ? / Электрическую прочность кристалла принять равной 40 кВ/см . Группа симметрии кристалла TGS в парафазе равна $2/m$, в сегнетофазе - 2. Направление оси 2 принимается за направление оси x_2 . Принять для пьезокоэффициента γ_2 значение, равное 500 ед. CGSE.

Глава 6. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ВТОРОГО РАНГА

Математика есть способ называть разные вещи одним именем.

Анри Пуанкаре

6.1. Тензоры второго ранга и их свойства

Тензорами второго ранга описываются многие физические свойства кристаллов. Как можно видеть из соотношения /5.1/, тензоры второго ранга связывают между собой два вектора. По симметрии различают полярные и аксиальные тензоры второго ранга.

Полярными тензорами второго ранга связываются либо два полярных, либо два аксиальных вектора. Отметим здесь, что имеется также полярный тензор второго ранга, связывающий деформацию /полярный тензор второго ранга/ и температуру /скаляр/, который описывает эффект термического расширения в кристаллах /что также не противоречит соотношению /5.17/. Полярными тензорами второго ранга описываются электропроводность σ кристалла, связывающая два полярных вектора - ток и электрическое поле; диэлектрическая проницаемость ϵ , связывающая два полярных вектора - электрическое поле \vec{E} и индукцию \vec{D} ; магнитная проницаемость μ , связывающая два аксиальных вектора - магнитное поле и намагниченность \vec{H} ; механическая деформация, связывающая между собой два полярных вектора - силу и смещение, и др.

Аксиальными тензорами второго ранга связываются между собой два разных по симметрии вектора - полярный и аксиальный. Так, аксиальным тензором описывается оптическая активность кристалла, связывающая между собой полярный вектор /направление распространения света/ и аксиальный вектор /угол поворота плоскости поляризации света/. Прежде чем дать определение тензора второго ранга, приведем некоторые примеры.

1. Рассмотрим тензор удельной электропроводности $[\sigma_{ij}]$. Как известно, закон Ома в кристаллах в векторной форме имеет вид

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad /6.1/$$

где σ в анизотропных кристаллах зависит от направления. В тензорной форме закон в общем случае записывается в ортогональной системе координат в виде системы трех уравнений:

$$\begin{aligned} J_1 &= \sigma_{11} E_1 + \sigma_{12} E_2 + \sigma_{13} E_3 \\ J_2 &= \sigma_{21} E_1 + \sigma_{22} E_2 + \sigma_{23} E_3 \\ J_3 &= \sigma_{31} E_1 + \sigma_{32} E_2 + \sigma_{33} E_3 \end{aligned} \quad /6.2/$$

Систему уравнений /6.2/ можно выразить следующим образом:

$$j_i = \sigma_{ij} E_j, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad /6.3/$$

или в форме матрицы

$$\begin{bmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{bmatrix} = [\sigma_{ij}] \cdot \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix}, \quad /6.4/$$

где тензор

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad /6.5/$$

определяет удельную электропроводность кристалла.

Таким образом, в отличие от изотропных тел в анизотропных кристаллах для определения σ требуется задание не одного числа, девяти чисел σ_{ij} /компонент тензора/. Конкретные значения компонент σ_{ij} зависят от выбора системы координат, связанной с кристаллом.

Можно показать, что при симметрическом преобразовании /при переходе от старой системы координат к новой/ величины компонент σ преобразуются по закону

$$\sigma'_{ij} = \sigma_{kl} c_{ki} c_{lj} \quad /6.6/$$

Напомним, что этот закон аналогичен таковому для двойного произведения координат /3.II/:

Многие физические свойства кристаллов описываются симметричными тензорами второго ранга. В нашем примере это означает, что для компонент σ_{ij} справедливы соотношения $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, которые сокращают число независимых компонент тензора $[\sigma_{ij}]$ от 9 до 6. При учете симметрии кристаллов высшей и средней категорий указанное число может быть уменьшено.

2. Тензор $[\sigma_{ij}]$ можно назвать прямым тензором, связывающим векторы \vec{j} и \vec{E} . Однако, используя тензор удельного сопротивления $[\rho_{ij}]$ можно выразить компоненты вектора \vec{E} через компоненты \vec{j} плотности тока:

$$E_i = \rho_{ij} j_j \quad /6.7/$$

где полярный симметричный тензор второго ранга $[\rho_{ij}]$ является обратным к прямому тензору удельной электропроводности $[\sigma_{ij}]$.

Компоненты ρ_{ij} обратного тензора могут быть найдены из соотношения

$$\rho_{ij} = (-1)^{i+j} \Delta_{ij}^c / \Delta^c \quad /6.8/$$

где Δ_{ij}^c - минор, полученный из определителя зачеркиванием i -той строки и j -того столбца; Δ^c - определитель /из компонент прямого тензора/.

Заметим по /6.8/, что тензор имеет обратный себе лишь в том случае, если все три главные значения отличны от нуля.

3. Диэлектрическая проницаемость ϵ анизотропного кристалла связывает линейным соотношением два непараллельных полярных вектора $\vec{E} = \vec{D}$:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad /6.9/$$

$$\begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{bmatrix} = [\epsilon_{ij}] \cdot \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix} \quad /6.10/$$

$$D_i = \epsilon_{ij} E_j, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad /6.II/$$

где $[\epsilon_{ij}]$ является полярным симметричным тензором второго ранга. Закон преобразования компонент ϵ_{ij} при операциях симметрии аналогичен /6.6/.

Прямому тензору $[\epsilon_{ij}]$ соответствует обратный ему тензор диэлектрической непроницаемости $[\eta_{ij}]$, связывающий векторы \vec{E} и \vec{D} :

$$E_i = \eta_{ij} D_j \quad /6.12/$$

Компоненты обратного тензора η_{ij} вычисляются через компоненты прямого с помощью соотношения, аналогичного /6.8/.

Подобные рассуждения можно продолжить также и для других тензоров второго ранга. Обобщим их в виде тензоров $[\tau_{ij}]$.

Совокупность величин τ_{ij} , которую принято записывать символом $[\tau_{ij}]$ или в развернутом виде

$$\begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix}$$

аналогичном матрице направляющих косинусов, и в которой каждый элемент τ_{ij} при переходе к новой системе координат преобразуется по закону $\tau'_{ij} = \sigma_{ik} \sigma_{jl} \tau_{kl}$, называется полярным тензором второго ранга. Тензор $[\tau_{ij}]$ симметричен, если $\tau_{ij} = \tau_{ji}$. В этом случае он будет содержать 6 независимых компонент /для кристаллов триклинной сингонии/.

Рассмотрим некоторые свойства таких тензоров:

1/ сумма двух полярных тензоров второго ранга есть полярный тензор второго ранга, причем его компоненты равны сумме соответствующих компонент исходных тензоров;

2/ произведение полярного тензора второго ранга на скаляр есть полярный тензор второго ранга, причем все компоненты его умножаются на этот скаляр;

3/ тензором, сопряженным данному, называется такой тензор, у которого строка стала столбцом и наоборот;

4/ тензор, обладающий тем свойством, что $T_{ij} = T_{ji}$, называется симметричным. У него всего 6 компонент;

5/ тензор, сопряженный с симметричным, равен ему:

$$[T_{ij}]^{comp} = [T_{ij}]_{sym} \quad ; \quad /6.13/$$

6/ тензор, обладающий тем свойством, что $T_{ij} = -T_{ji}$, и у которого диагональные элементы равны нулю, называется антисимметричным. У него всего три компонента:

$$\begin{bmatrix} 0 & T_{12} & T_{13} \\ -T_{12} & 0 & T_{23} \\ -T_{13} & -T_{23} & 0 \end{bmatrix} ;$$

7/ тензор второго ранга, сопряженный с антисимметричным тензором, отличается от него только знаком:

$$[T_{ij}]^{comp} = -[T_{ij}]_{ant} \quad ; \quad /6.14/$$

8/ любой полярный тензор второго ранга можно разложить и при этом единственным способом на сумму двух тензоров, из которых один будет симметричным, а другой - антисимметричным:

$$[T_{ij}] = [T_{ij}]_{sym} + [T_{ij}]_{ant} \quad /6.15/$$

Ввиду важности данного свойства для дальнейшего изложения докажем его. Запишем полярный тензор второго ранга в виде /6.15/:

$$[T_{ij}] = [T_{ij}]_{sym} + [T_{ij}]_{ant}$$

Запишем также подобное соотношение для сопряженных тензоров:

$$[T_{ij}]^{comp} = [T_{ij}]_{sym}^{comp} + [T_{ij}]_{ant}^{comp} \quad /6.16/$$

Тогда с учетом свойств /6.13/ и /6.14/ соотношение /6.16/ примет вид

$$[T_{ij}]^{comp} = [T_{ij}]_{sym} - [T_{ij}]_{ant} \quad /6.17/$$

Из суммы равенств /6.15/ и /6.17/ получим

$$[T_{ij}]_{sym} = \frac{[T_{ij}] + [T_{ij}]^{comp}}{2} \quad /6.18/$$

Из разности соотношений /6.15/ и /6.17/ имеем

$$[T_{ij}]_{ant} = \frac{[T_{ij}] - [T_{ij}]^{comp}}{2} \quad /6.19/$$

Тогда, складывая обе части /6.18/ и /6.19/, получим искомое соотношение /6.15/, из которого видно, что симметрия полярного тензора второго ранга в соответствии с принципом суперпозиции симметрий

будет определяться пересечением группы симметрии симметричного и антисимметричного тензоров. В дальнейшем это мы используем.

6.2. Симметричные полярные тензоры второго ранга

6.2.1. Характеристическая поверхность 2-го порядка

Рассмотрим уравнение

$$S_{ij} x_i x_j = 1. \quad /6.20/$$

где $i, j = 1, 2, 3$, а S_{ij} - коэффициенты / пока укажем, что это компоненты полярного тензора второго ранга/.

Выполняя суммирование по i и j , получим:

$$S_{11} x_1^2 + S_{12} x_1 x_2 + S_{13} x_1 x_3 + S_{21} x_2 x_1 + S_{22} x_2^2 + S_{23} x_2 x_3 + S_{31} x_3 x_1 + S_{32} x_3 x_2 + S_{33} x_3^2 = 1. \quad /6.21/$$

Положив $S_{ij} = S_{ji}$ и объединив подобные члены, имеем:

$$S_{11} x_1^2 + S_{22} x_2^2 + S_{33} x_3^2 + 2S_{12} x_1 x_2 + 2S_{13} x_1 x_3 + 2S_{23} x_2 x_3 = 1. \quad /6.22/$$

Полученное уравнение есть общее уравнение поверхности 2-го порядка с центром в начале координат.

Равенство /6.20/ может быть преобразовано к новым осям ox'_i с помощью уравнений

$$x_i = c_{ki} x'_k \quad ; \quad x_j = c_{lj} x'_l \quad /6.23/$$

аналогичных соотношениям /3.10/, но отнесенных порождению от новых систем координат к старым. Тогда уравнение /6.20/ примет вид

$$S'_{ij} c_{ki} c_{lj} x'_k x'_l = S'_{kl} x'_k x'_l = 1 \quad /6.24/$$

где $S'_{kl} = c_{ki} c_{lj} S_{ij}$. Поскольку мы положили $S_{ij} = S_{ji}$, то на основании результата /6.25/ можно сказать, что коэффициенты S'_{ij} поверхности 2-го порядка /6.20/ преобразуются подобно компонентам симметричного полярного тензора второго ранга $[T_{ij}]$. Поэтому поверхность /6.20/ называется характеристической поверхностью 2-го порядка для симметричного полярного тензора второго ранга $[S_{ij}]$.

Таким образом, эта поверхность может быть использована для описания любого симметричного полярного тензора второго ранга и, в частности, для описания любого физического свойства кристаллов, представляемого таким тензором. Добавим здесь, что размерность величин x_1, x_2, x_3 в уравнении /6.20/ определяется размерностью S_{ij} и равна $1/\sqrt{\text{размерность } S_{ij}}$.

6.2.2. Главные оси характеристической поверхности 2-го порядка

Важным свойством поверхностей 2-го порядка является то, что их можно привести к так называемым главным осям - трём локальным под

прямыми углами друг к другу направлениям, по отношению к которым (если их выбрать за оси координат) общее уравнение /6.20/ сводится к упрощенной форме:

$$S_{11}x_1^2 + S_{22}x_2^2 + S_{33}x_3^2 = 1 \quad /6.26/$$

Рассмотрим один из методов приведения /см. также гл. 7/.

Определяющим свойством главных осей является то обстоятельство, что в точке их пересечения с характеристической поверхностью нормаль к поверхности параллельна радиусу-вектору. Обозначим через P точку на характеристической поверхности, заданной уравнением /6.20/ а через \vec{X} - вектор OP . Тогда, если мы образуем вектор $S_{ij}X_j$, то в соответствии со свойством радиуса-вектора и нормали к характеристической поверхности этот вектор будет параллелен нормали в т. Радус-вектор и нормаль должны быть параллельны при условии пропорциональности их соответствующих компонент, т.е.

$$S_{ij}X_j = \lambda X_i \quad /6.27/$$

где λ - константа; $i, j = 1, 2, 3$ или

$$(S_{ij} - \lambda \delta_{ij})X_j = 0 \quad /6.28/$$

Полученная система трех линейных однородных уравнений в переменных X_i имеет отличные от нуля решения лишь в том случае, если детерминант $F(\lambda)$, составленный из коэффициентов уравнений, равен нулю

$$F(\lambda) = \begin{vmatrix} S_{11} - \lambda & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} - \lambda & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad /6.29/$$

Это кубическое уравнение называется веговым уравнением тензора $[S_{ij}]$. Три его корня $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ дают значения диагональных компонент тензора $[S_{ij}]$ в главных осях. В то же время каждый из корней определяет направление, в котором радиус-вектор поверхности 2-го порядка параллелен одной из главных осей.

Другим известным методом нахождения главных компонент тензора второго ранга является метод построения окружности Мора, связанный с поворотом тензора вокруг главных осей /см. в книге Др. Ная/

Следовательно, симметричный тензор второго ранга, так же как и любая поверхность 2-го порядка, при приведении к главным осям принимает простейшую форму:

$$[S_{ij}] = \begin{bmatrix} S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & S_{22} & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} \end{bmatrix} \quad /6.30/$$

Здесь числа S_{11}, S_{22}, S_{33} - главные компоненты тензора или свойства которое он описывает.

X/см. также Приложение.

6.2.3. Геометрический образ симметричных полярных тензоров второго ранга

Если сравнить /6.26/ с уравнением

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1, \quad /6.31/$$

то можно видеть, что полуоси характеристической поверхности 2-го порядка имеют длину $1/\sqrt{S_{11}}, 1/\sqrt{S_{22}}, 1/\sqrt{S_{33}}$.

В случае, когда величины S_{11}, S_{22}, S_{33} положительны, поверхность /6.26/ представляет собой эллипсоид общего вида, а вид тензора имеет форму /6.30/.

Следовательно, геометрическими образами симметричных полярных тензоров второго ранга являются:

- 1/ эллипсоид общего вида $[S_{11} \neq S_{22} \neq S_{33}]$, группа симметрии mmm ;
- 2/ эллипсоид вращения $[S_{11} = S_{22} \neq S_{33}]$, группа симметрии ∞/mmm ;
- 3/ сфера $[S_{11} = S_{22} = S_{33}]$, группа симметрии $\infty\infty m$.

6.2.1. Геометрические свойства поверхности 2-го порядка

Первое свойство. Длина радиуса-вектора характеристической поверхности 2-го порядка численно равна единице, деленной на корень квадратный из величины S , определяющей физическое свойство в том же направлении.

Докажем это свойство. Итак, имеем поверхность 2-го порядка для тензора $[S_{ij}]$, заданную уравнением /6.20/:

$$S_{ij}x_i x_j = 1.$$

Пусть ℓ_i - направляющие косинусы вектора $OP = \vec{r}$ /рис. 6.1/.

