

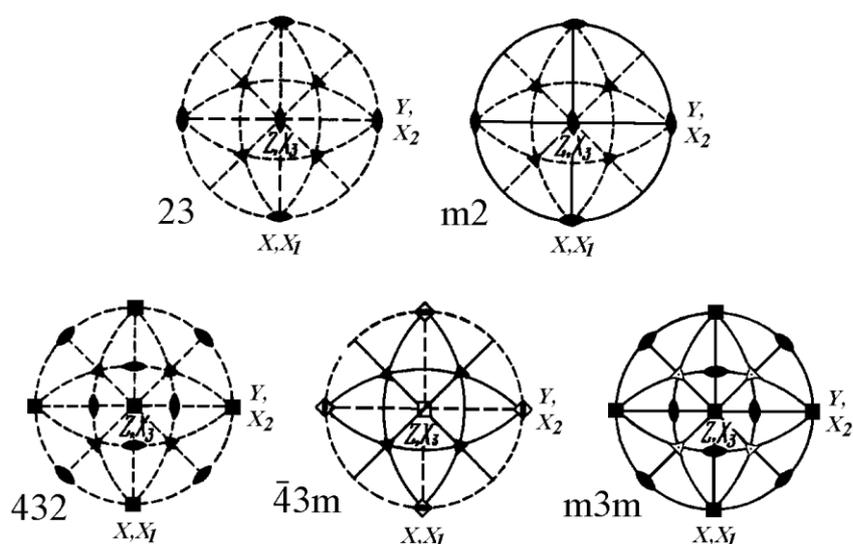
Томский государственный университет  
систем управления и радиоэлектроники

Давыдов В.Н.

## МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

Часть 2.

«Физические свойства кристаллов»



ТОМСК - 2012

Министерство образования и науки Российской Федерации

**ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ СИСТЕМ  
УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ**

**ДАВЫДОВ В.Н.**

**МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТЫ  
ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ**

**ЧАСТЬ 2.**

**«Физические свойства кристаллов»**

*Учебное пособие  
для студентов, обучающихся по очной  
форме специальности 210105.65*

ТОМСК - 2012

**Давыдов Валерий Николаевич,**  
профессор кафедры электронных приборов ТУСУР

МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ. Учебное пособие. Часть 2  
«Физические свойства кристаллов». – Томск, ТУСУР, 2012. – 94 с.

Во второй части учебного пособия изложены основные физические свойства кристаллов с позиций теории симметрии, принятых в современной кристаллографии и кристаллофизике. Изложение материала иллюстрируется физическими примерами и аналогиями. Выбранная форма изложения материала пособия направлена на формирование у студентов целостного методологического подхода к описанию физических свойств кристаллов, позволяющего выявлять сущность свойства, предсказывать новые физические явления, перспективные к применению в электронном приборостроении, предсказывать его основные свойства. Изложение материала пособия ориентировано на студентов технических вузов и не требует специальных знаний кроме основ высшей математики и физики, даваемых на первых курсах вузов.

На основании экспертизы УМК по специальности 210105.65 «Электронные приборы и устройства» комиссия Учебно-методического объединения по образованию в области автоматики, электроники, микроэлектроники и радиотехники присвоила данному учебному пособию гриф «Рекомендуется для межвузовского использования».

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>1. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ПЕРВОГО РАНГА.....</b>	<b>6</b>
1.1. Введение тензоров первого ранга в задачах кристаллофизики .....	6
1.2. Основные положения электростатики кристаллов.....	9
1.3. Пироэлектрический и пиромагнитный эффекты в кристаллах.....	12
1.4. Сегнетоэлектрики и их свойства.....	16
1.5. Симметрия электрических свойств кристаллов.....	19
<b>2. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ВТОРОГО РАНГА.....</b>	<b>21</b>
2.1. Введение тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики .....	21
2.2. Постоянный электрический ток и электропроводность кристалла.....	27
2.3. Влияние симметрии на вид тензора второго ранга.....	28
2.4. Теплопроводность кристаллов .....	30
2.5. Оптические свойства кристаллов .....	35
2.5.1. Электромагнитные волны в прозрачных кристаллах.....	35
2.5.2. Оптическая индикатриса .....	41
2.5.3. Эллипсоид Френеля .....	45
<b>3. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ВЫСШИХ РАНГОВ .....</b>	<b>50</b>
3.1. Упругие свойства кристаллов .....	50
3.1.1. Малые деформации сплошной среды.....	50
3.1.2. Тензор упругих напряжений.....	53
3.1.3. Деформация и симметрия кристалла.....	56

3.1.4. Деформация и симметрия кристалла.....	56
3.1.5. Тепловое расширение.....	56
3.2. Физические свойства кристаллов , описываемые тензорами третьего ранга .....	58
3.2.1. Способы введения тензоров третьего ранга в задачах кристаллофизики .....	58
3.2.2. Прямой пьезоэлектрический эффект .....	60
3.2.3. Обратный пьезоэлектрический эффект .....	65
3.2.4. Симметрия пьезоэлектрического эффекта .....	66
3.2.5. Линейный электрооптический эффект, пьезомагнетизм и электрогирация .....	70
3.3. Физические свойства кристаллов, описываемые тензорами четвёртого ранга.....	74
3.3.1. Обобщённый закон Гука. Тензор упругих постоянных.....	74
3.3.2. Влияние симметрии кристалла на его упругие свойства .....	79
3.3.4. Фотоупругость кристаллов, квадратичный электрооптический эффект и электрострикции.....	82
3.4. Упругие волны в кристаллах.....	84
<b>4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....</b>	<b>87</b>
<b>5. ЛИТЕРАТУРА.....</b>	<b>89</b>
<b>6. ПРИЛОЖЕНИЯ</b>	
Таблица 4. Форма матриц пьезомодулей кристаллов различных сингоний.....	90
Таблица 5. Форма матриц упругих постоянных кристаллов различных сингоний .....	93

# 1. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ПЕРВОГО РАНГА

## 1.1. Введение тензоров первого ранга в задачах кристаллофизики

Прежде чем рассматривать конкретные физические свойства заданного ранга, рассмотрим правила определения ранга тензора физического свойства и его характер: полярный или аксиальный. Если причина  $W$ , приложенная к кристаллу и описываемая тензором ранга  $r_W$ , вызывает следствие  $S$ , описываемое тензором ранга  $r_S$ , и линейная связь между ними устанавливается тензором  $\hat{T}$ :

$$S = \hat{T} \cdot W, \quad (1.1)$$

где ранг  $R_T$  тензора  $\hat{T}$  будет равен сумме рангов тензорных величин  $W$  и  $S$ . Данный вывод следует из того, что в тензорном выражении (1.1) ранг тензора левой части должен быть равен рангу тензора, получаемого в правой части. В свою очередь правая часть представляет собой скалярное произведение двух тензорных величин разных рангов. Как показано в первой части учебного пособия (п. 3.5.1), скалярное произведение двух тензоров дает результат, ранг которого (на примере выражения (1.1)) равен

$$R = R_T - r_W.$$

Имея это в виду, приравняем ранги левой правой части в (1.1), тогда

$$r_S = R_T - r_W$$

откуда находим

$$R_T = r_S + r_W.$$

Приведем пример вычисления ранга тензора, устанавливающего линейную связь между двумя величинами: изменение температуры кристалла на величину  $\Delta T$  вызывает появление в нем поляризации  $\bar{P}$  причем

$$\bar{P} = \hat{\pi} \cdot \Delta T.$$

Поскольку температура  $\Delta T$  имеет ранг  $r_W = 0$  (это скаляр, он по определению тензор нулевого ранга), поляризация кристалла это векторная величина и потому  $r_S = 1$ . Поэтому ранг тензора  $\hat{\pi}$  равен:  $R_{\hat{\pi}} = r_P + r_T = 0+1 = 1$ .

Тип тензора, описывающего линейную связь между причиной и следствием, определяется следующим образом: если тензорные величины  $W$  и  $S$  описываются полярными или аксиальными тензорами, то тензор  $\hat{T}$  будет являться полярным тензором всегда (даже в случае аксиальных тензоров  $W$  и  $S$ ). Если же один из тензоров  $W$  или  $S$  является тензором аксиальным, а другой полярным, то тензор  $\hat{T}$  будет аксиальным вне зависимости от того, какой из тензоров  $W$  и  $S$  является аксиальным, а какой полярным. Поэтому все возможные ситуации с тензорами первого ранга могут быть собраны в таблицу (см. таблицу1).

Таблица1. Варианты эффектов на физические свойства первого ранга

Ранги $r_W$ И $r_S$	Причина $W$	Следствие $S$	Природа тензора
1. $r_W=0,$ $r_S=1$	1.1. Скаляр	1.1.1. Полярный вектор	Полярный
		1.1.2. Аксиальный вектор	Аксиальный
	1.2. Псевдоскаляр	1.2.1. Полярный вектор	Полярный

		1.2.2. Аксиальный вектор	Аксиальный
2. $r_W=1,$ $r_S=0$	2.1. Полярный вектор	2.1.1. Скаляр	Полярный
		2.1.2. Псевдоскаляр	Аксиальный
	2.2. Аксиальный вектор	2.2.1. Скаляр	Аксиальный
		2.2.2. Псевдоскаляр	Полярный

Результаты этой таблицы можно представить в виде тензорных уравнений вида (1.1). Для этого введем следующие обозначения:

- скаляр обозначим  $Sc$ , а псевдоскаляр -  $\overset{0}{Sc}$ ;
- полярный вектор обозначим  $\bar{V}$ , а псевдовектор -  $\overset{0}{V}$ .

Тогда получим:

$$1.1.1. \bar{V} = \mathfrak{E} \cdot Sc; \quad 1.1.2. \overset{0}{V} = \mathfrak{E} \cdot \overset{0}{Sc};$$

$$1.2.1. \bar{V} = \mathfrak{E} \cdot \overset{0}{Sc}; \quad 1.2.2. \overset{0}{V} = \mathfrak{E} \cdot \overset{0}{Sc};$$

$$2.1.1. Sc = \mathfrak{E} \cdot \bar{V}; \quad 2.1.2. \overset{0}{Sc} = \mathfrak{E} \cdot \overset{0}{V};$$

$$2.2.1. Sc = \mathfrak{E} \cdot \overset{0}{V}; \quad 2.2.2. \overset{0}{Sc} = \mathfrak{E} \cdot \overset{0}{V};$$

Продемонстрируем порядок пользования таблицей 1 и уравнениями (1.1.1.) – (2.2.2.) на конкретных физических примерах.

Если причина  $W$  является скаляром, а следствие  $S$  – полярным вектором, то согласно уравнению (1.1.1) связывающий их линейно тензор  $\hat{T}$  будет полярным тензором первого ранга. Если же следствие  $S$  является аксиальным

вектором, то по (1.1.2) связывающий их линейно тензор  $\hat{T}$  будет аксиальным тензором первого ранга.

## 1.2 Основные положения электростатики кристаллов

Приложение к кристаллу внешнего электрического поля  $\bar{E}$  ведет к его поляризации. Все заряженные частицы в кристалле попадают в силовые линии внешнего поля и потому смещаются из равновесных своих положений так, чтобы создать поле, противоположное внешнему полю. Это поле характеризуют вектором поляризации кристалла  $\bar{P}$ . Таким образом, в каждой точке кристалла действует поле электрической индукции  $\bar{D} = \bar{E} + 4\pi\bar{P}$ , которое характеризует и величину внешнего электрического поля и поле поляризации кристалла. Если кристалл является диэлектрическим, а внешнее поле постоянно во времени, то справедливы следующие уравнения, характеризующие электростатическое состояние кристалла:

$$\text{rot } \bar{E} = 0, \quad (1.2)$$

$$\text{div } \bar{D} = 4\pi\rho,$$

где  $\rho$  - плотность свободных зарядов. Из уравнения (1.2) следует существование потенциала  $\varphi$  электростатического поля:  $\bar{E} = -\text{grad}(\varphi)$ . Внутри кристалла - диэлектрика, где свободные носители отсутствуют:  $\text{div } \bar{D} = 0$ .

Приведенные соотношения в равной мере применимы к однородным и неоднородным, изотропным и анизотропным диэлектрикам. Специфические свойства данного диэлектрика: его однородность или неоднородность, изотропия или анизотропия, его количественные диэлектрические характеристики - все это проявляется исключительно в зависимости индукции  $\bar{D}$  или поляризации  $\bar{P}$  от напряженности  $\bar{E}$ .

Таким образом, все характерные черты кристалла спрятаны в величине и

направлении вектора поляризации  $\bar{P}$ . Физической причиной его появления является внешнее электрическое поле  $\bar{E}$ . Если рассматриваемый кристалл изотропен, то его точечной группой симметрии является группа  $\infty m$ . Внешнее электрическое поле имеет симметрию полярного вектора  $\infty m$ . Поэтому симметрия изотропной среды в электрическом поле будет также  $\infty m$ . Поляризация любой среды наблюдается вдоль особенного, выделенного полярного направления. В симметрии изотропной среды такого направления нет, но наложение внешнего поля выделяет среди других направление, совпадающее с направлением электрического поля. Значит, только вдоль него может поляризоваться изотропная среда.

