

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

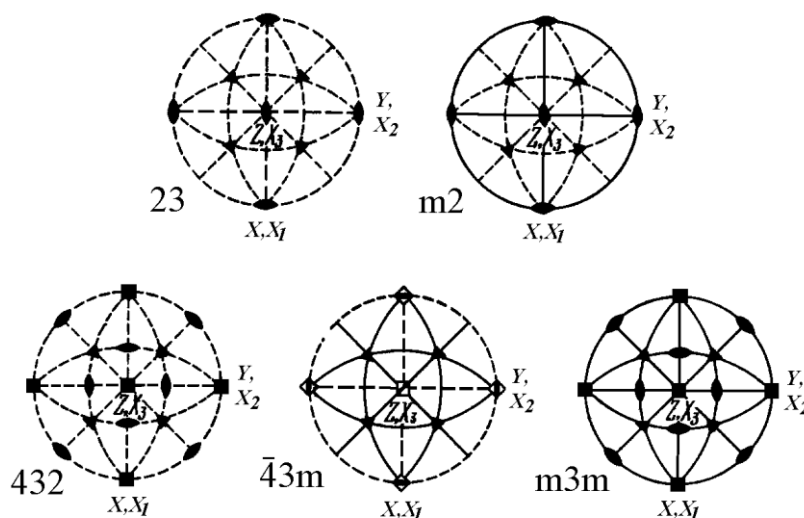
ТОТМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

В.Н. Давыдов

МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

*Учебно-методическое пособие
для самостоятельной работы студентов специальности
210105.65 с примерами и задачами*

Часть 1



Томск - 2011

Давыдов Валерий Николаевич
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры Электронных приборов.

МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ. *Учебно-методическое пособие для самостоятельной работы студентов специальности 210105.65 с примерами и задачами.* - Часть 1. Томск: ТУСУР, 2011. - 78 с.

Данное учебное методическое пособие содержит методические указания к организации самостоятельной работы студентов по дисциплине «Материалы и элементы электронной техники». Оно предназначено для получения студентами очной формы обучения навыков в решении задач, но также будет полезно студентам других форм обучения, испытывающим трудности в освоении данной дисциплины.

Пособие состоит из двух частей, каждая из которых охватывает круг вопросов, изучаемых в третьем и четвертом семестрах. В первой части пособия, относящейся к материалу дисциплины третьего семестра, приведена краткая программа лекционного курса с указанием списка рекомендованной литературы, в предельно простой форме кратко изложена теория тех разделов курса, изучение которых по учебному пособию «Материалы и элементы электронной техники» может оказаться недостаточным для самостоятельного решения задач. Приведены примеры решения задач по основным разделам первой части курса, а также варианты задач для контрольных работ по предмету. В конце первой части учебного методического пособия помещены таблицы, необходимые для установки систем координат в кристаллах различных сингоний, а также стереографические проекции кристаллов различных сингоний и точечных групп.

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ
2. ЦЕЛЬ ПРЕПОДАВАНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ
3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ
4. СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
5. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ
 - 5.1. Краткое содержание теории
 - 5.2. Стереографическая проекция многогранников
 - 5.3. Матричное представление элементов симметрии
6. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА СОСТАВЛЕНИЕ МАТРИЦ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ
7. ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ПО МАТРИЧНОМУ ПРЕДСТАВЛЕНИЮ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ №1
8. ПРЕДЕЛЬНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ. ПРИНЦИП НЕЙМАНА И ПРИНЦИП КЮРИ
 - 8.1. Краткое изложение теории
9. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА ПРИНЦИПЫ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ
10. ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ПО ПРИНЦИПАМ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ И НАЛОЖЕНИЮ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ №1
11. ТЕНЗОРЫ ВТОРОГО РАНГА
 - 11.1. Краткое изложение теории
12. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕЛИЧИНЫ ФИЗИЧЕСКОГО СВОЙСТВА В ЗАДАННОМ НАПРАВЛЕНИИ
13. ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ ВЕЛИЧИНЫ ФИЗИЧЕСКОГО СВОЙСТВА В ЗАДАННОМ НАПРАВЛЕНИИ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 2
14. ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИДА ТЕНЗОРА В НОВОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ
15. ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ НА ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИДА ТЕНЗОРА В НОВОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 2

ПРИЛОЖЕНИЯ.

- Таблица 1. Стандартные установки кристаллографической системы координат в кристаллах различных сингоний
- Таблица 2. Стереографические проекции кристаллов различной точечной симметрии

1. ВВЕДЕНИЕ

Данное учебно-методическое пособие включает в себя материалы, необходимые для организации самостоятельной работы при изучении дисциплины «Материалы электронной техники и методы их анализа». Оно разбито на главы, соответствующие основным разделам теоретического курса. Каждая глава содержит небольшой объем теоретического материала, за ним следуют примеры решения типовых задач по рассматриваемому материалу, а заканчивают главу варианты заданий для самостоятельного решения. В конце пособия приведены справочные материалы, необходимые для решения задач.

При очной форме обучения данный курс изучается в течение третьего и четвертого семестров. В соответствии с этим весь материал разбит на две части. Основной объем теоретического материала изучается в третьем семестре, который заканчивается сдачей экзамена. В четвертом семестре рассматривается одна тема по свойствам, описываемым тензорами четвертого ранга. По окончании семестра по этой теме сдается зачет.

В течение третьего семестра проводится две контрольных работы.

- * матричное представление операций симметрии;
- * принципы кристаллофизики, наложение элементов симметрии.
- * определение величины заданного физического свойства в выбранном направлении в кристалле;
- * определение компонент тензора второго ранга при смене системы координат.

Вторая контрольная работа третьего семестра выполняется по темам:

- * определение собственных векторов и собственных значений симметричного тензора второго ранга.
- вычисление физических свойств кристалла, описываемых тензорами первого ранга;
- вычисление физических свойств кристалла, описываемых тензорами второго ранга.

В четвертом семестре первая контрольная работа выполняется по темам:

- вычисление физических свойств кристалла, описываемых тензорами третьего ранга;
- вычисление физических свойств кристалла, описываемых тензорами четвертого ранга.

В четвертом семестре запланировано также выполнение курсовой работы по индивидуальным заданиям. Темы заданий распределяются преподавателем, их выполнение оценивается при поведении второй контрольной работы четвертого семестра. В этом же семестре запланировано также выполнение следующих лабораторных работ:

1. Оптические свойства кристаллов симметрии $3m$: расчет скоростей оптических волн при разных углах вхождения волны в кристалл (моделирование на компьютере).

2. Оптические свойства кристаллов симметрии $3m$: расчет векторов поляризации оптических волн в кристалле при разных углах вхождения волны в кристалл (моделирование на компьютере).

3. Упругие свойства кристаллов симметрии $3m$: расчет скоростей акустических волн при разных углах вхождения волны в кристалл (моделирование на компьютере).

4. Упругие свойства кристаллов симметрии $3m$: расчет векторов поляризаций упругих волн при разных углах вхождения волны в кристалл (моделирование на компьютере).

При чтении материала данного курса может сложиться впечатление о его излишней насыщенности математическими вопросами. В этой связи автор хотел бы отметить, что ни в какой другой физической дисциплине кроме кристаллофизики нет такой органичной и взаимодополняющей связи между физикой и математикой. Эта связь позволяет на основе достаточно простого математического анализа предсказывать новые физические явления, формулировать

условия их наблюдения, а также предвидеть симметричные свойства этих явлений в кристаллах различных сингоний. Введение какой-либо математической операции здесь сопровождается обязательной её физической интерпретацией, а применение выбранной математической операции в описании физического явления отражает определённое изменение в подходе к рассмотрению картины протекания физических процессов в рассматриваемом явлении.

1. ЦЕЛЬ ПРЕПОДАВАНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью изучения дисциплины “Материалы и элементы электронной техники” является ознакомление студентов с элементами теории симметрии кристаллических твердых тел, принципами проявления симметрии твердого тела в его физических свойствах, а также с математическим аппаратом для описания физических явлений различной сложности.

В результате изучения этой дисциплины студенты должны:

- знать основные элементы точечной симметрии и их свойства, а также в заданной элементарной ячейке находить элементы симметрии;
- уметь определять сингонию кристалла, а также его элементы точечной симметрии по символу точечной группы кристалла;
- знать принципы и критерии определения возможности наблюдения физического явления в кристаллах с заданной точечной симметрией;
- знать основные физические явления в кристаллах и подходы к их математическому описанию;
- исходя из общих принципов симметрии и теорем кристаллофизики по известным причине и следствию уметь предсказывать физическое явление, знать условия его наблюдения в кристаллах с заданной симметрией.

3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1. Наименование тем, их содержание, объем лекционных занятий

Тема 1. «Кристаллография». Введение. Содержание дисциплины, ее задачи. Структура кристалла и пространственная решетка. Кристаллографические проекции. Элементы точечной симметрии кристаллов. Свойства элементов точечной симметрии. Кристаллографические категории, системы и сингонии. Точечные группы симметрии кристаллов. Символика точечных групп. Вывод и описание 32 классов симметрии кристаллов. Предельные группы симметрии. Принцип Кюри и принцип Неймана в кристаллофизике. Симметрия

пространственной структуры кристаллов. Решетки Бравэ.

Тема 2. «Кристаллофизика. Элементы математического аппарата». Взаимный векторный базис и обратная решетка. Индексы направлений и плоскостей в кристаллах. Кристаллофизическая система координат. Тензоры второго ранга. Собственные векторы и собственные значения симметричного тензора второго ранга. Нормальные и тангенциальные составляющие симметричного тензора второго ранга. Внешняя симметрия тензоров второго ранга. Аксиальные векторы и аксиальные тензоры.

Тема 3. «Кристаллофизика. Тензора высших рангов» . Введение тензоров высших рангов в задачах кристаллофизики. Координатная запись тензоров и операции с ними в координатной форме. Дифференцирование тензоров. Внутренняя симметрия тензоров высших рангов. Внешняя симметрия тензоров высших рангов. Метод прямой проверки в декартовых координатах. Метод прямой проверки в циклических координатах. Теорема Германа. Применение теоремы Германа в кристаллофизике.

Тема 4. «Физические свойства кристаллов, описываемые тензорами первого ранга». Основные положения электростатики кристаллов. Пироэлектрический и пиромагнитный эффект в кристаллах. Сегнетоэлектрики и их свойства. Симметрия электрических свойств кристаллов.

Тема 5. «Физические свойства кристаллов, описываемые тензорами второго ранга». Постоянный электрический ток в кристалле и его электропроводность. Теплопроводность кристаллов. Оптические свойства кристаллов. Электромагнитные волны в прозрачных кристаллах. Оптическая индикатриса. Волны и лучи. Эллипсоид Френеля.

Тема 6. «Физические свойства кристаллов, описываемые тензорами высших рангов». Малые деформации сплошной среды. Тензор упругих напряжений. Деформация и симметрия кристалла. Тепловое расширение. Физические свойства третьего ранга. Прямой пьезоэлектрический эффект. Обратный пьезоэлектрический эффект. Симметрия пьезоэлектрического эффекта. Линейный электрооптический эффект, пьезомагнетизм и электрогирация. Физические свойства четвертого ранга. Обобщённый закон Гука. Тензор упругих постоянных. Матричные обозначения Фохта. Влияние симметрии кристалла на его упругие свойства. Фотоупругость кристаллов, квадратичный электрооптический эффект и электрострикция. Упругие волны в кристаллах.

3.2. Темы для самостоятельной работы

Часть 1 (третий семестр)

1. Элементы симметрии и их представления в матричном виде.
3. Символы точечных групп симметрии. Принципы составления международного символа групп.
4. Принцип Неймана и принцип Кюри: содержание основных принципов кристаллофизики и решение задач о наложении элементов симметрии точечных и предельных групп симметрии.
5. Кристаллофизические явления, описываемые тензорами первого ранга: физическое рассмотрение явлений и решение задач.
6. Кристаллофизические явления, описываемые тензором второго ранга: физическое рассмотрение явлений и решение задач.
7. Кристаллофизические явления, описываемые тензором третьего ранга: физическое рассмотрение явлений и решение задач.

Часть 2 (четвертый семестр)

8. 7. Кристаллофизические явления, описываемые тензором четвертого ранга: физическое рассмотрение явлений и решение задач.

4. СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979.
2. Дж. Най. Физические свойства кристаллов и их описание с помощью тензоров и матриц. М.: Мир, 1967.
3. Н.В. Переломова, М.М. Тагиева. Задачник по кристаллофизике. М.: Наука, 1972.
4. Б.А. Струков. Сегнетоэлектричество. М.: Наука, 1979.
5. И. Костов. Кристаллография. М.: Мир, 1965.
6. И.С. Желудев. Симметрия и её приложения. М.: Атомиздат, 1976.
7. В.Н. Давыдов В.Н. Материалы и элементы электронной техники. Томск, ТМЦ ДО, 2005.

5. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ .

5.1. Краткое содержание теории

Окружающий нас мир в своем устройстве подчинен многим законам, в частности, подавляющее число объектов материального мира имеют геометрически совершенную, правильную форму. Говорят, что они имеют симметричный вид. Как правило, совершенный вид материального объекта свидетельствует о сложном его внутреннем строении, длительной эволюции.

Все возможные симметричные фигуры материального мира могут быть сведены к конечному числу простых геометрических фигур: кубу, пирамиде, тетраэдру и т.д. Для описания симметрии этого набора геометрических фигур используется конечное число элементов симметрии. Рассмотрим их.

Плоскость симметрии (её наличие обозначают символом « m ») – это плоскость, которая делит фигуру на две зеркально равные части (рис.1). Плоскость симметрии можно представлять себе как зеркало внутри фигуры. Примером плоскости симметрии является плоскость, делящая яблоко по его сердцевине на две равные части, а также вертикальная плоскость, проходящая по середине через человека с лицевой стороны. Если нормаль к плоскости на-

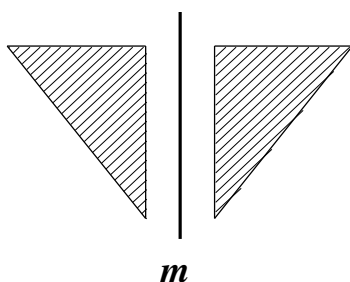


Рис.1

правлена по оси X (рис.2), то эту плоскость обозначают m_x , если по оси Y , то m_y и т.д. На рисунках плоскость симметрии изображают в виде толстой линии.