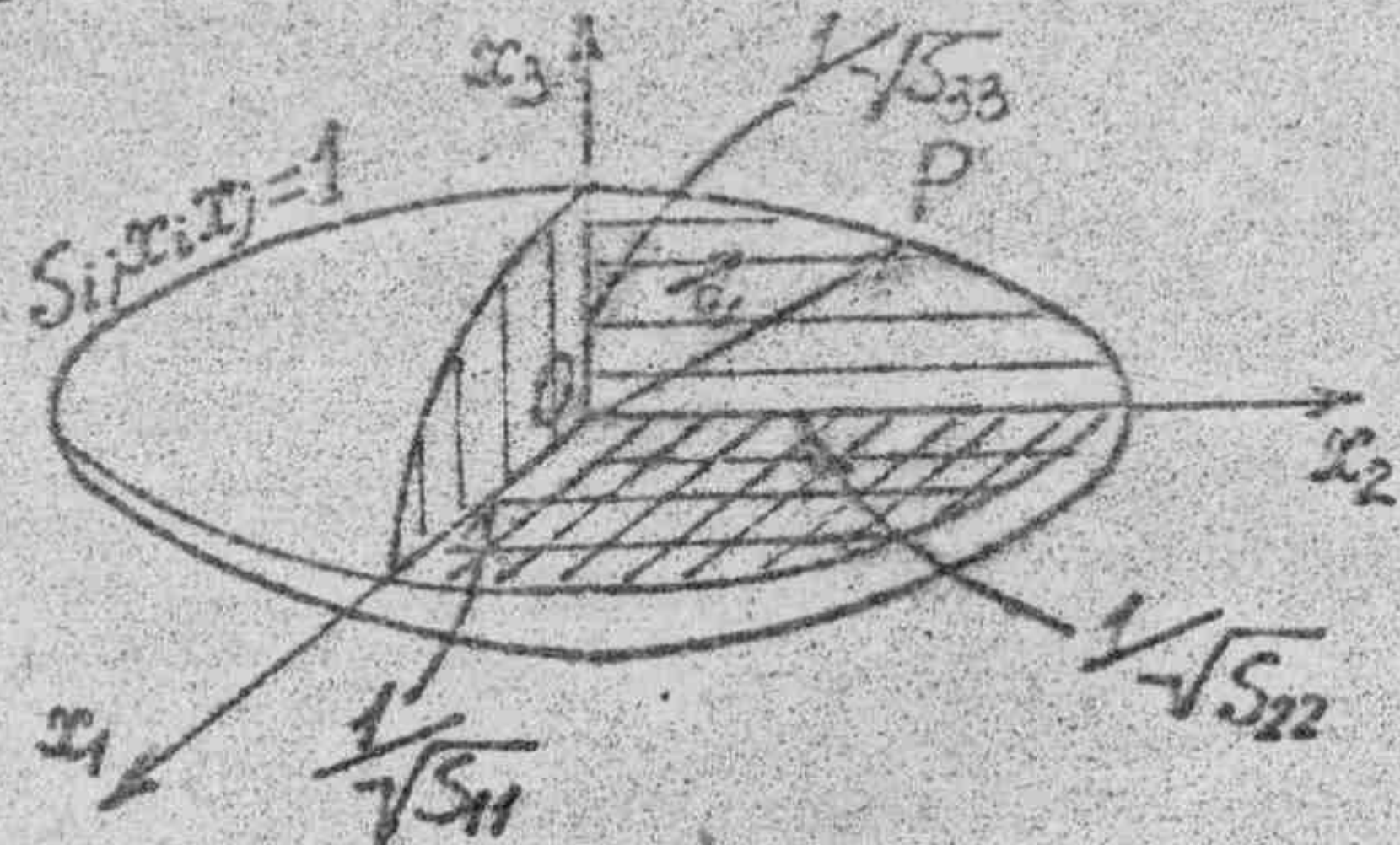


Рис. 6.1. Характеристическая поверхность 2-го порядка для тензора $[S_{ij}]$

Тогда $x_i = l_i r$. При подстановке таких значений x_i в /6.20/ получим

$$r^2 S_{ij} l_i l_j = 1, \quad /6.52/$$

откуда

$$r = 1/\sqrt{S}. \quad /6.53/$$

где $S = S_{ij} l_i l_j$ - величина S в направлении l_i .

Второе свойство. Если два вектора \vec{p} и \vec{q} связаны между собой тензором $[S_{ij}]$ второго ранга: $p_i = S_{ij} q_j$, то направление \vec{p} для заданного \vec{q} можно найти построением параллельного \vec{q} радиус-вектора $\vec{OP} = \vec{r}$ характеристической поверхности и затем восстановлением нормали к этой поверхности в точке P /рис. 6.2/.

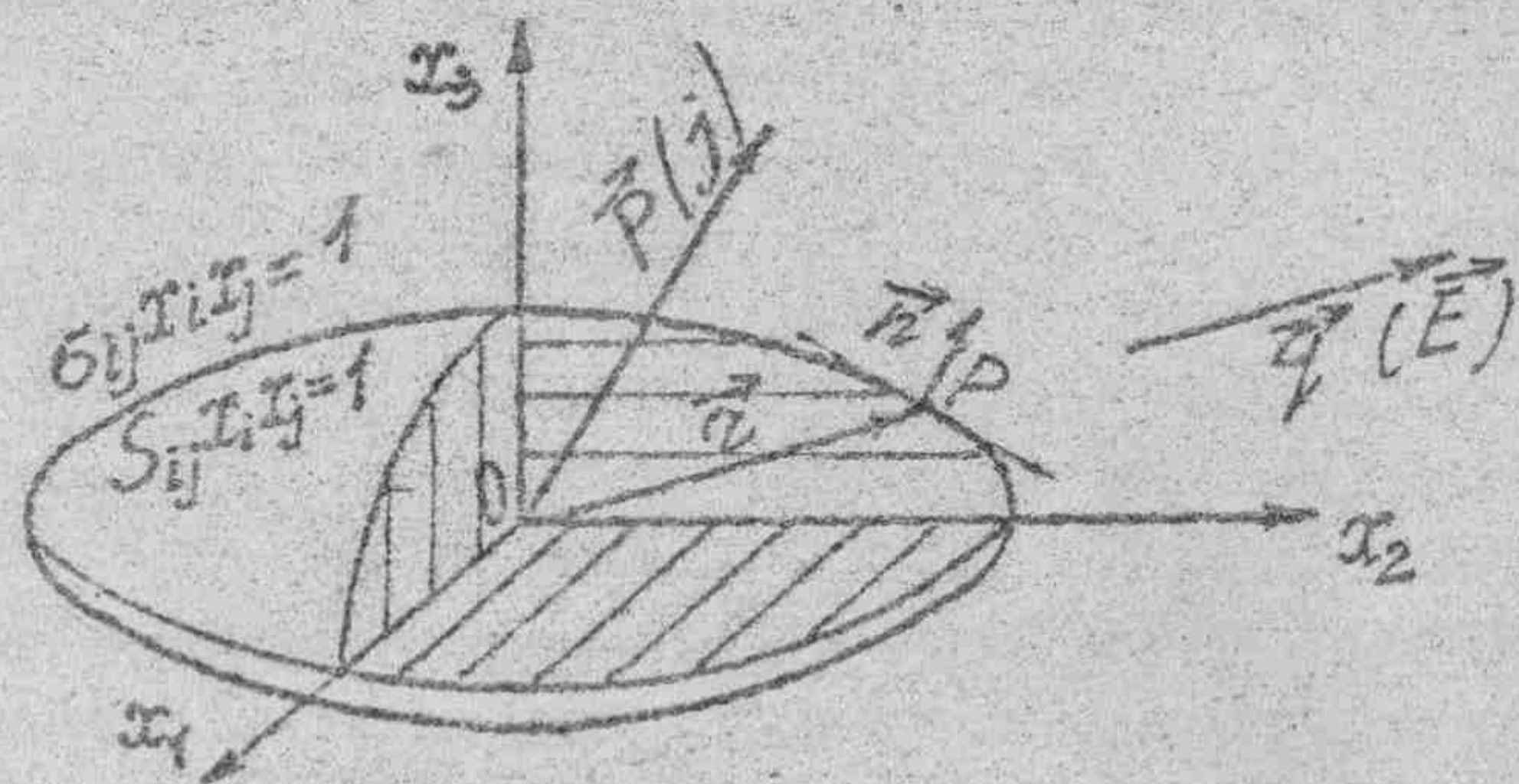


Рис. 6.2. К свойству радиуса-вектора и нормали характеристической поверхности 2-го порядка

Рассмотрим это свойство на конкретном примере тензора $[G_{ij}]$ симметричного вектора \vec{J} и \vec{E} .

Пусть на рис. 6.2 оси ox_i - главные оси тензора $[G_{ij}]$. Пусть вектор $\vec{E} = [G_{11}l_1E, G_{22}l_2E, G_{33}l_3E]$, где l_1, l_2, l_3 - направляющие косинусы. Тогда $\vec{J} = [G_{11}l_1E, G_{22}l_2E, G_{33}l_3E]$. Следовательно, направляющие косинусы радиус-вектора $G_{11}l_1, G_{22}l_2, G_{33}l_3$. Если точка P /рис. 6.2/ есть точка на поверхности

$$G_{11}x_1^2 + G_{22}x_2^2 + G_{33}x_3^2 = 1,$$

то отрезок $OP = \vec{r}$ параллелен \vec{E} , то координаты точки P будут равны $l_1 r, l_2 r, l_3 r$, т.е. $OP = [l_1 r, l_2 r, l_3 r]$. Тогда плоскость касательная к поверхности в т. P , будет иметь вид

$$r l_1 G_{11} x_1 + r l_2 G_{22} x_2 + r l_3 G_{33} x_3 = 1.$$

Отсюда можно видеть, что нормаль в т. P имеет направляющие косинусы, пропорциональные $l_1 G_{11}, l_2 G_{22}, l_3 G_{33}$, т.е. нормаль в т. P параллельна вектору \vec{J} . Поэтому на рис. 6.2 при заданном $\vec{q}(\vec{E})$ вектор $\vec{p}(\vec{J})$ проведен в направлении, параллельном нормали в т. P .

Третье свойство. Пусть снова два вектора \vec{p} и \vec{q} связаны соотношением $\vec{p} = S\vec{q}$ или $p_i = S_{ij} q_j$, где $[S_{ij}]$ - тензор второго ранга. Тогда, если q_j имеет единичную длину и вращается вокруг начала координат, то концы p_i описывает эллипсоид вида

$$\frac{x_1^2}{S_{11}^2} + \frac{x_2^2}{S_{22}^2} + \frac{x_3^2}{S_{33}^2} = 1.$$

Данное свойство можно показать также на примере тензора $[G_{ij}]$ что и предоставляем сделать читателю.

Рассмотренные свойства являются общими для всех полярных тензоров второго ранга, описывающих физические свойства кристаллов.

6.3. Точечные группы симметрии полярных тензоров второго ранга

Теперь мы можем найти точечные группы симметрии полярных тензоров второго ранга, подразумевая под ними симметрию геометрических образов.

Мы видели, что любой полярный тензор второго ранга можно представить как сумму симметричного и антисимметричного тензоров. Мы видели также, что симметричный тензор второго ранга соответствующим преобразованием системы координат можно привести к диагональному виду. Было показано, что симметрия симметричных тензоров определяется симметрией их геометрических образов и описывается тремя группами симметрии: mmm , ∞/mmm и ∞/m . Что же касается антисимметричных тензоров второго ранга, то они одновременно являются аксиальными векторами. Следовательно, их симметрия должна описываться предельной группой симметрии Кюри ∞/m .

Теперь с помощью рассмотренного ранее принципа суперпозиции симметрий можно найти точечные группы симметрии полярных тензоров второго ранга как общие высшие подгруппы точечных групп симметрии симметричных и антисимметричных тензоров при заданных ориентациях их элементов симметрии.

Так, если наложить на группу mmm группу ∞/m таким образом, что ось ∞ будет располагаться по направлениям $[100]$, $[010]$ или $[001]$, то общей высшей подгруппой этих групп будет $2/m$.

Аналогично, если на группу mmm наложить группу ∞/m таким образом, что ось ∞ будет располагаться по направлению $[hkl]$, то получим группу $\bar{1}$. То же следует проделать и с группами ∞/mmm и ∞/m . Рассмотрение приводит к следующим результатам:

$$\infty/mmm \cap \infty/m = \infty/m$$

$$\infty/[001]$$

$$\infty/mmm \cap \infty/m = 2/m$$

$$\infty/[010], [100]$$

$$\infty/mmm \cap \infty/m = \bar{7}$$

$$\infty/m \cap \infty/m = \infty/m$$

Кроме того, необходимо учесть вариант, когда антисимметричный тензор второго ранга равен нулю.

Тогда получим все возможные точечные группы симметрии полярных тензоров второго ранга: $\bar{1}$, $2/m$, mmm , ∞/m , ∞/mmm и $\infty\infty/m$. Из рассмотрения этих шести групп симметрии следует очень важный вывод: все они содержат в качестве элемента симметрии центр симметрии. Следовательно, если физическое свойство описывается полярным тензором второго ранга, то это свойство центросимметрично.

В табл. 6.1 представлен вид и симметрия тензоров второго ранга для всех кристаллографических сингоний. Это очень важная для кристаллофизики таблица. Она показывает, что если физическое свойство описывается полярным тензором второго ранга, то зависимость его от направления в кристалле для каждой кристаллографической системы имеет свой вид. Каждый тензор имеет свою симметрию и описывает физические свойства кристаллов, принадлежащие к точечной группе симметрии тензора и к её подгруппам.

Симметричность ряда полярных тензоров второго ранга, описывающих свойства в кристалле, можно показать на основании закона сохранения энергии.

В качестве примера докажем симметричность тензора диэлектрической проницаемости $[\epsilon_{ij}]$, т.е. $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$.

С этой целью рассмотрим плоский конденсатор с кристаллической пластинкой толщиной l , подключенный к батарее. При изменении поляризации кристалла на обкладках конденсатора появятся новые поверхностные заряды с плотностью $+d\sigma$ и $-d\sigma$ на единицу площади. При этом батареей будет произведена работа $S \cdot 4\pi d\sigma$, где S - площадь обкладок конденсатора. Эту работу можно выразить через \vec{E} и \vec{D} через их изменение в кристалле.

Из электростатики известно, что плотность зарядов σ равна нормальной компоненте \vec{D} в кристалле. Следовательно, в случае, если электрическое поле полностью заключено в кристалле, то работа батареи может быть выражена в виде $S \cdot 4\pi d\sigma = S \cdot 4\pi dD_n = V \cdot dD_n = V \cdot E_i dD_i$, где V - объем кристалла, так как электрическое поле нормально к обкладкам конденсатора.

Итак, приращение энергии конденсатора / для изотермического обратимого процесса - это приращение свободной энергии, определяемое соотношением

$$dW = V E_i dD_i \quad /6.34/$$

Таблица 6.1

Симметричные полярные тензоры второго ранга

Сингония	Симметрия тензора	Вид тензора
Тригональная	$\bar{1}$	$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ & T_{22} & T_{23} \\ & & T_{33} \end{bmatrix}$
Моноклинная	$2/m$	$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ & T_{22} & 0 \\ & & T_{33} \end{bmatrix}$
Ромбическая	mmm	$\begin{bmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ & T_{22} & 0 \\ & & T_{33} \end{bmatrix}$
Тригональная	∞/mmm	$\begin{bmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ & T_{11} & 0 \\ & & T_{33} \end{bmatrix}$
Тетрагональная		
Гексагональная		
Кубическая	$\infty\infty/m$	$\begin{bmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ & T_{11} & 0 \\ & & T_{11} \end{bmatrix}$

Но при использовании уравнения /6.11/ имеем

$$dW = V \epsilon_{ij} E_i dE_j \quad /6.35/$$

Мы получили W как функцию одних лишь независимых переменных E_1 , E_2 и E_3 . Для такой функции, как известно,

$$\frac{\partial}{\partial E_1} \left(\frac{\partial W}{\partial E_2} \right) = \frac{\partial}{\partial E_2} \left(\frac{\partial W}{\partial E_1} \right) \quad /6.36/$$

Уравнение /6.35/ в развернутом виде примет вид

$$dW = V (\epsilon_{11} E_1 dE_1 + \epsilon_{12} E_1 dE_2 + \epsilon_{13} E_1 dE_3 + \epsilon_{21} E_2 dE_1 + \epsilon_{22} E_2 dE_2 + \epsilon_{23} E_2 dE_3 + \epsilon_{31} E_3 dE_1 + \epsilon_{32} E_3 dE_2 + \epsilon_{33} E_3 dE_3) \quad /6.37/$$

Следовательно,

$$\frac{1}{V} \frac{\partial W}{\partial E_1} = \epsilon_{11} E_1 + \epsilon_{21} E_2 + \epsilon_{31} E_3 \quad /6.38/$$

$$\frac{1}{V} \frac{\partial W}{\partial E_2} = \epsilon_{12} E_1 + \epsilon_{22} E_2 + \epsilon_{32} E_3 \quad /6.39/$$

Отсюда, дифференцируя /6.38/ по E_2 и /6.39/ по E_1 , получим: $\epsilon_{12} = \epsilon_{21}$. Аналогичным путем можно доказать, что $\epsilon_{13} = \epsilon_{31}$ и $\epsilon_{23} = \epsilon_{32}$. Значит, тензор $[\epsilon_{ij}]$ является симметричным.

Можно доказать симметричность и других тензоров второго ранга /магнитной проницаемости, удельной электропроводности, теплопроводности и др./, что и предоставляется читателю сделать самому.

Тем не менее, рассматривая вопрос о симметрии тензоров второго ранга, нельзя не упомянуть здесь так называемый принцип Онсагера - общий принцип, приложимый ко всем явлениям переноса. Кратко рассмотрим его.

Уравнение, описывающее электрический ток в изотропном материале, $\vec{J} = -\sigma \text{grad } \psi$, можно записать в виде

$$\vec{J}_1 = L_1 \vec{X}_1, \quad /6.40/$$

где $\vec{J}_1 = \vec{J}$; $\vec{X}_1 = -\text{grad } \psi$. Здесь вектор \vec{J}_1 представляет собой поток заряда, а \vec{X}_1 - силу.