Для того чтобы найти связь между величиной внешнего поля и поляризацией кристалла воспользуемся условием малости приложенного электрического поля по сравнению с внутрискристаллическим полем решетки. Тогда в разложении неизвестной нам зависимости  $\bar{P}(\bar{E})$  по малому электрическому полю

$$\bar{P}(\bar{E}) = \bar{P}^s + \left( \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{E}} \right)_{E=0} \cdot \bar{E} + \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{\partial^2 \bar{P}}{\partial \bar{E}^2} \right)_{E=0} \bar{E}^2 + \dots$$

можно ограничиться только первыми двумя членами. Первый член этого разложения описывает спонтанную поляризацию кристалла, т.е. поляризацию, существующую в отсутствие внешнего поля. Однако в изотропном теле  $\bar{P}^s = 0$ , т.к. в нем нет выделенного полярного направления. Тогда

$$\bar{P}(\bar{E}) \approx \left( \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{E}} \right)_{E=0} \cdot \bar{E} = \epsilon \cdot \bar{E}$$

где

$$\epsilon = \left( \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{E}} \right)_{E=0}$$

полярный тензор второго ранга, называемый тензором **поляризуемости** или

**диэлектрической восприимчивости.** В изотропной среде он является шаровым.

Таким образом, приходим к выводу, что в изотропной среде вектор поляризации параллелен (совпадает) с вектором  $\bar{E}$ :  $\bar{P} = \alpha \cdot \bar{E}$ , где  $\alpha$  - скаляр. Чтобы обобщить это соотношение на анизотропные среды, надо помнить, что при переходе к анизотропным материалам необходимо использовать общее выражение для разложения вектора поляризации:

$$\bar{P}(\bar{E}) = \bar{P}^s + \left( \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{E}} \right)_{\bar{E}=0} \cdot \bar{E} + \dots$$

где тензор второго ранга

$$\epsilon = \left( \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{E}} \right)_{\bar{E}=0}; \quad \alpha_{ik} = \left( \frac{\partial P_i}{\partial E_k} \right)_{E=0}$$

зависит от симметрии элементарной ячейки рассматриваемого кристалла и потому не является шаровым - в нем скрыты особенности электрических свойств кристалла конкретной симметрии.

Отметим одно важное различие между рассмотренными здесь тензорами: вектора  $\bar{E}$ ,  $\bar{P}$ ,  $\bar{D}$  характеризуют электрическое поле в кристалле, все они меняются с изменением этого поля. Напротив, векторы спонтанной поляризации  $\bar{P}^s$ , спонтанной индукции  $\bar{D}^s$ , а также тензоры диэлектрической восприимчивости  $\epsilon$  и диэлектрической проницаемости  $\epsilon = 1 + 4\pi\epsilon$  не изменяются при изменении электрического поля в кристалле - они характеризуют диэлектрические свойства самого кристалла. Тензоры первого типа (т.е.  $\bar{E}$ ,  $\bar{P}$ ,  $\bar{D}$ ) называют **полевыми тензорами**, т.к. характеризуют поле, а тензоры  $\epsilon$ ,  $\epsilon$  - **материальными тензорами**, т.к. они характеризуют кристалл.

Полевые тензоры для изотропных и анизотропных сред определяются одинаково, но все различие между физикой изотропных и анизотропных сред заключено в виде материальных тензоров.

### **1.3 Пироэлектрический и пиромагнитный эффекты в кристаллах**

Среди многообразия физических явлений, описываемых с помощью тензоров первого ранга (см. выражения (1.1.1) - (2.2.2)), рассмотрим лишь несколько эффектов, наиболее важных в практическом отношении. Хотя их количество нетрудно увеличить, изменяя физическую реализацию полярного или аксиального вектора в данном кристалле, скаляра или псевдоскаляра.

**Пироэлектрический эффект.** Среди кристаллических диэлектриков известна группа монокристаллов, у которых «центры тяжести» зарядов положительных и отрицательных ионов в элементарной ячейке взаимно смещены, так что каждая элементарная ячейка кристалла представляет собой электрический диполь: даже в отсутствие внешних электрических и механических полей. Решетку такого диэлектрика можно представлять как результат объединения двух различных решеток: одна из них образована положительными ионами, а другая – отрицательными. Таким образом, каждая элементарная ячейка представляет собой элементарный электрический диполь. В направлении ориентации этих элементарных диполей кристалл обнаруживает электрические полюса, откуда и произошло название этих кристаллов - **полярные диэлектрики**. Электрические полюса у кристалла не могут существовать в свободном состоянии долго: с течением времени связанные заряды на поверхностях кристалла притягивают как из объема кристалла, так и из окружающей атмосферы противоположно заряженные ионы. В результате по истечению некоторого времени (от нескольких часов до нескольких суток) заряды на поверхностях кристалла оказываются заэкранированными

адсорбированными ионами, и кристалл оказывается нейтральным.

Теперь для обнаружения спонтанной поляризации кристалла необходимо нарушить электрическое равновесие между связанными поверхностными зарядами и адсорбированными зарядами. Для этого изменяют температуру кристалла, из-за чего каждая из решеток изменяет свои размеры в соответствии со своими коэффициентами линейного расширения – решетки разные и потому коэффициенты теплового расширения также разные. В результате одна решетка изменяет свои линейные размеры на большую величину, чем другая. Значит, изменяется расстояние между центрами отрицательного и положительного зарядов в каждой элементарной ячейке кристалла пьезоэлектрика. Это приводит к изменению величины дипольного момента и, как итог, к изменению величины связанного поверхностного заряда кристалла. Это изменение заряда создает дополнительное электрическое поле, которое не скомпенсировано адсорбированными ионами. Его можно зарегистрировать, например, поместив пластинку диэлектрика между обкладками плоского конденсатора. Количественной мерой этого состояния принято считать спонтанную поляризацию  $\bar{P}^S$ , равную его дипольному моменту, отнесенному к объему полярного диэлектрика.

Поскольку величина электрической поляризации полярных диэлектриков зависит от температуры, их называют **пьезоэлектриками** (от греческого слова «пиро» - огонь). О величине возможной спонтанной поляризации  $\bar{P}^S$  можно судить по следующему факту: для лучших пьезоэлектриков величина напряжения, возникающего на кристалле при изменении температуры на 1 К, достигает 10 кВ.

Благодаря наличию спонтанной поляризации на противоположных гранях пластинки, вырезанной из пьезоэлектрика, находятся связанные заряды. Их плотность  $\sigma$  зависит от величины и направления вектора спонтанной поляризации относительно граней пластины:

$$\sigma = \left( \bar{P}^S \cdot \bar{n} \right) = \left| \bar{P}^S \right| \cdot \cos \alpha, \quad (1.3)$$

где  $\bar{n}$  - единичный вектор нормали к поверхности пластинки,  $\alpha$  - угол между векторами  $\bar{n}$  и  $\bar{P}^S$ . Если происходит небольшое изменение температуры  $\Delta T$ , одинаковое во всех точках кристалла, изменение вектора спонтанной поляризации  $\Delta \bar{P}^S$  пропорционально изменению температуры:

$$\Delta \bar{P}^S = \bar{\gamma} \cdot \Delta T, \quad (1.4)$$

где  $\bar{\gamma}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$  - **вектор пьезоэлектрических коэффициентов**. Его компоненты считаются положительными, если возрастание температуры приводит к увеличению спонтанной поляризации.

Сопутствующие явления. Для пластины пьезоэлектрика, вырезанной перпендикулярно полярной оси, пространственную локализацию сопутствующих явлений можно несколько условно связать с объемом пьезоэлектрика, с приповерхностными областями и с собственно поверхностью. Полярное состояние привносит в объем диэлектрика уникальные свойства:

\* электропроводность пьезоэлектрика существенно отличается для случаев наложения внешнего поля вдоль и против направления спонтанной поляризации, т. е. омическая проводимость кристалла пьезоэлектрика в зависимости от направления внешнего электрического поля относительно вектора спонтанной поляризации различна;

\* освещение кристалла белым светом или более коротковолновым излучением создает постоянное поле порядка  $1 \text{ кВ} \cdot \text{см}^{-2}$  на электродах полярного среза пьезоэлектрика (фотовольтаический эффект).

Оба эти сопутствующие эффекта имеют место в высокосовершенных кристаллах, т. е. их появление обусловлено фундаментальными причинами, а не присутствием различного рода дефектов.

**Электрокалорический эффект.** Из термодинамических соображений следует существование эффекта, обратного пьезоэлектрическому. Он заключается в изменении температуры пьезоэлектрика при действии на него электрического поля и носит название электрокалорического эффекта. Его уравнение таково:

$$\Delta T = \bar{q} \cdot \Delta \bar{E}, \quad (1.5)$$

где вектор электрокалорических коэффициентов  $\bar{q}$  связан с вектором пьезоэлектрических коэффициентов соотношением:

$$\bar{q} = - \frac{\bar{\gamma} \cdot T}{\rho \cdot c \cdot J} \quad (1.6)$$

Здесь  $\rho$  и  $c$  - соответственно плотность и теплоемкость кристалла,  $J$  - механический эквивалент тепла ( $J = 4.18 \cdot 10^7$  эрг·кал). По существу это коэффициент перевода величины  $\bar{q}$  из системы единиц СГСЕ в систему СИ.

С учетом выражения для вектора электрокалорических коэффициентов основное выражение (1.5) для электрокалорического эффекта можно переписать в виде

$$\Delta T = - \frac{T}{\rho \cdot c \cdot J} \bar{\gamma} \cdot \Delta \bar{E}. \quad (1.7)$$

Отсюда следует, что когда компоненты вектора  $\bar{\gamma}$  положительны, а вектор  $\Delta \bar{E}$  совпадает с  $\bar{P}^S$ , компоненты вектора  $\bar{q}$  будут отрицательны, т.е. увеличение поляризации за счет действия  $\Delta \bar{E}$  приведёт к снижению температуры пьезоэлектрика.

**Пироманитный эффект.** Наряду с пьезоэлектрическим эффектом в кристаллах существует пироманитный эффект, представляющий собой изменение спонтанной намагниченности кристалла  $\bar{I}^S$  при изменении

температуры кристалла -  $\Delta T$ :

$$\overline{P^S} = \overline{k} \cdot \Delta T, \quad (1.8)$$

где  $\overline{k}(k_1, k_2, k_3)$  - вектор пирромагнитных коэффициентов. Поскольку спонтанная намагниченность описывается аксиальным вектором, то и  $\overline{k}$  является также аксиальным вектором. Это обстоятельство принципиальным образом отличает рассматриваемый эффект от пирозлектрического. Согласно принципу Неймана, кристаллы, в которых наблюдается пирромагнитный эффект, имеют группы симметрии, являющиеся подгруппами предельной группы  $\infty/m$  (группа симметрии магнитного поля).

#### 1.4 Сегнетоэлектрики и их свойства

Сегнетоэлектриками называются кристаллические вещества, у которых в определённом интервале температур и (или) механических напряжений в отсутствие внешнего электрического поля возникает спонтанная поляризация, направление которой может быть изменено электрическим полем и в ряде случаев - механическими напряжениями. Впервые сегнетоэлектрические свойства открыты у сегнетовой соли, откуда и возникло это название эффекта поляризации. В зависимости от температуры сегнетоэлектрика он может находиться в двух модификациях: **сегнетофазе** и **парафазе**. Их разделяет критическая температура, называемая **температурой Кюри**  $T_k$ . Если температура кристалла  $T < T_k$ , то кристалл находится в сегнетофазе, когда в кристалле самопроизвольно возникает спонтанная поляризация большой величины. Эта поляризация возникает за счет внутренних процессов в кристалле. Однако стремление кристалла минимизировать свою энергию приводит к тому, что весь кристалл, как правило, разбивается на отдельные области – домены, в каждой из которых направление вектора поляризации отличается от его направления в соседних областях. Размеры доменов

колеблются от единиц до тысяч микрон. Направление поляризации в доменах не произвольное, а определяется симметричными свойствами элементарной ячейки сегнетоэлектрика. По этой причине конечное число возможных значений углов между векторами поляризации, а также действие принципа минимизации полной энергии приводят к тому, что доменная структура сегнетоэлектрика имеет также некоторую симметрию, образуя определенный рисунок доменных границ.

Казалось бы, что разбиение кристалла на очень малые домены понизит полную энергию кристалла до сколь угодно малых значений. Однако разбиение на домены происходит до вполне определенных размеров, после которых прекращается. Это связано с тем, что на образование стенок домена необходима энергия. По мере увеличения числа доменов увеличивается энергия, необходимая для образования доменных стенок, и, таким образом, конечная доменная структура кристалла определяется «энергетическим компромиссом» между этими двумя факторами.

Следует отметить, что в сегнетофазе весь кристалл имеет совершенную кристаллическую структуру.

При повышении температуры выше температуры Кюри сегнетоэлектрик испытывает фазовый переход, сопровождающийся исчезновением спонтанной поляризации и изменением симметрии кристаллической решетки. В этой фазе (парафазе) кристалл имеет другую точечную группу симметрии, в которой спонтанной поляризации нет.

Каковы же причины мощной спонтанной поляризации сегнетоэлектриков? Чтобы понять это необходимо знание атомной структуры его элементарной ячейки и ее изменений при фазовых переходах «сегнетофаза - парафаза». Рассмотрим этот вопрос на примере типичного сегнетоэлектрика - титаната бария ( $\text{BaTiO}_3$ ). Его температура Кюри составляет  $120^0$  С. Его элементарная ячейка имеет симметрию куба, в вершинах которого находятся дважды ионизованные ионы  $\text{Ba}^{2+}$ . Однако кубическая ячейка этого кристалла

является гранецентрированной, так что в центре всех шести граней находятся дважды ионизованные ионы кислорода  $O^{2-}$  - образуется кислородный октаэдр. Наконец, в центре куба находится четырехкратно ионизованный ион титана  $Ti^{4+}$ . Важно, что размеры элементарной ячейки больше удвоенной суммы ионных радиусов титана и кислорода. По этой причине у иона титана имеется некоторая свобода перемещения в пределах кислородного октаэдра.

При высоких температурах (в парафазе) вследствие интенсивного теплового движения ион титана непрерывно перебрасывается от одного иона кислорода к другому. Усредненное по времени его положение совпадает с геометрическим центром ячейки и потому она не обладает дипольным моментом. При низких температурах (в сегнетофазе) энергии теплового движения недостаточно для перебрасывания иона титана и потому он локализуется вблизи одного иона кислорода. В результате этого нарушается кубическая симметрия расположения частиц в элементарной ячейке, и она приобретает дипольный момент. Одновременно с этим она искажается – ячейка вытягивается вдоль направления, соединяющего центры сблизившихся ионов кислорода и титана. Понижает кубическую симметрию титаната бария с кубической симметрии до тетрагональной. Это создает шесть возможных направлений вектора спонтанной поляризации. Существует еще один механизм формирования спонтанной поляризации при низких температурах: за счет упорядочения ориентации дипольных групп, занимающих в парафазе несколько равнозначных положений. Взаимодействие заряженных частиц соседних ячеек приводит к однонаправленному выстраиванию их дипольных моментов – так образуется домен. Если при температуре кристалла выше температуры Кюри на него наложить сильное внешнее электрическое, а затем охладить кристалл в поле, то оно задаст направление спонтанной поляризации во всем кристалле, который в этом случае будет однодоменным. Полученная таким способом спонтанная поляризация будет иметь максимальную величину, которую можно охарактеризовать диэлектрической проницаемостью в сотни тысяч единиц.