Центром симметрии (его обозначают латинской буквой I и иногда называют центром инверсии) - называется особая точка внутри фигуры, характеризующаяся тем, что любая проведенная через нее прямая встречает одинаковые (говорят «гомологичные») точки по обе стороны от нее и на равных расстояни-

ях (рис.3): $A - A'$, $B - B'$. Таким образом, действие симметрии центра инверсии - это отражение в точке, в которой он находится. Обычно это геометрический центр фигуры.

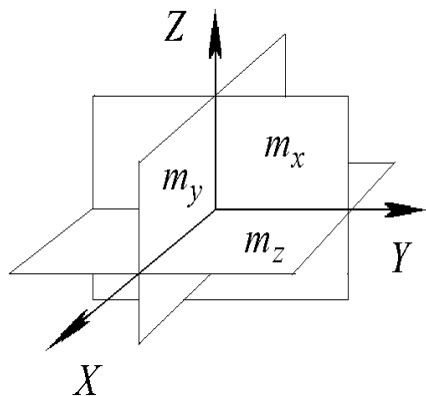


Рис. 2

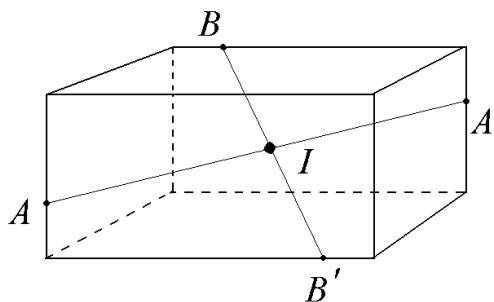


Рис. 3

Ось симметрии n -го порядка (её наличие обозначают символом « n ») – это прямая линия, при повороте вокруг которой на некоторый угол или несколько углов фигура совмещается сама с собой (рис. 4).

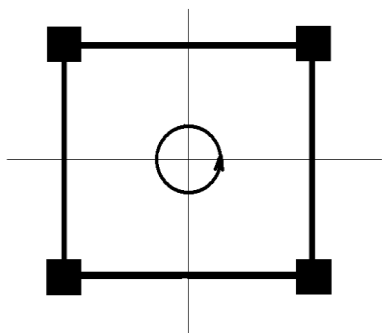


Рис. 4

Наименьший угол поворота равен: $\alpha = 2\pi/n$, всего поворотов у оси n - штук: $\alpha, 2\alpha, 3\alpha, \dots, n\alpha$. Примером оси четвертого порядка является ось, проходящая через две противоположные грани куба. В элементах симметрии кристаллов n не может быть равно пяти и быть больше шести. Таким образом, в реальных кристаллах $n = 1, 2, 3, 4, 6$. Доказатель-

ством этого является следующее обстоятельство: фигура (в нашем случае элементарная ячейка кристалла) должна быть такой симметрии, чтобы укладывая их рядом, можно было бы плотно заполнить всю плоскость. Если это удастся, то элементарные ячейки такой симметрии будут плотно прилегать друг к другу, образуя механически прочный кристалл. Для этой цели можно применить плоские фигуры: неправильной формы (имеет ось симметрии порядка $n = 1$),

прямоугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 2$), равносторонний треугольник (имеет ось симметрии порядка $n=3$), квадрат (имеет ось симметрии порядка $n = 4$) и шестиугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 6$). Примером последней ситуации является пчелиный улей, составленный из шестиугольных сот. Но невозможно провести плотную упаковку плоскости пятиугольниками, семиугольниками, восьмиугольниками и т.д. – между отдельными фигурами обязательно будут пустоты. Это утверждение легко проверить, вырезав пятиугольники и складывая их на плоскости до плотного её заполнения. Такого не получится - фигуры не будут прилегать друг к другу без пустот. Отсутствие плотной упаковки между элементарными ячейками кристалла приведет к тому, что ячейки будут слабо связаны друг с другом. Как следствие этого, такой кристалл окажется структурно непрочен, так что любое слабое воздействие разрушит его вплоть до элементарных ячеек.

Вывод о возможных значениях порядка оси симметрии для реальных кристаллов, полученный здесь логическим путем, можно доказать строго математически (см. Учебное пособие по курсу, с. 10). На рис. 4 в качестве демонстрации оси симметрии показана фигура в виде правильного четырехугольника, обладающего осью симметрии четвертого порядка, проходящей через центр фигуры перпендикулярно плоскости рисунка.

На рисунках ось симметрии изображается в виде тонкой сплошной или пунктирной прямой, положение которой соответствует положению оси симметрии в рассматриваемой фигуре. На концах этой прямой помещают зачерненный многоугольник с числом углов, равным порядку оси симметрии (см. таблицы 1, 2 в конце пособия). Так, на концах оси симметрии третьего порядка рисуют треугольник, оси шестого порядка - шестиугольник и т.д.

Инверсионной осью симметрии (обозначают как ось симметрии, но с чертой сверху, что указывает на наличие центра симметрии - \bar{n}) называется ось симметрии n -того порядка с расположенным на ней центром инверсии.

Каждый элемент симметрии может породить несколько операций симметрии: ось симметрии третьего порядка - повороты на углы 120° , 240° и 360° ; ось 6 - на 60° , 120° , 180° , 240° , 360° . Таким образом, ось 6 порождает оси порядка 3 (углы поворота 120° , 240° и 360°) и 2 (углы поворота 180° и 360°). Другие элементы симметрии также способны образовать новые элементы. Это особенно важно при сочетании нескольких элементов симметрии.

5.2. Стереографическая проекция многогранников

Для того, чтобы лучше уяснить излагаемый ниже материал, рассмотрим следующую ситуацию. Предположим, что Вам необходимо рассказать сослуживцам о том, какой сложный и в то же время красивый многогранник (или симметричную геометрическую фигуру) Вам удалось видеть. Рисовать её на бумаге, чтобы коллеги поняли о чем идет речь – сложно, долго да и не всегда возможно. Как быть в подобной ситуации? Для того, чтобы точно передать симметрию геометрического многогранника, который может быть в частности и кристаллом, необходим свой набор символов, свой язык (ведь никого не удивляет, что для передачи на бумаге музыкального произведения изобретён свой язык: нотная грамота). Отдельные элементы описания симметрии фигур («ноты») - плоскости симметрии, оси симметрии, центр инверсии, уже рассматривались. Осталось научиться с их помощью изображать всю геометрическую фигуру (в нашем примере: как из нот - элементов симметрии составить описание фигуры). Таким описанием является стереографическая проекция геометрической фигуры.

Стереографическая проекция применяется для изображения элементов симметрии геометрических фигур, в частности, симметрии кристаллов. Ее строят следующим образом. Рассматриваемый многогранник мысленно помещается в центр прозрачной сферы такого радиуса, чтобы в неё поместилась вся фигура. Затем из центра многогранника к каждой грани восстанавливается перпендикуляр (нормаль к грани), который продолжают до его пересечения со

сферой. Точку пересечения перпендикуляра и сферы называют **полюсной точкой**. Если проделать описанную процедуру получения точек пересечения, то в итоге наш многогранник оказывается скопирован на сферу. Полученные полюсные точки, а точнее перпендикуляры, исходящие из центра сферы, и их положение на сфере проекций полностью передают информацию о симметричных свойствах рассматриваемого многогранника. Но рисовать систему полюсных точек или набора линий, пересекающихся в центре сферы, также ненаглядно как и рисовать самую фигуру – человеческое воображение плохо работает с пространственными фигурами, но значительно лучше с плоскостными, т.е. нарисованными на плоскости.

Для дальнейшего упрощения полученной информации о фигуре пространственное представление преобразуют в плоскостное: систему полюсных точек со сферы переносят на плоскость. Наиболее удобное положение этой плоскости - экваториальное. Перенос полюсных точек на плоскость проекций проводят следующим образом. Если необходимо получить стереографическую про-

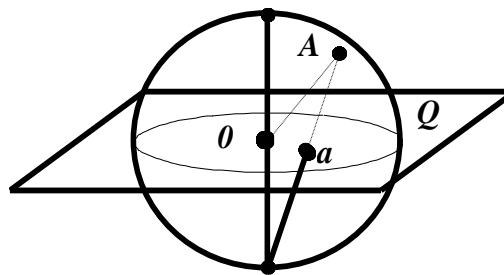


Рис. 5

екцию линии AO (см. рис.5), соединяют полюсную точку A с южным полюсом сферы проекций. Точка пересечения линии AS с экваториальной плоскостью Q – точка a и есть стереографическая проекция направления OA . Здесь наклонные направления, расположенные в верхней части сферы, проецируются внутри круга проекций. Если же направление выходит из нижней части сферы, то проекцию изображают не точкой, а крестиком, тем самым указывая на ее обратный знак по направлению. Вертикальная линия в стереографической проек-

ции выглядит как точка в центре круга, а горизонтальная - как две точки на окружности экватора. Окружность, проведенная на сфере, на стереографической проекции выглядит как окружность, эллипсоид или прямая линия в зависимости от её положения в пространстве: параллельна плоскости проекций, под острым углом или перпендикулярно её, соответственно.

Если грань, перпендикуляр от которой дал рассматриваемую полюсную точку, имеет ось симметрии, то изображение соответствующей полюсной точки на плоскости проекций рисуют в виде многогранника с числом углов, равным порядку оси симметрии. Так, ось симметрии второго порядка изображают в виде зерна (чечевицы), ось симметрии третьего порядка - в виде треугольника, а ось симметрии четвертого порядка - четырехугольника. Плоскость симметрии изображается на плоскости проекций в виде жирной прямой линии (если плоскость перпендикулярна плоскости проекций) или в виде окружности, эллипса, если угол между ней и плоскостью проекций меньше 90° . Впрочем, об обозначениях элементов симметрии мы уже говорили.

На стереографической проекции не искажаются угловые соотношения. По этой причине при построении стереографической проекции форма геометрической фигуры передается точно и полностью. Стереографические проекции

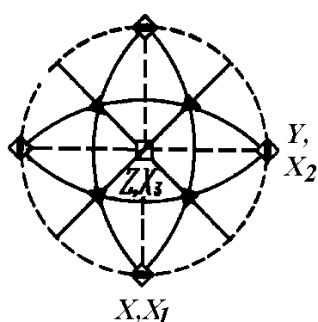


Рис. 6

всех классов симметрии кристаллов приведены в конце данного учебно-методического пособия в таблице 2.

Рассмотрим конкретные примеры стереографических проекций кристаллов различных симметрий кубической сингонии. На рис.6 приведена стереографическая проекция точечной группы $\bar{4}32$. Здесь пунктирная окружность - след от сферы проекций на экваториальную плоскость; X, Y, Z - оси кристаллографической системы координат; X_1, X_2, X_3 - оси кристаллофизической системы координат. В кубической сингонии они совпадают. По оси X_3 направлена

ры проекций на экваториальную плоскость; X, Y, Z - оси кристаллографической системы координат; X_1, X_2, X_3 - оси кристаллофизической системы координат. В кубической сингонии они совпадают. По оси X_3 направлена

ось инверсионная симметрии четвертого порядка, на что указывает светлый четырехугольник в центре фигуры. Инверсионные оси четвертого порядка находятся также на координатных осях X_1 и X_2 (светлые четырехугольники находятся на вертикальной и горизонтальной осях). Сплошными линиями на рисунке показаны плоскости симметрии, которые в данном случае направлены по диагоналям между осями координат X_1 и X_2 (две прямые линии), а также по плоскостям, проходящим через оси X_1 и X_2 и диагоналям противоположных граней куба (на рисунке это два пересекающихся эллипса). В данной фигуре имеются также оси симметрии третьего порядка, которые расположены по пространственным диагоналям куба и которые на рисунке показаны как зачерненные треугольники на пересечении плоскостей симметрии. Эти точки пересечения являются углами куба. Указанные оси симметрии третьего порядка являются обычными (говорят «прямыми»), т.к. треугольники зачернены.

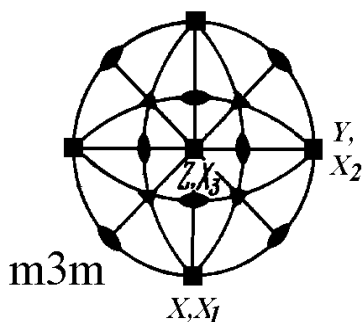


Рис.7.

сечения являются углами куба. Указанные оси симметрии третьего порядка являются обычными (говорят «прямыми»), т.к. треугольники зачернены.

В точечной группе $m\bar{3}m$ (рис.7) количество элементов симметрии значительно больше. По осям координат направлены оси симметрии четвертого порядка - они отмечены зачерненным четырехугольником. Имеются четыре оси симметрии

третьего порядка, совпадающие с пространственными диагоналями куба. Оси симметрии второго порядка проходят через середины противоположных ребер куба и их число равно числу ребер, деленное на два, т.е. шести. Эти оси отмечены на рис.7 чечевицеобразными фигурами. В данной группе симметрии есть плоскости симметрии. Первая буква m в международном символе группы ($m\bar{3}m$) указывает на плоскости, расположенные в координатных плоскостях: X_1OX_3 , X_1OX_2 и X_2OX_3 и показанные на рис. 7 толстыми линиями по осям X_1 , X_2 и в виде окружности для случая плоскости X_1OX_2 . Вторая буква m в символе группы ($m\bar{3}m$) указывает на наличие плоскостей симметрии, расположенных по

диагоналям в координатных плоскостях. Эти плоскости на стереографической проекции дают толстые линии, проходящие по диагоналям между осями X_1 , X_2 , а также вертикальный и горизонтальный эллипс в центре рис.7, для плоскостей, проходящих через верхнее правое (левое) ребро куба и нижнее левое (правое) ребро через центр фигуры.

При рассмотрении элементов симметрии кристаллов низшей или средней категории необходимо иметь перед собой таблицу формирования международного символа группы (см. Учебное пособие по курсу, с.14). Согласно ей по символу группы можно воспроизвести все порождающие её элементы симметрии. Затем, поочерёдно применяя свойства элементов симметрии, восстановить остальные элементы рассматриваемой группы.

5.3. Матричное представление элементов симметрии

В данном параграфе показано как математически описать действие элементов симметрии.