Аналогично, поток тепла пропорционален силе, согласно уравнению

$$\vec{J}_2 = L_2 \vec{X}_2, \quad /6.41/$$

где вектор \vec{J}_2 есть плотность теплового потока, а сила $\vec{X}_2 = -(1/T)\text{grad } T$; T - абсолютная температура. Уравнения /6.40/ и /6.41/ справедливы в том виде, в каком они записаны, в случае, если бы оба процесса - перенос электричества и перенос тепла - происходили независимо друг от друга. Однако в общем случае данное условие не выполняется и поэтому необходимо применять более универсальные уравнения:

$$\vec{J}_1 = L_{11} \vec{X}_1 + L_{12} \vec{X}_2, \quad /6.42/$$

$$\vec{J}_2 = L_{21} \vec{X}_1 + L_{22} \vec{X}_2,$$

в каждом из которых потоки линейно связаны с обеими силами, а не только с одной из них.

Принцип Онсагера утверждает, что в таком случае при условии правильного выбора потоков и сил

$$L_{12} = L_{21}. \quad /6.43/$$

В более общем случае, когда количество потоков / и соответственно сил / больше двух, уравнения /6.42/ записываются в виде

$$\vec{J}_i = L_{ij} \vec{X}_j, \quad L_{ij} = L_{ji}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n. \quad /6.44/$$

Согласно принципу Онсагера

$$L_{ij} = L_{ji}. \quad /6.45/$$

Важно подчеркнуть, что прежде чем применять принцип Онсагера, следует правильно выбрать \vec{J} и \vec{X} в уравнениях /6.42/ и /6.44/.

Интересно также отметить, что при наличии магнитных полей соотношения /6.45/ заменяются уравнениями

$$L_{ij}(\vec{H}) = L_{ji}(-\vec{H}). \quad /6.46/$$

6.4. Аксиальные тензоры второго ранга

Как мы уже указывали в начале главы, аксиальный тензор второго ранга устанавливает связь между полярным и аксиальным векторами.

Под аксиальными тензорами второго ранга мы будем понимать тензор $[T_{ij}]$, отличающийся от соответствующего полярного тензора только тем, что в формуле преобразования компонент тензора

$$T'_{ij} = \pm c_{ik} c_{jl} T_{kl} \quad /6.47/$$

стоят два знака - плюс и минус, причем плюс берется в том случае, если новая и старая системы координат одинаковы /обе правые или обе левые/, минус же применяется тогда, когда одна система энантиморфна другой.

Академик А.В. Шубников впервые показал, что существует девять разниц по своей точечной симметрии аксиальных тензоров второго ранга: $1, 2, 22, \infty, \infty 2, \infty \infty, m, m2, 12m$.

Отличительной особенностью указанных групп симметрии аксиальных тензоров второго ранга является отсутствие центра симметрии. Следовательно, физическое свойство в кристалле, описываемое аксиальным тензором второго ранга, должно быть нецентросимметрично. Так, объект оптической активности /гирации/ может наблюдаться в 15/из 21/ нецентросимметричных классах симметрии, поскольку по условиям симметрии он не наблюдается в классах $\bar{6}, \bar{6}m2, \bar{4}3m, 3m, 4mm, 6mm$.

Рассмотренные нами полярные и аксиальные тензоры /шесть полярных и девять аксиальных/ являются материальными тензорами, поскольку их симметрия зависит от симметрии кристалла, физическое свойство которого они описывают. В отличие от них имеются также полевые тензоры второго ранга, симметрия которых не зависит от симметрии кристалла, они близки по смыслу к "силе", приложенной к кристаллу /например, тензор механических напряжений/. В остальном все свойства характеристической поверхности 2-го порядка для полевых тензоров те же. Вид некоторых полевых тензоров второго ранга будет приведен в разд. 6.6.

6.5. Оптическая индикатриса кристалла

В данном разделе кратко остановимся на рассмотрении симметричных полярных тензоров второго ранга для описания оптических свойств кристаллов.

Для описания распространения света в анизотропном кристалле

можно использовать эллипсоид Френеля — характеристическую поверхность тензора диэлектрической проницаемости $[\epsilon_{ij}]$, т.е. эллипсоид, определяемый уравнением

$$\epsilon_{11}x_1^2 + \epsilon_{22}x_2^2 + \epsilon_{33}x_3^2 = 1 \quad /6.48/$$

которое в главных осях имеет вид

$$\epsilon_{11}x_1^2 + \epsilon_{22}x_2^2 + \epsilon_{33}x_3^2 = 1 \quad /6.49/$$

Это уравнение можно записать иначе, введя в него показатели преломления кристалла.

Используя соотношение /справедливое в области оптических частот /

$$E = n^2 \quad /6.50/$$

уравнение /6.49/ запишется следующим образом:

$$\frac{x_1^2}{n_{11}^2} + \frac{x_2^2}{n_{22}^2} + \frac{x_3^2}{n_{33}^2} = 1 \quad /6.51/$$

Как и /6.49/, это уравнение является выражением для эллипсоида через коэффициенты преломления кристалла, определяющие скорость света в кристалле.

В ряде случаев лучше использовать так называемую оптическую индикатрису кристалла, т.е. характеристическую поверхность тензора диэлектрической непроницаемости. Этот эллипсоид определяется уравнением

$$\eta_{11}x_1^2 + \eta_{22}x_2^2 + \eta_{33}x_3^2 = 1 \quad /6.52/$$

или в главных осях

$$\eta_{11}x_1^2 + \eta_{22}x_2^2 + \eta_{33}x_3^2 = 1 \quad /6.53/$$

где η_{ij} являются компонентами тензора, обратного тензору $[\epsilon_{ij}]$. В литературе по кристаллооптике вместо символов η_{ij} , как компонент тензора диэлектрической непроницаемости, очень часто используются символы α_{ij} — так называемые полярizationные константы.

Используя снова соотношение /6.50/, уравнение /6.52/ перепишем в форме

$$\frac{x_1^2}{\alpha_{11}} + \frac{x_2^2}{\alpha_{22}} + \frac{x_3^2}{\alpha_{33}} = 1 \quad /6.54/$$

Это и есть уравнение оптической индикатрисы — эллипсоида показателей преломления кристалла; полуоси эллипсоида равны значениям показателей преломления n_{11}, n_{22}, n_{33} , измеренным вдоль главных осей кристалла. Зная величины полуосей оптической индикатрисы, её форму и ориентацию в кристалле, можно определить скорости, показатели преломления в плоскости колебаний для световых волн, распространяющихся в кристалле в любом направлении.

Понятие оптической индикатрисы оказывает неопенимую помощь при исследовании электро-, пьезо-, акусто- и магнитооптических эффектов

в кристаллах, суть которых, в основном, сводится к "деформации" оптических индикатрис кристаллов под влиянием внешних воздействий /электрических полей, механических напряжений, звуковых волн и др./ и, следовательно, к изменению полярizationных констант кристалла. Примеры таких явлений будут рассмотрены в последующих главах.

6.6. Тензоры однородной деформации и напряжения

Рассмотрим в качестве примера полевых тензоров второго ранга, необходимого для анализа пьезоэлектрических и пьезооптических эффектов в кристаллах. Представим однородную деформацию в кристалле /рис. 6.3/, когда одна точка С кристалла не претерпевает никаких перемещений. Если мы выберем за начало координат и посмотрим, что произойдет с другими точками кристалла.

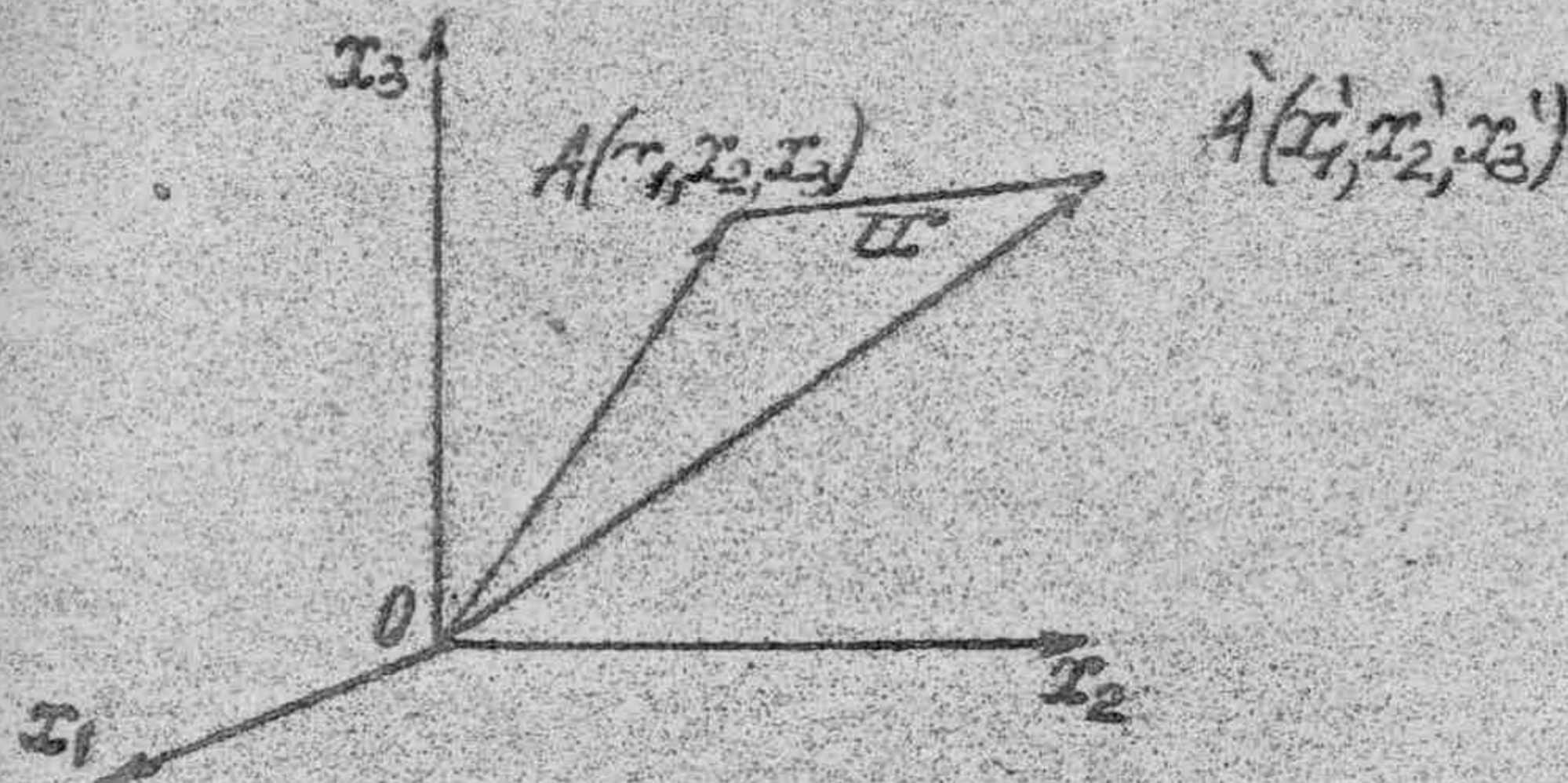


Рис. 6.3. Однородная деформация в кристалле

Если до деформации т. А имела координаты x_1, x_2, x_3 , то после деформации т. А примет положение т. А' с координатами x_1', x_2', x_3' . Как видно из рисунка, положение т. А до и после деформации можно характеризовать и радиусами-векторами \vec{OA} и \vec{OA}' . Тогда, если деформация является однородной, между компонентами этих векторов должно выполняться соотношение

$$x_i' = S_{ij}x_j \quad /6.55/$$

где $[S_{ij}]$ — полярный тензор второго ранга, описывающий деформацию.

Деформацию можно характеризовать также и другим образом. Если ввести /рис. 6.3/ $\vec{AA}' = \vec{u}$, то $\vec{OA}' = \vec{OA} + \vec{AA}'$. Тогда становится ясным, что должно выполняться соотношение между компонентами векторов \vec{OA} и $\vec{AA}' = \vec{u}$, т.е.

$$u_i = \gamma_{ij}x_j \quad /6.56/$$

где $[\gamma_{ij}]$ — симметричный полярный тензор второго ранга, также описывающий деформацию.

ващий деформации, или при записи в развернутом виде для тензора

$$[z_{ij}] = \begin{bmatrix} z_{11} & z_{12} & z_{13} \\ z_{12} & z_{22} & z_{23} \\ z_{13} & z_{23} & z_{33} \end{bmatrix}$$

/6.57/

Здесь диагональные компоненты z_{ij} описывают деформации растяжения, другие — представляют деформацию сдвига.

Так как тензор деформаций является симметричным тензором, его можно привести к главным осям. Сдвиговые компоненты при этом исчезают, остаются лишь главные деформации z_{11}, z_{22}, z_{33} . Как и в случае материальных полярных тензоров второго ранга, здесь можно использовать характеристическую поверхность деформаций $z_{ij}x_i x_j = 1$, эллипсоид деформаций, а также рассмотренные геометрические свойства поверхности 3-го порядка.

В качестве другого примера полярного симметричного тензора второго ранга рассмотрим тензор механических напряжений.

Напряжение в т. P кристалла /рис. 6.4/ может быть найдено следующим образом. Пусть dS — площадь элемента поверхности, содержащего т. P . Построим единичный вектор \vec{l} , перпендикулярный этой

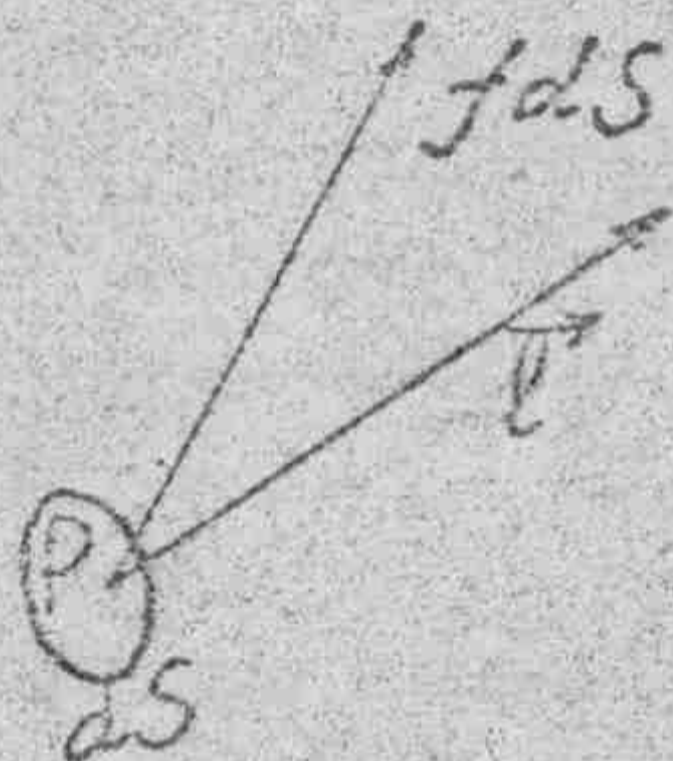


Рис. 6.4. Сила, передаваемая через элемент поверхности dS , взятый в напряженном кристалле

площадке. Пусть через площадку передается сила $\vec{f}dS$, которая действует с положительной стороны площадки /определяемой направлением \vec{l} / на часть кристалла, находящуюся с отрицательной её стороны. Тогда статическое рассмотрение показывает, что при $dS \rightarrow 0$ вектор \vec{f} связан с \vec{l} соотношением

$$f_i = t_{ij} l_j \quad /6.58/$$

где t_{ij} — компоненты тензора второго ранга, называемого напряжением в данной точке. Компоненты с $i=j$ являются нормальными компонентами напряжения /они положительны при растяжении/, а компоненты с $i \neq j$ — сдвиговыми компонентами.

Так как тензор $[t_{ij}]$ является симметричным / в отсутствие объемных моментов /, его можно привести к главным осям и характеризовать поверхность 2-го порядка $t_{ij}x_i x_j = 1$ со всеми её свойствами.

Приведем некоторые частные формы тензора напряжений:

1/ одноосное напряжение

$$[t_{ij}] = \begin{bmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

2/ трехосное напряжение

$$[t_{ij}] = \begin{bmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ 0 & t_{22} & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} \end{bmatrix}$$

3/ гидростатическое давление

$$[t_{ij}] = \begin{bmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{bmatrix}$$

6.7. Упражнения

1. Какими из следующих свойств: пьезоэффект, оптическая активность, пьезоэффект — обладают кристаллы кварца / класс 32 /?

Какими из следующих свойств: пьезоэффект, пьезоэффект, оптическая активность — обладают кристаллы, имеющие симметрию 1/ C_2 , 2/ D_2 , 3/ C_{3v} , 4/ T_d ?

2. Монокристалл обточен в форме шара. Как изменится его форма при нагревании, если он относится к следующей сингонии: 1/ кубической, 2/ гексагональной, 3/ тетрагональной, 4/ ромбической, 5/ триклинной?

3. Характеристическая поверхность, описывающая электропроводность пьезоэлектрического кристалла, имеет вид эллипсоида вращения. Какую точечную группу симметрии может иметь кристалл?

4. Оптически одноосные кристаллы обнаруживают пьезоэффект и вращают плоскость поляризации. Какой может быть их симметрия?