Отметим, что в классических пьезоэлектриках ионы в элементарной ячейке

кристалла или дипольные группы жестко закреплены во всей температурной области существования твердого состояния. В этом случае внешние электрические поля и механические напряжения не в состоянии переориентировать  $\bar{P}^S$ .

## 1.5 Симметрия электрических свойств кристаллов

Итак, кристаллы некоторых групп точечной симметрии могут обладать электрической поляризацией в отсутствие внешнего электрического поля. Такая поляризация называется спонтанной, а кристаллы, обладающие ею - пьезоэлектриками. Выясним, к каким точечным группам симметрии принадлежат пьезоэлектрики.

I. Спонтанная поляризация описывается вектором, значит, ее симметрия совпадает с симметрией полярного вектора и характеризуется группой  $\infty m$ . Точечные группы симметрии пьезоэлектрических кристаллов, согласно принципу Неймана, должны быть подгруппами этой группы, так что из всех элементов симметрии им разрешено обладать одной осью симметрии любого порядка и проходящими вдоль ее плоскостями симметрии. Из 32 кристаллографических и семь предельных групп этому условию удовлетворяют десять точечных групп симметрии и две предельные группы:

$$1, 2, 3, 4, 6, m, mm2, 3m, 4mm, 6mm; \infty, \infty m.$$

Если у пьезоэлектрика есть ось симметрии или плоскость симметрии, то вектор спонтанной поляризации должен быть направлен по этой оси или лежать в этой плоскости. Поэтому в кристаллах точечной симметрии  $m$ , в соответствии с правилами выбора кристаллофизической системы координат, вектор спонтанной поляризации имеет вид:

$$\bar{P}^S = P_1^S \cdot \bar{e}_1 + P_3^S \cdot \bar{e}_3$$

в кристаллах точечной группы симметрии 2 вектор спонтанной поляризации

направлен по оси симметрии:  $\bar{P}^s = P_2^s \cdot \bar{e}_2$ , в кристаллах точечной группы симметрии 3, 4, 6,  $mm2$ ,  $3m$ ,  $4mm$ ,  $6mm$  и в текстурах - вид  $\bar{P}^s = P_3^s \cdot \bar{e}_3$ . Лишь для кристаллов точечной группы симметрии 1  $\bar{P}^s$  в кристаллофизической системе координат самый общий вид. При изменении внешних условий, например температуры, вектор спонтанной поляризации, вообще говоря, изменяется. Однако эти изменения существенно ограничены симметрией кристалла: в кристаллах с осью симметрии  $\bar{P}^s$  изменяется только по длине при неизменном направлении по оси симметрии. В кристаллах же класса  $m$  вектор  $\bar{P}_0$  может менять величину и направление, оставаясь в плоскости симметрии  $m$ .

Пиромагнитный эффект наблюдается в кристаллах, точечная группа симметрии является подгруппой группы аксиального вектора. Их всего 15 и это следующие группы:

$$1, 2, 3, 4, 6, \bar{1}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}, m, 2/m, 4/m, 6/m, \infty, \infty/m,$$

т.е. всего 15 групп. Часть их одновременно являются подгруппами группы  $\infty m$ , т.е. в этих кристаллах наряду с пиромагнитным эффектом возможен также пироэлектрический эффект.

Расположение вектора спонтанной намагниченности также определяется выделенным направлением в кристалле, но в отличие от пироэлектрического эффекта это направление не обязательно является полярным: оно может иметь центр симметрии. Вектор спонтанной намагниченности направлен по осям симметрии, а в группе  $m$  он находится в плоскости симметрии. Только в кристаллах триклинной сингонии положение вектора намагниченности не определено элементами симметрии.

## 2. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ВТОРОГО РАНГА

### 2.1. Введение тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики

Рассмотрим общие условия, приводящие к тензорам второго ранга, используемым в кристаллофизике для описания физических свойств кристаллов. При этом в линейном уравнении, описывающем следствие  $S$  физического воздействия на кристалл  $W$

$$S = \hat{T} \cdot W, \quad (2.1)$$

ранг тензора  $S$  левой части выражения (5.1) равен рангу правой части, представляющего собой свертку (суммирование по одинаковым индексам) тензоров физического свойства и воздействия  $W$  и потому равного разности рангов этих тензоров. Тогда ранг вводимого тензора равен сумме рангов тензоров, описывающих воздействие ( $r_W$ ) и следствие ( $r_S$ ):  $R = r_S + r_W$ . Возможные комбинации с рангами тензоров  $S$  и  $W$ , а также с их полярной или аксиальной природой перечислены в таблице 2.

Таблица 2. Варианты эффектов на физические свойства второго ранга

Ранги $r_W$ и $r_S$	Причина $W$	Следствие $S$	Природа тензора
$r_W=0,$ $r_S=2$	1.1. Скаляр	1.1.1. Полярный тензор	Полярный
		1.1.2. Аксиальный тензор	Аксиальный
	1.2. Псевдоскаляр	1.2.1. Полярный тензор	Полярный
		1.2.2. Аксиальный тензор	Аксиальный

$r_W=1,$ $r_S=1$	2.1. Полярный вектор	2.1.1. Полярный вектор	Полярный
		2.1.2. Аксиальный вектор	Аксиальный
	2.2. Аксиальный вектор	2.2.1. Полярный вектор	Аксиальный
		2.2.2. Аксиальный вектор	Полярный
$r_W=2,$ $r_S=0$	3.1. Полярный тензор	3.1.1. Скаляр	Полярный
		3.1.2. Псевдоскаляр	Аксиальный
	3.2. Аксиальный тензор	3.2.1. Скаляр	Аксиальный
		3.2.2. Псевдоскаляр	Полярный

Результаты этой таблицы можно представить в виде тензорных уравнений (2.1).

Для этого введем следующие обозначения:

- скаляр обозначим  $Sc$ , а псевдоскаляр -  $\overset{0}{Sc}$ ;
- полярный вектор обозначим  $\bar{V}$ , а псевдовектор -  $\overset{0}{V}$ ;
- полярный тензор второго ранга обозначим -  $\bar{\bar{P}}$ ;
- аксиальный тензор второго ранга -  $\overset{00}{A}$ .

Тогда получим:

$$1.1.1. \bar{\bar{P}} = \bar{\epsilon} \cdot Sc; \quad 1.1.2. \overset{00}{A} = \bar{\epsilon} \cdot Sc;$$

$$1.2.1. \bar{\bar{P}} = \bar{\epsilon} \cdot \overset{0}{Sc}; \quad 1.2.2. \overset{00}{A} = \bar{\epsilon} \cdot \overset{0}{Sc};$$

$$2.1.1. \bar{V}_S = \bar{\epsilon} \cdot \bar{V}_W; \quad 2.1.2. \overset{0}{V} = \bar{\epsilon} \cdot \bar{V};$$

$$2.2.1. \bar{V} = \bar{\epsilon} \cdot \overset{0}{V}; \quad 2.2.2. \overset{0}{V}_S = \bar{\epsilon} \cdot \overset{0}{V}_W;$$

$$3.1.1. Sc = \overline{\overline{\epsilon}} \cdot \overline{P}; \quad 3.1.2. Sc = \overline{\overline{\epsilon}} \cdot A^{00};$$

$$3.2.1. Sc^0 = \overline{\overline{\epsilon}} \cdot \overline{P}; \quad 3.2.2. Sc^0 = \overline{\overline{\epsilon}} \cdot A^{00}.$$

Этими уравнениями описываются все возможные ситуации в кристаллах с воздействиями и реакциями кристаллов, когда проявляемое кристаллом высокоранговое свойство описывается полярным или аксиальным тензором второго ранга. Пользуясь ими, можно предсказывать новые свойства кристаллов, а также определять природу тензора, с помощью которого это свойство описывается. Ниже мы увидим, как эффективно можно предсказывать новые свойства кристаллов второго ранга. Трудность же предсказания новых свойств заключается в определении физической природы нового воздействия и регистрируемого следствия.

### Общий случай

Рассмотрим конкретные реализации приведенной выше схемы введения тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики.

**Полярные тензоры.** Полярные тензоры второго ранга образуются тогда, когда в причинно-следственной связи, описываемой линейной зависимостью вида (2.1), и причина, и следствие одновременно являются или полярными, или аксиальными тензорами нулевого, первого или второго ранга.

1. Если на кристалл действует внешняя причина, описываемая полярным вектором  $\overline{W}$ , а регистрируется полярная величина, описываемая полярным вектором  $\overline{S}$ , то при наличии между причиной и следствием линейной зависимости  $\overline{S} = \hat{T} \cdot \overline{W}$  вида (2.2.1) коэффициенты этой зависимости образуют полярный тензор второго ранга  $\hat{T}$ .

*Пример:* при воздействии на кристалл электрического поля  $\overline{E}$  в нем возникает электрический ток  $\overline{j}$ , так что  $\overline{j} = \overline{\overline{\epsilon}} \cdot \overline{E}$ . Согласно описанному выше, тензор второго ранга  $\overline{\overline{\epsilon}}$  является полярным тензором.

2. Если причина  $W$  и следствие  $S$  описываются аксиальными векторами первого ранга, то в причинно-следственной зависимости (2.2.2) тензор  $\hat{T}$  будет также полярным тензором второго ранга.

*Пример:* при воздействии на кристалл магнитного поля  $\overset{\circ}{H}$  в нем возникает магнитная индукция  $\overset{\circ}{B}$ , так что  $\overset{\circ}{B} = \overset{\circ}{\epsilon} \cdot \overset{\circ}{H}$ . Согласно изложенному, тензор второго ранга  $\overset{\circ}{\epsilon}$  представляет собой полярный тензор второго ранга.

3. Полярный тензор второго ранга может быть введен в рассмотрение, если скалярное воздействие  $T$  (полярный тензор нулевого ранга) вызывает следствие, описываемое полярным тензором второго ранга  $\epsilon$ , и имеет место линейная связь между причиной и следствием вида (1.1.1):  $\epsilon = \overset{\circ}{\epsilon} \cdot T$ . Здесь тензор  $\overset{\circ}{\epsilon}$  будет полярным тензором второго ранга. Обратная ситуация: если причина, описываемая полярным тензором второго ранга, вызывает следствие, описываемое скаляром, то в зависимости (3.3.2) коэффициенты их связи также образуют полярный тензор второго ранга.

*Пример:* Изменение температуры кристалла  $\Delta T$  вызывает его деформацию, описываемую тензором упругой деформации  $\epsilon$  - тензором второго ранга, и имеет место линейное соотношение  $\epsilon = \overset{\circ}{\epsilon} \cdot \Delta T$ . Связь между ними описывается полевым тензором второго ранга  $\overset{\circ}{\epsilon}$ , называемым тензором теплового расширения кристалла.

**Аксиальные тензоры.** Аксиальные тензоры второго ранга образуются, если в причинно-следственной связи (2.1) либо причина, либо следствие описывается аксиальным тензором нулевого, первого или второго ранга, а вторая величина - полярным тензором соответствующего ранга. Наглядной иллюстрацией физического свойства, описываемого аксиальным тензором второго ранга, является магнитная индукция в анизотропной среде, когда протекание тока (причина - полярный вектор) приводит к появлению магнитного поля (следствие - аксиальный вектор). Рассмотрим способы введения аксиальных тензоров подробнее.

1. Тензор  $\hat{T}$  будет аксиальным тензором второго ранга, если одна из величин: воздействие  $W$  или следствие  $S$ , будет аксиальным вектором, а вторая будет описываться полярным вектором. Связь этих величин будет описываться выражением вида (2.2.1) или (2.1.2), соответственно.

*Пример:* к кристаллу приложили электрическое поле  $\bar{E}$  в результате чего в нем возникла магнитная индукция  $\overset{\circ}{B}$ , величина которой линейно связана с  $\bar{E}$ :  $\overset{\circ}{B} = \overset{\circ}{\epsilon} \cdot \bar{E}$ . Тензор второго ранга  $\overset{\circ}{\epsilon}$  будет представлять собой аксиальный тензор второго ранга. Другая ситуация, когда причина описывается аксиальным тензором, а следствие - полярным:  $\bar{E} = \overset{\circ}{\epsilon} \cdot \overset{\circ}{B}$ , также приводит к аксиальному тензору второго ранга  $\overset{\circ}{\epsilon}$ .

2. Другой класс физических явлений, описываемых аксиальными тензорами второго ранга, может быть введен, если в приведенных выражениях причиной считать скаляр или псевдоскаляр, а следствие - аксиальным или полярным тензором второго ранга. Данные ситуации описываются зависимостями вида (1.1.2) - (1.2.2).

### Частные случаи

Возможны также частные физические ситуации, приводящие к тензорам второго ранга, когда причиной является действие двух векторов: полярных  $(\bar{E}, \bar{P})$ , аксиальных  $(\overset{\circ}{H}, \overset{\circ}{A})$  или одного полярного и одного аксиального, а следствием является полевой тензор нулевого ранга - скаляр  $T$  или аксиальный тензор нулевого ранга - псевдоскаляр  $\varphi$  (мнимая часть комплексного числа):

$$S = \overset{\circ}{\epsilon} \cdot W_1 \cdot W_2.$$

Другой вариант этой ситуации – одна из причин, например,  $W_1$ , является скаляром или псевдоскаляром, а другая причина – вектор или псевдовектор. Во всех этих случаях ранг тензора  $\overset{\circ}{\epsilon}$  будет равен  $R = r_S + r_{W_1} + r_{W_2} = 2$ , а схема

определения его природы аналогична примененной при составлении таблицы 7.