Операции симметрии могут быть описаны аналитически как преобразования системы координат. Это обусловлено тем, что при вращении или отражении какого - либо объекта есть две основные возможности описания совершённого действия: либо перевести объект в новое положение в исходной системе координат (при неподвижном наблюдателе фигуры), либо оставить объект неподвижным, а переместить наблюдателя этой фигуры, т.е. переместить систему координат. При первом подходе требуется записать математические выражения, описывающие перемещение каждой точки объекта в новое положение. В этом случае требуется также знание координат каждой точки объекта, что очень громоздко и требует больших затрат сил. Поэтому второй путь оказывается предпочтительнее, т.к. он технически проще и к тому же позволяет воспользоваться уже имеющимися методами аналитической геометрии. В этом случае точку, остающуюся неподвижной, выбирают за начало координат орто-

гональной системы $X_1 X_2 X_3$. Тогда действие любой операции точечной симметрии будет представлять собой перевод осей координат $X_1 X_2 X_3$ в новые ортогональные положения $X_1' X_2' X_3'$. Углы между новыми ($X_1' X_2' X_3'$) и старыми ($X_1 X_2 X_3$) осями определяются таблицей направляющих косинусов, которая и представляет собой матрицу преобразования координат.

Таблица косинусов

	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}

$$X_i' = C_{i1}X_1 + C_{i2}X_2 + C_{i3}X_3 . \quad (1)$$

Первый индекс в символе C_{ij} ($i, j=1, 2, 3$) относится к новым осям, а второй к старым. Для того, чтобы показать, что C_{ij} являются косинусами углов между новыми и старыми координатными осями, заменим в выражении (1) оси координат ортами по соответствующим осям и умножим полученное выражение скалярно на орт старой системы $X_3 - \bar{e}_3$ и рассмотрим полученный результат справа налево.

$$\langle \bar{e}_i' \cdot \bar{e}_3 \rangle = C_{i1} \langle \bar{e}_1 \cdot \bar{e}_3 \rangle + C_{i2} \langle \bar{e}_2 \cdot \bar{e}_3 \rangle + C_{i3} \langle \bar{e}_3 \cdot \bar{e}_3 \rangle . \quad (2)$$

Скалярное произведение орта \bar{e}_3 на самого себя даст единицу, т.к. модуль орта равен единице и косинус угла равен 1. Далее, скалярное произведение орта \bar{e}_3 на орт \bar{e}_2 дает ноль, т.к. орты перпендикулярны друг другу, а косинус прямого угла равен нулю. По этой же причине будет равно нулю и первое слагаемое правой части выражения (2). Поэтому будем иметь

$$\langle \bar{e}_i' \cdot \bar{e}_3 \rangle = |\bar{e}_i'| \cdot |\bar{e}_3| \cdot \cos(\bar{e}_i', \bar{e}_3) = 1 \cdot 1 \cdot \cos(\bar{e}_i', \bar{e}_3) = C_{i3} . \quad (3)$$

Так, C_{23} - это косинус угла между осями X_2' и X_3 . Угол поворота считается положительным, если при наблюдении из положительного конца оси в направлении к началу координат поворот от старой оси к новой происходит против часовой стрелки. В итоге матрица преобразования системы координат будет иметь вид:

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix}.$$

Проверить правильность составления матрицы можно, вычислив её определитель - он должен быть равен ± 1 . Для преобразований первого рода (это повороты вокруг осей симметрии любого порядка, когда правая система координат остается правой, а левая - левой), определитель матрицы преобразования системы координат равен «+1», а для преобразования второго рода (это отражения в плоскости, в центре инверсии и инверсионные повороты) - «-1».

6. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА СОСТАВЛЕНИЕ МАТРИЦ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Все задачи по определению матрицы преобразования системы координат, вызванного действием какого-либо элемента симметрии, сводятся к вычислению косинусов углов между новыми координатными осями и старыми. Работа по вычислению косинусов сильно упрощается, если нарисовать рисунок с изображением старой и новой систем координат и указать углы между ними. Затем записывать матрицу построчно: первая строка - это косинусы углов между осью X_1' и осями X_1 (первый элемент строки), X_2 (второй элемент строки) и X_3 (третий элемент строки). Вторая строка - косинусы углов между осью X_2' и осями X_1 (первый элемент строки), X_2 (второй элемент строки) и X_3 (третий элемент строки). Третья строка - косинусы углов между осью X_3' и осями X_1

(первый элемент строки), X_2 (второй элемент строки) и X_3 (третий элемент строки). Рассмотрим это на конкретных примерах.

Задача 1. Записать матричное представление всех операций симметрии, входящих в точечную группу mmm .

Решение. Точечная группа mmm описывает симметрию элементарной ячейки кристаллов ромбической сингонии. Геометрической фигурой, имеющей такую группу симметрии, является прямоугольный параллелепипед (например, кирпич). Согласно правил составления международного символа этой сингонии в кристалле имеется три плоскости симметрии, лежащие в координатных плоскостях. Другие элементы симметрии, входящие в данную группу, можно выявить, применяя пять свойств элементов симметрии (см. Учебное пособие «Материалы электронной техники», стр. 14). По первому свойству линия пересечения двух плоскостей - это ось симметрии с двойным углом: $90^\circ \cdot 2 = 180^\circ$, т.е. это оси второго порядка. По второму свойству пересечение осей порядка 2 перпендикулярно (обозначим это состояние символом « \perp ») плоскости симметрии m дает центр инверсии. Третье и четвертое свойства дополнительных элементов симметрии не дают.

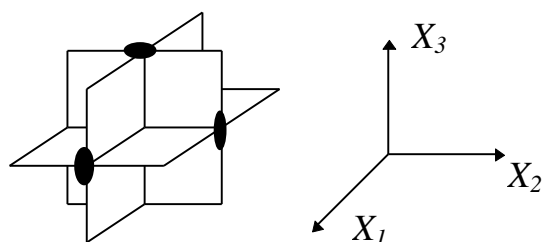


Рис. 8

Итак, имеем: 3 плоскости симметрии, 3 оси порядка 2 и центр симметрии I , т.е. 3 отражения в плоскости, 3 поворота на 180° и центр инверсии, а также поворот на 360° - поворот вокруг осей X_i ($i = 1, 2, 3$).

Начнем рассмотрение с операции отражения в плоскости в плоскости $X_1O X_2$ (или, сокращенно: $m \perp X_3$) (рис.8). В этом случае ось X_3 , отразившись в зеркале, сменит свое направление на обратное. Две другие же оси лежат в плоскости симметрии (в плоскости зеркала) и потому никак не

изменяют свою ориентацию. Эта ситуация с расположением осей координат новой и старой систем математически описывается следующим образом:

$$X_1' = X_1, X_2' = X_2, X_3' = -X_3.$$

Это можно записать в развернутом виде

$$\begin{aligned} X_1' &= 1 \cdot X_1 + 0 \cdot X_2 + 0 \cdot X_3, \\ X_2' &= 0 \cdot X_1 + 1 \cdot X_2 + 0 \cdot X_3, \\ X_3' &= 0 \cdot X_1 + 0 \cdot X_2 - 1 \cdot X_3. \end{aligned}$$

В результате матрица преобразования системы координат плоскостью симметрии, перпендикулярной оси X_3 запишется в виде:

$$C_{ij}(m \perp X_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Заметим, что в этой матрице «-1» стоит в той строке, какой оси перпендикулярна плоскость симметрии. Поэтому поступая аналогично для двух других плоскостей симметрии: $(m \perp X_2)$ и $(m \perp X_1)$, получим следующие матрицы преобразования для этих случаев:

$$C_{ij}(m \perp X_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_{ij}(m \perp X_1) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Определитель $|C_{ij}(m \perp X_i)|$ равен -1, следовательно, операция отражения в плоскости симметрии есть операция II рода.

Рассмотрим теперь преобразование системы координат осью симметрии второго порядка, например, проходящей по оси X_3 . Происходящие при операции поворота на 180^0 вокруг оси X_3 (обозначим эту ситуацию так: $X_3, 180^0$) изменения в положении координатных осей показаны на рис.9. Здесь ось X_3 не изменит своего положения, т.к. вращение производится вокруг этой оси. Две другие же оси сменяют своё направление на обратное. Поэтому в матрице преоб-

разования в первой строке на первом месте будет стоять «-1», т.к. это косинус 180^0 (оси X_1 и X_1' направлены в противоположные стороны), а на других позициях будут нули - ось X_1' перпендикулярна осям X_2 и X_3 . Во второй строке в первой и третьей позиции будут стоять нули, т.к. ось X_2' перпендикулярна осям X_1 и X_3 , а на второй позиции будет «-1» - оси X_2' и X_2 направлены в противоположные стороны из-за поворота на 180^0 . Третья строка будет состоять из нулей на первом и втором месте и «+1» на третьем. В итоге матрица преобразования системы координат за счет действия оси симметрии второго порядка, проходящей по оси X_3 , будет иметь следующий вид:

$$C_{ij}(X_3, 180^0) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Из-за того, что угол поворота осей координат кратен прямому углу, матрица оказывается единичной. Заметим, что в этой матрице «+1» стоит на той строке, вдоль которой направлена ось симметрии второго порядка.

Для двух других осей симметрии второго порядка, проходящих по координатным осям X_1 и X_2 :

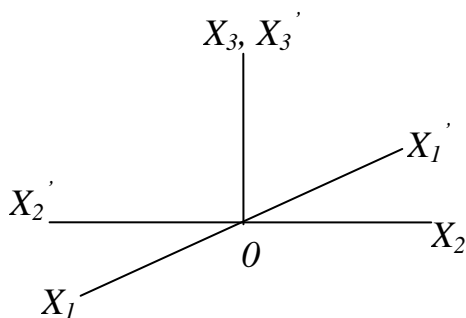


Рис.9

$(X_2, 180^0)$ и $(X_1, 180^0)$, матрицы преобразования можно записать по аналогии

$$C_{ij}(X_2, 180^0) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$C_{ij}(X_1, 180^0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Матрица поворота на 360^0 вокруг любого направления в кристалле, например, вокруг оси X_3 ($X_3, 360^0$), имеет вид

$$C_{ij}(X_3, 360^0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

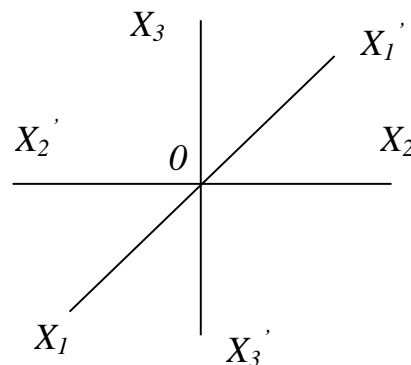


Рис.10.

Определитель $|C_{ii}(X_j, 180^0)|$, так же как и определитель $|C_{ij}(X_i, 360^0)|$, равен 1, т.е. операции поворота на 180 и 360^0 являются операциями I рода.

И наконец, матричное представление операции инверсии I (рис. 10). В этом случае все оси координат меняют свое направление на обратное и потому «-1» будет стоять во всех строках матрицы на диагональных местах:

$$C_{ij}(I) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Поскольку $|C_{ij}(I)| = -1$, то это операция II рода.

Задача 2. Найти матричное представление и порядок группы симметрии низкотемпературной модификации кварца (точечная группа симметрии 32).

Решение. В соответствии с правилами выбора кристаллофизических осей относительно элементов симметрии (см. табл.1) оси X_1, X_2, X_3 точечной группы симметрии 32 ориентируются, как показано на рис.11. Здесь изображена стереографическая проекция точечной группы 32 с выбранной системой координат (см.табл.2). Ось симметрии третьего порядка расположена перпендикулярно рисунку и направлена о оси X_3 . Ось симметрии второго порядка по пятому свойству элементов симметрии «размножится» осью симметрии третьего порядка и их станет три - все будут перпендикулярны оси $n=3$. Эти оси находятся

в плоскости рисунка так что угол между ними равен $2\pi/n = 120^\circ$. Других элементов симметрии в данной группе нет, в чем нетрудно убедиться перебирая свойства элементов симметрии при известных: оси симметрии третьего порядка и трех осей симметрии второго порядка. Для определения вида матрицы преобразования системы координат, осуществляемого осью симметрии третьего порядка, учтем, что этот элемент симметрии совершает поворот системы координат вокруг оси X_3 на углы 120° , 240° и 360° .

Запишем матрицу для поворота на угол 120° вокруг оси X_3 . Для корректного решения поставленной задачи обратимся вновь к рис.11 и отметим на нем положение новых осей X_1' , X_2' . Теперь несложно посчитать косинусы углов между новыми и старыми осями координат, учитывая, что ось X_3 своего положения не изменила. Опуская простые геометрические вычисления проекций новых осей на старые, запишем матрицу преобразования при повороте на 120° вокруг оси X_3 в следующем виде:

$$C_{ij}(X_3, 120^\circ) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Для двух других углов поворота вокруг оси X_3 матрицы преобразования вычисляются аналогичным образом и их вид следующий:

$$C_{ij}(X_3, 240^\circ) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad C_{ij}(X_3, 360^\circ) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

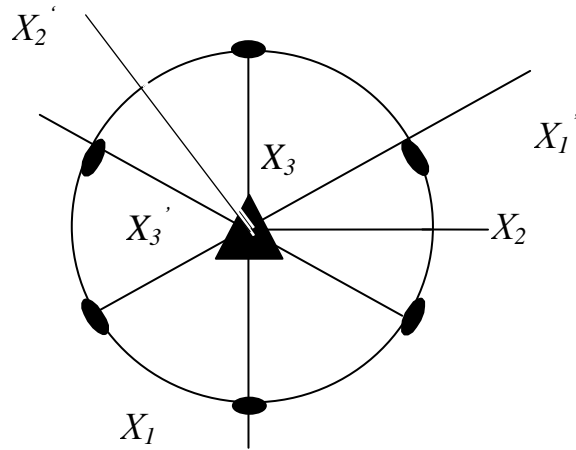


Рис.11

Матрицы преобразования системы координат, вызываемого действием других элементов симметрии данной точечной группы, получаются таким же образом. Так, например, матрица операций поворота на 180^0 вокруг оси второго порядка, направленной по оси X_1 имеет вид:

$$C_{ij}(2 \parallel X_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Для двух других осей, совпадающих с осями X_2 и X_3 матрицы имеют аналогичный вид с той лишь разницей, что +1 стоит во второй строке (для оси порядка 2, направленной по X_2) или в третьей (для оси порядка 2, направленной по X_3).