5. Диэлектрическая проницаемость моноклинного кристалла в ортогональной системе координат x_1, x_2, x_3 задается тензором вида

$$[\epsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} 10 & 5 & 0 \\ 5 & 20 & 0 \\ 0 & 0 & 30 \end{bmatrix}$$

Как следует вырезать кристаллическую пластинку фиксированных размеров, обладающих наибольшей ёмкостью?

6. Монокристаллический кубик каменной соли /симметрия $m\bar{3}m$ / помещают в однородное постоянное электрическое поле таким образом, что направление вектора напряженности \vec{E} поля поочередно совпадает со следующими кристаллографическими направлениями: а/ $[001]$, б/ $[110]$, в/ $[111]$, г/ $[1\bar{1}0]$.

Как изменится оптическая индикатриса кристалла в каждом из перечисленных случаев?

Глава 7. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ТРЕТЬЕГО РАНГА

Большее назначение математики — находить порядок в хаосе, который нас окружает.

Роберт Вигнер

В кристаллах наблюдается множество явлений, описываемых тензорами третьего ранга. Укажем некоторые из них. Широкое применение нашли прямой и обратный пьезоэлектрические эффекты, линейный электрооптический эффект /Поккельса/, описываемые полярным симметричным тензором третьего ранга, магнитооптический эффект первого порядка, описываемый аксиальным тензором третьего ранга, эффект оптической нелинейности второго порядка, ответственный за генерацию второй гармоники, параметрическое усиление и генерация, описываемые тензорами для нелинейной оптической восприимчивости.

Кроме того, существуют эффект Колла; эффект электрогирации; пьезомагнитный эффект, описываемые аксиальными тензорами третьего ранга; эффект магнитогирации, определяемый полярным тензором и др. К сожалению, из-за ограниченного объема книги не все эффекты нами будут рассмотрены.

7.1. Прямой пьезоэлектрический эффект в кристаллах

7.1.1. Сущность пьезоэффекта

Суть пьезоэлектрического эффекта в кристалле состоит в возникновении электрической поляризации под действием механического напряжения или деформации. Это явление было впервые обнаружено физиками К. и П. Кури в кристаллах кварца в 1880 году.

Пьезоэлектрический эффект с точки зрения симметрии в кристаллах кварца можно в нескольких словах описать следующим образом. Кварц

обладает симметрией 32 , т.е. имеет тройную ось /она же главная/ и три двойные оси, перпендикулярные первой. При сжатии вдоль двойной оси к диссимметрии кварца добавляется цилиндрическая диссимметрия воздействия ∞/mmm ; из элементов симметрии остается только двойная ось, которая может принять направление электрической поляризации /см. принцип Неймана/. Если же кристалл кварца сжимать вдоль оси третьего порядка, то в соответствии с принципом суперпозиции симметрий в качестве общей высшей подгруппы исходной точечной группы симметрии 32 и предельной группы ∞/mmm остается та же группа 32 , оси которой не являются полярными, поэтому пьезоэффекта не будет.

Эти рассуждения полностью подтверждаются тензорным описанием пьезоэффекта в кварце.

Как можно видеть из приведенного ранее соотношения /5.1/, при воздействии, описываемом полярным тензором второго ранга, возникает векторное явление, следовательно, связывающее их свойство кристалла должно быть полярным тензором третьего ранга.

7.1.2. Тензор пьезоэффекта

Тензорное описание пьезоэффекта было введено В. Фойгтом.

Рассмотрим случай приложения деформаций к кристаллу. Допустив линейную зависимость между компонентами полярного вектора поляризации P_i и полярного симметричного тензора второго ранга $[z_{jk}]$, будем иметь:

$$P_1 = e_{111}z_{11} + e_{112}z_{12} + e_{113}z_{13} + e_{121}z_{21} + e_{122}z_{22} + e_{123}z_{23} + e_{131}z_{31} + e_{132}z_{32} + e_{133}z_{33}; \quad /7.1/$$

$$P_2 = e_{211}z_{11} + e_{212}z_{12} + e_{213}z_{13} + e_{221}z_{21} + e_{222}z_{22} + e_{223}z_{23} + e_{231}z_{31} + e_{232}z_{32} + e_{233}z_{33};$$

$$P_3 = e_{311}z_{11} + e_{312}z_{12} + e_{313}z_{13} + e_{321}z_{21} + e_{322}z_{22} + e_{323}z_{23} + e_{331}z_{31} + e_{332}z_{32} + e_{333}z_{33}$$

или

$$P_i = e_{ijk}z_{jk}, \quad i, j, k = 1, 2, 3. \quad /7.2/$$

где e_{ijk} — компоненты полярного тензора третьего ранга, описывающего пьезоэффект, которые при симметричных операциях преобразуются по закону

$$e'_{ijk} = c_{im}c_{jn}c_{ko}e_{mno}. \quad /7.3/$$

аналогичному закону преобразования тройного произведения координат /8.13/. Следовательно, совокупность 27 величин, которые записываются в виде

$$[e_{ijk}] = \begin{bmatrix} e_{111} & e_{112} & e_{113} & e_{114} & e_{115} & e_{116} & e_{121} & e_{122} & e_{123} \\ e_{211} & e_{212} & e_{213} & e_{214} & e_{215} & e_{216} & e_{221} & e_{222} & e_{223} \\ e_{311} & e_{312} & e_{313} & e_{314} & e_{315} & e_{316} & e_{321} & e_{322} & e_{323} \end{bmatrix} \quad /7.4/$$

и преобразуются при переходе от одной системы координат к другой в соответствии с законом /7.3/, называется полярным тензором третьего ранга для пьезоэффекта.

Поскольку полярный тензор второго ранга, описывающий механическую деформацию $[e_{jk}]$, симметричен, то компоненты тензора $[e_{ijk}]$ симметричны по двум последним индексам j и k , т.е. $e_{ijk} = e_{ikj}$. Поэтому из 27 элементов остается только 18 независимых компонент /для кристаллов триклинной симметрии/.

Воспользуемся для записи /7.4/ матричными обозначениями. При этом используем следующую связь между индексами:

$$\begin{array}{l} \text{тензорные обозначения: } i, j, k \quad 21, 33, 31, 13, 12, 31 \\ \text{матричные обозначения: } I, 2, 3, 4, 5, 6 \end{array}$$

Два последних индекса в тензорной записи e_{ijk} соответствуют индексам компонент деформации, поэтому для согласованности необходимо сделать изменения и в обозначениях компонент деформации:

$$\begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{12} & e_{22} & e_{23} \\ e_{13} & e_{23} & e_{33} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ e_2 & e_4 & e_5 \\ e_3 & e_5 & e_6 \end{bmatrix} \quad /7.5/$$

Тогда в новых обозначениях мы можем записать уравнения для P_1 из /7.1/ в виде

$$P_1 = e_{11}e_1 + \frac{1}{2}e_{16}e_6 + \frac{1}{2}e_{15}e_5 + \frac{1}{2}e_{14}e_4 + e_{12}e_2 + \frac{1}{2}e_{14}e_4 + \frac{1}{2}e_{15}e_5 + \frac{1}{2}e_{16}e_6 + e_{13}e_3$$

$$P_1 = e_{11}e_1 + e_{12}e_2 + e_{13}e_3 + 2e_{14}e_4 + e_{15}e_5 + e_{16}e_6 \quad /7.6/$$

При этой записи мы полагаем, что

$$e_{ijk} = e_{ikj}, \text{ когда } k = 1, 2, 3;$$

$$2e_{ijk} = e_{ikj}, \text{ когда } k = 4, 5, 6.$$

Для P_2 и P_3 можно получить два аналогичных /7.6/ уравнения. При использовании индексов суммирования запишем:

$$P_l = e_{ij}z_j \quad / l = 1, 2, 3; j = 1, 2, \dots, 6 / \quad /7.7/$$

Тогда тензор /7.4/ может быть записан в виде матрицы

$$\begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & e_{14} & e_{15} & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & e_{24} & e_{25} & e_{26} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & e_{34} & e_{35} & e_{36} \end{pmatrix} \quad /7.8/$$

Подчеркнем, что матричные обозначения используются потому, что по сравнению с тензорными они обладают преимуществом большей компактности. Но необходимо всегда помнить, что элементы матрицы не преобразуются подобно компонентам тензора второго ранга и $e_{in} \neq e_{ni}$. В форме /7.8/ приводятся тензоры пьезоэффекта для всех кристаллов, в которых наблюдается явление.

7.1.5. Симметрия тензора пьезоэффекта. Метод прямой проверки

В отличие от полярных тензоров второго ранга для тензоров третьего ранга единого геометрического образа нет. Поэтому вопрос о влиянии симметрии кристалла на вид тензора может быть решен только аналитически с помощью закона преобразования /7.3/.

Однако в ряде конкретных случаев весьма полезным при поиске вида тензора третьего ранга / а также других рангов / оказывается метод прямой проверки /Зуми/, основанный на том, что компоненты тензоров при изменении системы координат преобразуются аналогично преобразованиям соответствующих координат /см. разд. 3.4/.

Пример. Рассмотрим, как работает метод Зуми /по имени итальянского физика/ на примере центра симметрии $\bar{1}$. При наличии в кристалле центра симметрии ось координат преобразуются следующим образом:

$$x_1' \rightarrow -x_1, \quad x_2' \rightarrow -x_2, \quad x_3' \rightarrow -x_3$$

значит, любая $x_i' \rightarrow -x_i$ / $i = 1, 2, 3$ /. Тогда любая компонента e_{ijk} тензора преобразуется как $e_i'x_j'x_k'$ /обращаем внимание читателя на индексы координат/. Произведение $x_i'x_j'x_k'$ преобразуется в $-x_i x_j x_k$ /со знаком "минус"/, что соответствует $-e_{ijk}$. Но согласно принципу Неймана компоненты тензора должны оставаться теми же /сохранять свой знак и величину/ при заданной операции симметрии, присущей кристаллу. Отсюда можно сделать важный вывод, что $e_{ijk} = -e_{ijk} = 0$, т.е. в кристаллах с центром симметрии пьезоэлектрический эффект наблюдаться не может /все компоненты тензора являются нулевыми/.

Итак, пьезоэлектрическим эффектом могут обладать лишь кристаллы без центра симметрии. Заметим, однако, здесь, что конкретный анализ влияния симметрии кристалла 432 на вид тензора $[e_{ijk}]$ обнаруживает нулевые компоненты этого тензора для данного класса кубического кристалла, в чем предлагаем читателю убедиться самому.

Можно также показать, например, что для кристаллов кварца 32 тензор $[e_{ijk}]$ пьезоэффекта в матричной форме имеет вид

Handwritten note:
 (e_{111} = 0, e_{112} = 0, e_{113} = 0, e_{114} = 0, e_{115} = 0, e_{116} = 0, e_{121} = 0, e_{122} = 0, e_{123} = 0, e_{124} = 0, e_{125} = 0, e_{126} = 0, e_{131} = 0, e_{132} = 0, e_{133} = 0, e_{134} = 0, e_{135} = 0, e_{136} = 0, e_{211} = 0, e_{212} = 0, e_{213} = 0, e_{214} = 0, e_{215} = 0, e_{216} = 0, e_{221} = 0, e_{222} = 0, e_{223} = 0, e_{224} = 0, e_{225} = 0, e_{226} = 0, e_{231} = 0, e_{232} = 0, e_{233} = 0, e_{234} = 0, e_{235} = 0, e_{236} = 0, e_{311} = 0, e_{312} = 0, e_{313} = 0, e_{314} = 0, e_{315} = 0, e_{316} = 0, e_{321} = 0, e_{322} = 0, e_{323} = 0, e_{324} = 0, e_{325} = 0, e_{326} = 0, e_{331} = 0, e_{332} = 0, e_{333} = 0, e_{334} = 0, e_{335} = 0, e_{336} = 0)

$$(e_{ijk}) = \begin{pmatrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} - 2e_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

7.1.4. Работа тензоров третьего ранга для пьезоэффекта на примере кристаллов кварца

Если перейти от матричной формы в тензорную форму записи, то /7.9/ примет вид

$$[e_{ijk}] = \begin{bmatrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & 2e_{123} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2e_{123} & -2e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7.10)$$

Напишем выражение /7.2/ для пьезоэффекта в кварце в следующей форме:

	ε_{11}	ε_{22}	ε_{33}	ε_{23}	ε_{31}	ε_{12}	
P_1	e_{11}	$-e_{11}$	0	$2e_{123}$	0	0	/7.11/
P_2	0	0	0	0	$-2e_{123}$	$-2e_{11}$	
P_3	0	0	0	0	0	0	

или в развернутом виде

$$\begin{aligned} P_1 &= e_{11}\varepsilon_{11} - e_{11}\varepsilon_{22} + 2e_{123}\varepsilon_{23} \\ P_2 &= -2e_{123}\varepsilon_{13} - 2e_{11}\varepsilon_{12} \\ P_3 &= 0. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Из уравнений /7.12/ можно сразу видеть, что при любых деформациях кристаллы кварца никогда не поляризуются по оси $Z // [0001]$ в полном соответствии с принципом Пеймана. Если же кристалл 32 растягивать вдоль оси X_1 , совпадающей с кристаллографической осью Z , т.е. $\varepsilon_{11} \neq 0$, $\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = 0$, то $P_1 = e_{11}\varepsilon_{11} \neq 0$. Следовательно, возникает поляризация вдоль той же оси X_1 , по которой проходит одна из осей симметрии 2-го порядка в классе 32. При деформации кристалла вдоль оси $X_2 / \varepsilon_{22} \neq 0$, $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{33} = 0$, $P_1 = -e_{11}\varepsilon_{22}$. Снова возникает поляризация вдоль оси X_1 , но с обратным знаком. Поэтому ось $X_1 /$ она же ось симметрии 2-го порядка / в кварце называется электрической.

Аналогичные рассуждения можно провести также при анализе возникновения поляризации в кварце с компонентой $P_2 \neq 0$.

7.1.5. Указательная поверхность продольного пьезоэлектрического эффекта в кварце и её симметрия

Значительный интерес для рассмотрения с точки зрения симметрии представляет указательная поверхность продольного пьезоэффекта в кварце.

Как уже отмечалось, в отличие от тензоров второго ранга тензор третьего ранга представить единственной поверхностью невозможно. Поэтому обычно рассматриваются лишь частные случаи, имеющие значение для практического применения пьезоэффекта, например, продольный пьезоэффект.

Рассмотрим определение поверхности продольного пьезоэффекта на примере кварца. Предположим, что на поверхность пластинки, вырезанной из кристалла перпендикулярно произвольно выбранному направлению $ox'_1 /$ рис. 7.1/, действует нормальное напряжение растяжения t_{11} .

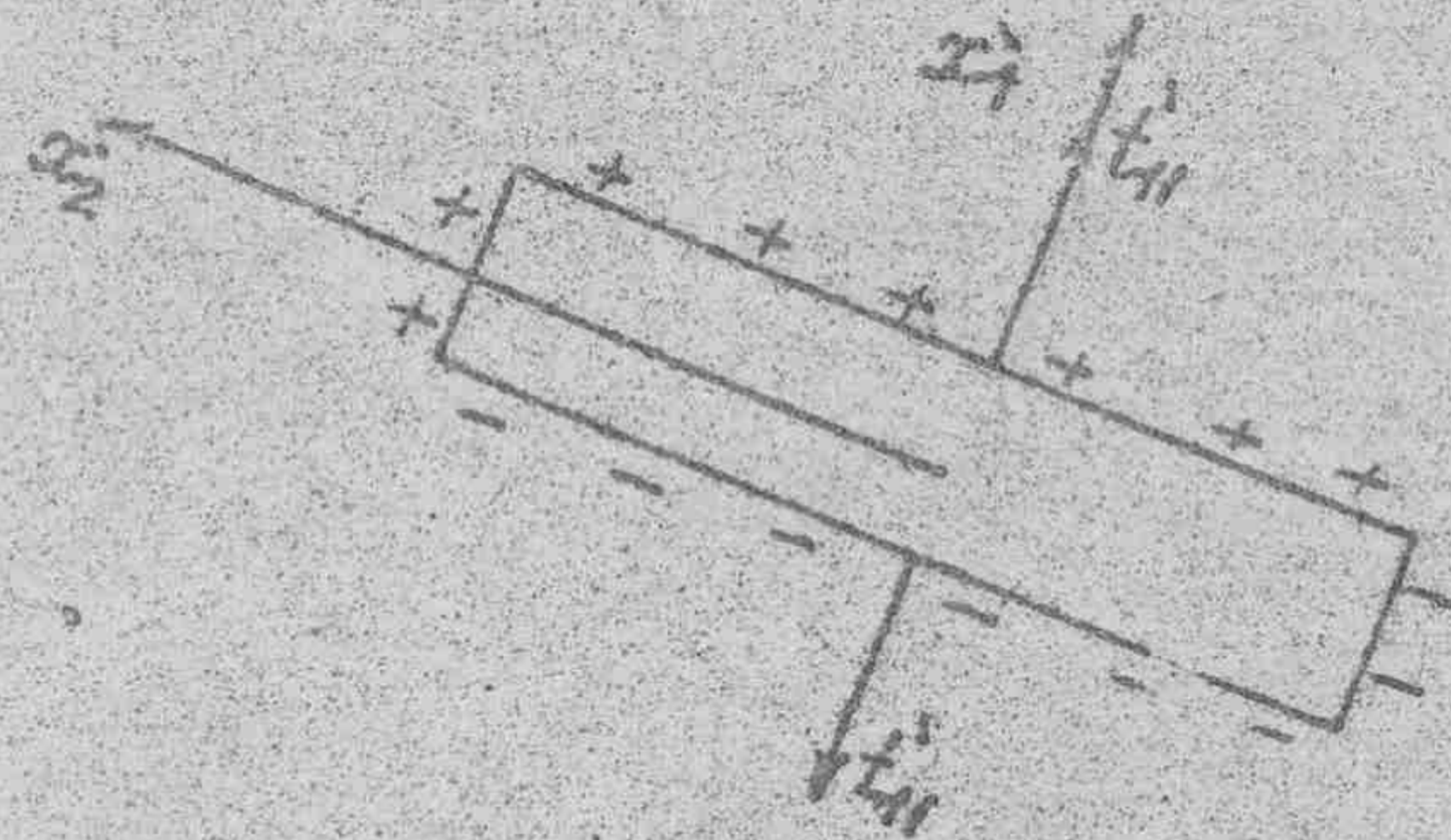


Рис. 7.1. Продольный пьезоэффект в кристалле

В общем случае возникающая поляризация будет обладать компонентами во всех трёх направлениях: ox'_1, ox'_2, ox'_3 . Компонента поляризации P_i в направлении ox'_i дается выражением

$$P_i = d_{ijn} t_{nn} \quad (7.13)$$

где d_{ijn} - компоненты тензора пьезоэффекта.