На физическом уровне рассмотренные частные случаи соответствуют описанию принципиально низкорангового явления, наблюдаемого в сложных условиях. Например, рассматривается электрокалорический эффект, когда к кристаллу наряду с электрическим полем приложено магнитное. В этом случае суммарное изменение температуры кристалла будет определяться электрокалорическим и, возможно, магнитнокалорическим эффектами, а также сверхэффектом от суммарного действия этих двух полей. Именно последняя составляющая будет описываться тензором второго ранга.

Продемонстрируем применение схемы определения природы тензора  $\mathcal{F}$  на конкретных примерах.

В линейной зависимости скалярного следствия и двух полярных причин  $\bar{E}$  и  $\bar{P}$

$$S = \left( \frac{\partial^2 S}{\partial E_i \partial P_j} \right)_0 \cdot E_i \cdot P_j,$$

вторые производные  $\left( \frac{\partial^2 S}{\partial E_i \partial P_j} \right)_0$  образуют полярный тензор второго ранга. Аналогично будем иметь, если оба причинных вектора аксиальные. Если же один из причинных векторов будет полярным, а другой аксиальным, то при наблюдении скалярного результата коэффициенты линейной зависимости образуют аксиальный тензор второго ранга, например:

$$S = \left( \frac{\partial^2 S}{\partial E_i \partial R_j} \right)_0 \cdot E_i \cdot A_j,$$

где вторые производные  $\left( \frac{\partial^2 S}{\partial E_i \partial A_j} \right)_0$  образуют аксиальный тензор второго ранга.

## 2.2. Постоянный электрический ток и электропроводность кристалла

В проводящих кристаллах при наличии электрического поля  $\bar{E}$  возникает электрический ток плотностью  $\bar{j}$ . Величина этого тока может быть найдена из закона Ома:

$$\bar{j}(\bar{E}) \approx \bar{j}_0 + \left( \frac{\partial \bar{j}}{\partial \bar{E}} \right)_{E=0} \cdot \bar{E} \quad (2.2)$$

Наличие в кристалле постоянного тока без действия внешнего электрического поля противоречит законам термодинамики и потому первое слагаемое в этом выражении должно быть приравнено к нулю. Следовательно, в слабых электрических полях величины компонент возникающего электрического тока связаны линейным соотношением с компонентами приложенного электрического поля:  $j_k = \sigma_{kl} E_l$ . Коэффициенты линейной зависимости

$$\sigma_{kl} = \left( \frac{\partial j_k}{\partial E_l} \right)_{E=0}$$

в соответствии с правилами определения природы тензора и его ранга образуют полярный тензор второго ранга. Данный тензор симметричный. Его называют **тензором удельной электропроводности**, а тензорную зависимость

$$\bar{j} = \underline{\epsilon} \cdot \bar{E} \quad (2.3)$$

**законом Ома для анизотропной среды.** Можно рассмотреть обратную зависимость к (5.3):  $\bar{E} = \underline{\epsilon}^{-1} \cdot \bar{j}$ , где тензор второго ранга  $\underline{\epsilon}^{-1}$  является обратным по отношению к тензору удельной электропроводности и называется **тензором удельного сопротивления**.

Термодинамика необратимых процессов позволяет сформулировать требование на компоненты тензора проводимости: компоненты тензоров  $\underline{\epsilon}$  и  $\underline{\epsilon}^{-1}$  должны быть симметричными и положительными из свойства обратимости  $\bar{j}$  и

$\bar{E}$ : трудно представить себе однородный совершенный по строению кристалл, в котором значение электропроводности изменяется при смене полярности питающего постоянного напряжения на противоположное.

Основные уравнения постоянного тока в кристаллах такие же, как и в изотропных средах:

$$\operatorname{rot} \bar{E} = 0, \quad \bar{E} = -\operatorname{grad} \varphi, \quad \operatorname{div} \bar{j} = 0.$$

Здесь последнее уравнение устанавливает отсутствие расходимости или сходимости вектора тока. При протекании тока в единице объема проводящего материала выделяется джоулево тепло, величина которого в единичном объеме кристалла определяется как скалярное произведение тока и напряженности электрического поля:  $Q = \bar{E} \cdot \bar{j}$ .

### 2.3. Влияние симметрии на вид тензора второго ранга

Рассмотрим влияние точечной симметрии кристалла на вид тензора второго ранга, описывающего полярное физическое свойство. Ввиду общности подхода к любым полярным тензорам второго ранга разберем этот вопрос на конкретном примере: тензоре диэлектрической восприимчивости.

Тензор диэлектрической восприимчивости  $\epsilon$ , как и всякий симметричный тензор второго ранга, обладает тремя собственными значениями. В системе координат, построенной на собственных векторах, любой тензор второго ранга приобретает диагональный вид. При этом на диагонали расположены собственные значения данного тензора. Если все они различны, то симметрия тензора описывается точечной группой  $mmm$ , если два значения совпадают, то предельной группой  $\infty/mmm$ , если все три значения совпадают -  $\infty\infty m$ . Этот вывод получен при рассмотрении примеров в методе прямой проверки в декартовых координатах (п. 3.5.4).

1. Выясним, какие кристаллы могут иметь тензор  $\epsilon$  с тремя различными

значениями. Точечные группы симметрии таких кристаллов, согласно принципу Неймана, либо являются подгруппами группы  $mmm$ , либо совпадают с ней. Этому требованию удовлетворяют все кристаллы низшей категории.

2. Сложнее вопрос для тензора  $\hat{\epsilon}$ , два собственных значения которого совпадают. Его вид следующий:  $\hat{\epsilon} = \alpha_{\perp} \cdot \hat{E} + (\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}) \hat{k}k$ . Точечные группы симметрии кристаллов, тензор диэлектрической восприимчивости имеет такую структуру, должны быть подгруппами предельной группы симметрии  $\infty/mmm$ . Такими группами точечной симметрии обладают кристаллы средней категории и текстуры. У них два собственных значения тензора  $\hat{\epsilon}$  обязательно совпадают.

Однако и точечные группы кристаллов низшей категории также являются подгруппами группы  $\infty/mmm$ , хотя тензор диэлектрической восприимчивости таких кристаллов должен иметь три различных собственных значения, но симметрия кристаллов не запрещает совпадения двух из них. Однако материальные тензоры зависят от внешних условий, например, температуры. Если у кристаллов низшей категории при некоторой температуре два собственных значения совпадают, при другой температуре они будут обязательно различны. Значит, незаконно высокая симметрия тензора  $\hat{\epsilon}$  присуща не данному кристаллу вообще, а лишь кристаллу в строго определенных условиях. При изменении внешних условий, в частности, температуры эта симметрия тензором будет утрачена.

Таким образом, в общем случае тензор диэлектрической восприимчивости любого кристалла средней категории имеет симметрию, описываемую предельной группой  $\infty/mmm$ .

3. Тензор диэлектрической восприимчивости  $\alpha$  с тремя совпадающими собственными значениями имеет вид:  $\hat{\alpha} = \alpha \cdot \hat{I}$  и симметрию  $\infty\infty m$ . Тензором такого вида обладают кристаллы, точечные группы симметрии которых являются подгруппами группы  $\infty\infty m$ . Таковы точечные группы кристаллов высшей категории и изотропные вещества.

Тензор диэлектрической восприимчивости, как и всякий материальный тензор, зависит от внешних условий. При их изменении изменяются и его собственные значения. Однако если симметрия кристалла требует совпадения двух из них или всех трех, они продолжают совпадать и в изменившихся условиях. Ориентация собственных векторов относительно кристалла при изменении внешних условий также изменяется, если только их направление не задано симметрией кристалла. В триклинных кристаллах изменение ориентации собственных векторов никак не ограничено симметрией кристалла. В моноклинных кристаллах тот из собственных векторов, который направлен по оси симметрии или по нормали к плоскости симметрии, неподвижен, а два других могут изменяться, оставаясь перпендикулярными первому вектору. Во всех остальных кристаллах и во всех текстурах ориентация тензора диэлектрической восприимчивости полностью определяется симметрией кристалла и, следовательно, не изменяется при изменении внешних условий.

Влияние симметрии кристаллов на другие физические свойства второго ранга аналогично рассмотренному. Заметим, что собственные векторы тензоров диэлектрических свойств и электропроводности совпадают лишь тогда, когда их направления определяются элементами симметрии кристалла. Собственные же векторы  $\epsilon$  и  $\mu$  - тензоров совпадают всегда, т.к. эти тензора взаимно обратные.

## 2.4. Теплопроводность кристаллов

Если между различными частями тела поддерживать разность температур, то между этими частями будет осуществляться перенос тепла посредством теплопроводности. В изотропном теле процесс переноса тепла за счет теплопроводности описывается уравнением теплопроводности:

$$\bar{q} = -\lambda \cdot \text{grad}T ,$$

т.е. тепловой поток  $\bar{q}$  пропорционален градиенту температуры кристалла. Знак

"-" выбран из тех соображений, что распространение тепла идет от горячего участка к холодному, а градиент дает обратное направление. Обобщение этой формулы на анизотропные среды предполагает, что  $\lambda$  представляет собой тензор второго ранга (раз он связывает два вектора:  $\bar{q}$  и  $gradT$ :  $\bar{q} = -\kappa \cdot gradT$ ). Эта запись аналогична записи закона Ома:  $\bar{j} = \epsilon \cdot grad\phi$ . Отметим, что тензор теплопроводности симметричен, а все его собственные значения положительны – невозможно представить себе кристалл, в котором тепло от холодного конца течет к горячему.

Ясно, что  $div\bar{q}$  равна количеству теплоты, выходящему из единицы объема в единицу времени. Изменение же температуры единичного объема кристалла за единицу времени, вызванное уходом тепла, равно:  $-div\bar{q}/(c \cdot \rho)$  (теплоемкость единицы объема). Последняя же равна:  $c \cdot \rho$ , где  $c$  - удельная теплоемкость (единицы массы),  $\rho$  - плотность вещества. Теперь уравнение для изменения температуры тела единичного объема будет:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{c \cdot \rho} div\bar{q} = \frac{1}{c \cdot \rho} div(\kappa \cdot gradT)$$

Поскольку тензор  $\kappa$  не зависит от координат, его можно вынести за знак "div" и ввести тензор температуропроводности, определив его как:

$$\kappa = (c \cdot \rho) \cdot \epsilon$$

Тогда уравнение теплопроводности переписывается в виде:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \cdot div(gradT) \quad \text{или} \quad \frac{\partial T}{\partial t} = k_{ij} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2.4)$$

В стационарном случае, когда производная по времени равна нулю, имеем:

$$\lambda_{ij} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} = 0$$

Это уравнение полностью аналогично уравнению для электростатического потенциала  $\phi$  в электростатике. В этих условиях теплопроводность кристаллов

будет вычисляться по формулам, аналогичным для электропроводности. Здесь разности потенциалов  $U$  будет соответствовать разность температур, силе тока  $I$  - количество тепла, протекающего за 1 секунду при разнице температур в 1 К, напряженности электрического поля - взятые с обратным знаком градиент температуры, вектору плотности тока  $\vec{j}$  - вектор потока тепла.

Рассмотрим распределение температуры в кристалле при равномерном его нагревании (рис. 23), когда температура окружающей газовой среды повышается с постоянной скоростью  $h$  [К/с]. Равномерное охлаждение соответствует  $h < 0$ . После установления можно считать, что в каждой точке кристалла температура возрастает со скоростью  $h$ . Тогда решение уравнения теплопроводности (5.2) нужно искать в виде:

$$T(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) + h \cdot t.$$

Функция  $\Phi(\vec{r})$  удовлетворяет уравнению:

$$k_{ij} \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_j} = h. \quad (2.5)$$

Пусть кристаллическая пластина толщиной  $2a$  равномерно нагревается со своих по поверхностей, которые могут быть сложного профиля. Поскольку

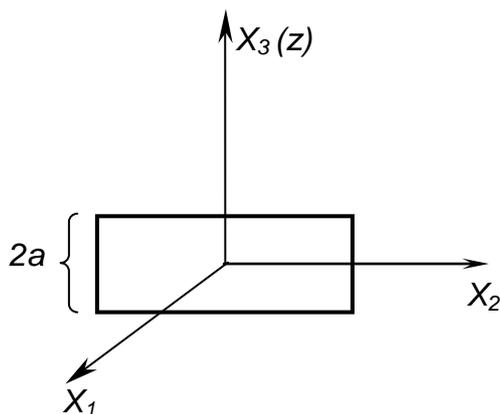


Рис.23

толщина пластины много меньше двух других её линейных размеров и интерес представляет только распределение температуры по толщине, введем координату «толщины»:  $z = \vec{n} \cdot \vec{r} = n_j \cdot X_j$ . Здесь  $\vec{n}$  - единичный вектор нормали к поверхности пластины,  $\vec{r}$  - радиус-вектор, отсчитываемый от середины пластины. Ясно, что температура - это

функция  $z$  и времени  $t$ , причем:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial x_j} = n_j \cdot \frac{\partial}{\partial z}.$$

Уравнение (2.5) переписывается в виде:

$$k_{ij} \cdot n_i \cdot n_j \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = h.$$

Так как температура с других двух сторон одинакова,  $\Phi(z) = \Phi(-z)$ , то решение этого уравнения будет иметь вид:

$$\Phi(z) = \frac{h}{2k_{ij} n_i n_j} \cdot z^2 + B,$$

где постоянная  $B$  определяется из граничных условий. В частности, если принять, что температура  $T(\pm a)$  - на границе кристалла равна температуре окружающей среды  $T_0$ , то:

$$B = T_0 - \frac{h \cdot a^2}{2k_{ij} n_i n_j}.$$

Таким образом, распределение температуры в образце описывается функцией, показывающей параболическое изменение с координатой и линейное изменение со временем:

$$T(\bar{r}, t) = T_0 + \frac{h}{2k_{ij} n_i n_j} \cdot (z^2 - a^2) + h \cdot t.$$

Это означает, что в центре пластины температура может значительно отличаться от температуры на ее гранях. Физической причиной параболического распределения температуры по толщине кристаллической пластины является конечное значение температуропроводности кристалла.