Теперь запишем матрицу преобразования для оси симметрии второго порядка, расположенную под углом 30^0 к оси X_1 . Для этого последовательно спроектируем новые координатные оси на старые, учитывая их взаимное расположение. Тогда

$$C_{ij}(2 \text{ под углом } 30^0 \text{ к } X_1) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$C_{ij}(2 \text{ под углом } 30^\circ \text{ к } X_2) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Шесть неэквивалентных матриц (C_{ij}), соответствующих различным операциям симметрии, входящим в точечную группу 32 являются матричным представлением этой группы. Поэтому порядок группы равен шести.

Задача 3. Известна теорема Эйлера: равнодействующей двух пересекающихся осей симметрии является третья ось, проходящей через точку пересечения первых двух. Пользуясь матричным представлением элементов симметрии, проиллюстрировать теорему Эйлера на примере точечной группы симметрии 422.

Решение. За исходные элементы симметрии примем ось четвертого порядка и одну ось второго порядка, перпендикулярную к ней. Согласно правилам выбора кристаллофизической системы координат ось X_3 направляем по оси четвертого порядка, ось X_1 - по оси второго порядка, ось X_2 выбираем из условия ортогональности координатной системы.

Запишем матрицу, соответствующую повороту на 90° вокруг оси X_3 :

$$C_{ij}(X_3, 90^\circ) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Матрица, соответствующая повороту на 180° вокруг оси X_1 , имеет вид

$$C_{ij}(X_1, 180^0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Пусть $(C_{ij}(X_3, 90^0))=A$, $(C_{ij}(X_1, 180^0))=B$. Воспользовавшись свойством группы $(AB=C)$ и произведя перемножение двух матриц, найдем матричное представление элемента C :

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Из вида полученной матрицы делаем вывод: результирующий элемент симметрии C - это такая симметрическая операция, которая переводит (расшифровываем первую строку) ось X_1 в «- X_2 », ось X_2 (расшифровываем вторую строку) - в «- X_1 », а ось X_3 (расшифровываем третью строку) - в «- X_3 ». Таким элементом симметрии является ось второго порядка, располагающаяся под углом 45^0 к осям X_1 и X_2 и проходящая перпендикулярно оси X_3 (рис.12.). Аналогично взяв поочередно произведение всех матриц, соответствующих поворотам на $90, 180, 270, 360^0$ вокруг оси X_3 , на матрицу, соответствующую повороту на 180^0 вокруг оси X_1 ($2||X_1$), получим, что перпендикулярно оси симметрии порядка 4 расположатся четыре оси порядка 2.

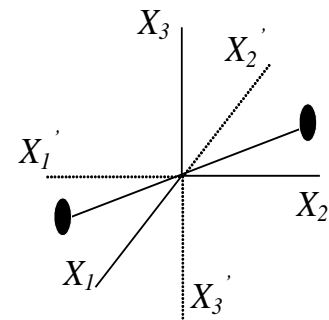


Рис.12

В заключение рассмотрения решений типовых задач на определение матриц преобразования системы координат элементами симметрии отметим два важных обстоятельства. При перемножении матриц, соответствующих нескольким преобразованиям системы координат, матрицы располагаются в следующем порядке: справа стоит та матрица, преобразование по которой сделано раньше. Второе и далее по счету преобразование системы

координат следует проводить с исходной системой координат независимо от того, сколько преобразований симметрии до этого было уже применено.

7. ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ПО МАТРИЧНОМУ ПРЕДСТАВЛЕНИЮ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1

1. Записать матрицу преобразования системы координат плоскостью симметрии, проходящей через ось X_2 и располагающейся под произвольным углом φ к оси X_1 .

2. Записать матрицу преобразования системы координат плоскостью симметрии, проходящей через ось X_1 и располагающейся под произвольным углом φ к оси X_2 .

3. Записать матрицу преобразования системы координат плоскостью симметрии, проходящей через ось X_3 и располагающейся под произвольным углом φ к оси X_2 .

4. Записать матрицу преобразования системы координат плоскостью симметрии, проходящей через ось X_3 и располагающейся под произвольным углом φ к оси X_1 .

5. Найти матрицу преобразования системы координат осью симметрии второго порядка, лежащей в координатной плоскости $X_1 X_2$ и располагающейся под произвольным углом φ к оси X_1 .

6. Найти матрицу преобразования системы координат осью симметрии второго порядка, лежащей в координатной плоскости $X_1 X_2$ и располагающейся

под произвольным углом φ к оси X_2 .

7. Кристалл поворачивается на 90^0 с последующим отражением в центре инверсии, затем поворачивается на 180^0 вокруг направления, перпендикулярного оси первого поворота. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

8. Кристалл поворачивают на 120^0 , затем отражают в центре инверсии. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

9. Используя матричное представление элементов симметрии, найти такую операцию симметрии, действия которой давало бы тот же результат, что и действия двух осей второго порядка, пересекающихся под углом 90^0 .

10. Найти матричное представление операции симметрии, действия которой дает тот же результат, что и действия осей второго порядка, расположенных под углом в 60^0 друг к другу.

11. Кристалл поворачивают на 120^0 , затем отражают в плоскости симметрии, проходящей перпендикулярно оси поворота. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

12. Найти матричное представление двух элементов симметрии точечной группы 622 : одиночный поворот вокруг оси симметрии шестого порядка и вокруг оси симметрии второго порядка, проходящей по оси X_2 .

13. Найти матричное представление и порядок группы $\bar{6}$.

14. Найти матричное представление группы $2/m$ в случае, когда ось симметрии второго порядка параллельна оси $X_2 : 2 \parallel X_2$

15. Найти матричное представление группы $2/m$ в случае, когда ось симметрии второго порядка параллельна оси $X_3 : 2 \parallel X_3$.

16. Пользуясь матричным представлением операции симметрии, проверить справедливость теоремы Эйлера (четвертое свойство элементов симметрии) на примере точечной группы 222 .

17. Используя матричное представление операций симметрии, проверить справедливость теоремы: сочетание оси четного порядка и перпендикулярной ей плоскости дает центр симметрии.

18. Кристалл поворачивают на 45° , затем отражают в плоскости симметрии, проходящей перпендикулярно оси поворота. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

19.. Кристалл поворачивают на 240° , затем отражают в плоскости симметрии, проходящей параллельно оси поворота. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

20. Кристалл поворачивают на 90° вокруг оси X_1 , затем поворачивается на 180° вокруг направления, перпендикулярного оси первого поворота – оси X_2 . Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

8. ПРЕДЕЛЬНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ.

ПРИНЦИП НЕЙМАНА И ПРИНЦИП КЮРИ.

8.1. Краткое изложение теории

Для описания симметрии физических свойств, а также симметрии геометрических фигур, являющихся телами вращения, вводят предельные группы симметрии. Они получаются путем предельного перехода: увеличением порядка оси симметрии от конечного значения до бесконечного. Таким образом, предельные группы обязательно содержат оси симметрии бесконечного порядка $-\infty$. Напомним, что минимальный угол поворота вокруг оси n -того порядка равен $2\pi/n$. Поэтому поворот вокруг оси порядка ∞ на бесконечно малый угол приводит к совмещению фигуры с самой собой. Всего существует семь предельных групп, которые описывают симметрию шара, цилиндра, конуса. Шар можно рассматривать как предельную фигуру таких объемных многогранников как куб, октаэдр, додекаэдр и т.д. Конус можно рассматривать как пирамиду, а цилиндр - как призму с бесконечным числом граней.

Симметрия физических свойств кристалла связана с его точечной группой симметрии. Эта связь устанавливается фундаментальным законом кристаллофизики, известным под названием *принципа Неймана*:

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

Этот принцип утверждает, что группа симметрии физического свойства кристалла, определяемая независимо от симметрии его формы, может быть бо-

лее высокой, чем точечная группа симметрии кристалла. В соответствии с принципом Неймана физическое свойство кристалла в обязательном порядке должно иметь все элементы симметрии, которыми обладает элементарная ячейка кристалла. Говорят, что точечная группа кристалла является подгруппой группы симметрии физического свойства. Как это понимать?

Рассмотрим такое физическое свойство кристалла как поляризацию. Она описывается полярным вектором \vec{P} . Группа симметрии полярного вектора - ∞m , т.е. в этой группе имеется ось симметрии бесконечного порядка (она направлена вдоль вектора) и бесконечное количество плоскостей симметрии, проходящих через эту ось. Геометрическая фигура, демонстрирующая такую симметрию - конус. Подгруппами этой предельной группы симметрии будут все точечные группы, имеющие либо просто ось симметрии (группы 1, 2, 3, 4, 6, ∞), либо плоскости симметрии (m , $mm2$), либо то и другое одновременно, но обязательно ось должна лежать в плоскости симметрии ($3m$, $4mm$, $6mm$, ∞m). Таким образом, имеется двенадцать указанных выше точечных групп, в которых возможна поляризация.

Однако зачастую кристалл подвергается внешнему воздействию в виде механического сжатия-растяжения, наложения магнитного поля и т.д. Как быть в таком случае? Для решения этого вопроса сначала укажем, что наиболее часто встречаемые физические воздействия на кристаллы имеют следующие группы симметрии:

- электрическое поле, поляризация и другие свойства, описываемые полярным вектором - ∞m ;
- магнитное поле, намагниченность и другие свойства, описываемые аксиальным вектором - ∞ /m ;
- всестороннее сжатие или растяжение кристалла (кристалл растягивается во всех направлениях с одинаковой силой) - $\infty\infty m$;
- одноосное сжатие или растяжение (кристалл растягивается вдоль одной из осей) - ∞/mmm ;
- сдвиговое воздействие (кристалл подвергается скалывающему воздействию) - mmm .

Итак, есть смысл искать какое-либо физическое свойство в кристалле только в том случае, если выполняется принцип Неймана.

Наряду с задачами на определение возможности наблюдать заданное свойство в кристаллах различных классов, в кристаллофизике часто возникают задачи по определению симметрии кристалла, подвергнутого какому либо внешнему воздействию. Они решаются с помощью принципа Кюри.

Если несколько явлений природы накладываются друг на друга, образуя единую систему, то в результирующем явлении останутся только те элементы симметрии, которые являются общими для складываемых явлений в отдельности.

Здесь важным также является взаимная ориентация элементов симметрии складываемых явлений (например, кристаллов и воздействий на них).

Поясним принцип Кюри на конкретных примерах. Пусть на кристалл точечной симметрии $4mm$ накладывается внешнее одноосное растяжение вдоль оси симметрии четвертого порядка. Какой будет симметрия кристалла под воздействием? Решить данную задачу можно двояко: во-первых рассматривая геометрическую картину до и после воздействия или, во-вторых, поочередно накладывая элементы симметрии внешнего воздействия на элементы симметрии кристалла.

Первый способ. Характерной фигурой группы симметрии $4mm$ является четырехугольная пирамида. Если пирамиду растянуть вдоль её высоты, то она останется пирамидой, не изменится и число углов в ней. Значит, симметрия кристалла под указанным воздействием останется $4mm$.

Второй способ. При наложении оси симметрии бесконечного порядка и оси симметрии четвертого порядка друг на друга результирующим элементом будет ось симметрии четвертого порядка. Поясним этот вывод: если в цилиндр вдоль его оси ввести четырехугольную пирамиду так чтобы их оси совпадали, то результирующая фигура (цилиндр, из которого по его длине выступают четыре ребра пирамиды) будет иметь ось симметрии четвертого порядка. Теперь будем совмещать плоскости симметрии: во внешнем воздействии их бесконечное количество вдоль оси, а в пирамиде только четыре (две по осям X_1 и X_2 , а также две по диагонали между осями X_1 и X_2). Поскольку должны остаться

только общие плоскости, то в результирующей фигуре будет четыре плоскости симметрии, совпадающие с плоскостями пирамиды. Таким образом, оставшийся набор элементов симметрии будет такой же, что и в группе $4mm$. Значит, симметрия исходной фигуры при указанном внешнем воздействии не изменится.

Если в этой задаче изменить ориентацию внешнего воздействия, например, направив растягивающее усилие перпендикулярно оси пирамиды, то результирующая фигура будет иметь совсем другую симметрию. Действительно, пусть усилие направлено по оси X_1 или X_2 , т.е. в плоскости симметрии фигуры. Тогда из всех элементов симметрии пирамиды останутся только две пересекающиеся плоскости симметрии по осям X_1 и X_2 и проходящие через ось X_3 . Согласно первому свойству элементов симметрии, такая конфигурация даст дополнительно ось симметрии второго порядка, которая будет лежать по линии пересечения плоскостей. Результирующая группа симметрии будет $mm2$. Действительно, представьте, что четырехугольную пирамиду растянули, взяв её за два противоположных ребра. И последнее, если растягивающее усилие, будучи перпендикулярным оси пирамиды, не лежит на осях X_1 или X_2 , то результирующая фигура не будет иметь других элементов симметрии кроме оси симметрии первого порядка (единичный элемент группы).

8.2. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА ПРИНЦИПЫ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ

Задача 1. Известно, что кристаллы кварца являются пьезоэлектрическими, т.е. поляризуются под действием механических напряжений. Применяя принцип Кюри и принцип Неймана, ответить на следующие вопросы:

* Какие из ориентированных кварцевых пластинок: пластинки, перпендикулярные оси 3 или оси 2, следует выбрать в качестве чувствительных элементов пьезоэлектрических датчиков одноосного давления?

* Можно ли кристаллы кварца использовать в качестве датчиков гидростатического давления?

Решение. В начале уясним следующее обстоятельство: возникновение поляризации кристалла есть появление напряженности электрического поля в его объеме. Симметрия электрического поля, т.е. желаемого физического свойства кристалла, есть ∞m . Согласно принципу Неймана группа симметрии кристалла должна быть подгруппой группы ∞m . Кристаллы кварца принадлежат к классу 32, который не является в исходном состоянии подгруппой группы физического свойства. Однако при внешнем воздействии симметрия кристалла изменяется и в определенных ситуациях может стать такой, что будет удовлетворять принципу Неймана. Эти ситуации устанавливаются принципом Кюри и именно они будут нас интересовать в этой задаче.

В предыдущих задачах рассматривалась стереографическая проекция этого класса и записывали матрицы преобразования системы координат. Поэтому при необходимости можно обратиться к задаче 2 п.6 данного учебно-методического пособия.