В частном случае для продольного пьезоэффекта имеем

$$P_1 = d_{111} t_{11} \quad (7.14)$$

Следовательно, величина d_{111} измеряет значение продольного пьезоэффекта. Её можно выразить в виде

$$d_{111} = P_1 / t_{11} = \frac{Q_2}{F/S} = \frac{q/S}{F/S} \quad (7.15)$$

где $Q_2 = q/S = P_1$ - поверхностная плотность заряда; F - нормальная сила, приложенная к пластинке с площадью S . Величина d_{111} измеряется в Кулон/Ньютон.

Выражение /7.14/ может быть использовано для поиска формы поверхности продольного пьезоэффекта в кристалле с тензором d_{ijn} .

Поверхность продольного пьезоэффекта называется поверхностью, радиус-вектор которой в направлении ox'_1 равен d_{111} , т.е. $|R| = d_{111}$.

Найдем в качестве примера форму этой поверхности для кристаллов кварца. Радиус-вектор $|R| = d_{111}$ данной поверхности в произвольном

направлении выражается в виде /см. закон преобразования компонент тензора третьего ранга/

$$d_{ijk} = c_{11}c_{ij}c_{ik}d_{ijk} \quad /7.16/$$

где ox_i - оси "старые" координат, согласованные с симметрией кристалла, для которых применим вид тензора $[d_{ijk}]$.

Раскрывая соотношение /7.16/ при подстановке компонент тензора вида /7.10/ для кварца, получим:

$$d_{111} = c_{11}^3 d_{111} - c_{11}c_{12}^2 d_{111} + 2c_{11}c_{12}c_{13} d_{123} - 2c_{12}c_{13}c_{14} d_{123} - 2c_{12}^2 c_{11} d_{111} \quad /7.17/$$

откуда при учете подобных членов выразим

$$d_{111} = c_{11}(c_{12}^2 - 3c_{12}c_{13})d_{111} \quad /7.18/$$

Это и есть уравнение указательной поверхности продольного пьезоэффекта в кварце.

Введем величины

$$\begin{aligned} c_{11} &= \cos^2(\alpha_1, \alpha_1) \equiv l \\ c_{12} &= \cos(\alpha_1, \alpha_2) \equiv m \\ c_{13} &= \cos(\alpha_1, \alpha_3) \equiv n \end{aligned} \quad /7.19/$$

Тогда уравнение /7.18/ примет вид

$$d_{111} = l(l^2 - 3m^2)d_{111} \quad /7.20/$$

Возьмем сечение указанной поверхности плоскостью, содержащей α_1 и α_2 , в полярных координатах. Для этой цели положим $l = \cos \theta$, $m = \sin \theta$, где θ - угол между \vec{r} и α_1 .

После соответствующих тригонометрических преобразований уравнение /7.20/ запишем следующим образом:

$$d_{111} = d_{111} \cos \theta (\cos^2 \theta - 3 \sin^2 \theta) = d_{111} \cos 3\theta \quad /7.21/$$

Это сечение представлено на рис. 7.2, а.

Рассмотрим второе сечение поверхности /7.20/ - сечение плоскостью, содержащей оси α_1 и α_3 /рис. 7.2, б/. Для этого в формуле /7.20/ положим $m = 0$ и $l = \cos \theta$, где θ - угол между радиусом-вектором и осью α_1 . Тогда будем иметь

$$d_{111} = d_{111} \cos^3 \theta \quad /7.22/$$

Таким образом, форма указательной поверхности продольного пьезоэффекта в кварце подобна трем миндалевидным, острые концы которых встречаются в точке, лежащей на тригональной оси. Как ясно видно из формы поверхности, при сдвиге кристалла кварца вдоль оси 3 продольный пьезоэффект отсутствует, что следует и из симметрии. Как видно также из рис. 7.2, наибольшее значение продольного пьезоэффекта наблюдается в случае сдвига кристалла кварца вдоль оси симметрии 3-го порядка.

Следует подчеркнуть, что пьезоэлектрические свойства кварца

является прекрасным примером иллюстрации принципа Неймана: кристалл кварца 32 в отношении прямого пьезоэффекта обнаруживает симметрию того же рода, что и его кристаллографическая форма.

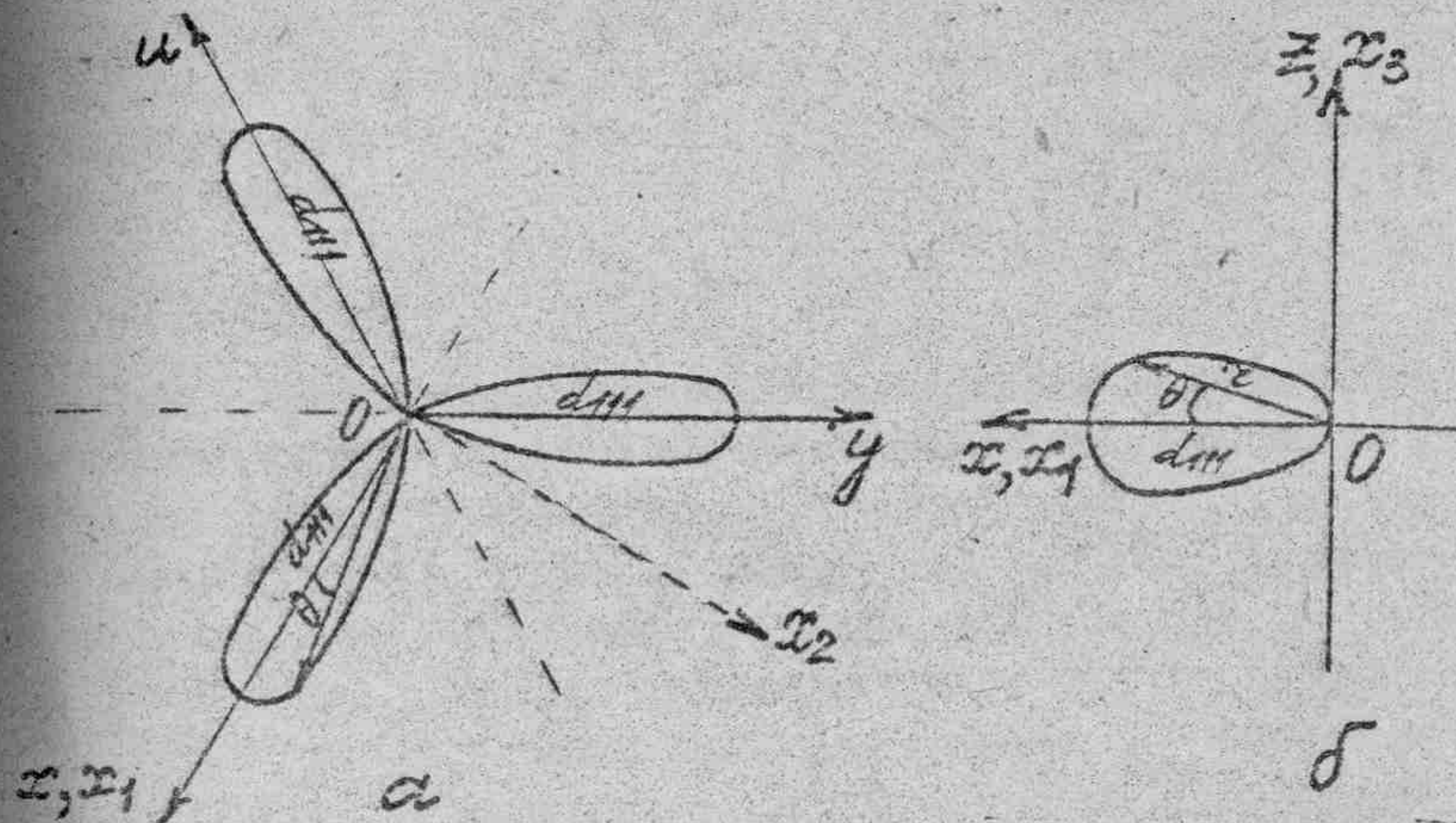


Рис. 7.2. Указательная поверхность продольного пьезоэффекта для кварца

7.2. Обратный пьезоэлектрический эффект

Данный эффект был предсказан Липпманом и в 1881 г. экспериментально обнаружен физиками Э. и П. Кюри в кристаллах кварца.

Сущность явления сводится к возникновению деформации кристалла при приложении к нему внешнего электрического поля. Эти деформации описываются полярным тензором третьего ранга для обратного пьезоэффекта, а именно:

$$z_{jk} = d_{ijk} E_i, \quad i=1,2,3; j,k=1,2,3, \quad /7.23/$$

где z_{jk} - компоненты симметричного полярного тензора второго ранга; E_i - компоненты вектора электрического поля; d_{ijk} - компоненты тензора обратного пьезоэффекта.

Поскольку тензор $[z_{jk}]$ симметричен, т.е. $z_{jk} = z_{kj}$, то тензор d_{ijk} симметричен по j и k , т.е. $d_{ijk} = d_{ikj}$. Число независимых компонент тензора обратного пьезоэффекта равно числу компонент прямого.

Если ввести, как и ранее, матричные обозначения

$$\begin{aligned} z_n &= z_{jk} & \text{при } n=1,2,3; \\ z_n &= 2z_{jk} & \text{при } n=4,5,6, \end{aligned} \quad /7.24/$$

то соотношение /7.23/ для обратного пьезоэффекта примет вид

$$\varepsilon_n = d_{in} E_i \quad / i=1,2,3; n=1,2,\dots,6 / \quad /7.25/$$

Тензор $[d_{ij}]$ в матричных обозначениях запишется следующим образом:

$$(d_{ij}) = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{21} & d_{31} \\ d_{12} & d_{22} & d_{32} \\ d_{13} & d_{23} & d_{33} \\ d_{14} & d_{24} & d_{34} \\ d_{15} & d_{25} & d_{35} \\ d_{16} & d_{26} & d_{36} \end{pmatrix} \quad /7.26/$$

Как и ранее отметим: в данной матрице $d_{ij} \neq d_{ji}$.

Так, матрица обратного пьезоэффекта для кристаллов кварца 32 имеет вид

$$(d_{in}) = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & 0 \\ -d_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & -d_{14} & 0 \\ 0 & -2d_{14} & 0 \end{pmatrix} \quad /7.27/$$

Из приведенной матрицы непосредственно следует, что при приложении электрического поля вдоль оси Z_3 в кристаллах кварца не возникает никаких деформаций. Деформации возникают лишь в случаях, когда $E_1 \neq 0$ и $E_2 \neq 0$.

7.3. Применение пьезоэлектрических эффектов

Кристаллы, обладающие пьезоэлектрическим эффектом /пьезоэлектрические кристаллы/, могут применяться как преобразователи механической энергии в электрическую и обратно.

Практические приложения пьезоэффекта весьма широки. Пьезокварц первым использовали для измерения различных физических величин /в пьезометрии/, для излучения и приема звука и ультразвука /в частности, для гидролокации/. В дальнейшем круг применений и набор кристаллов расширился, наряду с кварцем в различных устройствах используются ниобат лития, дигидрофосфаты аммония и калия, сегнетова соль и керамические пьезоэлектрики /текстуры, симметрия $oo, oo2, oom$ /.

Одна из областей применения пьезокристаллов - источники и приемники звука и ультразвука. Широко используются в радиотехнике и электронике пьезоэлектрические резонаторы /главным образом кварцевые/ для стабилизации частот радиотехнических генераторов, а также в фильтрах с высокой избирательностью.

В последнее время пьезоэлектрики нашли важное и широкое применение в акустоэлектронике. Речь прежде всего идет об усилении упругих волн с помощью пьезоэлектриков - полупроводников $CdS, GaAs$ и др. Такое усиление обусловлено черенковским излучением объемного заряда, создаваемого самой упругой волной: объемный заряд, дрейфующий в направлении волны со сверхзвуковой скоростью, излучает фононы. Взаимодействия электронных потоков с решеткой кристалла приводят к ряду и других явлений.

7.4. Линейный электрооптический эффект

Сущность электрооптического эффекта в кристаллах заключается в "деформации" оптической индикатрисы кристалла внешним электрическим полем, что приводит к изменению их двулучепреломления.

Возьмем, например, кристалл дигидрофосфата калия, класс симметрии которого $42m$. Поскольку этот кристалл относится к тетрагональной сингонии, в отсутствие внешнего поля его оптическая индикатриса является эллипсоидом вращения, а кристалл - оптически одноосным. Приложим к кристаллу электрическое поле \vec{E} в направлении $[001]$. Тогда в соответствии с принципом суперпозиции симметрий Кюри получим

$$42m \uparrow oo2 = mm2 \\ \infty \uparrow [001]$$

т.е. при таком воздействии поля кристалл становится оптически двуосным /класс $mm2$ относится к ромбической сингонии/. К такому же результату мы приходим при тензорном описании эффекта, при котором можно определить величину изменения $\Delta n(E)$.

Пусть в отсутствие электрического поля оптическая индикатриса кристалла в главных осях имеет вид

$$a_{11}^0 x_1^2 + a_{22}^0 x_2^2 + a_{33}^0 x_3^2 = 1 \quad /7.28/$$

где a_{ij}^0 - постоянные вольтразмерные константы /см. гл. 6/ кристалла. При приложении \vec{E} -поля индикатриса "деформируется" в тех же координатных осях к виду

$$a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2 + a_{33} x_3^2 + 2a_{12} x_1 x_2 + 2a_{23} x_2 x_3 + 2a_{13} x_1 x_3 = 1, \quad /7.29/$$

где a_{ij} - полтразмерные константы при $E \neq 0$.

Эквивалентно, можно найти изменение Δa_{ij} при воздействии поля:

$$\Delta a_{ij}(E) = a_{ij}(E) - a_{ij}^0 \quad /7.30/$$

или

$$\Delta a_{11}(E) = a_{11} - a_{11}^0$$

$$\Delta a_{22}(E) = a_{22} - a_{22}^0$$

$$\Delta a_{33}(E) = a_{33} - a_3^0$$

$$\Delta a_{23}(E) = \Delta a_{32}(E) = a_{23}$$

$$\Delta a_{31}(E) = \Delta a_{13}(E) = a_{13}$$

$$\Delta a_{21}(E) = \Delta a_{12}(E) = a_{12}$$

Аналитически связь между приращением Δa_{ij} поляризационных констант и внешним полем можно в общем случае выразить соотношением

$$\Delta a_{ij}(E) = r_{ijk} E_k + R_{ijkl} E_k E_l, \quad /7.31/$$

в котором первым слагаемым выражается линейный электрооптический эффект /Поккельса/ (где $[r_{ijk}]$ - полярный тензор третьего ранга), а вторым слагаемым - квадратичный электрооптический эффект /Керра/ (где R_{ijkl} - компоненты тензора четвертого ранга).

В данном разделе главы мы основное внимание уделим линейному явлению.

Поскольку $a_{ij} = a_{ji}$, то компоненты тензора r_{ijk} также симметричны по первым двум индексам, т.е. $r_{ijk} = r_{jik}$. Следовательно, как и в случае пьезоэффекта, число независимых компонент тензора уменьшается от 27 до 18.

Соотношение /7.31/ с учетом только первого слагаемого /эффекту Керра внимание будет уделено ниже, в гл. 8/ можно выразить в форме следующей таблицы /при переходе к матричным обозначениям/:

	E_1	E_2	E_3
Δa_1	r_{11}	r_{12}	r_{13}
Δa_2	r_{21}	r_{22}	r_{23}
Δa_3	r_{31}	r_{32}	r_{33}
Δa_4	r_{41}	r_{42}	r_{43}
Δa_5	r_{51}	r_{52}	r_{53}
Δa_6	r_{61}	r_{62}	r_{63}

/7.32/

или

$$\Delta a_n = r_{nm} E_m$$

где $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$; $m = 1, 2, 3$.