Ранее отмечалось, что тензор  $k_{ij}$  является симметричным:  $k_{ij} = k_{ji}$  (тепло по оси  $X_i$  при градиенте по оси  $X_j$  переносится также, если создать градиент по оси  $X_i$  и следить за распространением тепла по оси  $X_j$ ). Доказательство этого равенства заключено в принципе, сформулированном Онзагером.

**Принцип Онзагера:** если полярные силы  $\bar{X} X_1, X_2, X_3$  вызывают полярные потоки  $\bar{j} j_1, j_2, j_3$  и между ними имеется линейная связь,

определяемая соотношением:  $J_k = L_{km} \cdot X_m$ , то тензор  $L$  должен быть симметричным тензором второго ранга, т.е.

$$L_{km} = L_{mk}.$$

Физическая сущность этого принципа прозрачна: если связь между полярными причиной и следствием описывается линейной зависимостью, то, поменяв местами между собой их направления, получим такое же количественное соотношение между ними, что и до перестановки. Перестановка направлений даёт перестановку индексов у элементов тензора, а сохранение количественного соотношения - равенство элементов тензора до и после перестановки индексов.

Опираясь на изложенные выше выводы об определении природы тензора по известному воздействию и следствию в выражении (2.1), можно продолжить этот принцип для аксиальных тензоров, а также сочетания аксиальных и полярных тензоров.

Если аксиальные силы  $H \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ h_1 & h_2 & h_3 \end{pmatrix}$  вызывают аксиальные потоки  $A \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a_1 & a_2 & a_3 \end{pmatrix}$  и между ними имеется линейная связь, определяемая соотношением:  $a_k = N_{ks} h_s$ , то тензор  $N$  должен быть симметричным тензором второго ранга, т.е.  $N_{ks} = N_{sk}$ .

Далее, в случае полярной причины и аксиального следствия получим следующую формулировку этого принципа: если полярные силы  $\bar{Y} Y_1, Y_2, Y_3$

вызывают аксиальные потоки  $A \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a_1 & a_2 & a_3 \end{pmatrix}$  и между ними имеется линейная связь, определяемая соотношением:  $a_k = M_{km} \cdot Y_m$ , то тензор  $M$  должен быть антисимметричным тензором второго ранга, т.е.  $M_{km} = -M_{mk}$ .

## 2.5. Оптические свойства кристаллов

### 2.5.1. Электромагнитные волны в прозрачных кристаллах

Распространение электромагнитных волн в прозрачном немагнитном кристалле описывается уравнениями Максвелла:

$$\operatorname{rot} \bar{H} = \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \bar{D}}{\partial t} \quad \operatorname{rot} \bar{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \bar{H}}{\partial t} \quad (2.6)$$

$$\operatorname{div} \bar{D} = 0 \quad \operatorname{div} \bar{H} = 0.$$

и материальным уравнением:  $\bar{E} = \frac{1}{\epsilon} \cdot \bar{D}$ . Здесь  $\bar{E}$  и  $\bar{H}$  - векторы напряженности электрического и магнитного поля,  $\bar{D}$  - вектор электрической индукции,  $c$  - скорость света в вакууме. Слагаемые, соответствующие электрическому току и свободным зарядам, отсутствуют в виду того, что кристалл диэлектрический.

Если переменное электромагнитное поле распространяется в кристалле в виде плоских электромагнитных волн, зависимость полевых векторов  $\bar{E}$ ,  $\bar{D}$ ,  $\bar{H}$  от пространственных координат  $\bar{r}$  и времени  $t$  может быть описана с помощью следующих зависимостей:

$$\begin{aligned} \bar{E}(\bar{r}, t) &= \bar{E}_0 \cdot \exp \left( i\omega t + i\bar{k}\bar{r} \right) \\ \bar{D}(\bar{r}, t) &= \bar{D}_0 \cdot \exp \left( i\omega t + i\bar{k}\bar{r} \right) \\ \bar{H}(\bar{r}, t) &= \bar{H}_0 \cdot \exp \left( i\omega t + i\bar{k}\bar{r} \right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Здесь  $\omega$  - циклическая частота,  $\bar{k}$  - волновой вектор. Он перпендикулярен плоскости волнового фронта, причём волновой вектор

$$\bar{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \bar{m} = \frac{\omega}{v} \cdot \bar{m} = \frac{\omega}{c} \cdot n \cdot \bar{m},$$

так как

$$\lambda = v \cdot t = \frac{v}{f} = \frac{c}{nf} = \frac{c}{n} \frac{2\pi}{\omega}$$

где  $\bar{m}$  - единичный вектор волновой нормали,  $\lambda$  - длина волны,  $v$  - ее фазовая скорость в среде,  $n$  - показатель преломления среды:

$$n = \frac{c}{v} .$$

Для анизотропных сред пространственные соотношения между векторами  $\bar{E}$ ,  $\bar{D}$ ,  $\bar{H}$  сложнее, чем в изотропных. Эти соотношения можно найти, подставив (5.5) в выражения (5.4):

$$\bar{k} \times \bar{H} = -\frac{\omega}{c} \cdot \bar{D}, \quad \bar{k} \times \bar{E} = \frac{\omega}{c} \bar{H}, \quad (2.8)$$

$$\bar{k} \cdot \bar{H} = 0, \quad \bar{k} \cdot \bar{D} = 0 . \quad (2.9)$$

Уравнения (2.9) означают, что векторы  $\bar{D}$  и  $\bar{H}$  перпендикулярны вектору  $\bar{k}$ . Но поскольку этот же вывод следует из уравнений (2.8), то их можно в дальнейшем не рассматривать. Из уравнений (2.8) следует, что векторы  $\bar{D}$  и  $\bar{H}$  перпендикулярны вектору  $\bar{k}$ , а значит, они лежат в плоскости волнового фронта - к этому сводится условие поперечности электромагнитных волн в анизотропных средах. Кроме того, из уравнений (2.8) также следует взаимная перпендикулярность векторов  $\bar{H}$  и  $\bar{D}$ ,  $\bar{H}$  и  $\bar{E}$ . Таким образом, в анизотропной среде сохраняется ортогональность и синфазность векторов  $\bar{H}$  и  $\bar{E}$ , а также векторов  $\bar{H}$  и  $\bar{D}$ , но не сохраняется параллельность векторов  $\bar{E}$  и  $\bar{D}$ , имеющая место в изотропных средах (рис.32). Разделив обе части уравнений (2.8) на  $\frac{\omega}{c}$ , получим:

$$n \cdot [\bar{n} \times \bar{H}] = -\bar{D},$$

$$n \cdot [\bar{n} \times \bar{E}] = \bar{H} .$$

Исключив из них напряженность магнитного поля  $\vec{H}$ , получим уравнение для связи  $\vec{E}$  и  $\vec{D}$  в анизотропной среде:

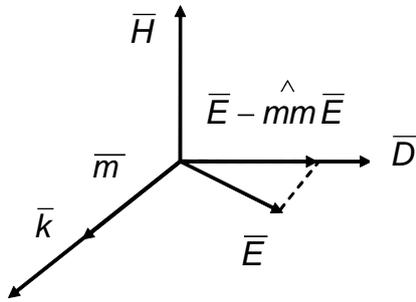


Рис.24

$$n \cdot [\vec{n} \times \vec{H}] = -\vec{D},$$

$$n \cdot [\vec{n} \times [\vec{n} \cdot \vec{m} \times \vec{E}]] = -\vec{D},$$

$$n^2 \cdot [\vec{n} \times [\vec{n} \times \vec{E}]] = -\vec{D}.$$

Последнее уравнение после алгебраических преобразований и раскрытия векторного произведения по правилу «БАС минус САБ»:

$$[\vec{a} \times [\vec{b} \times \vec{c}]] = \vec{b} \cdot (\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c} \cdot (\vec{a} \cdot \vec{b}) \text{ дает:}$$

$$\vec{E} - \hat{m} \vec{E} = \frac{1}{n^2} \cdot \vec{D}. \quad (2.10)$$

Левая часть этого уравнения есть составляющая вектора  $\vec{E}$ , лежащая в плоскости волнового фронта. Она параллельна вектору  $\vec{D}$ , а отношение ее длины к длине вектора  $\vec{D}$  - есть квадрат отношения скорости волны в этой среде к скорости света в вакууме. Используя уравнение  $\vec{E} = \frac{1}{\epsilon} \vec{D}$ , из выражения (2.10) получим:

$$(\epsilon_{ik} - m_j m_j \cdot \eta_{jk}) D_k = \frac{1}{n^2} \cdot D_j. \quad (2.11)$$

Здесь каждый из индексов пробегает значения от 1 до 3. Развернув индексное выражение (2.11), получим систему трёх линейных уравнений, которая определяет величину фазовой скорости и поляризацию распространяющейся через кристалл в направлении  $\vec{m}$  электромагнитной волны.

Для исследования системы уравнений (2.11) введем новую декартову систему координат  $X_1, X_2, X_3$ , в которой координат ось  $X_3$  направим по нормали к волновому фронту:  $\vec{e}_3 \parallel \vec{m}$ ,  $\vec{e}_3 = \vec{m}$ , а взаимно перпендикулярные

оси  $X_1$  и  $X_2$  окажутся в плоскости волнового фронта без строгого условия на их ориентацию кроме взаимной перпендикулярности. Поскольку в этих координатах  $D_3 = 0$ , то из системы уравнений (2.11) будем иметь уже систему двух уравнений вида относительно неизвестных координат вектора электрической индукции  $D_1$  и  $D_2$ :

$$\begin{cases} \eta'_{11}D_1 + \eta'_{12}D_2 = n^{-2}D_1 \\ \eta'_{12}D_1 + \eta'_{22}D_2 = n^{-2}D_2 \end{cases} \quad (2.12)$$

Здесь  $\eta'_{ij}$ - компоненты тензора диэлектрической непроницаемости в новой системе координат. Система уравнений (2.12) показывает, что  $n^{-2}$  - это собственные значения тензора

$$\begin{vmatrix} \eta'_{11} & \eta'_{12} \\ \eta'_{12} & \eta'_{22} \end{vmatrix},$$

а  $\bar{D}$  - его собственный вектор. Поэтому данный тензор естественно назвать **проекцией тензора диэлектрической непроницаемости  $\hat{\eta}'$**  на плоскость волнового фронта. Так как он двумерный, то у него имеется два собственных значения, определяемые из характеристического уравнения:

$$\begin{vmatrix} \eta'_{11} - n^{-2} & \eta'_{12} \\ \eta'_{12} & \eta'_{22} - n^{-2} \end{vmatrix} = 0,$$

откуда находим:

$$n^{-2(1,2)} = \frac{1}{2} \cdot \left[ \eta'_{11} + \eta'_{22} \pm \sqrt{(\eta'_{11} - \eta'_{22})^2 + 4\eta'^2_{12}} \right]. \quad (2.13)$$

Таким образом, имеем два различных значения показателей преломления плоской электромагнитной волны, распространяющейся в кристалле в направлении  $\bar{e}_3 \parallel \bar{m}$ , каждой из которых соответствует своя фазовая скорость:  $v_1 = c/n_1$ ,  $v_2 = c/n_2$ . Каждому собственному значению  $n^{-2}$  из

выражения (2.13) соответствует свой собственный вектор  $\vec{D}^{\circ}$ . Направление вектора  $\vec{D}$  в волне, распространяющейся со скоростью  $v^{\circ}$ , определяется из уравнений:

$$\begin{cases} (\eta'_{11} - n_{(1)}^{-2}) \cdot D_1^{(1)} + \eta'_{12} \cdot D_2^{(1)} = 0 \\ \eta'_{12} \cdot D_1^{(1)} + (\eta'_{22} - n_{(1)}^{-2}) \cdot D_2^{(1)} = 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

Направление вектора  $\vec{D}^{\circ}$  находится из системы (5.12) аналогично и он обязательно перпендикулярен  $\vec{D}^{(1)}$ , т.к. собственные векторы взаимно перпендикулярны.

Итак, в анизотропных кристаллах имеет место явление двулучепреломления: плоская монохроматическая электромагнитная волна с определенной линейной поляризацией вектора электрической индукции, вошедшая в кристалл и прошедшая в нем расстояние порядка несколько длин волн, превращается в две линейно поляризованные волны с разными скоростями распространения фазового фронта:  $v^{\circ}$ ,  $v^{\circ}$  и взаимно перпендикулярными векторами  $\vec{D}$ . Заметим, что оптические свойства кристаллов описываются тензором второго ранга, который имеет три собственных числа и три собственных вектора. В рассмотренной же ситуации их оказалось только два, что привело к описанию поведения двух волн. В общем случае следует ожидать преобразование одной плоской волны в три волны (так оно и есть для упругих волн). Уменьшение числа волн в данном случае обусловлено принципиальным свойством электромагнитных волн: их поперечностью. Именно по этой причине тензор второго ранга превратился в его проекцию на плоскость волнового фронта.

## 2.5.2. Оптическая индикатриса

Вычисления, проведенные в п. 2.5.1, могут быть проиллюстрированы простым геометрическим построением на характеристической поверхности тензора диэлектрической непроницаемости. С помощью такого построения можно определить величины фазовых скоростей обеих волн, а также их поляризации не прибегая к решению системы уравнений (2.14) и характеристического уравнения (2.13).

Характеристическая поверхность тензора  $\hat{\epsilon}$  имеет вид:

$$\left( \hat{r} \cdot \hat{\eta} \hat{r} \right) = 1, \quad \eta_{ik} X_i X_k = 1 \quad (2.15)$$

и представляет собой эллипсоид с центром в начале координат, который называется **оптической индикатрисой** кристалла.