* В кристаллах может наблюдаться поляризация, если в результате наложения симметрии воздействия на симметрию кристалла, согласно принципу Кюри, останется симметрия одного из 10 полярных классов, причем неважно, будет ли это достигнуто за счет симметрии кристалла при самой высокой симметрии воздействия (пироэлектрический эффект), или, наоборот, за счет полярной симметрии воздействия, когда поляризация может наблюдаться в кристалле любой симметрии и даже в изотропном теле. Это с одной стороны. А с другой, поляризация кристаллов под действием одноосного сжатия возникает в том случае, если в кристалле имеется единичное направление, являющееся одновременно и полярным. В классе 32 ось третьего порядка является единичным, но не полярным направлением из-за присутствия перпендикулярных этой оси осей второго порядка (напомним, что полярное направление это такое направление, концы которого не могут быть совмещены никакими элементами симметрии, входящими в группу симметрии кристалла).

Действуем на кристалл кварца сжатием, обладающим группой симметрии ∞/mmm вдоль оси третьего порядка, что условно можно записать в виде

$$32 \cap_{||3} \infty/mmm$$

где \cap - знак, обозначающий пересечение (или произведение) групп. Получаем, что симметрия кристалла в этом случае не изменяется:

$$32 \cap |||_3 \infty / mmm = 32.$$

Следовательно, сжимая кварцевую пластинку, вырезанную так, что ее рабочие грани были перпендикулярны оси 3 (пластинка Z-среза; см. рис.13), эффекта поляризации не будет.

Теперь попробуем сжать кристалл кварца вдоль одной из осей 2:

$$32 \cap |||_2 \infty / mmm = 2.$$

Итак, при сжатии вдоль оси симметрии второго порядка симметрия кварца понижается до группы 2 и из всех полярных направлений кристалла, располагающихся в плоскости, перпендикулярной оси симметрии порядка 3, выделяется одно. Теперь оно оказывается единичным и полярным; следовательно, вдоль него может располагаться вектор пьезоэлектрической поляризации.

Для получения пьезоэлектрического эффекта при действии одноосного сжатия кварцевую пластину следует вырезать так, чтобы её рабочие грани были перпендикулярны одной из осей 2 (пластинка X-среза; см. рис. 13).

* В качестве датчиков гидростатического давления, симметрия которого характеризуется группой $\infty\infty t$, могут использоваться кристаллы, которые обладают полярным направлением в отсутствие воздействия. Их в группе 32 нет. Поэтому для этой цели кристаллы кварца не годятся.

Задача 2. Для исследования физических свойств кристалла сегнетовой соли

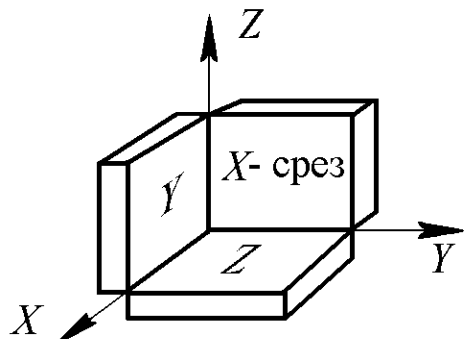


Рис.13

ли при температуре выше 24°C были изготовлены пластинки X -, Y -, Z - и L - срезов.

Будут ли эти пластинки поляризоваться при действии одноосного сжатия перпендикулярно их торцам? X- срезом пластины называется пластина, поверхность которой перпендикулярна оси X, Y - срезом называется пластина, поверхность которой перпендикулярна оси Y и т.д. (рис.13). L - срез кристалла - это пластина, поверхность которой перпендикулярна пространственной диагонали куба (кристаллографическому направлению $[111]$).

Решение. Кристаллы сегнетовой соли принадлежат классу 222 , для которого все направления, лежащие в координатных плоскостях, не являются полярными. Сжатие пластинок X-,Y- и Z- срезов перпендикулярно их торцам означает, что механическое напряжение симметрией ∞/mmm поочередно действуют вдоль направлений $[100]$, $[010]$ и $[001]$. Применяя принцип Кюри, получаем, что при действии одноосного механического напряжения вдоль указанных направлений симметрия кристалла не понижается. Действительно, если вдоль оси симметрии второго порядка (симметрия кристалла) направить ось симметрии бесконечного порядка с бесконечным количеством плоскостей, проходящим через неё, то в результате проявится только ось симметрии (плоскостей

симметрии в кристалле в данном направлении нет). Её порядок будет равен двум, т.к. такая ось имеется в оси симметрии бесконечного порядка. Итак, в соответствии с принципом Неймана, такие пластинки не могут поляризоваться при сжимающем напряжении, перпендикулярном их торцам.

При действии сжимающего напряжения на пластинку L - среза, одинаково наклоненную к осям симметрии второго порядка, симметрия кристалла понижается до класса 1, т.к. общих элементов симметрии у кристалла и воздействия нет. У кристалла появляется выделенная полярное направление, совпадающее с направлением действия напряжения, вдоль которого может располагаться вектор пьезоэлектрической поляризации.

Значит, L - пластинка из сегнетовой соли будет поляризоваться при сжатии, действующем перпендикулярно её рабочим граням.

Таким образом, общий вывод, который следует из рассмотренных задач таков: **в принципе Неймана под точечной группой симметрии кристалла понимается группа симметрии кристалла при действии внешнего возмущения, если таковое необходимо для наблюдения физического свойства.**

Задача 3. К кубическому кристаллу симметрией $m\bar{3}m$ приложили одноосное напряжение растяжения. Какой симметрией будет обладать кристалл, если напряжение приложено вдоль кристаллографического направления: $[100]$, $[111]$ или $[110]$?

Решение. По условию задачи внешнее воздействие симметрии ∞/mmm приложили к кубу симметрии $m\bar{3}m$ вдоль направления $[100]$, которое является

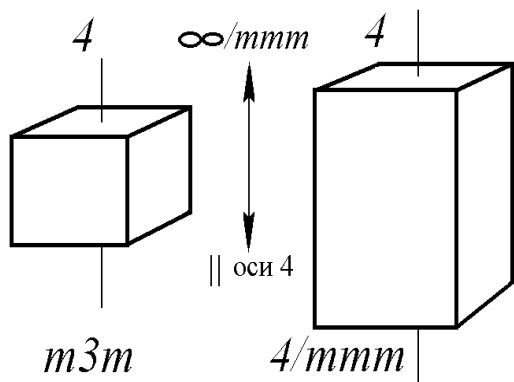


Рис.14

осью симметрии четвертого порядка. Будем решать задачу двумя способами.

По первому способу представим себе куб, который растягивают за две противоположные грани. В результате такого воздействия куб превратится в прямоугольный параллелепипед (см. рис.14). Нетрудно ви-

деть, что его симметрия будет $4/mmm$. Действительно, согласно второго спосо-

ба, вертикальная ось симметрии четвертого порядка (элемент симметрии куба) сохранится при наложении на неё оси симметрии бесконечного порядка (элемент симметрии воздействия). Плоскость симметрии, перпендикулярная оси четвертого порядка присутствует и в фигуре ($m\bar{3}m$), и в воздействии ($/mmm$) (здесь и далее в символе группы жирным шрифтом выделены элементы симметрии, о которых идет речь в тексте). Поэтому она сохранится также. Из бесконечного количества плоскостей симметрии в воздействии (∞/mmm) совпадут только 4 плоскости: две по осям координат и две по диагонали между осям координат.

При растяжении кристалла вдоль пространственной диагонали куба (направление [111]) куб изменит свой первоначальный вид (см. рис.15). Получившаяся при этом фигуру нетрудно представить себе, если мысленно растянуть куб, взявшись за его противоположные вершины. Ясно, что поскольку

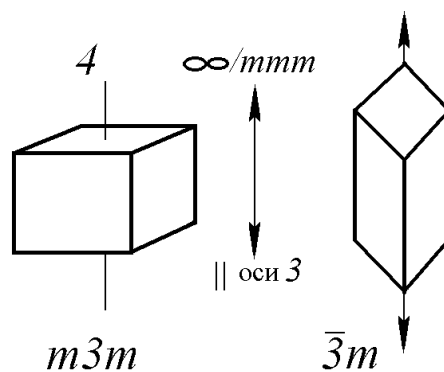


Рис.15

растягивающее усилие направлено по оси симметрии третьего порядка, то в результирующей фигуре этот элемент симметрии сохранится и будет направлен также как и до воздействия: по пространственной диагонали куба. Ось была инверсионной. Таковой она и останется, т.к. в растягивающем действии есть плоскость, перпендикулярная оси симметрии бесконечного порядка (∞/mmm).

По второму правилу сочетание оси симметрии четного порядка (ось симметрии бесконечного порядка можно рассматривать как ось четного порядка) и перпендикулярной плоскости дает центр симметрии. Другими словами, центр симметрии имеется в группе симметрии внешнего воздействия. Есть он и в кристалле до воздействия. Поэтому при наложении он останется в группе симметрии деформированного кристалла.

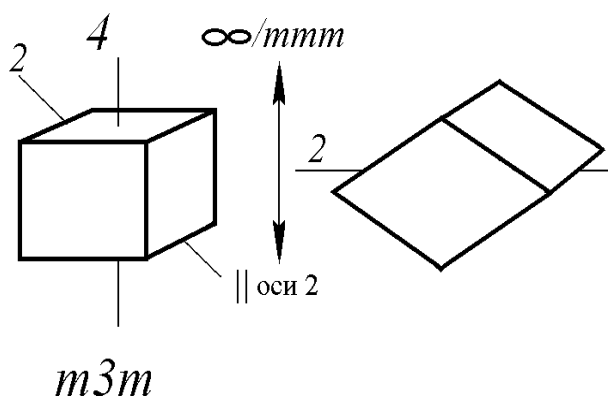


Рис.16

Далее, плоскости симметрии, проходящие через ось симметрии третьего порядка в кубическом кристалле, совпадут с отдельными плоскостями симметрии из бесконечного их числа, характерного для группы симметрии воздействия (∞/mmm). Поэтому в деформированном кристалле должно быть три плоскости симметрии, проходящие через инверсионную ось симмет-

Рис.15

рии третьего порядка (как этого и требует третье свойство элементов симметрии). Таким образом, группа симметрии кубического кристалла при одноосном растяжении-сжатии по пространственной диагонали куба понизится до $\bar{3}m$. Демонстрация этого вывода на стереографической проекции довольно громоздка, нуждается в дополнительных пояснениях и потому не приводится.

Теперь рассмотрим растяжение куба по направлению [110]. Такое растяжение создается, если взяться за середины противоположно расположенных ребер (по диагонали куба) и приложить растягивающее усилие (рис.16). В результате куб превращается в ромбоэдрическую фигуру. У ромбоэдрической сингонии точечная группа симметрии только одна - mmm . Следовательно, в результате растягивающего действия на группу симметрии $m\bar{3}m$ группа понижается до mmm . Этот же результат можно получить по второму способу, накладывая поочередно элементы симметрии воздействия на элементы симметрии кристалла в указанном направлении и учитывая первое свойство элементов симметрии.

10. ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ПО ПРИНЦИПАМ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ И НАЛОЖЕНИЮ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1

1. Как изменится симметрия однородной изотропной среды, если её подвергли всестороннему сжатию.
2. Какую симметрию приобретает однородная изотропная среда в постоянном магнитном поле?
3. Какую симметрию приобретает однородная изотропная среда в постоянном электрическом поле?
4. Какую симметрию приобретает однородная изотропная среда в постоянных однородных электрическом и магнитном поле, направленных параллельно друг другу?

5. Какую симметрию приобретает однородная изотропная среда в постоянных однородных электрическом и магнитном поле, направленных перпендикулярно друг другу?
6. К кристаллу рубина (точечная группа симметрии $\bar{3}m$) приложили постоянное электрическое поле в направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
7. К кристаллу рубина (точечная группа симметрии $\bar{3}m$) приложили постоянное электрическое поле в направлении $[010]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
8. К кристаллу сульфида кадмия (точечная группа симметрии $6mm$) приложили постоянное электрическое поле в направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
9. К кристаллу сульфида кадмия (точечная группа симметрии $6mm$) приложили постоянное электрическое поле в направлении $[001]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
10. К кристаллу графита (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили постоянное магнитное поле в направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
11. К кристаллу графита (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили постоянное магнитное поле в направлении $[001]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
12. Кристаллы какой симметрии обнаруживают пьезоэлектрический эффект при всестороннем сжатию - растяжении?
13. К кристаллу рубина (точечная группа симметрии $\bar{3}m$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
14. К кристаллу рубина (точечная группа симметрии $\bar{3}m$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[010]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?

15. К кристаллу сульфида кадмия (точечная группа симметрии $6mm$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
16. К кристаллу сульфида кадмия (точечная группа симметрии $6mm$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[010]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
17. К кристаллу алмаза (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
18. К кристаллу алмаза (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[010]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
19. К кристаллу алмаза (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили сдвиговое упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
20. К кристаллу алмаза (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили сдвиговое упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[010]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?

11. ТЕНЗОРЫ ВТОРОГО РАНГА.

11.1. Краткое изложение теории

Понятие тензора. Внешне тензор второго ранга представляет собой квадратную матрицу с числом элементов по строкам и столбцам, равным трем. Однако от матриц с аналогичным числом элементов тензор отличается тем, что численные значения его компонент относятся к заданной системе координат и определяют величину какого-либо физического свойства (электропроводность кристалла, удельное сопротивление кристалла, диэлектрическая проницае-

мость, магнитная проницаемость и другие) в выбранном направлении регистрации физического свойства при заданном направлении внешнего воздействия. Так, численное значение компоненты тензора электропроводности кристалла σ_{23} говорит о том, что при приложении по оси X_3 единичного электрического поля по оси X_2 будет течь ток плотностью σ_{23} . Отличить тензор от матрицы можно по закону преобразования их компонент при смене системы координат: компоненты тензора в новой системе координат $T_{i'j'}$ будут связаны с компонентами тензора в старой системе T_{kl} соотношением

$$T_{i'j'} = C_{i'k} \cdot C_{j'l} \cdot T_{kl}, \quad (1)$$

где $C_{i'k}$ и $C_{j'l}$ - это компоненты матрицы преобразования системы координат. В приведённом выше выражении (1) подразумевается суммирование в правой части по индексам k и l , каждый из которых пробегает значения 1, 2, 3. Так, для вычисления компоненты $T_{1'1'}$ будем иметь следующую сумму из девяти слагаемых (в выражении (1) полагаем $i' = j' = 1'$):

$$\begin{aligned} T_{1'1'} = C_{1'k} C_{1'l} T_{kl} = & C_{1'1}^2 T_{11} + C_{1'1} C_{1'2} T_{12} + C_{1'1} C_{1'3} T_{13} + \\ & + C_{1'2} C_{1'1} T_{21} + C_{1'2}^2 T_{22} + C_{1'2} C_{1'3} T_{23} + C_{1'3} C_{1'1} T_{31} + \\ & + C_{1'3} C_{1'2} T_{32} + C_{1'3}^2 T_{33}. \end{aligned}$$

Тензор второго ранга может быть симметричным, если $T_{kl} = T_{lk}$, т.е. недиагональные компоненты тензора, равноотстоящие от диагонали, равны друг другу. Если же тензор антисимметричен, то $T_{kl} = -T_{lk}$, т.е. недиагональные компоненты тензора, равноотстоящие от диагонали, равны по модулю и противоположны по знаку. Диагональные элементы антисимметричного тензора равны нулю.