Таким образом, тензор линейного электрооптического эффекта в кристаллах в матричной форме имеет вид

$$(\Sigma_{nm}) = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \\ r_{41} & r_{42} & r_{43} \\ r_{51} & r_{52} & r_{53} \\ r_{61} & r_{62} & r_{63} \end{pmatrix}$$

/7.34/

который и используется в табличных данных для всех кристаллов.

Пример. Найдем изменение двуупреждения Δn в кристаллах $42m$:
1/ пусть $\vec{E} = 0$. Тогда исходная оптическая индикатриса кристалла /тетрагональная сингония/ в главных осях

$$a_1^0(x_1^2 + x_2^2) + a_3^0 x_3^2 = 1 \quad /7.35/$$

является эллипсоидом вращения /кристалл одноосный/;

2/ приложим поле \vec{E} вдоль направления $[001]$, т.е. $\vec{E} = [0, 0, E_3]$. Найдем изменение поляризационных констант по формуле /7.35/, для чего нам необходимо знать тензор $[r_{ijk}]$ для класса $42m$:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ r_{41} & 0 & 0 \\ 0 & r_{41} & 0 \\ 0 & 0 & r_{63} \end{pmatrix}$$

/7.36/

Тогда при $E_3 \neq 0$ найдем, что

$$\Delta a_6 = r_{63} E_3. \quad /7.37/$$

При воздействии \vec{E} -поля оптическая индикатриса кристалла преобразуется в той же системе координат от /7.35/ к виду

$$a_1^0(x_1^2 + x_2^2) + 2r_{63} E_3 x_1 x_2 + a_3^0 x_3^2 = 1, \quad /7.38/$$

т.е. тензор $[a_{ij}]$ запишется следующим образом:

$$\begin{bmatrix} a_1^0 & r_{63} E_3 & 0 \\ r_{63} E_3 & a_1^0 & 0 \\ 0 & 0 & a_3^0 \end{bmatrix} \quad /7.39/$$

Для нахождения наибольшего приращения Δa_{ij} тензор /7.39/ необходимо привести к главным осям.

Воспользуемся методом решения векового уравнения для $[a_{ij}]$ /хотя довольно легко этот тензор приводится к главным осям с помощью построения окружности Мора/:

$$F(\lambda) = \begin{vmatrix} a_1^0 - \lambda & r_{63} E_3 & 0 \\ r_{63} E_3 & a_1^0 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & a_3^0 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad /7.40/$$

или

$$(a_3^0 - \lambda) [(a_1^0 - \lambda)^2 - r_{63}^2 E_3^2] = 0 \quad /7.41/$$

откуда

$$\lambda_3 = a_3^0, \quad \lambda_1 = a_1^0 - r_{63} E_3, \quad \lambda_2 = a_1^0 + r_{63} E_3 \quad /7.42/$$

Следовательно, тензор /7.39/ после приведения к главным осям будет иметь вид

$$\begin{bmatrix} a_1^0 - r_{63} E_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_1^0 + r_{63} E_3 & 0 \\ 0 & 0 & a_3^0 \end{bmatrix} \quad /7.43/$$

т.е. кристалл при E_3 превратился в оптически двуосный $n_{11} \neq n_{22}$.
 Найдем величину двупреломления Δn , для чего от компонент a_{ij} перейдем к коэффициенту преломления: $a_{ij} = 1/n_{ij}^2$.

Тогда будем иметь

$$a_{11} = 1/n_{11}^2 = a_{11}^0 - \gamma_{23} E_3 = 1/n_{11}^0 - \gamma_{23} E_3 \quad /7.44/$$

$$a_{22} = 1/n_{22}^2 = 1/n_{11}^0 + \gamma_{23} E_3 \quad /7.45/$$

$$a_{33} = a_{33}^0 = 1/n_{33}^0 \quad /7.46/$$

Уравнения /7.44/ и /7.45/ преобразуем к виду

$$n_{11} = n_{11}^0 \sqrt{\frac{1}{1 - n_{11}^0 \gamma_{23} E_3}} \quad /7.47/$$

$$n_{22} = n_{11}^0 \sqrt{\frac{1}{1 + n_{11}^0 \gamma_{23} E_3}} \quad /7.48/$$

Воспользовавшись известным соотношением

$$\sqrt{\frac{1}{1 \pm x}} \approx 1 \pm \frac{x}{2} \quad \text{при } x \ll 1, \quad /7.49/$$

для уравнений /7.47/ и /7.48/, получим /при разумном допущении, что $n_{11}^0 \gamma_{23} E_3 \ll 1$:/

$$n_{11}(E) = n_{11}^0 + \frac{1}{2} n_{11}^0 \gamma_{23} E_3 \quad /7.50/$$

$$n_{22}(E) = n_{11}^0 - \frac{1}{2} n_{11}^0 \gamma_{23} E_3 \quad /7.51/$$

а из /7.46/ напишем

$$n_{33}(E) = n_{33}^0 \quad /7.52/$$

Таким образом, ясно видно, что $n_{11} \neq n_{22} \neq n_{33}$, т.е. кристалл в поле E стал оптически двуосным.

Зная n_{11} и n_{22} , можно оценить разность хода, полуволновое напряжение кристалла в продольном электрооптическом эффекте /когда свет распространяется вдоль E_3 /, а также разность фаз.

Разность хода Δ имеет вид

$$\Delta = \Delta n d \quad /7.53/$$

где

$$\Delta n = n_{11}(E) - n_{22}(E) = n_{11}^0 \gamma_{23} E_3 \quad /7.54/$$

с использованием уравнений /7.50/ и /7.51/; d - толщина кристалла /в направлении распространения света/, или

$$\Delta = n_{11}^0 \gamma_{23} E_3 d \quad /7.55/$$

Для разности фаз

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta \quad \text{получим соотношение}$$

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot n_{11}^0 \gamma_{23} E_3 d \quad /7.56/$$

Из /7.55/ выразим полуволновое напряжение $V_{\lambda/2} = E_3 d$ /при $\Delta = \lambda/2$:/

$$V_{\lambda/2} = \frac{\lambda}{2 n_{11}^0 \gamma_{23}} \quad /7.57/$$

Нетрудно видеть, что величина $V_{\lambda/2}$ для данного кристалла в основном определяется электрооптическим коэффициентом γ_{23} . Так, для кристалла дигидрофосфата калия: $n_{11}^0 = 1,511$, $\gamma_{23} = 30 \cdot 10^{-9}$ CGSE при $\lambda = 0,546$ мкм: $V_{\lambda/2} \approx 7,9$ кВ.

Рассмотренный эффект широко используется в квантовой и опто-электронике для амплитудной и фазовой модуляции света. Емь раз напомним, что, как и в случае пьезоэффекта, для наблюдения линейного электрооптического эффекта необходимо использование кристаллов без центра симметрии.

Специальный интерес представляют разнообразные электрооптические эффекты в жидких кристаллах, рассмотрение которых, к сожалению, выходит за рамки настоящей книги.

7.5. Упражнения

1. Как с помощью изучения пьезо- и пьезоэлектрических свойств можно различить кристаллы симметрии $4/m$, 432 , $4mm$?
2. Пьезоэлектрический оптически активный кристалл имеет изотропную электропроводность. Определить его симметрию.
3. Какие точечные группы средней категории допускают одновременно пьезоэффект и оптическую активность и исключают возможность пьезоэффекта?
4. Как, изучая пьезоэлектрические свойства, различить кристаллы симметрии 322 , $42m$ и $43m$?
5. Доказать, что кристаллы симметрии 432 не могут обладать пьезоэффектом.
6. Рассмотреть основные физические эффекты в жидких кристаллах /по книге А.С. Сонина "Введение в физику жидких кристаллов"/.

Глава 8. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ. ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ЧЕТВЕРТОГО РАНГА

У истоков симметрии лежат математика; для того чтобы показать, как работает математическое мышление, вряд ли возможно найти что-либо лучшее, чем симметрия.

Герман Вейль

В кристаллах наблюдается ряд физических эффектов, описываемых тензорами четвертого ранга. Отметим прежде всего упомянутый в предыдущей главе квадратичный электрооптический эффект /Керра/, затем

пьезооптический эффект /или эффект фотоупругости/. Тензорами четвертого ранга описываются упругие свойства кристаллов и связанные с ним явления, такие, как распространение упругих волн через кристаллы, имеющие важное значение для акустооптики и акустоэлектроники, и как пьезорезистивный эффект, используемый при разработке тензопреобразователей различного типа. Следует назвать также квадратичный магнитооптический эффект, эффекты квадратичной электро- и магнитогирации.

В нелинейной оптике тензором четвертого ранга /тензором нелинейной оптической восприимчивости 4-го порядка/ описываются различные явления: генерация 3-ей гармоники, комбинационное рассеяние, самофокусировка, оптическое фазовое сопряжение и др.

В большинстве указанных явлений тензор четвертого ранга связывает между собой либо два тензора второго ранга, либо тензор второго ранга с произведением компонент полярного вектора \vec{E} -поля для аксиального вектора \vec{T} -поля.

В данной главе кратко рассмотрены квадратичный электрооптический и пьезооптический эффекты, затронуты упругие свойства кристаллов. К сожалению, небольшой объем книги не позволяет нам привести подробное обсуждение других явлений. Наконец, совсем не будут рассматриваться явления, описываемые тензорами пятого ранга, например, воздействие деформации на электрогирационные коэффициенты.

8.1. Квадратичный электрооптический эффект в кристаллах

Запишем уравнение /7.10/ для изменения поляризационных констант Δa_{ij} в \vec{E} -поле лишь с учетом второго слагаемого:

$$\Delta a_{ij} = R_{ijkl} E_k E_l \quad /8.1/$$

Здесь R_{ijkl} - компоненты тензора четвертого ранга для квадратичного электрооптического эффекта.

Тензор $[R_{ijkl}]$ состоит из 81 компоненты, каждая из которых преобразуется при операциях симметрии аналогично четвертому произведению соответствующих координат, т.е.

$$R_{ijkl} = c_{im} c_{jn} c_{ko} c_{lp} R_{mnop} \quad /8.2/$$

Поскольку компоненты a_{ij} симметричны, то компоненты тензора /8.2/ также симметричны по первым двум или по вторым двум вследствие независимости E_k и E_l , т.е.

$$R_{ijkl} = R_{jikl}, R_{ijkl} = R_{ijlk} \quad /8.3/$$

Поэтому из 81 компоненты число независимых компонент тензора

уменьшается до 36. Если ввести матричные обозначения такие, что

$$\begin{aligned} R_{mn} &= R_{ijkl} && \text{при } m \text{ и } n = 1, 2, 3; \\ R_{mn} &= 2 R_{ijkl} && \text{при } m \text{ или } n = 4, 5, 6; \\ R_{mn} &= 4 R_{ijkl} && \text{при } m \text{ и } n = 4, 5, 6, \end{aligned} \quad /8.4/$$

то уравнение /8.1/ принимает вид соотношения

$$\Delta a_n = R_{nm} E_m^2 \quad /8.5/$$

или следующую форму:

	E_1^2	E_2^2	E_3^2	$E_2 E_3$	$E_1 E_3$	$E_1 E_2$	
Δa_1	R_{11}	R_{12}	R_{13}	R_{14}	R_{15}	R_{16}	/8.6/
Δa_2	R_{21}	R_{22}	R_{23}	R_{24}	R_{25}	R_{26}	
Δa_3	R_{31}	R_{32}	R_{33}	R_{34}	R_{35}	R_{36}	
Δa_4	R_{41}	R_{42}	R_{43}	R_{44}	R_{45}	R_{46}	
Δa_5	R_{51}	R_{52}	R_{53}	R_{54}	R_{55}	R_{56}	
Δa_6	R_{61}	R_{62}	R_{63}	R_{64}	R_{65}	R_{66}	

Таким образом, тензор $[R_{ijkl}]$ в матричной форме в общем случае содержит 36 элементов. Конкретный вид матрицы определяется точечной группой симметрии кристаллов.

Отметим, что в отличие от линейного электрооптического эффекта квадратичный электрооптический эффект может наблюдаться во всех классах симметрии, включая классы с центром симметрии, в том числе и изотропные среды.

В качестве примера рассмотрим квадратичный электрооптический эффект в кубическом кристалле класса $m\bar{3}m$. Исходная, оптическая индикатриса кристалла является сферой /в главных осях/:

$$a_i^2 (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) = 1, \quad /8.7/$$

где $a_i^2 = 1/n_i^2$; $n_1^2 = n_2^2 = n_3^2$. /8.8/

Если к кристаллу приложить электрическое поле \vec{E} вдоль направления $[100]$, т.е. $\vec{E} = [E_1, 0, 0]$, то в соответствии с принципом Кори

$$m\bar{3}m \rightarrow \infty m = 4mm \quad /8.9/$$

кристалл принимает свою симметрию по классу $4mm$ тетрагональной симметрии; в результате оптическая индикатриса кристалла становится эллипсоидом вращения, а кристалл - оптически одноосным, в котором возможно наблюдение двулучепреломления.

Проведем обсуждение эффекта с помощью тензорного описания.

Прежде всего выведем матрицу для обсуждаемого эффекта для $m\bar{3}m$:

$$(R_{nm}) = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{12} & 0 & 0 & 0 \\ R_{12} & R_{11} & R_{12} & 0 & 0 & 0 \\ R_{12} & R_{12} & R_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & R_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{44} \end{pmatrix} \quad /8.10/$$

Тогда соотношение /8.5/ в условиях эксперимента, когда $\vec{E} \parallel [100]$, можно выразить в виде

$$\begin{pmatrix} \Delta a_1 \\ \Delta a_2 \\ \Delta a_3 \\ \Delta a_4 \\ \Delta a_5 \\ \Delta a_6 \end{pmatrix} = (R_{nm}) \begin{pmatrix} E_1^2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad /8.11/$$

С учетом /8.10/ и /8.11/ для изменения поляризационных констант Δa_n получим

$$\Delta a_1 = R_{11} E_1^2 \quad /8.12/$$

$$\Delta a_2 = \Delta a_3 = R_{12} E_1^2 \quad /8.13/$$

Уравнение оптической индикатрисы тогда будет иметь вид

$$(a_{11}^0 + \Delta a_{11})x_1^2 + (a_{22}^0 + \Delta a_{22})(x_2^2 + x_3^2) = 1 \quad /8.14/$$

или при учете /8.12/ и /8.13/

$$(a_{11}^0 + R_{11} E_1^2)x_1^2 + (a_{22}^0 + R_{12} E_1^2)(x_2^2 + x_3^2) = 1 \quad /8.15/$$

Главные оси индикатрисы кристалла до и после приложения \vec{E} -поля совпадают. Как можно видеть из /8.15/, оптической индикатрисой в поле \vec{E} является эллипсоид вращения, как и ожидалось.

Найдем величину эффекта двупреломления. Для этого, как и ранее, следует перейти от констант a_{ij} к коэффициентам преломления. Полагая изменения Δa_{ij} малыми, для n_{11} получим (используя производные):

$$\Delta a_{11} = (a_{11})' = (1/n_{11}^3)' = -2\Delta a_{11}/n_{11}^3 \quad /8.16/$$

откуда

$$\Delta n_{11} = -\frac{1}{2} \Delta a_{11} \cdot n_{11}^3 \quad /8.17/$$

При подстановке в /8.17/ значений Δa_{ij} из /8.12/ и /8.13/ получим

$$\Delta n_{11} = -\frac{1}{2} n_{11}^3 R_{11} E_1^2 \quad /8.18/$$

$$\Delta n_{22} = \Delta n_{33} = -\frac{1}{2} n_{22}^3 R_{12} E_1^2 \quad /8.19/$$

Тогда величины n_{ij} при действии \vec{E} -поля запишем следующим образом:

$$n_{11} = n_{11}^0 \left(1 - \frac{1}{2} n_{11}^2 R_{11} E_1^2\right) \quad /8.20/$$

$$n_{22} = n_{33} = n_{22}^0 \left(1 - \frac{1}{2} n_{22}^2 R_{12} E_1^2\right) \quad /8.21/$$

Итак, мы имеем эллипсоид вращения, с оптической осью вдоль направления $[100]$, т.е. по направлению \vec{E} -поля. Следовательно, в данном случае, при $n_{22} = n_{33}$ продольный квадратичный эффект является нулевым. Возможна работа лишь в поперечном режиме, когда направление \vec{E} -поля и направление распространения света взаимно перпендикулярны. Так, в этом режиме двойное лучепреломление будет иметь вид

$$\Delta n(E) = n_{11} - n_{22} = \frac{1}{2} n_{11}^2 (R_{12} - R_{11}) E_1^2 \quad /8.22/$$

2.2. Пьезооптический эффект в кристаллах

Пьезооптический эффект или явление фотоупругости в кристаллах состоит в изменении "деформации" оптической индикатрисы кристаллов в результате влияния внешних постоянных или переменных механических напряжений.