Рассмотрим центральное сечение индикатрисы плоскостью волнового фронта электромагнитной волны, распространяющейся по кристаллу. В полученном сечении будет эллипс, все точки которого удовлетворяют уравнению (2.15) и уравнению плоскости волнового фронта, проходящего через начало координат:  $X_3 = 0$  – этим вводится поперечность электромагнитной волны и направление ее распространения. Уравнение, описывающее сечение, будет уравнением эллипса:

$$\eta_{11} X_1^2 + 2\eta_{12} X_1 X_2 + \eta_{22} X_2^2 = 1.$$

Если оси  $X_1$  и  $X_2$  направить по собственным векторам двумерного тензора  $\begin{vmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} \\ \eta_{12} & \eta_{22} \end{vmatrix}$ , то, поскольку в этих координатах тензор примет диагональный вид с собственными значениями  $n_1^{-2}$  и  $n_2^{-2}$  на диагонали. В этом

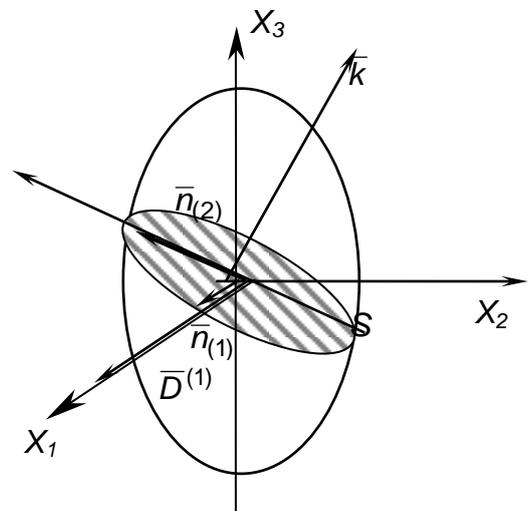


Рис.25

случае уравнение оптической индикатрисы примет наиболее простой вид:

$$\left(\frac{X_1}{n_1}\right)^2 + \left(\frac{X_2}{n_2}\right)^2 = 1.$$

Отсюда видно, что длины главных полуосей эллипса, полученного в сечении, равны  $n_{(1)}$  и  $n_{(2)}$ . По этим полуосям направлены векторы электрической индукции  $\bar{D}^{(1)}$  и  $\bar{D}^{(2)}$ .

Таким образом, чтобы вычислить скорости и поляризации электромагнитных волн, распространяющихся в кристалле в произвольном направлении, достаточно рассмотреть центральное сечение оптической индикатрисы плоскостью волнового фронта, т.е. плоскостью, перпендикулярной к вектору  $\bar{k}$ . Направления главных полуосей этого сечения совпадут с направлениями векторов  $\bar{D}$ , а длины этих полуосей будут равны показателям преломления. Рисунок 25 иллюстрирует сказанное. Здесь  $S$  - центральное сечение, перпендикулярное к направлению распространения волны,  $\bar{m}$  - вектор волновой нормали. Полуоси эллипса равны  $n_{(1)}$  и  $n_{(2)}$ . Ясно, что форма эллипса полностью определяется симметрией тензора  $\bar{\epsilon}$  или, проще говоря, точечной симметрией кристалла.

I. В кристаллах высшей категории оптическая индикатриса - это сфера радиусом  $n_{(1)} = n_{(2)} = 1/\sqrt{\eta_0}$ , поскольку их тензор диэлектрической непроницаемости является шаровым с элементами  $\eta_{ij} = \eta_0$  и потому уравнение (2.15) принимает вид:

$$\eta_0 \cdot X_i^2 = \eta_0 \cdot (X_1^2 + X_2^2 + X_3^2) = 1,$$

что представляет собой уравнение сферы указанного выше радиуса. Все центральные сечения такой оптической индикатрисы - круговые, что означает равенство показателей преломления во всех направлениях и, следовательно, отсутствие двулучепреломления. Таким образом, в отношении оптических

свойств кристаллы высшей категории изотропны.

II. У кристаллов средней и низшей категории проходящий в любом направлении монохроматический свет в общем случае распадается на две плоско поляризованные волны. Однако в этих кристаллах есть особенные направления - **оптические оси (бинормали)**. Эти кристаллографические направления характеризуются тем, что нормальные к ним сечения оптической индикатрисы являются окружностями. При любом выборе осей  $X_1$  и  $X_2$  в плоскости волнового фронта, перпендикулярной к оптической оси, проекция тензора  $\hat{\eta}$  на эту плоскость имеет вид:

$$\begin{vmatrix} \eta_{11} & 0 \\ 0 & \eta_{11} \end{vmatrix}$$

так что оба корня уравнения по определению собственных значений совпадут:

$n_{\mathbf{C}}^{-2} = n_{\mathbf{e}}^{-2} = \eta_{11}$ . Любой вектор, лежащий в плоскости волнового фронта, для данного тензора является собственным. Поэтому вдоль оптической оси может распространяться свет любой поляризации.

У кристаллов средней категории оптическая индикатриса - это эллипсоид вращения (в кристаллофизической системе координат):

$$\frac{X_1^2 + X_2^2}{n_{(1)}^2} + \frac{X_3^2}{n_{(2)}^2} = 1.$$

Ось вращения эллипсоида совпадает с главной осью симметрии кристалла и является его единственной оптической осью (рис.26). Кристаллы средней категории являются оптически одноосными. Ориентация оптической оси в них задана положением главной ось симметрии кристалла, которая всегда направлена по  $X_3$ . В кристаллах средней категории уравнение оптической индикатрисы имеет вид:

$$\frac{X_1^2 + X_2^2}{n_0^2} + \frac{X_3^2}{n_e^2} = 1,$$

откуда следует, что в оптически одноосных кристаллах один показатель преломления -  $n_1 = n_0$  не зависит от направления, а другой -  $n_2 = n_e$  изменяется с направлением. Первый из них и называют **обыкновенным**, а второй - **необыкновенным**. Происхождение этих названий связано с «обыкновенным» поведением электромагнитной волны вектор электрической индукции которой либо лежит в плоскости  $X_1O X_2$  - фазовая скорость этой волны не зависит от ориентации вектора  $\vec{D}$ . У «необыкновенной» волны фазовая скорость зависит от ориентации ее вектора электрической индукции, что необычно для поведения волн в обычных условиях – изотропных средах. В зависимости от направления распространения волны  $\bar{m}$  значение показателя преломления изменяется от  $n_0$  до  $n_e$ .

Величина двулучепреломления кристалла измеряется **оптической анизотропией**, равной  $\Delta n = n_e - n_0$ . Если  $\Delta n > 0$ , то одноосные кристаллы считаются **оптически положительными** (оптическая индикатриса имеет вид эллипсоида, вытянутого вдоль оптической оси - оси симметрии наивысшего порядка). Если же  $\Delta n < 0$ , то форма оптической индикатрисы - сплюснутый эллипсоид, а кристаллы считаются **оптически отрицательными**.

III. У кристаллов низшей категории оптическая индикатриса - эллипсоид общего вида. В системе координат, построенной на собственных векторах тензора  $\bar{\epsilon}$  и ее уравнение будет иметь вид:

$$\frac{X_1^2}{n_{(1)}^2} + \frac{X_2^2}{n_{(2)}^2} + \frac{X_3^2}{n_{(3)}^2} = 1$$

где  $n_{(i)}$  - главные полуоси эллипсоида. Эти индикатрисы имеют два круговых сечения и, соответственно, две оптические оси:  $\bar{P}_1, \bar{P}_2$ , т.е. эти кристаллы оптически двухосны (рис.27):  $S_1$  и  $S_2$  - это круговые сечения, а нормали к ним

-  $\bar{P}_1, \bar{P}_2$ . В кристаллах этой категории оба

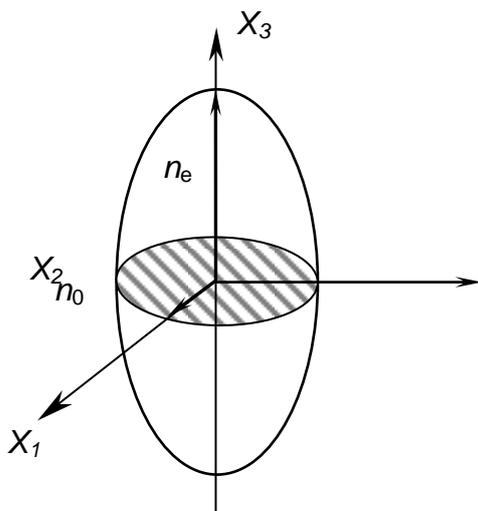


Рис.26

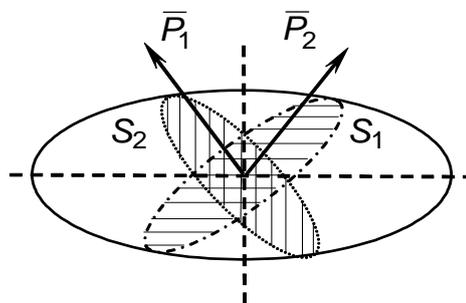


Рис.27

показателя преломления необыкновенны, т.е. их величины зависят от направления вектора поляризации в волне. Эти кристаллы оптически двухосны, линия пересечения круговых сечений - средняя главная ось оптической индикатрисы. Она перпендикулярна к плоскости оптических осей.

### 2.5.3. Эллипсоид Френеля

При распространении в кристалле плоской электромагнитной волны переносится не только фаза волны, но, что самое важное, ее энергия. Если с переносом фазы волны мы в предыдущем параграфе разобрались, то с переносом энергии вопрос остается открытым: не известна скорость переноса энергии, ее направление в кристалле, а также влияние точечной симметрии кристалла на эти параметры. Для выяснения поставленных вопросов обратимся к следующему мысленному эксперименту.

Как известно из теории электромагнитных волн, перенос энергии в ней описывается вектором потока энергии (вектор Умова-Пойтинга) электромагнитной волны, который равен:

$$\bar{S} = \frac{c}{4\pi} \cdot [\bar{E} \times \bar{H}].$$

Здесь  $c$  – скорость света в вакууме. Единичный вектор этого направления  $\bar{s} = \bar{S}/|\bar{S}|$  называется **лучевым вектором**. Происхождение этого названия связано со следующим обстоятельством. Если на пути плоской



Рис.28

электромагнитной волны в прозрачном кристалле поместить непрозрачную диафрагму, то направление прошедшего луча будет определяться именно вектором  $\bar{S}$  (рис. 28).

В изотропной среде для волны, идущей от точечного источника, волновой фронт имеет вид сферы.

Направление луча здесь совпадает с нормалью к фронту волны, т.е. оно перпендикулярно плоскости, касательной к волновой поверхности. В изотропной среде фазовая и групповая скорости могут различаться по величине, но всегда совпадают по направлению. Напомним, что фазовая скорость – это скорость распространения волнового фронта (фазы), направленная по нормали к фронту волны. Групповая скорость (или лучевая скорость) – это скорость луча, т.е. скорость переноса энергии, параллельная вектору Пойтинга. Фазовую скорость обозначим как  $\bar{v}$ , а групповую как  $\bar{U}$ . В общем случае в анизотропной среде вектора  $\bar{v}$  и  $\bar{U}$  могут быть не параллельны друг другу. В анизотропной среде направления векторов  $\bar{E}$  и  $\bar{D}$  в электромагнитной волне не совпадают. Тогда различны по направлению на тот же угол вектора  $\bar{v}$  и  $\bar{U}$  или, в обозначениях единичных векторов,  $\bar{s}$  и  $\bar{m}$ . Действительно, из определения вектора Пойтинга следует, что векторы  $\bar{E}$ ,  $\bar{H}$  и  $\bar{S}$  (также как векторы  $\bar{D}$ ,  $\bar{H}$ ,  $\bar{m}$ ) составляют правую тройку векторов. Но если  $\bar{E}$  и  $\bar{D}$  не параллельны друг другу, то луч  $\bar{s}$  и нормаль  $\bar{m}$  также не параллельны (см. рис. 28). Из этих рассуждений следует, что если в

анизотропном кристалле распространяется световой луч, например, от лазера, то испытывает двулучепреломление (этот эффект будет иметь место и в случае плоской волны, т.к. определяется анизотропией кристалла), будет распространяться в кристалле по направлениям, которые не совпадают с направлениями распространения преобразованной (расщепленной на две) плоской волны. Значит, для определения направлений распространения преобразованных световых лучей и векторов поляризации (векторов  $\vec{E}$ ) в них нельзя пользоваться оптической индикатрисой.

Для решения поставленных вопросов отметим, что если в плоской световой волне определяющую роль играет вектор электрической индукции  $\vec{D}$ , то для светового луча эта роль принадлежит вектору электрического поля  $\vec{E}$ , связь между которыми устанавливает тензор диэлектрической проницаемости  $\hat{\mathcal{G}} = 1/\hat{\eta}$ . Поэтому ту роль, которую для световых волн играет оптическая индикатриса, для световых лучей выполняет эллипсоид Френеля. Он представляет собой характеристическую поверхность тензора диэлектрической проницаемости кристалла:

$$\left( \vec{r} \cdot \hat{\mathcal{G}} \vec{r} \right) = 1 \quad \text{или} \quad \mathcal{G}_{ij} X_i X_j = 1.$$

Как и оптическая индикатриса, эллипсоид Френеля в общем случае представляет собой эллипсоид общего вида. В зависимости от точечной симметрии кристалла он может изменяться. Рассмотрим вид этой поверхности в кристаллах различных категорий.

I. У изотропных тел и кристаллов высшей категории тензор диэлектрической проницаемости имеет диагональный вид с компонентами  $\mathcal{G}_{11} = \mathcal{G}_{22} = \mathcal{G}_{33} = \mathcal{G}_0$ . Поэтому эллипсоид Френеля у этих кристаллов представляет собой сферу радиуса  $R = 1/\sqrt{\mathcal{G}_0}$ . Для него сечение любой плоскостью дает круговое сечение и, значит, распространяясь в любом направлении, световой луч не расщепляется на два.