Тензорные поверхности. Каждый тензор можно представить в наглядной форме, нарисовав его в трехмерном пространстве как какую-то фигуру, по-

верхность. Существует два способа отображения тензора в виде объемной фигуры (поверхности).

Первый способ заключается в следующем: каждому тензору второго ранга \hat{T} с компонентами T_{kl} ставится в соответствие указательная поверхность второго порядка в пространстве $X_1X_2X_3$, которая определяется следующим образом: $r = T_{kl}n_k n_l$. Как она строится? В направлении единичного вектора $\bar{n} (n_1, n_2, n_3)$ произвольного направления из начала координат откладывается отрезок длиной r , которая характеризует величину физического свойства в направлении выбранного единичного вектора. Если перебрать все возможные направления вектора $\bar{n} (n_1, n_2, n_3)$ в пространстве $X_1X_2X_3$, то концы отрезков длиной r опишут некую поверхность, которая и называется указательной. Так, если рассматриваемое физическое свойство изотропно в кристалле выбранной симметрии, то указательная поверхность будет представлять собой сферу. Симметрия указательной поверхности отражает симметрию рассматриваемого физического свойства.

Второй способ заключается в следующем: другая поверхность тензора строится как поверхность равного свойства и определяется выражением:

$$T_{ij}X_iX_j = 1.$$

и называется характеристической поверхностью. Это поверхности второго порядка, которые хорошо известны из курса высшей математики. В системе координат, построенной на собственных векторах данного тензора, вид характеристической поверхности предельно упрощается, т.к. у тензора оказываются отличными от нуля только диагональные элементы, которые равны собственным значениям T_1, T_2, T_3 . Таким образом, характеристическая поверхность будет иметь следующий вид

$$T_{ii}X_i^2 = T_{11}X_1^2 + T_{22}X_2^2 + T_{33}X_3^2 = 1,$$

где $T_{11} = T_1$, $T_{22} = T_2$, $T_{33} = T_3$. Возможные варианты видов характеристической поверхности ограничены и определяются величинами собственных значений тензора T_1, T_2, T_3 :

- * эллипсоид общего вида (значения T_1, T_2, T_3 положительны и не совпадают между собой);
- * эллипсоид вращения (значения T_1, T_2, T_3 положительны и два из них равны друг другу: $T_1 = T_2$);
- * сфера (T_1, T_2, T_3 положительны и равны $T_1 = T_2 = T_3$);
- * однополостной гиперboloид (два собственных значения положительны, а третье отрицательно);
- * двуполостной гиперboloид (два собственных значения отрицательны, а третье положительно);
- * мнимый эллипсоид (все три собственных значения T_1, T_2, T_3 отрицательны).

Собственные векторы и собственные значения. Из предыдущего изложения видно, что собственные значения играют важную роль в изучении физических свойств кристаллов. Рассмотрим их подробнее.

Если тензор \hat{T} действует на векторное поле \bar{E} (представьте его себе как поле с пшеницей, колоски которой под действием ветра как-то улеглись, образовав некоторую картину распределения направлений стеблей), то в соответствии с выражением $\bar{j} = \hat{T} \bar{E}$ это векторное поле преобразуется в другое векторное поле \bar{j} . Конечно второе поле отличается от первого как одно поле пшеницы от другого - каждый вектор \bar{E} будет преобразован тензором \hat{T} . Если сопоставить между собой векторные поля \bar{j} и \bar{E} , то можно будет обнаружить, что отдельные векторы \bar{j} (их не более трех), полученные из векторов \bar{E} , совпадают с ними по направлению - тензор не изменил их направления, хотя у всех других он это сделал. Вот эти векторы \bar{E} , которые не подверглись пере-

ориентации под действием тензора, называют собственными векторами тензора \hat{T} . Число T_1 , указывающее во сколько раз изменилась длина собственного вектора \bar{E}_1 в результате действия на него тензора, называется собственным для вектора \bar{E}_1 . В трехмерном пространстве при решении физических задач число собственных векторов и собственных значений не может быть больше трех. Их находят из решения следующего векторного уравнения:

$$\bar{j} = \hat{T} \bar{E} \quad \text{или} \quad \hat{T} \bar{E} = T_1 \cdot \bar{E},$$

где T_1 - число, а \hat{T} - тензор (матрица из девяти чисел).

12. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ ВЕЛИЧИНЫ ФИЗИЧЕСКОГО СВОЙСТВА В ЗАДАННОМ НАПРАВЛЕНИИ

Задача 1. Определить относительную величину линейного расширения кристалла в направлении, задаваемым единичным вектором $\bar{n} \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, 0 \right)$, если известно, что изменение температуры составило 10^0 С, а тензор линейного расширения имеет следующий вид:

$$\left\| \begin{array}{ccc} 9.5 & 4.8 & 0 \\ 4.8 & 9.5 & 0 \\ 0 & 0 & 45.8 \end{array} \right\| \cdot 10^{-4}, \text{ К}^{-1}$$

Решение. Эффект линейного расширения кристалла при изменении его температуры описывается тензором второго ранга с компонентами α_{ij} , который вводится следующим образом: если температура кристалла изменилась на величину ΔT , то изменение длины кристалла ΔL равно

$$\Delta L = L \cdot \hat{\alpha} \cdot \Delta T,$$

где L - исходный линейный размер кристалла. Относительное изменение длины будет равно:

$$\Delta L/L = \hat{\alpha} \cdot \Delta T.$$

Величина физического свойства в заданном направлении определяется с помощью выражения

$$(\Delta L/L)_n = \alpha_{ij} n_i n_j \Delta T.$$

Распишем его в полном виде, что предполагает проведение суммирования по двум индексам

$$(\Delta L/L)_n = (\alpha_{11} \cdot n_1^2 + \alpha_{12} \cdot n_1 n_2 + \alpha_{13} n_1 n_3 + \alpha_{21} \cdot n_1 n_2 + \alpha_{22} \cdot n_2^2 + \alpha_{23} n_2 n_3 + \alpha_{31} \cdot n_1 n_3 + \alpha_{32} n_2 n_3 + \alpha_{33} \cdot n_3^2) \cdot \Delta T.$$

Подставим в данное выражение сначала значения компонент единичного вектора \bar{n} , у которого $n_3=0$, тогда

$$(\Delta L/L)_n = (\alpha_{11} \cdot n_1^2 + \alpha_{12} \cdot n_1 n_2 + \alpha_{21} \cdot n_1 n_2 + \alpha_{22} \cdot n_2^2) \cdot \Delta T.$$

Теперь вместо α_{ij} в данное выражение подставим численные значения компонент тензора, а также численное значение изменения температуры

$$\begin{aligned} (\Delta L/L)_n &= (9.5 \cdot n_1^2 + 4.8 \cdot n_1 n_2 + 4.8 \cdot n_1 n_2 + 9.5 \cdot n_2^2) \cdot 10^{-4} \Delta T = \\ &= (2 \cdot 9.5 \cdot \frac{2}{4} + 2 \cdot 4.8 \cdot \frac{2}{4}) \cdot 10^{-4} \cdot 10 = 14.3 \cdot 10^{-3} = 1.43 \cdot 10^{-2}. \end{aligned}$$

Задача 2. Определить величину электропроводности кристалла в направлении, задаваемым единичным вектором $\bar{n} \left(0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2 \right)$, если известно, что тензор электропроводности данного кристалла в кристаллофизической системе координат имеет следующий вид:

$$\begin{vmatrix} 15 & 4.5 & 0 \\ 4.5 & 15 & 0 \\ 0 & 0 & 88.8 \end{vmatrix} \cdot 10^{-7}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

Решение. Как и в предыдущей задаче, сначала запишем общее выражение для величины физического свойства в выбранном направлении

$$\sigma_n = \sigma_{ij} n_i n_j = \sigma_{11} \cdot n_1^2 + \sigma_{12} n_1 n_2 + \sigma_{13} n_1 n_3 + \sigma_{21} n_2 n_1 + \sigma_{22} n_2^2 + \sigma_{23} n_2 n_3 + \sigma_{31} n_3 n_1 + \sigma_{32} n_3 n_2 + \sigma_{33} n_3^2.$$

В данном выражении равны нулю все слагаемые, содержащие n_1 , а также и те, которые содержат σ_{13} , σ_{31} , σ_{23} , σ_{32} . Если эти слагаемые опустить, то получим, что требуемая величина равна

$$\sigma_n = \sigma_{ij} n_i n_j = \sigma_{22} n_2^2 + \sigma_{33} n_3^2.$$

Подстановка в данное выражение численных значений компонент тензора и координат единичного вектора дает

$$\sigma_n = \sigma_{ij} n_i n_j = \sigma_{22} n_2^2 + \sigma_{33} n_3^2 = \left(15 \cdot \frac{2}{4} + 88.8 \cdot \frac{2}{4} \right) \cdot 10^{-7} = 51.6 \cdot 10^{-7} \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

Задача 3. Вычислить величину абсолютной диэлектрической проницаемости ε_a кристалла в направлении $\bar{n} \left(\sqrt{2}/2, 0, \sqrt{2}/2 \right)$, если тензор относительной диэлектрической проницаемости ε_{omn} имеет вид

$$\begin{vmatrix} 16 & 2.2 & 7.4 \\ 2.2 & 18 & 5.6 \\ 7.4 & 5.6 & 24 \end{vmatrix}.$$

Решение. Величина абсолютной диэлектрической проницаемости ϵ_a связана с относительной диэлектрической проницаемостью через диэлектрическую проницаемость вакуума $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$

$$\epsilon_a = \epsilon_{отн} \cdot \epsilon_0.$$

Значит, требуемая величина определится с помощью следующего выражения

$$\epsilon_{an} = \epsilon_0 \cdot (\epsilon_{11} \cdot n_1^2 + \epsilon_{12} n_1 n_2 + \epsilon_{13} n_1 n_3 + \epsilon_{21} n_2 n_1 + \epsilon_{22} n_2^2 + \epsilon_{23} n_2 n_3 + \epsilon_{31} n_3 n_1 + \epsilon_{32} n_3 n_2 + \epsilon_{33} n_3^2).$$

Его упрощение возможно за счет использования симметричности тензора диэлектрической проницаемости

$$\epsilon_{an} = \epsilon_0 \cdot (\epsilon_{11} \cdot n_1^2 + 2\epsilon_{12} n_1 n_2 + 2\epsilon_{13} n_1 n_3 + \epsilon_{22} n_2^2 + 2\epsilon_{23} n_2 n_3 + \epsilon_{33} n_3^2).$$

Теперь подставим в полученное выражение значения компонент единичного вектора и учтем, что $n_2 = 0$, тогда

$$\begin{aligned} \epsilon_{an} &= \epsilon_0 \cdot (\epsilon_{11} \cdot n_1^2 + 2\epsilon_{13} n_1 n_3 + \epsilon_{33} n_3^2) = 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot (16 \cdot \frac{2}{4} + 2 \cdot 7.4 \cdot \frac{2}{4} + 24 \cdot \frac{2}{4}) = \\ &= 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot (8 + 7.4 + 12) = 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot 27.4 = 2.4 \cdot 10^{-10} (\text{Ф/м}). \end{aligned}$$

Итак, величина абсолютной диэлектрической проницаемости в направлении вектора \vec{n} составляет $2.4 \cdot 10^{-10} \text{ Ф/м}$.