Аналогично электрооптическому эффекту для изменения Δa_{ij} поляризационных констант имеем:

в случае приложения деформации

$$\Delta a_{ij} = P_{ijkl} \cdot \epsilon_{kl} \quad /8.22/$$

где $[P_{ijkl}]$ - тензор упругооптических констант,

в случае приложения напряжений

$$\Delta a_{ij} = \pi_{ijkl} \cdot \sigma_{kl} \quad /8.23/$$

где $[\pi_{ijkl}]$ - тензор пьезооптических констант.

Так как $\epsilon_{kl} = \epsilon_{lk}$, $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$, $\Delta a_{ij} = \Delta a_{ji}$, то

$$P_{ijkl} = P_{jikl}, P_{ijkl} = P_{jilk} \quad /8.24/$$

$$\pi_{ijkl} = \pi_{jikl}, \pi_{ijkl} = \pi_{jilk}$$

аналогично коэффициентам квадратичного электрооптического эффекта.

Заметим здесь, что упругооптические константы кристалла связаны с пьезооптическими следующими соотношениями:

$$P_{ijkl} = \pi_{ijkl} - C_{ijkl} \cdot \epsilon_{ij} \quad /8.25/$$

где C_{ijkl} - константы упругой жесткости кристалла /компоненты также тензора четвертого ранга/.

и

$$\pi_{ijkl} = P_{ijkl} - S_{ijkl} \cdot \sigma_{ij} \quad /8.26/$$

где S_{ijkl} - константы упругой податливости кристалла.

Константы C_{ijkl} и S_{ijkl} описывают упругие свойства кристаллов. Так, закон Гука в обобщенной форме /связь деформаций с напряжением/ может быть выражен в виде

$$\epsilon_{ij} = S_{ijkl} \cdot \sigma_{kl} \quad /8.27/$$

либо в форме

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \epsilon_{kl} \quad /8.28/$$

Симметрия тензоров $[C_{ijkl}]$ и $[S_{ijkl}]$, как и $[P_{ijkl}]$, $[\pi_{ijkl}]$, $[P_{ijkl}]$ определяется симметрией кристалла /материальными тензорами/. Напомним, что закон преобразования компонент этих тензоров подобен таковому для четвертого произведения координат.

С учетом соотношений /8.24/ число независимых компонент этих тензоров в общем случае равно 36. Уместно заметить, что вследствие условия взаимности деформаций число независимых компонент тензора модулей упругости или констант податливости уменьшается до 21/.

Продолжим рассмотрение пьезооптического эффекта. Если ввести матричную запись, то уравнение /8.23/ примет вид

$$\Delta a_m = \pi_{mn} t_n, \quad m, n = 1, 2, \dots, 6, \quad /8.29/$$

где

$$\pi_{mn} = \begin{cases} \pi_{ijk}, & \text{когда } n = 1, 2, 3; \\ 2\pi_{ijkl}, & n = 4, 5, 6. \end{cases} \quad /8.30/$$

Для наблюдения пьезооптического эффекта нет никаких симметричных ограничений, как и в случае эффекта Керра.

В качестве примера рассмотрим явление фотоупругости в кубических кристаллах класса 23.

Приложим к кристаллу 23 одноосное напряжение в направлении [100]. В соответствии с принципом Кюри

$$23 \quad \rho_{\infty} / mmm = 222 \quad /8.31/$$

симметрии кристалла при таком воздействии понижается до класса 222 /ромбической сингонии/. Следовательно, исходная оптическая индикатриса кристалла 23 /сфера/ деформируется до эллипсоида общего вида, и кристалл становится оптически двуосным. Тензорное описание позволяет, как и ранее, найти величину эффекта двуупреломления.

Итак, до приложения напряжения оптическая индикатриса кристалла представляла собой сферу:

$$a_{ij}^0 (x_i^2 + x_j^2 + x_k^2) = 1, \quad /8.32/$$

где $a_{ij}^0 = 1/n_{ij}^2$; n_{ij} — компоненты коэффициента преломления. Под действием механического напряжения по направлению [100] индикатриса изменяется. Тогда выполняется соотношение /8.29/. Запишем тензор $[\pi_{ijkl}]$ для кристалла 23 в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{13} & \pi_{11} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{pmatrix} \quad /8.33/$$

Соотношение /8.29/ в развернутом виде будет иметь вид

$$\begin{pmatrix} \Delta a_1 \\ \Delta a_2 \\ \Delta a_3 \\ \Delta a_4 \\ \Delta a_5 \\ \Delta a_6 \end{pmatrix} = (\pi_{mn}) \begin{pmatrix} t_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pi_{11} t_1 \\ \pi_{13} t_1 \\ \pi_{12} t_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad /8.34/$$

Поскольку $\Delta a_4 = \Delta a_5 = \Delta a_6 = 0$, главные оси оптической индикатрисы остались прежними.

Найдем изменения трех главных показателей преломления, для чего запишем

$$a_{11} = 1/n_{11}^2, \quad a_{22} = 1/n_{22}^2, \quad a_{33} = 1/n_{33}^2$$

Тогда, как и ранее, взяв производную, получим:

$$\Delta a_{ii} = -2/n_{ii}^3 \cdot \Delta n_{ii}, \quad /8.35/$$

где мы с достаточной степенью точности заменили n_{ii} на n_{ii}^0 . Стояда для Δn_{11} , Δn_{22} и Δn_{33} при учете /8.34/ и /8.35/ имеем соотношение

$$\Delta n_{11} = -\frac{1}{2} n_{11}^3 \pi_{11} t_1, \quad /8.36/$$

$$\Delta n_{22} = -\frac{1}{2} n_{11}^3 \pi_{13} t_1, \quad /8.37/$$

$$\Delta n_{33} = -\frac{1}{2} n_{11}^3 \pi_{12} t_1. \quad /8.38/$$

Как видно, кристалл стал оптически двуосным. Так, двойное лучепреломление кристалла для светового луча, распространяющегося вдоль оси x_2 в соответствии с уравнениями /8.36/ - /8.38/ выражается формулой:

$$\Delta n = n_{11} - n_{12} = \Delta n_{11} - \Delta n_{13} = -\frac{1}{2} n_{11}^3 (\pi_{11} - \pi_{13}) t_1, \quad /8.39/$$

а для света, распространяющегося вдоль оси x_3 , — формулой

$$\Delta n = n_{11} - n_{12} = \Delta n_{11} - \Delta n_{22} = -\frac{1}{2} n_{11}^3 (\pi_{11} - \pi_{12}) t_1, \quad /8.40/$$

где n_{11} и n_{12} — показатели преломления кристалла соответственно в направлениях, параллельном и перпендикулярном направлению приложенного механического напряжения.

На этом эффекте основан поляризационно-оптический метод исследования механических напряжений. Измеряя индуцированное двулучепреломление, можно количественно определять величины и распределение напряжений в кристалле. Так, например, можно исследовать распределение напряжений /в ИК-свете/, возникающих в процессе роста в полупроводниковых кристаллах, или измерять поля напряжений около отдельных или скопленных дефектов.

Значительное место эффект фотоупругости нашёл при разработке акустооптических модуляторов и дефлекторов света в оптоэлектронике и интегральной оптике. Ультразвуковая волна, распространяясь в кристалле, создает локальные сжатия и растяжения среды, приводя к локальным изменениям показателя преломления. В среде образуются периодические слои с отличающимися показателями преломления. Эти слои движутся со скоростью звука и следуют друг за другом на расстоянии половины длины звуковой волны. При прохождении света через такую слоистую структуру возникает дифракция света, которая и используется в модуляторах и дефлекторах.

8.3. Упругие свойства кристаллов

8.3.1. Закон Гука

Как было показано в предыдущем разделе, закон Гука в обобщенной форме записывается в виде соотношения /8.27/ либо /8.23/:

$$\epsilon_{ij} = S_{ijkl} t_{kl} \quad /8.27/$$

$$t_{ij} = C_{ijrs} \epsilon_{rs} \quad /8.28/$$

где S_{ijkl} и C_{ijrs} - компоненты тензоров четвертого ранга: S_{ijkl} - другие податливости, и C_{ijrs} - упругие жесткости.

Вследствие симметричности тензора напряжения /в отсутствие объемных моментов/ можно полагать, что $S_{ijkl} = S_{jikl}$. Симметричность тензора деформации приводит к соотношению $S_{ijkl} = S_{jilk}$. Аналогично, тензор $[C_{ijrs}]$ также симметричен по первым двум и по последним двум индексам. Поэтому число независимых компонент S_{ijkl} и C_{ijrs} уменьшается от 81 до 36.

При введении матричных обозначений, таких, что

$$S_{ijkl} = S_{mn}, \quad \text{когда } m \text{ и } n = 1, 2 \text{ или } 3;$$

$$2S_{ijkl} = S_{mn}, \quad \text{когда или } m, \text{ или } n = 4, 5 \text{ или } 6;$$

$$4S_{ijkl} = S_{mn}, \quad \text{когда и } m, \text{ и } n \text{ равны } 4, 5 \text{ или } 6,$$

уравнение /8.27/ можно записать в более кратком виде:

$$\epsilon_i = S_{ij} \epsilon_j \quad /8.41/$$

Для C_{ijrs} множители 2 и 4 в матричном обозначении вводить не нужно /в отличие от S_{ijkl} /. Поэтому, если

$$C_{ijrs} = C_{mn} (i, j, r, s = 1, 2, 3; m, n = 1, 2, \dots, 6),$$

то уравнение /8.28/ принимает форму

$$t_i = C_{ij} \epsilon_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6) \quad /8.42/$$

Величины S_{ij} и C_{ij} записываются в виде матриц:

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \quad /8.43/$$

Заметим, что здесь, как и в случае пьезоконстант, S_{ij} и C_{ij} не являются компонентами тензора второго ранга и поэтому не преобразуются подобно таким компонентам. Для преобразования их к другим осям координат необходимо возвращаться к тензорным обозначениям и пользоваться законом преобразования компонент тензора четвертого ранга.

В предыдущем разделе обращалось внимание на то, что вследствие

условия взаимности деформаций число независимых компонент модулей упругости и податливости уменьшается от 36 до 21. Это можно доказать при вычислении энергии деформированного кристалла.

Рассмотрим кристалл, имеющий в недеформированном состоянии форму единичного куба, и предположим, что он испытывает малую однородную деформацию с компонентами ϵ_i . Пусть теперь все компоненты деформации возрастут до $\epsilon_i + d\epsilon_i$. Тогда работа, произведенная при этом компонентами напряжения t_i , действующими на грани куба, может быть выражена в виде

$$dW = t_i d\epsilon_i \quad (i=1, 2, \dots, 6) \quad /8.44/$$

или в тензорном обозначении

$$dW = t_{ij} d\epsilon_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad /8.45/$$

Заметим, что уравнение /8.41/ аналогично уравнению /8.34/ для работы поляризации.

Если процесс деформации протекает изотермически и обратимо, то произведенная работа равна возрастанию свободной энергии dY , и для единичного объема можно записать

$$dY = dW = t_i d\epsilon_i \quad /8.46/$$

Если выполняется закон Гука /8.42/, то уравнение /8.46/ принимает вид

$$dY = C_{ij} \epsilon_j d\epsilon_i \quad /8.47/$$

Следовательно,

$$\partial Y / \partial \epsilon_i = C_{ij} \epsilon_j \quad /8.49/$$

Дифференцируя обе части этого уравнения по ϵ_j , получим:

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon_j} \left(\frac{\partial Y}{\partial \epsilon_i} \right) = C_{ij} \quad /8.50/$$

Но так как Y есть функция только состояния тела, определяемого компонентами деформации, то порядок дифференцирования не имеет значения, и левая сторона этого соотношения симметрична по i и j . Значит,

$$C_{ij} = C_{ji} \quad /8.51/$$

Из соотношения между C_{ij} и S_{ij} /как между прямой и обратной матрицами/ следует, что и

$$S_{ij} = S_{ji} \quad /8.52/$$

Таким образом, с учетом /8.51/ и /8.52/ число независимых жесткостей и податливостей уменьшается от 36 до 21.

8.3.2. Влияние симметрии кристалла

Вследствие симметрии кристалла число независимых компонент S_{ij} и C_{ij} уменьшается еще больше, поскольку элементы симметрии налагают на упругие константы определенные ограничения. Для наведения этих ограничений в трех случаях симметрии используется аналитический

метод, а именно закон преобразования компонент тензоров четвертого ранга:

$$T_{ijkl} = C_{im} C_{jn} C_{ko} C_{lp} T_{mnop} \quad /8.55/$$

Отметим, в чем легко убедиться, что упругость кристалла является центросимметричным свойством, т.е. компоненты S_{ijkl} и C_{ijkl} остаются неизменными при действии центра симметрии.

За исключением классов, относящихся к тригональной и гексагональной системам, независимые упругие константы можно быстрее определить с помощью метода прямой проверки /Фуми/, рассмотренного нами в предыдущей главе.

Так, можно показать, что матрица (S_{ij}) для изотропных материалов имеет вид

$$\begin{matrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2(S_{11}-S_{12}) & 0 & 0 \\ & & & & 2(S_{11}-S_{12}) & 0 \\ & & & & & 2(S_{11}-S_{12}) \end{matrix} \quad /8.51/$$

Так как матрица симметрична, мы опустили нижнюю левую половину матрицы.

8.3.5. Характеристические поверхности и модуль Юнга

Упругие свойства кристалла нельзя полностью представить одной поверхностью. Для практики важна геометрическая поверхность, представляющая изменение модуля Юнга с направлением.

Пусть из кристалла вырезан стержень, ось которого параллельна произвольному направлению ox_1^i . Если к этому стержню приложить напряжение растяжения, то в общем случае оно вызывает не только продольную и поперечные деформации, но также и деформации сдвига. Модуль Юнга в направлении растяжения определяется отношением продольного напряжения к продольной деформации, т.е. равен $1/S_{11}^i$. Как правило, используются характеристические поверхности, радиус-вектор которых в направлении ox_1^i пропорционален S_{11}^i или $1/S_{11}^i$.

Общее выражение искомого: поверхности может быть записано в виде

$$S_{1111}^i = C_{11m} C_{11n} C_{11o} C_{11p} S_{mnop} \quad /8.55/$$

где $[S_{mnop}]$ — тензор податливости кристалла в исходной системе координат. Зная его для данного класса симметрии кристалла, можно найти аналитическое выражение для этой поверхности.

Так, например, для гексагональной системы матрица S_{ij} имеет вид

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & S_{11} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & S_{44} & 0 & 0 \\ & & & & S_{44} & 0 \\ & & & & & 2(S_{11}-S_{12}) \end{pmatrix} \quad /8.56/$$

Тогда соотношение /8.55/ после упрощения запишем следующим образом

$$S_{11}^i = S_{11}(1-C_{13}^2)^2 + S_{33}C_{13}^4 + (S_{44} + 2S_{13})(1-C_{13}^2)C_{13}^2$$

$$\text{или } S_{11}^i = S_{11} \sin^4 \theta + S_{33} \cos^4 \theta + (S_{44} + 2S_{13}) \sin^2 \theta \cos^2 \theta,$$

где θ — угол между произвольным направлением ax_1^i и кристаллографической осью z /или кристаллофизической осью z_3 /. В данном случае поверхность S_{11}^i /или $1/S_{11}^i$ / является поверхностью вращения вокруг оси oz_3 .

В заключение раздела заметим, что нами были рассмотрены лишь статические деформации и напряжения. Современные исследования, как правило, являются динамическими /например, в кристалл посылаются звуковая волна определенной частоты с помощью пьезоэлектрических кристаллов /см. гл. 7//. Ультразвуковые колебания и волны в твердых телах и жидкостях /а также в жидких кристаллах/ находят важные технические применения.

8.4. Упражнения

1. Найти вид матрицы упругой жесткости кристалла класса 222.
2. Какие C_{mnp} обращаются в нуль при наличии двойной оси дополнительно к оси 4, т.е. в классе 422?
3. Ромбический кристалл подвергается действию гидростатического давления. Матрица упругих податливостей кристалла такова:

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & S_{11} & S_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & S_{44} & 0 & 0 \\ & & & & S_{55} & 0 \\ & & & & & S_{66} \end{pmatrix}$$

Выписать все шесть компонент деформации /см. ф-лу /8.27//.

4. Выписать все шесть компонент деформации для кубического кристалла. Сравнить с ответом упражнения 3.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В кристаллофизике привлекает то совершенно особое эстетическое наслаждение, которое она доставляет в гораздо большей степени, чем любая другая область физики.

В. Фойгт

Использование симметрии кристаллов является одним из наиболее общих способов понимания физических эффектов в кристаллах. Симметрия, как специфический метод, позволяет сравнительно просто сделать заключение о том, возможно или нет то или иное явление в кристалле, хотя и не дает способа утверждать, что это явление будет иметь место обязательно. Симметрия позволяет сделать однозначные заключения о тех явлениях в кристаллах, которые ею не разрешаются: что недопустимо по симметрии кристалла, в реальности обнаружено быть не может.