II. У кристаллов средней категории (одноосных кристаллов) эллипсоид Френеля - это эллипсоид вращения. В кристаллофизической системе координат его уравнение следующее:

$$n_0^2 (x_1^2 + x_2^2) + n_e^2 x_3^2 = 1.$$

Эллипсоид вращения имеет одно круговое сечение перпендикулярное к главной оси симметрии кристалла - к оптической оси. Для одноосных оптически положительных кристаллов эллипсоид Френеля сплюснутый, а для отрицательных - вытянутый (см. рис.29):

III. У кристаллов низшей категории (двухосных кристаллов) - это эллипсоид общего вида, имеющий два круговых сечения. В системе координат, построенной на собственных векторах диэлектрических тензоров, его уравнение

$$n_1^2 x_1^2 + n_2^2 x_2^2 + n_3^2 x_3^2 = 1.$$

Главные оси оптической индикатрисы и эллипсоида Френеля для света одной и той же частоты совпадают, потому что у взаимно обратных тензоров собственные векторы одни и те же.

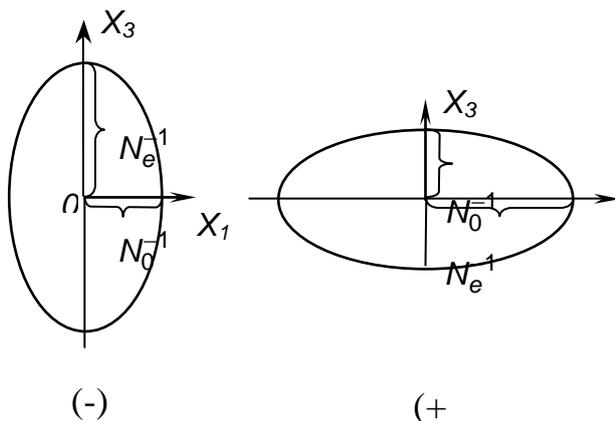


Рис.29

Чтобы выяснить скорости и поляризации лучей, распространяющихся в кристалле в направлении вектора  $\vec{s}$ , необходимо произвести сечение эллипсоида Френеля данного кристалла плоскостью, перпендикулярной вектору  $\vec{s}$  и проходящей через центр эллипсоида. Тогда получившийся в сечении эллипсоид будет

характеризовать направления распространения преломленных лучей и величины их скоростей. Длины главных полуосей эллипса:  $q_o$  и  $q_e$  пропорциональны групповым скоростям лучей:

$$U_{\mathbf{e}} = q_{\mathbf{e}} \cdot c$$

$$U_{\mathbf{e}'} = q_{\mathbf{e}'} \cdot c \quad ,$$

а направления главных полуосей совпадают с направлениями поляризации векторов  $\bar{E}_{\mathbf{e}}$  и  $\bar{E}_{\mathbf{e}'}$ . Если же направление вектора  $\bar{s}$  оказывается перпендикулярным к круговому сечению эллипсоида Френеля, то в этом направлении может распространяться луч света произвольной поляризации со скоростью  $U$ , определяемой радиусом  $q$  этого кругового сечения:  $U = q \cdot c$ . У изотропных тел и кубических кристаллов  $q = 1/n_0$ . Направления, перпендикулярные к круговым сечениям эллипсоида Френеля, называются **лучевыми оптическими осями (бирадиалами)**. У одноосных кристаллов бирадиали совпадают с бинормальными, а у двухосных - нет, но лежат в плоскости оптических осей.

Практически для подсчета скоростей и поляризаций лучей удобно пользоваться системой координат с осью  $X_3$ , направленной вдоль луча, и осями  $X_1, X_2$ , перпендикулярными к лучу. Вычислив компоненты тензора диэлектрической проницаемости  $\mathcal{E}$  в этой системе координат, из уравнения:

$$\begin{vmatrix} g_{11} - q^{-2} & g_{12} \\ g_{12} & g_{22} - q^{-2} \end{vmatrix} = 0$$

можно найти  $q_{\mathbf{e}}$  и  $q_{\mathbf{e}'}$ , а затем по формуле  $U = q \cdot c$  определить групповые скорости -  $U_{\mathbf{e}}, U_{\mathbf{e}'}$ . Направление вектора  $\bar{E}^{(1)}$  определится из решения системы:

$$\begin{cases} (g_{11} - q_{\mathbf{e}}^{-2}) E_1 + g_{12} E_2 = 0 \\ g_{12} E_1 + (g_{22} - q_{\mathbf{e}}^{-2}) E_2 = 0 \end{cases}$$

а вектор  $\bar{E}_{\mathbf{e}'}$  будет ему перпендикулярен.

### 3. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ВЫСШИХ РАНГОВ

#### 3.1. Упругие свойства кристаллов

##### 3.1.1. Малые деформации сплошной среды

При деформации сплошной среды (изотропной или анизотропной) ее частицы смещаются из своих начальных положений: из положения, описываемого радиусом-вектором  $\vec{r}$  она смещается в положение с радиус-вектором  $\vec{r}'$  (рис. 30). Вектор  $\vec{U} = \vec{r}' - \vec{r}$

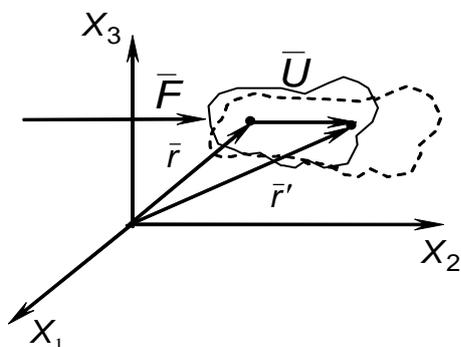


Рис.30

называется **вектором смещений**. Задание во всем объеме, занимаемом телом, векторного поля  $\vec{U}(\vec{r})$  полностью определяет деформированное состояние тела. Однако, для более наглядного и полного описания деформированного состояния твердого тела удобнее пользоваться другими векторными

и тензорными полями, выводимыми из поля смещения.

Чтобы представить физическую картину себе деформацию сплошной среды, необходимо рассматривать точку с радиусом-вектором  $\vec{r}$  вместе с ее бесконечно малой окрестностью  $\delta\vec{r}$ . Деформацию тела в выделенном элементарном объеме вокруг данной точки удобно разложить на три движения:

1. поступательное движение всего элементарного объема как целого из точки  $\vec{r}$  в точку  $\vec{r}'$ ;
2. поворот элементарного объема как целого вокруг некоторой оси, проходящей через данную точку, то есть точку  $\vec{r}$ ;
3. собственно деформацию, то есть такое перемещение одних точек выделенного элементарного объема относительно других, при котором

изменяется расстояние между соседними точками.

I. Поступательное перемещение частицы вместе с ее окрестностью определяется вектором  $\bar{U}$ . Остальные два движения определяются производными векторами смещения по координатам, Эти девять производных образуют несимметричный тензор дисторсии  $\mathcal{E} = \partial \bar{U} / \partial \bar{r}$  с компонентами  $\mathcal{E}_{ik} = \partial U_i / \partial X_k$ . С помощью транспонированного тензора  $\mathcal{E}^* = \text{Grad } \bar{U}$  тензор дисторсии можно разложить на симметричную часть

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{r}} + \text{Grad}(\bar{U}) \right) = \text{Def } \bar{U} \quad \text{или} \quad \mathcal{E}_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_i}{\partial X_k} + \frac{\partial U_k}{\partial X_i} \right),$$

называемую **тензором малых деформаций**, и антисимметричную часть:

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{r}} - \text{Grad}(\bar{U}) \right) \quad \text{или} \quad \mathcal{A}_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_i}{\partial X_k} - \frac{\partial U_k}{\partial X_i} \right), \quad (3.1)$$

называемую **тензором малых вращений**. При деформациях кристалла, не нарушающих его целостности, все компоненты тензора дисторсии малы:  $|\mathcal{E}_{ik}| \ll 1$ , и, следовательно, малы и все компоненты тензоров  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{A}$ . Только такие деформации будут рассматриваться в дальнейшем.

В окрестности материальной точки, находящейся до деформации в точке  $\bar{r}$ , вектор смещения можно представить в виде трёх слагаемых:

$$\bar{U}(\bar{r} + \delta \bar{r}) \approx \bar{U}(\bar{r}) + \left( \frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{r}} \right) \cdot \delta \bar{r} = \bar{U}(\bar{r}) + \mathcal{A} \cdot \delta \bar{r} + \mathcal{E} \cdot \delta \bar{r};$$

или:

$$U_i(\bar{r} + \delta \bar{r}) \approx U_i(\bar{r}) + \left( \frac{\partial U_i}{\partial X_k} \right) \delta X_k = U_i(\bar{r}) + \mathcal{A}_{ik} \cdot \delta X_k + \mathcal{E}_{ik} \cdot \delta X_k.$$

Антисимметричный тензор второго ранга можно заменить аналогичным ему по действию (говорят - «дуальным ему») аксиальным вектором  $\varphi$ , называемым **тензором малых вращений**, с компонентами

$$\overset{\circ}{\varphi} = -\frac{1}{2} \delta_{ijk} \omega_{jk} \quad (3.2)$$

по определению (6.1) тензора малых вращений и  $\left( \overset{\wedge}{\omega} \cdot \delta \bar{r} \right) = \left[ \overset{\circ}{\varphi} \times \delta \bar{r} \right]$ . Поэтому

можно записать

$$\delta \bar{U} \llcorner \rhd \bar{U} \llcorner + \delta \bar{r} \rhd \bar{U} \llcorner \rhd \left[ \overset{\circ}{\varphi} \times \delta \bar{r} \right] + \left( \overset{\wedge}{\varepsilon} \cdot \delta \bar{r} \right).$$

II. Чтобы выяснить геометрический смысл тензора малых вращений, предположим, что  $\llcorner \rhd = 0$ . Если  $\delta \bar{r}$  - составляющая вектора  $\delta \bar{r}$ , перпендикулярная к вектору  $\overset{\circ}{\varphi}$ , то

$$\delta \bar{U} \llcorner + \delta \bar{r} \rhd \left[ \overset{\circ}{\varphi} \times \delta \bar{r} \right].$$

Но это означает, что смещение каждой точки  $\bar{r} + \delta \bar{r}$  окрестности пропорционально расстоянию  $\delta \bar{r}$  от точки  $\bar{r} + \delta \bar{r}$  до оси, параллельной вектору  $\overset{\circ}{\varphi}$  и проходящей через точку  $\bar{r}$ . Кроме того, направление этого смещения перпендикулярно как к оси, так и вектору  $\delta \bar{r}$ , соединяющему эту ось с данной точкой окрестности. Это означает поворот всего объема, выделенного вблизи рассматриваемой точки, как целого вокруг оси вращения. Нетрудно убедиться также, что угол и направление этого поворота совпадают с длиной и направлением аксиального вектора  $\overset{\circ}{\varphi}$ , соответственно. Подставив в выражение (3.2) компоненты тензора малых вращений по (3.1), получим

$$\overset{\circ}{\varphi} = \frac{1}{2} \text{rot} \bar{U},$$

так как

$$\overset{\circ}{\varphi} = -\frac{1}{4} \delta_{ijk} \left( \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \frac{\partial U_k}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{4} \delta_{ijk} \frac{\partial U_k}{\partial x_j} - \frac{1}{4} \delta_{ijk} \frac{\partial U_j}{\partial x_k}.$$

III. Для выяснения геометрического смысла тензора  $\mathbf{\epsilon}$  будем считать  $\mathbf{\epsilon} \cdot \bar{\mathbf{r}} = 0$ . Тогда  $\delta \bar{U} \bar{\mathbf{r}} + \delta \bar{\mathbf{r}} = \mathbf{\epsilon} \cdot \delta \bar{\mathbf{r}}$ . Рассмотрим случай, когда  $\epsilon_{11} \neq 0$ , а  $\epsilon_{12} = 0$  и  $\epsilon_{13} = 0$ . Обозначим проекцию отрезка  $\delta \bar{\mathbf{r}}$  на направление единичного вектора вдоль оси как  $\delta X_1$ :  $\delta X_1 = \bar{\mathbf{e}}_1 \cdot \delta \bar{\mathbf{r}}$ . Тогда будем иметь

$$\delta \bar{U} \bar{\mathbf{r}} + \delta \bar{\mathbf{r}} = \epsilon_{(1)} \delta X_1 \cdot \bar{\mathbf{e}}_1.$$

Это означает, что смещение всех точек окрестности выбранной точки происходит параллельно вектору  $\bar{\mathbf{e}}_1$ , а по величине пропорционально расстоянию  $\delta X_1$  (до соответствующих точек перпендикулярной к этому вектору плоскости  $\delta X_1 = 0$ ).

Таким образом, при деформации твердого тела происходит его удлинение в направлении, параллельном  $\bar{\mathbf{e}}_1$ , в  $1 + \epsilon_{(1)}$  - раз. В общем случае, когда все собственные значения тензора  $\mathbf{\epsilon}$  отличны от нуля, происходит одновременное удлинение в трех взаимно перпендикулярных направлениях.

### 3.1.2. Тензор упругих напряжений

Из повседневного опыта известно, что при деформировании кристалла возникают силы, стремящиеся восстановить его первоначальную конфигурацию. Эти силы короткодействующие - эффективный радиус их действия не превышает нескольких постоянных решетки. Теория упругости твердого тела рассматривает его как непрерывную среду, т.е. элементарные объемы, используемые в теории сплошных сред, во много раз превосходят размеры элементарной ячейки. Поэтому можно считать, что сила, действующая на элементарный объем, передается через поверхность, ограничивающую этот объем.