**13. ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ
ВЕЛИЧИНЫ ФИЗИЧЕСКОГО СВОЙСТВА
В ЗАДАННОМ НАПРАВЛЕНИИ
ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 2**

1. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии $m\bar{3}m$ в направлении единичного вектора $\vec{n} \parallel (0, 0, 1)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 88 & 0 & 0 \\ 0 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 88 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

2. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии $m\bar{3}m$ в направлении единичного вектора $\vec{n} \parallel (0, 1, 0)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 88 & 0 & 0 \\ 0 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 88 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

3. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии mmm в направлении единичного вектора $\vec{n} \parallel (0, 1, 0)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 77 & 0 & 0 \\ 0 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

4. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии mmm в направлении единичного вектора $\vec{n} (0, 0, 1)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 77 & 0 & 0 \\ 0 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

5. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии $6mm$ в направлении единичного вектора $\vec{n} (\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2, 0)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 77 & 0 & 0 \\ 0 & 77 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

6. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии $6mm$ в направлении единичного вектора $\vec{n} (0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 77 & 0 & 0 \\ 0 & 77 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

7. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии $6mm$ в направлении единичного вектора $\vec{n} (\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 77 & 0 & 0 \\ 0 & 77 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

8. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3 \right)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 77 & 45 & 0 \\ 55 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

9. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2, 0 \right)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 77 & 45 & 0 \\ 55 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

10. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\sqrt{2}/2, 0, \sqrt{2}/2 \right)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 77 & 45 & 0 \\ 55 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

11. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2 \right)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 77 & 45 & 0 \\ 55 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

12. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 4 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2 \right)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 77 & 45 & 0 \\ -45 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

13. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 4 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3 \right)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 77 & 45 & 0 \\ -45 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

14. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 4 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\sqrt{2}/2, 0, \sqrt{2}/2 \right)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 77 & 45 & 0 \\ -45 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 99 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

15. Вычислить значение абсолютной диэлектрической проницаемости кристалла симметрии 4 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3 \right)$, ес-

ли тензор относительной диэлектрической проницаемости кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 2.1 & 0 \\ -2.1 & 6.7 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{vmatrix}.$$

16. Вычислить значение абсолютной диэлектрической проницаемости кристалла симметрии 4 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\sqrt{2}/2, 0, \sqrt{2}/2 \right)$, если тензор относительной диэлектрической проницаемости кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 2.1 & 0 \\ -2.1 & 6.7 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{vmatrix}.$$

17. Вычислить значение абсолютной диэлектрической проницаемости кристалла симметрии 4 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2 \right)$, если тензор относительной диэлектрической проницаемости кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 2.1 & 0 \\ -2.1 & 6.7 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{vmatrix}.$$

18. Вычислить значение абсолютной диэлектрической проницаемости кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2 \right)$, если тензор относительной диэлектрической проницаемости кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 2.1 & 0 \\ 3.9 & 6.7 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{vmatrix}.$$

19. Вычислить значение абсолютной диэлектрической проницаемости кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, \frac{\sqrt{2}}{2} \right)$, если тензор относительной диэлектрической проницаемости кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 2.1 & 0 \\ 3.9 & 6.7 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{vmatrix}.$$

20. Вычислить значение абсолютной диэлектрической проницаемости кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\bar{n} \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3} \right)$, если тензор относительной диэлектрической проницаемости кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 2.1 & 0 \\ 3.9 & 6.7 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{vmatrix}.$$

14. ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИДА ТЕНЗОРА В НОВОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

Задача 1. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} тетрагонального кристалла точечной симметрии 422 в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

Решение. Для определения компонент тензора второго ранга при смене системы координат воспользуемся выражением

$$T_{i'j'} = C_{i'k} \cdot C_{j'l} \cdot T_{kl},$$

где $C_{i'k}$ и $C_{j'l}$ - компоненты матрицы преобразования системы координат, а суммирование в правой части идет по индексам k и l , каждый из которых пробегает значения 1, 2, 3. Определим компоненту тензора T_{11} в новой системе координат сначала в общем виде, полагая в приведённом выше выражении $i' = j' = 1'$:

$$\begin{aligned} T_{1'1'} &= C_{1'k} C_{1'l} T_{kl} = C_{1'1}^2 T_{11} + C_{1'1} C_{1'2} T_{12} + C_{1'1} C_{1'3} T_{13} + \\ &+ C_{1'2} C_{1'1} T_{21} + C_{1'2}^2 T_{22} + C_{1'2} C_{1'3} T_{23} + C_{1'3} C_{1'1} T_{31} + \\ &+ C_{1'3} C_{1'2} T_{32} + C_{1'3}^2 T_{33}. \end{aligned}$$

Теперь подставим в данное выражение значения компонент тензора и матрицы преобразования, имея в виду их диагональный вид:

$$T_{11'} = C_{1'k} C_{1'l} T_{kl} = C_{11}^2 T_{11} = T_{11} .$$

Для компоненты T_{12} в новой системе координат будем иметь выражение $i' = 1', j' = 2'$:

$$\begin{aligned} T_{12'} &= C_{1'k} C_{2'l} T_{kl} = C_{11} C_{21} T_{11} + C_{11} C_{22} T_{12} + C_{11} C_{23} T_{13} + \\ &+ C_{12} C_{21} T_{21} + C_{12} C_{22} T_{22} + C_{12} C_{23} T_{23} + \\ &+ C_{13} C_{21} T_{31} + C_{13} C_{22} T_{32} + C_{13} C_{23} T_{33}. \end{aligned}$$

В данном выражении отбрасываем слагаемые, содержащие недиагональные элементы тензора:

$$T_{12'} = C_{11} C_{21} T_{11} + C_{12} C_{22} T_{22} + C_{13} C_{23} T_{33}.$$

Но недиагональные элементы матрицы преобразования равны нулю, поэтому $T_{12'} = 0$.

Для компоненты T_{13} в новой системе координат будем иметь выражение $i' = 1', j' = 3'$:

$$\begin{aligned} T_{13'} &= C_{1'k} C_{3'l} T_{kl} = C_{11} C_{31} T_{11} + C_{11} C_{32} T_{12} + C_{11} C_{33} T_{13} + \\ &+ C_{12} C_{31} T_{21} + C_{12} C_{32} T_{22} + C_{12} C_{33} T_{23} + \\ &+ C_{13} C_{31} T_{31} + C_{13} C_{32} T_{32} + C_{13} C_{33} T_{33}. \end{aligned}$$

Отбросим слагаемые, которые содержат недиагональные элементы тензора:

$$T_{13'} = C_{11} C_{31} T_{11} + C_{12} C_{32} T_{22} + C_{13} C_{33} T_{33}.$$

Поскольку недиагональные элементы матрицы преобразования системы координат равны нулю, то $T_{13'} = 0$.

Ввиду симметричности исходного тензора из полученных результатов можно сделать вывод, что $T_{2'1'} = 0$, $T_{3'1'} = 0$.

Теперь определим элемент T_{22} в новой системе координат. Для этого в исходном выражении положим $i' = 2'$, $j' = 2'$. Тогда

$$\begin{aligned} T_{2'2'} &= C_{2'k} C_{2'l} T_{kl} = C_{2'1} C_{2'1} T_{11} + C_{2'1} C_{2'2} T_{12} + C_{2'1} C_{2'3} T_{13} + \\ &+ C_{2'2} C_{2'1} T_{21} + C_{2'2} C_{2'2} T_{22} + C_{2'2} C_{2'3} T_{23} + \\ &+ C_{2'3} C_{2'1} T_{31} + C_{2'3} C_{2'2} T_{32} + C_{2'3} C_{2'3} T_{33}. \end{aligned}$$

Отбросим слагаемые, содержащие недиагональные элементы тензора:

$$T_{2'2'} = C_{2'1} C_{2'1} T_{11} + C_{2'2} C_{2'2} T_{22} + C_{2'3} C_{2'3} T_{33}.$$

Недиагональные элементы матрицы преобразования также равны нулю, поэтому окончательно имеем:

$$T_{2'2'} = C_{2'2} C_{2'2} T_{22} = T_{22}.$$

Определим элемент T_{33} в новой системе координат. Для этого в исходном выражении положим $i' = 3'$, $j' = 3'$. Тогда

$$\begin{aligned} T_{3'3'} &= C_{3'k} C_{3'l} T_{kl} = C_{3'1} C_{3'1} T_{11} + C_{3'1} C_{3'2} T_{12} + C_{3'1} C_{3'3} T_{13} + \\ &+ C_{3'2} C_{3'1} T_{21} + C_{3'2} C_{3'2} T_{22} + C_{3'2} C_{3'3} T_{23} + \\ &+ C_{3'3} C_{3'1} T_{31} + C_{3'3} C_{3'2} T_{32} + C_{3'3} C_{3'3} T_{33}. \end{aligned}$$

По тем же причинам, что и в предыдущих вычислениях получим

$$T_{3'3'} = C_{3'3} C_{3'3} T_{33} = T_{33}.$$

Нам осталось определить компоненты T_{23} и T_{32} . Из соображений симметричности исходного тензора (тензор симметричный в какой-либо системе координат должен оставаться симметричным в любой другой системе) следует, что эти элементы должны быть равны друг другу. Следовательно требуется вычислить только одну компоненту, например, T_{23} . Полагаем $i' = 2'$, $j' = 3'$:

$$T_{2'3'} = C_{2'k} C_{3'l} T_{kl} = C_{2'1} C_{3'1} T_{11} + C_{2'1} C_{3'2} T_{12} + C_{2'1} C_{3'3} T_{13} + \\ + C_{2'2} C_{3'1} T_{21} + C_{2'2} C_{3'2} T_{22} + C_{2'2} C_{3'3} T_{23} + \\ + C_{2'3} C_{3'1} T_{31} + C_{2'3} C_{3'2} T_{32} + C_{2'3} C_{3'3} T_{33}.$$

Отбрасываем все слагаемые, содержащие недиагональные элементы тензора:

$$T_{2'3'} = C_{2'1} C_{3'1} T_{11} + C_{2'2} C_{3'2} T_{22} + C_{2'3} C_{3'3} T_{33} = 0.$$

Итак, эта компонента тензора равна нулю, т.к. все его слагаемые равны нулю из-за нулевых значений недиагональных компонент матрицы преобразования.

Окончательно, вид тензора в новой системе координат остался неизменным по отношению к кристаллофизической системе координат.

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{pmatrix}.$$

Полученный вид тензора в новой системе координат подтверждается тем, что выбранная матрица преобразования системы координат соответствует действию оси симметрии второго порядка, расположенной по оси X_1 . Симметрия же кристалла описывается точечной группой 422, которая имеет такую ось симметрии и, согласно принципу Неймана, эту же ось симметрии должно иметь любое физическое свойство, наблюдаемое в данном кристалле. Что и было получено путем строгих математических вычислений.

15. ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ НА ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИДА ТЕНЗОРА В НОВОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ № 2

1. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} тетрагонального кристалла точечной симметрии 422 в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

2. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} тетрагонального кристалла точечной симметрии 422 в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 7.4 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

3. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} тетрагонального кристалла точечной симметрии 422 в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

4. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} тетрагонального кристалла точечной симметрии 422 в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

5. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} тетрагонального кристалла точечной симметрии 422 в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

6. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} кубического кристалла точечной симметрии $m\bar{3}m$ в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 4.8 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

7. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} кубического кристалла точечной симметрии $m\bar{3}m$ в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 4.8 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

8. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} кубического кристалла точечной симметрии $m\bar{3}m$ в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 4.8 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

9. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} кубического кристалла точечной симметрии $m\bar{3}m$ в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 4.8 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

10. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} кубического кристалла точечной симметрии $m\bar{3}m$ в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 4.8 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

11. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} ромбоэдрического кристалла точечной симметрии mmm в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

12. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} ромбоэдрического кристалла точечной симметрии mmm в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

13. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} ромбоэдрического кристалла точечной симметрии mmm в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

14. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} ромбоэдрического кристалла точечной симметрии mmm в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

15. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} ромбоэдрического кристалла точечной симметрии mmm в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

16. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} ромбоэдрического кристалла точечной симметрии mmm в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

17. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} моноклинного кристалла точечной симметрии m в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 6.2 & 0 \\ 6.2 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

18. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} моноклинного кристалла точечной симметрии m в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 6.2 & 0 \\ 6.2 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

19. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} моноклинного кристалла точечной симметрии m в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 6.2 & 0 \\ 6.2 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{vmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

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

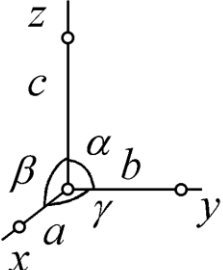
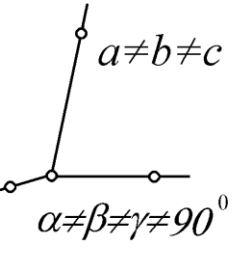
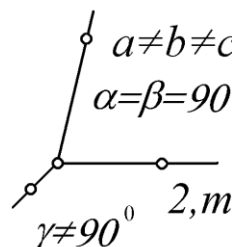
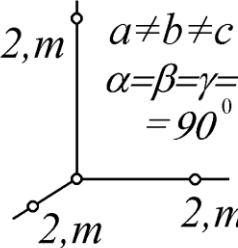
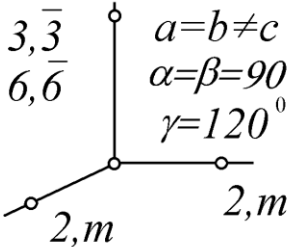
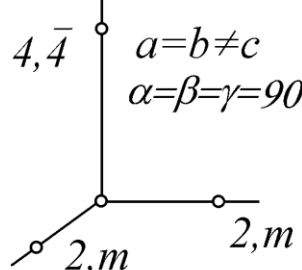
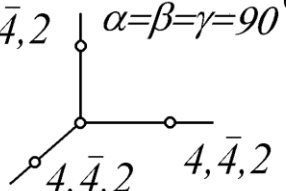
20. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} моноклинного кристалла точечной симметрии m в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 6.2 & 0 \\ 6.2 & 9.6 & 0 \\ 0 & 0 & 15.2 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему имеет следующий вид:

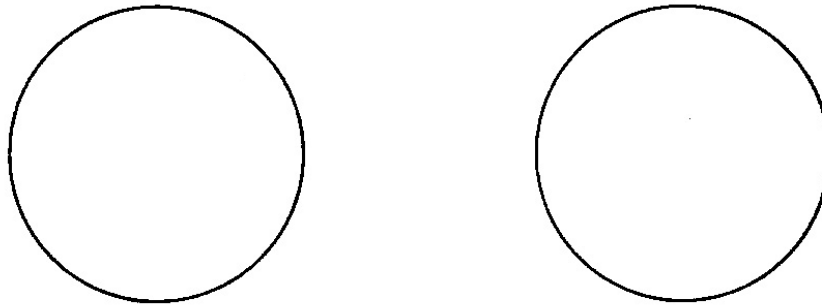
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Стандартные установки кристаллографической системы координат в кристаллах различных сингоний

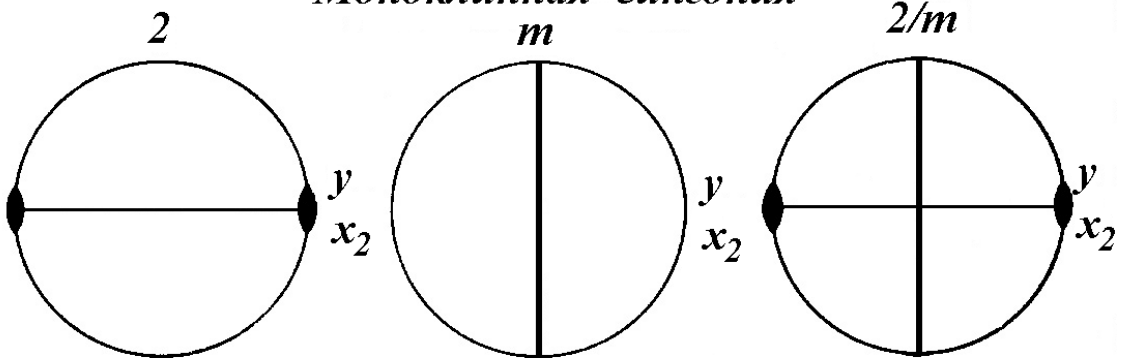
<p>Обозначения:</p> 	<p>Триклинная</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$</p>	<p>Моноклинная</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma \neq 90^\circ$</p>	<p>Ромбическая</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>
<p>Тригональная и гексагональная</p>  <p>$3, \bar{3}$ $6, \bar{6}$</p> <p>$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$</p>	<p>Тетрагональная</p>  <p>$4, \bar{4}$</p> <p>$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>	<p>Кубическая</p>  <p>$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>	