В данной книге мы старались показать, почему кристаллофизика, как наука, является основой таких направлений науки и техники, как полупроводниковая микро- и оптоэлектроника, квантовая электроника и нелинейная оптика, полупроводниковое приборостроение, акустоэлектроника и др.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Сонин А.С. Беседы о кристаллофизике. М.: Атомиздат, 1976. 240 с.
2. Сонин А.С. Постигание совершенства / Симметрия, асимметрия, диссимметрия, антисимметрия/. М.: Знание, 1987. 208 с.
3. Шаскольская М.П. Кристаллография. 2-е изд. М.: Высшая школа, 1986. 391 с.
4. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. 2-е изд. М.: Наука, 1979. 640 с.
5. Переломова Е.В., Тагиева М.М. Задачник по кристаллофизике / Под ред. М.П. Шаскольской. 2-е изд. М.: Наука, 1982. 288 с.
6. Най Дт. Физические свойства кристаллов. М.: Мир, 1967. 386 с.
7. Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1981. 40 с.
8. Вустер У. Применение тензоров в теории групп для описания физических свойств кристаллов /Пер. с англ. Под ред. Л.А. Шувалова. М.: Мир, 1977. 384 с.

9. Желудев И.С. Физика кристаллов и симметрия. М.: Наука, 1987. 192 с. /Сер. "Наука и технический прогресс"/.
10. Современная кристаллография. В 4-х т.:
 - Т.1: Вайнштейн Б.К. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. М.: Наука, 1979. 384 с.
 - Т.2: Вайнштейн Б.К., Фридкин В.М., Инденбом Л.М. Структура кристаллов. М.: Наука, 1979. 360 с.
 - Т.4: Физические свойства кристаллов /Л.А. Шувалов, А.А. Урусовская, И.С. Желудев и др. М.: Наука, 1981. 496 с.
11. Сонин А.С. Введение в физику жидких кристаллов. М.: Наука, 1983. 320 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ. Построение окружности Мора

Рассмотрим здесь кратко полезное построение, предложенное О. Мором /1335 - 1918 гг./ и обычно используемое инженерами при анализе тензоров напряжений и деформаций. Это построение в ряде случаев удобно применять и для других тензоров второго ранга.

П.1. Поворот тензора вокруг главных осей

Часто бывает необходимым преобразовывать компоненты симметричного тензора второго ранга от одной системы координат к другой, получающейся из первой простым поворотом вокруг одной из осей координат. В этом случае уравнения преобразования значительно упрощаются.

Предположим, что "новые" оси x'_1, x'_2 получаются из "старых" осей x_1, x_2 , как показано на рис. П.1, а, поворотом вокруг x_3 на угол θ , измеряемый от x_1 в сторону x_2 .

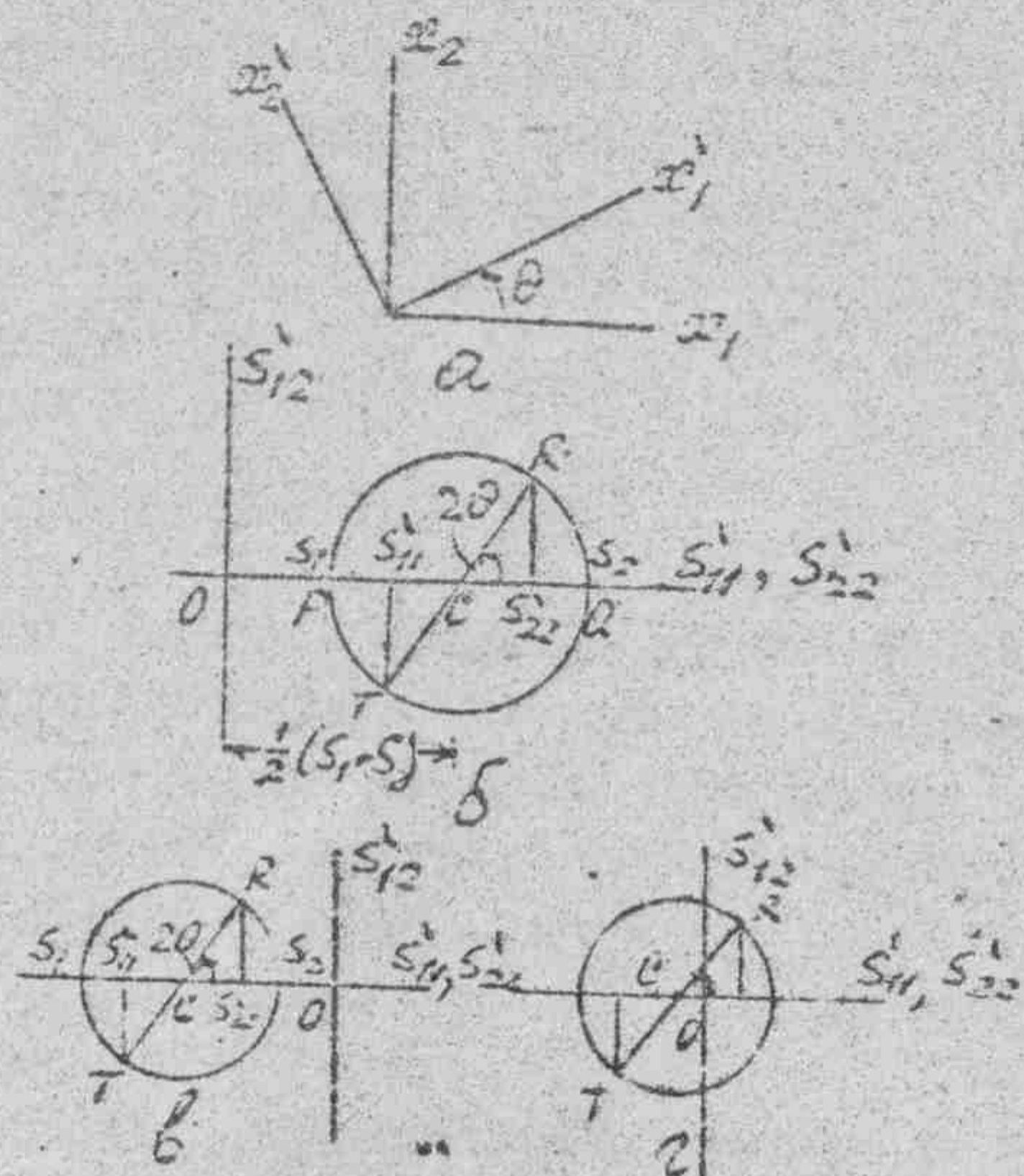


Рис. П.1. Построение окружности Мора.
 а - поворот осей координат; б - случай, когда s_1 и s_2 положительны;
 в - случай, когда s_1 и s_2 отрицательны; г - случай, когда $s_1 < 0$ и $s_2 > 0$.
 В этом случае матрица преобразования имеет вид

$$[c_{ij}] = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad /П.1/$$

Рассмотрим простой случай, когда оси координат x_1, x_2, x_3 являются главными осями тензора $[S_{ij}]$. Тогда имеем

$$[S_{ij}] = \begin{pmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{pmatrix} \quad /П.2/$$

Применяя закон преобразования компонент полярного тензора второго ранга

$$S'_{ij} = c_{ik} c_{jl} S_{kl} \quad (S'_{ij} = S'_{ji}) \quad /П.3/$$

и используя значения компонент c_{ij} из /П.1/ и S_{ij} из /П.2/, находим, что тензор в новой системе координат запишется в виде

$$[S'_{ij}] = \begin{pmatrix} S'_{11} & S'_{12} & 0 \\ S'_{12} & S'_{22} & 0 \\ 0 & 0 & S'_{33} \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} S'_{11} &= S_1 \cos^2\theta + S_2 \sin^2\theta, \\ S'_{22} &= S_1 \sin^2\theta + S_2 \cos^2\theta, \\ S'_{12} &= -S_1 \sin\theta \cos\theta + S_2 \sin\theta \cos\theta, \\ S'_{33} &= S_3. \end{aligned} \quad /П.4/$$

Следует заметить, что при рассматриваемом преобразовании изменились лишь четыре компонента в левой верхней части тензора, что вполне соответствует виду матрицы преобразования. В случае поворота тензора на угол θ вокруг оси x_3 мы приходим к виду

$$\begin{pmatrix} S'_{11} & 0 & 0 \\ 0 & S'_{22} & S'_{23} \\ 0 & S'_{23} & S'_{33} \end{pmatrix} \quad /П.5/$$

в случае поворота вокруг оси x_2 - к виду

$$\begin{pmatrix} S'_{11} & 0 & S'_{13} \\ 0 & S'_{22} & 0 \\ S'_{13} & 0 & S'_{33} \end{pmatrix} \quad /П.6/$$

После несложных тригонометрических преобразований уравнения /П.4/ можно привести к форме

$$\begin{aligned} S'_{11} &= \frac{1}{2}(S_1 + S_2) - \frac{1}{2}(S_2 - S_1) \cos 2\theta, \\ S'_{22} &= \frac{1}{2}(S_1 + S_2) + \frac{1}{2}(S_2 - S_1) \cos 2\theta, \\ S'_{12} &= \frac{1}{2}(S_2 - S_1) \sin 2\theta. \end{aligned} \quad /П.7/$$

Полученный результат можно представить графически /рис. П.1, б/. Пусть $S_1 < S_2$. Отметим на горизонтальной оси две т. Р и Q на расстояниях от 0, равных соответственно S_1 и S_2 . Затем проведем окружность с центром С, взяв РQ в качестве диаметра. Построим радиус CR так, чтобы угол между CR и CQ, измеренный против часовой стрелки, составлял 2θ /где угол θ определяется так же, как и на рис. П.1, а/. Тогда, поскольку $OC = \frac{1}{2}(S_1 + S_2)$ и $CR = \frac{1}{2}(S_2 - S_1)$,

на основании уравнений /П.7/ получаем, что координаты т. R в системе координат, изображенной на рисунке, будут равны S_{22}^1 и S_{11}^1 . Если продолжить KC до пересечения с окружностью в т. T , то абсцисса T равна S_{11}^1 . Это построение, называемое построением окружности Мора, дает наглядную картину изменения S_{11}^1 , S_{22}^1 , S_{12}^1 при повороте осей координат.

На рис. П.1,б значения S_1 и S_2 положительны, однако построение остается справедливым и в том случае, когда оба значения отрицательны, как показано на рис. П.1,в, а также при противоположных знаках S_1 и S_2 /рис. П.1,г/. Значения S_{22}^1 и S_{12}^1 по-прежнему являются координатами т. R , а значение S_{11}^1 - абсциссой т. T ; при этом во всех случаях следует учитывать знаки.

П.2. Нахождение главных компонент тензора по окружности Мора

Нетрудно видеть, что при известных значениях S_{11}^1 , S_{12}^1 , S_{22}^1 окружность Мора можно использовать для нахождения главных компонент S_1 и S_2 /заметим, что в рассмотренном случае $S_3 = S_{33}^1$ /.

Из рис. П.1,б легко можно найти, что

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{1}{2} (S_{11}^1 + S_{22}^1) - \tau \\ S_2 &= \frac{1}{2} (S_{11}^1 + S_{22}^1) + \tau \end{aligned} \quad /П.8/$$

где

$$\tau = \sqrt{\frac{1}{4} (S_{22}^1 - S_{11}^1)^2 + S_{12}^1{}^2}$$

и

$$\operatorname{tg} 2\theta = \frac{2 S_{12}^1}{S_{22}^1 - S_{11}^1} \quad /П.9/$$

При построении рис. П.1,а-г мы предполагали, что вращение системы происходит вокруг оси X_3 и что $S_1 < S_2$. Однако на практике часто приходится применять это построение и для случаев, когда порядок осей не соответствует рассмотренной схеме. Поэтому используется следующий общий способ построения. Из двух главных компонент, участвующих в преобразовании, выбирается наибольшая и вертикально вверх проводится соответствующая ось /см. рис. П.1,а/. Вправо откладывается ось для меньшей компоненты. Затем вводятся более удобные обозначения осей и даются соответствующие обозначения осей на рис. П.1,б,в или г.

П.3. Упражнения

Привести следующие тензоры к главным осям, используя построение окружности Мора:

$$a/ \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{bmatrix}$$

$$b/ \begin{bmatrix} 25 & 0 & 0 \\ 0 & 7 & -3\sqrt{3} \\ 0 & -3\sqrt{3} & 13 \end{bmatrix}$$

$$d/ \begin{bmatrix} 8 & 0 & -4 \\ 0 & 12 & 0 \\ -4 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

$$r/ \begin{bmatrix} a_1^2 & z_{33} \bar{E}_3 & 0 \\ z_{33} \bar{E}_3 & a_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{bmatrix}$$

Заметим, что указанные тензоры могут описывать не только механические напряжения, но и другие физические свойства кристаллов /удельная проводимость, диэлектрическая проницаемость, диэлектрическая непроницаемость и др./ . При решении указанной задачи для сравнения читатель может воспользоваться также методом решения векторного уравнения тензоров, рассмотренным в книге.

СПИСОК СОДЕРЖАНИЯ

Предисловие	3
Введение	4
Глава 1. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОГРАННИКОВ	6
1.1. Определение симметрии	6
1.2. Элементы симметрии кристаллических многогранников	7
1.3. Кристаллографические категории, символы и системы осей координат	10
1.4. 32 класса /точечные группы/ симметрии кристаллических многогранников	11
1.5. Предельные точечные группы симметрии /группы Кюри/	14
1.6. Метод кристаллографического индексирования	15
1.7. Упражнения	17
Глава 2. СИММЕТРИЯ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ	18
2.1. Структура кристаллов и пространственная решетка	18
2.2. Элементарная ячейка пространственной решетки. Ячейки Браве	18
2.3. Элементы симметрии кристаллических структур	20
2.4. Пространственные группы симметрии	21
2.5. Обратная решетка	22
2.6. Упражнения	25
Глава 3. МАТРИЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СИММЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ	25
3.1. Кристаллофизические системы координат	25
3.2. Преобразование осей кристаллофизической системы координат	26
3.3. Преобразование компонент вектора	27
3.4. Преобразование координат точки	28
3.5. Упражнения	29
Глава 4. ПРИНЦИП СИММЕТРИИ В КРИСТАЛЛОФИЗИКЕ	30
4.1. Основной закон кристаллофизики /принцип Неймана/	30
4.2. Принцип суперпозиции симметрий /принцип Кюри/	35
4.3. Упражнения	35
Глава 5. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ПЕРВОГО РАНГА	35
5.1. Прямой пьезоэлектрический эффект в кристаллах	36
5.1.1. Сущность пьезоэлектрического эффекта	36
5.1.2. Ограничения, налагаемые симметрией кристалла на пьезоэффект	36
5.1.3. Указательная поверхность пьезоэлектрического эффекта и её антисимметрия	36
5.1.4. О применении пьезоэлектрических кристаллов	39

5.2. Обратный пьезоэлектрический эффект	39
5.3. Упражнения	40
Глава 6. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ВТОРОГО РАНГА	41
6.1. Тензоры второго ранга и их свойства	41
6.2. Симметричные полярные тензоры второго ранга	45
6.2.1. Характеристическая поверхность 2-го порядка	45
6.2.2. Главные оси характеристической поверхности 2-го порядка	45
6.2.3. Геометрический образ симметричных полярных тензоров второго ранга	47
6.2.4. Геометрические свойства поверхности 2-го порядка	47
6.3. Точечные группы симметрии полярных тензоров второго ранга	49
6.4. Аксиальные тензоры второго ранга	53
6.5. Оптическая индикатриса кристалла	53
6.6. Тензор однородной деформации и напряжения	55
6.7. Упражнения	57
Глава 7. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ТРЕТЬЕГО РАНГА	58
7.1. Прямой пьезоэлектрический эффект в кристаллах	58
7.1.1. Сущность пьезоэффекта	58
7.1.2. Тензор пьезоэффекта	59
7.1.3. Симметрия тензора пьезоэффекта. Метод прямой проверки	61
7.1.4. Работа тензоров третьего ранга для пьезоэффекта на примере кристаллов кварца	62
7.1.5. Указательная поверхность продольного пьезоэлектрического эффекта в кварце и её симметрия	62
7.2. Обратный пьезоэлектрический эффект	65
7.3. Применение пьезоэлектрических эффектов	66
7.4. Линейный электрооптический эффект	67
7.5. Упражнения	71
Глава 8. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ЧЕТВЕРТОГО РАНГА	71
8.1. Квадратичный электрооптический эффект в кристаллах	72
8.2. Пьезооптический эффект в кристаллах	75
8.3. Упругие свойства кристаллов	78
8.3.1. Закон Гука	78
8.3.2. Влияние симметрии кристалла	79

8.3.3. Характеристические поверхности и модуль Юнга	80
8.4. Упражнения	81
Заключение	82
Библиографический список	82
Приложение. Построение окружности Мора	84

Учебное издание

НАЗВАНОВ Василий Федорович

ВВЕДЕНИЕ В КРИСТАЛЛОФИЗИКУ

Учебное пособие для студентов специальностей "Физика твердого тела", "Квантовая электроника /в т.ч. оптоэлектроника/", "Кристаллофизика"

Редактор В.И. Филиппова
Технический редактор Л.В. Агальцова
Корректор А.И. Оганесян
Н/К

Подписано к печати 2.04.93.

Формат 60x84 1/16. Бум. типогр. 32. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 5,35(5,75). Уч.-изд. л. 5,2. Тираж 500 экз
Заказ 86 С 22

Издательство Саратовского университета. 410601, Саратов,
Университетская, 42.
Типография издательства СГУ. 410601, Саратов, Астраханская, 83