Стереографические проекции кристаллов
различной точечной симметрии

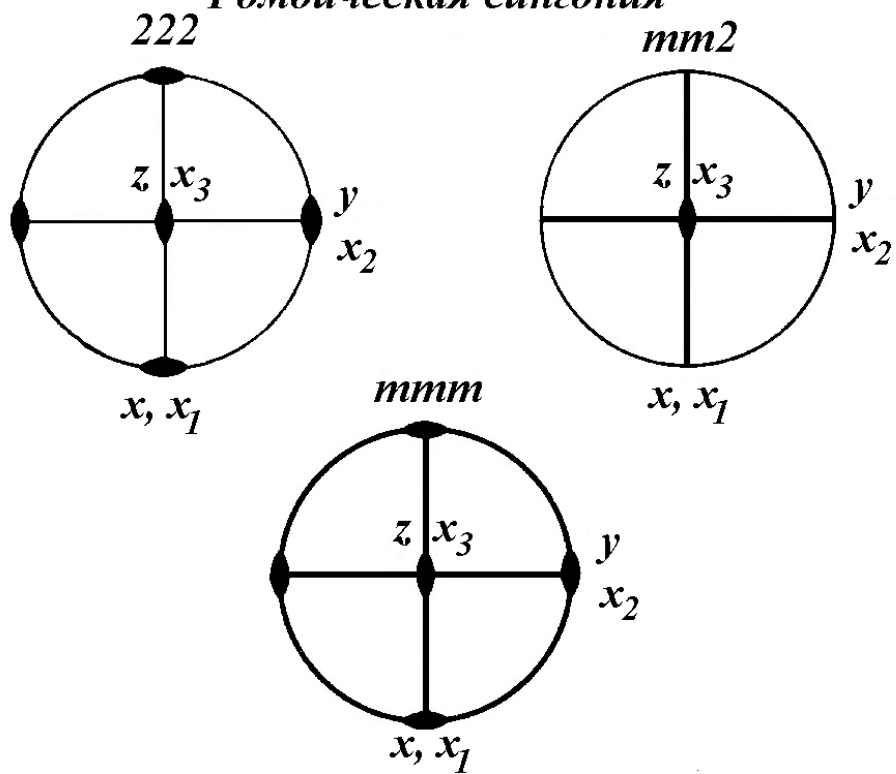
1 Триклинная сингония $\bar{1}$



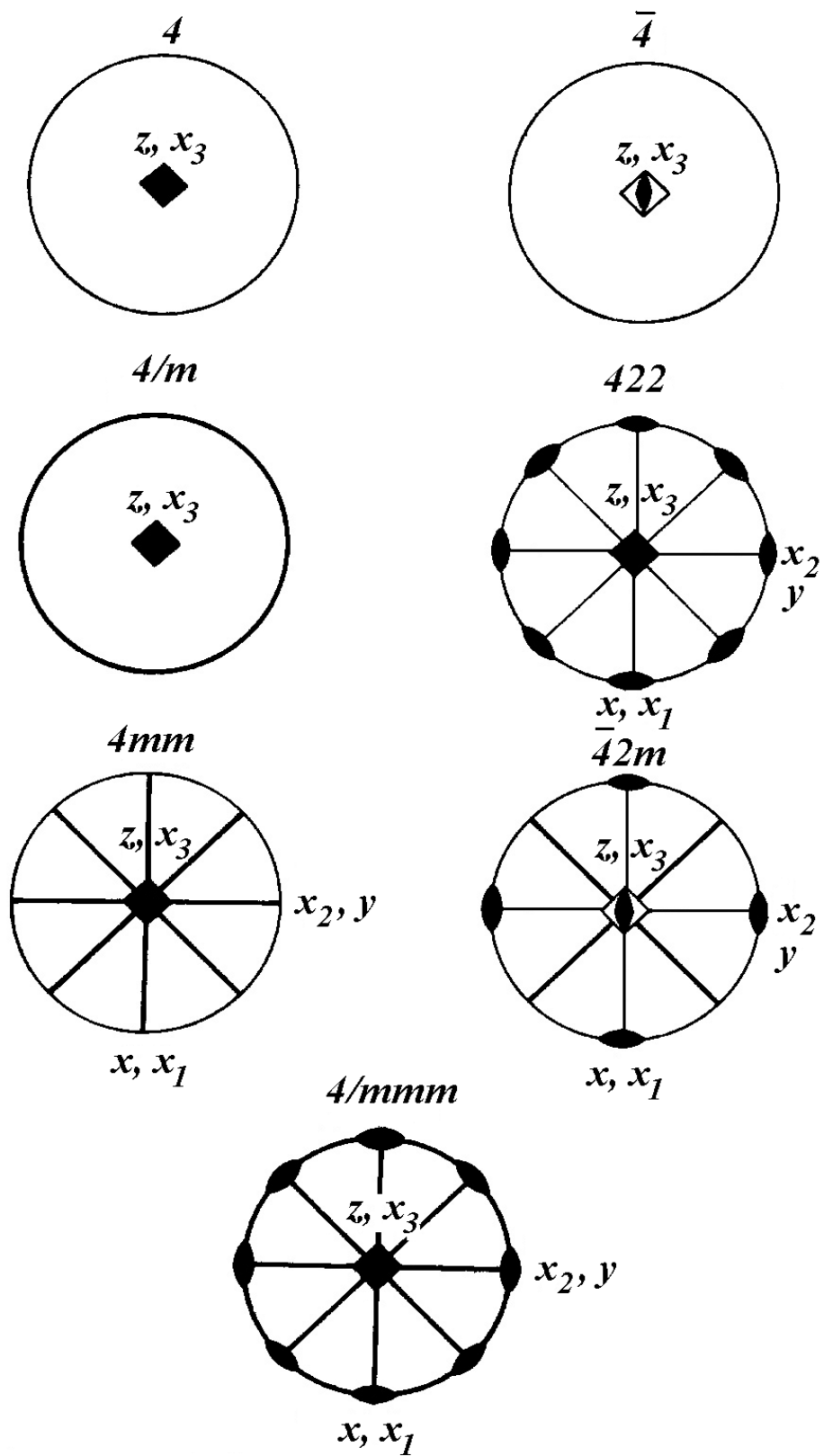
Моноклинная сингония



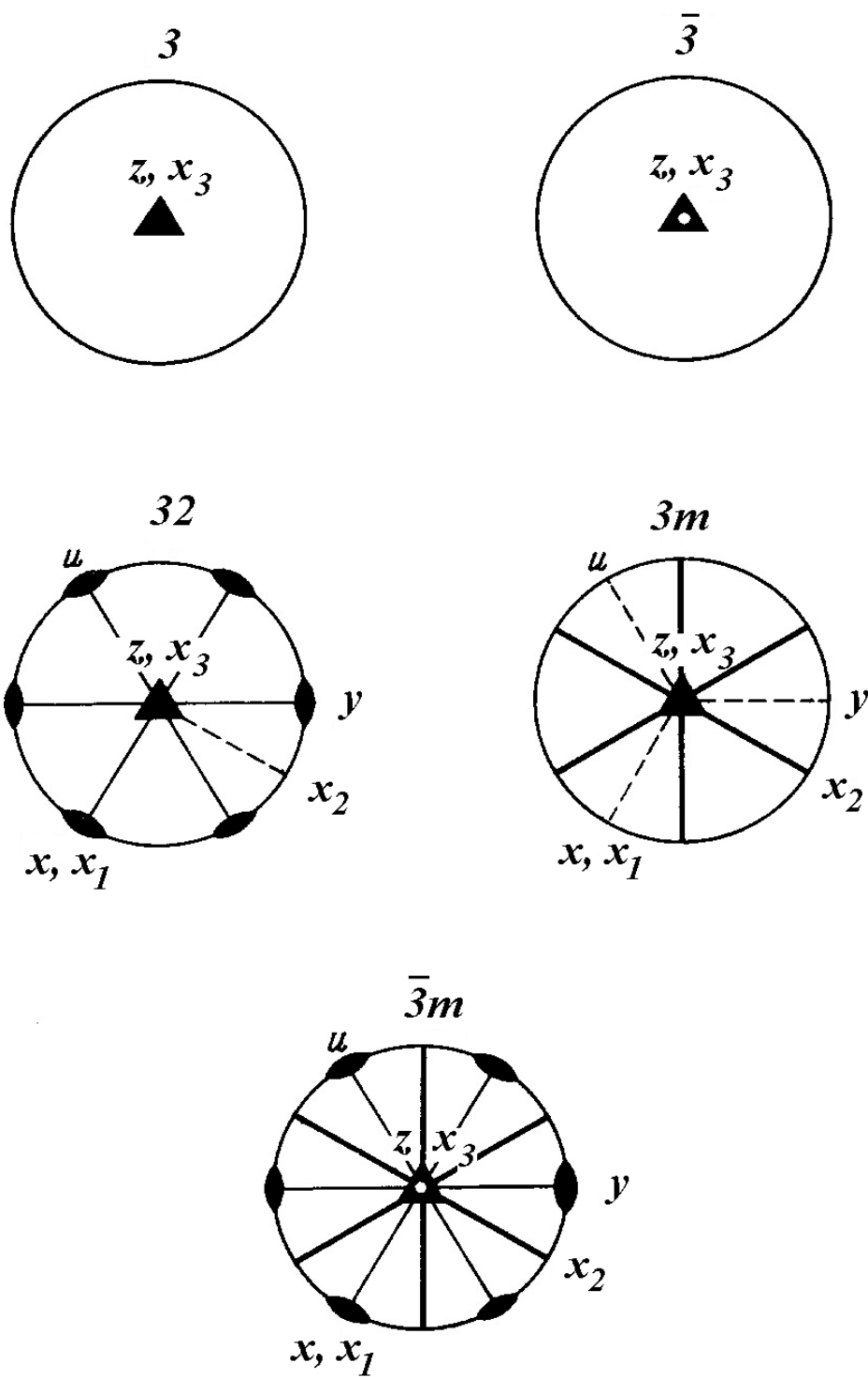
Ромбическая сингония



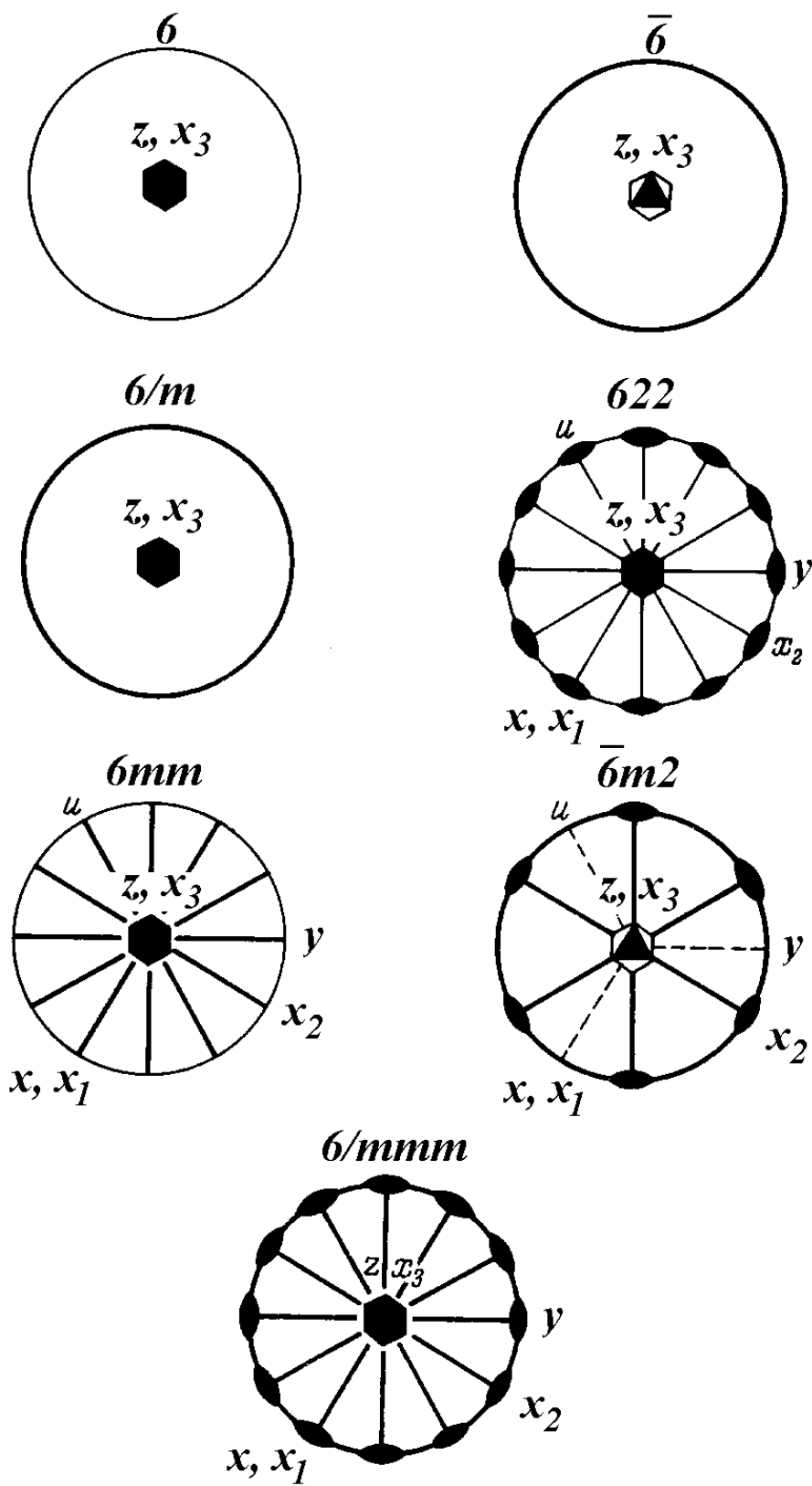
Тетрагональная сингония



Тригональная сингония



Гексагональная сингония



Кубическая сингония