Для характеристики физического действия поверхностных сил, как известно, используют давление  $\bar{P}$ , представляющее собой отношение действующей силы к величине площади, на которую оказывается воздействие. При таком подходе напряженное состояние в каждой точке кристалла можно охарактеризовать совокупностью сил  $\bar{P} \cdot dS$ . Однако результат их действия зависит от направления силы по отношению к поверхности. Ориентацию последней задают внешней нормалью. Таким образом, напряженное состояние в точке определяется функцией  $\bar{P}(\bar{n})$ , где  $\bar{n}$  - нормаль к поверхности. Согласно способам введения тензоров в кристаллофизике коэффициенты линейной зависимости  $\sigma_{ij}$  компонент одного вектора ( $P_i$ ) от компонент другого ( $n_j$ ) образуют тензор второго ранга  $\sigma$ :

$$P_i = \sigma_{ij} \cdot n_j, \quad (3.3)$$

который называется **тензором упругих напряжений**. Он исчерпывающим образом характеризует напряженное состояние в точке. Чтобы найти его компоненты, достаточно измерить силы  $\bar{P}^{(k)}$ , действующие на три площадки с непараллельными нормальями  $\bar{n}^{(k)}$ . Тогда компоненты  $\sigma_{ij}$  оказываются решением системы девяти уравнений, линейных по  $\sigma_{ij}$ :

$$P_i^{(k)} = n_j^{(k)} \cdot \sigma_{ij}. \quad (3.4)$$

В частности, когда нормали к площадкам параллельны осям декартовой системы координат:  $\bar{n}^{(k)} = \bar{e}_k$ . Тогда  $n_j^{(k)} = \delta_{jk}$  и система (3.4) становится вида

$$\sigma_{ik} = P_i^{(k)}. \quad (3.5)$$

Таким образом,  $\sigma_{ik}$  - это  $i$ -тая компонента силы, приложенной к единичной площадке, внешняя нормаль которой направлена по оси  $X_k$ .

Мысленно выделим в теле некоторый объем  $V$ , ограниченный поверхностью

S. Если на каждый элемент поверхности  $dS$  действует сила  $\bar{P} \cdot dS = \bar{\epsilon} \cdot \bar{n} \cdot dS$ , то она весь объем будет действовать сила:

$$\bar{F} = \int_S \bar{P} \cdot dS = \int_S \bar{\epsilon} \cdot \bar{n} \cdot dS;$$

Интеграл по замкнутой поверхности, согласно теореме Остроградского-Гауса, можно заменить на интеграл по объему:

$$\bar{F} = \int_S \bar{\epsilon} \cdot \bar{n} \cdot ds = \int_V \text{Div} \bar{\epsilon} \cdot dV$$

С другой стороны, по второму закону Ньютона:

$$\bar{F} = \int_V \rho \cdot \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial t^2} \cdot dv,$$

Поэтому можно записать:

$$\int_V \text{Div} \bar{\epsilon} \cdot dV = \int_V \rho \cdot \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial t^2} \cdot dv,$$

Так как это равенство справедливо при любом выборе  $V$ , то должны быть равны подинтегральные выражения:

$$\text{Div} \bar{\epsilon} = \rho \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial t^2} \quad (3.6)$$

Это уравнение движения упругого тела называется **уравнением эластодинамики** или **уравнением Коши**. В равновесном состоянии

$$\text{Div} \bar{\epsilon} = 0 \quad , \quad \rho \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial t^2} = 0;$$

Можно показать, что тензор напряжений  $\bar{\epsilon}$  симметричен, т.е.  $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$ .

### 3.1.3. Деформация и симметрия кристалла

Деформация кристалла не является физическим свойством кристалла в том смысле, в котором является физическим свойством, например, диэлектрическая проницаемость. Деформация - это реакция кристалла на воздействие. Им может быть упругое напряжение (явление упругости) или электрическое поле (пьезоэлектрический эффект). В обоих случаях величина и направление главных осей тензора деформаций определяются как физическими свойствами и симметрией кристалла, так величиной и направлением воздействия ( $\bar{F}$ ,  $\bar{E}$ ). Следовательно, тензор деформаций, подобно тензору напряжений, не обязан согласовываться с симметрией кристалла. Однако деформация может быть вызвана изменением температуры кристалла. В этом случае воздействие является ненаправленным (оно описывается скаляром -  $T$ ), в следствии чего результирующая деформация должна согласовываться с симметрией кристалла.

### 3.1.4 Тепловое расширение

Если температура кристалла изменяется, то деформация при этом, может быть описана тензором деформаций  $\epsilon_{ij}$ . Когда изменение температуры  $\Delta T$  происходит во всем кристалле, то деформация однородна и все компоненты  $\epsilon_{ij}$  оказываются пропорциональны  $\Delta T$ , т.е.

$$\epsilon_{ij} = \alpha_{ij} \cdot \Delta T, \quad (3.7)$$

где  $\alpha_{ij}$  - это константы, называемые **коэффициентами теплового расширения**. Так как  $\epsilon_{ij}$  - тензор, то и  $\alpha_{ij}$  - тензор тоже. Более того, раз  $\epsilon_{ij}$  симметричен, то симметричен и тензор  $\alpha_{ij}$ . Следовательно, тензор теплового расширения  $\alpha$  может быть приведен к главным осям; тогда уравнения (6.7) упрощаются и принимают вид:

$$\varepsilon_{11} = \alpha_{(1)} \Delta T; \quad \varepsilon_{22} = \alpha_{(2)} \Delta T; \quad \varepsilon_{33} = \alpha_{(3)} \Delta T; ,$$

где  $\alpha_{(1)}, \alpha_{(2)}, \alpha_{(3)}$  - главные коэффициенты теплового расширения. Отсюда следует, что если выбрать в кристалле сферу, то при изменении температуры она становится эллипсоидом (эллипсоидом деформаций) с осями, пропорциональными

$$(\alpha_{(1)} \Delta T, \alpha_{(2)} \Delta T, \alpha_{(3)} \Delta T)$$

Уравнение характеристической поверхности тензора теплового расширения имеет вид:

$$\alpha_{ij} \cdot X_i \cdot X_j = 1$$

или в главной системе координат:  $\alpha_1 \cdot X_1^2 + \alpha_2 \cdot X_2^2 + \alpha_3 \cdot X_3^2 = 1$ . Форма и ориентация этой поверхности в соответствии с принципом Неймана подчиняются ограничениям, накладываемым симметрией кристалла. Поскольку тепловое расширение кристалла должно обладать симметрией этого кристалла, оно не может привести к исчезновению какого-либо элемента симметрии. Именно поэтому кристалл относится к тому или иному кристаллофизическому классу независимо от температуры.

Для большинства кристаллов главные коэффициенты теплового расширения положительны и, следовательно, характеристическая поверхность теплового расширения является эллипсоидом общего вида. Однако, у небольшого числа кристаллов некоторые коэффициенты отрицательны.

## 3.2. Физические свойства кристаллов, описываемые тензорами третьего ранга

### 3.2.1. Способы введения тензоров третьего ранга в задачах кристаллофизики

Тензорами третьего ранга в кристаллах описываются прямой и обратный пьезоэффекты, линейный электрооптический эффект, прямой и обратный пьезомагнитный эффекты, электрогирация и т.д. В настоящее время это один из важных классов физических явлений, используемых в электронном приборостроении и научных исследованиях. Напомним, какими способами в задачах кристаллофизики могут быть введены полярные и аксиальные тензоры третьего ранга. При этом следует иметь в виду, что в линейном уравнении, описывающем следствие  $S$  физического воздействия на кристалл  $W$

$$S = \mathcal{F} \cdot W, \quad (3.8)$$

ранг тензора  $S$  – левой части выражения (6.8), обязательно равен рангу правой части (3.8), представляющему собой свертку (сумму компонент тензоров по одинаковым индексам) тензоров физического свойства  $\mathcal{F}$  и воздействия  $W$  и потому равному разности рангов тензоров  $\mathcal{F}$  и  $W$ .

**Полярные тензоры.** Полярные тензоры третьего ранга образуются тогда, когда в причинно-следственной связи, описываемой линейной зависимостью вида (3.8), и причина, и следствие одновременно являются или полярными, или аксиальными тензорами нулевого, первого или второго ранга. Ранг вводимого в рассмотрение тензора равен сумме рангов тензоров, описывающих причину ( $r_W$ ) и следствие ( $r_S$ ):  $R = r_W + r_S$ . Рассмотрим способы введения полярных тензоров подробнее.

1. Если на кристалл действует внешняя причина, описываемая полярным вектором  $\bar{P}$ , а регистрируется полярная величина, описываемая полярным тензором второго ранга  $\mathcal{S}$ , то при наличии между причиной и следствием

линейной зависимости  $\mathcal{E} = \mathcal{F} \cdot \bar{P}$  коэффициенты этой зависимости образуют полярный тензор третьего ранга  $\mathcal{F}$ .

*Пример:* при воздействии на кристалл электрического поля  $\bar{E}$  в нем возникает деформация  $\mathcal{E}$ , так что  $\mathcal{E} = \mathcal{F} \cdot \bar{E}$ . Согласно описанному выше, тензор третьего ранга  $\mathcal{F}$  является полярным тензором.

2. Если на кристалл действует внешняя причина, описываемая полярным тензором второго ранга  $\mathcal{E}$ , а регистрируется полярная величина, описываемая полярным вектором  $\bar{S}$ , то при наличии между причиной и следствием линейной зависимости  $\bar{S} = \mathcal{F} \cdot \bar{P}$  коэффициенты этой зависимости образуют полярный тензор третьего ранга  $\mathcal{F}$ .

*Пример:* при деформации кристалла  $\mathcal{E}$  в нем возникает электрическое поле  $\bar{E}$ , так что  $\bar{E} = \mathcal{F} \cdot \mathcal{E}$ . Согласно описанному выше, тензор третьего ранга  $\mathcal{F}$  является полярным тензором.

3. Если причина  $P$  и следствие  $S$  описываются аксиальными векторами первого и второго ранга, тензор  $\mathcal{F}$  по (3.8) будет также полярным тензором третьего ранга.

*Пример:* при воздействии на кристалл магнитного поля  $\overset{\circ}{H}$  в нем возникает деформация, описываемая аксиальным тензором второго ранга  $\overset{\circ}{\mathcal{E}}$ , так что  $\overset{\circ}{\mathcal{E}} = \overset{\circ}{\mathcal{F}} \cdot \overset{\circ}{H}$ . Согласно изложенному, тензор третьего ранга  $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$  представляет собой полярный тензор.

**Аксиальные тензоры.** Аксиальные тензоры третьего ранга образуются, если в причинно-следственной связи типа (3.8) либо причина, либо следствие описывается аксиальным тензором нулевого, первого или второго ранга, а вторая величина является обязательно полярным тензором. Рассмотрим способы введения аксиальных тензоров подробнее.

1. Тензор  $\mathcal{F}$  будет аксиальным тензором третьего ранга, если одна из

величин – причина  $P$  или следствие  $S$  - будет аксиальным тензором первого ранга, а вторая описывается полярным тензором второго ранга.

*Пример:* К кристаллу приложили магнитное поле  $\overset{\circ}{H}$ , в результате чего в нем возникла упругая деформация  $\xi$  и имеет место линейная связь между  $\overset{\circ}{H}$  и  $\xi$ :  $\xi = \overset{\circ}{\kappa} \cdot \overset{\circ}{H}$ . Тензор  $\overset{\circ}{\kappa}$  будет представлять собой аксиальный тензор третьего ранга.

2. Другой класс физических явлений, описываемых аксиальными тензорами третьего ранга, может быть введен, если в приведенных выражениях причиной считать аксиальный вектор, а следствие является полярным тензором второго ранга.

### 3.2.2. Прямой пьезоэлектрический эффект

У некоторых кристаллов при приложении к ним упругого напряжения  $\sigma$  возникает поляризация  $P$ , величина которого пропорциональна приложенному напряжению. Это явление называется **прямым пьезоэлектрическим эффектом**. Например, если одноосное напряжение растяжения приложено к кристаллу кварца (точечная группа симметрии 32) вдоль одной из его осей второго порядка, то величина электрического момента на единицу объема, или величина поляризационного заряда на единицу площади, определяется уравнением:

$$P = d \cdot \sigma,$$

где  $d$  - константа, называемая **пьезоэлектрическим модулем**. Из этого выражения следует, что замена напряжения растяжения напряжением сжатия приводит к изменению направления поляризации на обратное.

Физическая причина возникновения прямого пьезоэффекта заключается в специфическом строении элементарных ячеек пьезоэлектрических кристаллов.

Их можно рассматривать как результат совмещения двух элементарных ячеек разной упругости, каждая из которых состоит из ионов одного знака: положительных и отрицательных. В зависимости от того совпадают или нет центры положительных и отрицательных зарядов в суммарной ячейке - пьезоэлектрики делят на два класса: полярные и полярно-нейтральные, соответственно. При приложении к пьезоэлектрику упругого напряжения каждая из элементарных ячеек деформируется в соответствии со своим значением упругости, так что одна больше, а другая меньше. В результате деформации центры зарядов положительных и отрицательных ионов смещаются друг относительно друга, что в итоге обнаруживается на внешних гранях кристалла как поляризация.

В общем случае напряженное состояние характеризуется, как мы уже знаем, тензором второго ранга, тогда как поляризация кристалла, будучи вектором, описывается тремя компонентами. Поэтому когда произвольное напряжение действует на пьезоэлектрический кристалл, то каждая компонента поляризации  $P_j$  линейно связана со всеми компонентами  $\sigma_{ij}$ . Эту зависимость можно получить уже использованным ранее методом: разложением неизвестной функции  $\bar{P}(\boldsymbol{\sigma})$  в ряд Тейлора вблизи равновесного состояния ( $\sigma_{ij} = 0$ ) и в силу малости упругого напряжения ограничения линейным членом разложения. Поэтому для  $P_1$  будем иметь:

$$P_1 = d_{111}\sigma_{11} + d_{112}\sigma_{12} + d_{113}\sigma_{13} + d_{121}\sigma_{21} + d_{122}\sigma_{22} + d_{123}\sigma_{23} + d_{131}\sigma_{31} + d_{132}\sigma_{32} + d_{133}\sigma_{33};$$

Для  $P_2$  и  $P_3$  уравнения будут аналогичны. В сокращённой форме это уравнение можно записать так:

$$P_1 = d_{11k}\sigma_{1k} + d_{12k}\sigma_{2k} + d_{13k}\sigma_{3k}$$

или в краткой форме:

$$P_1 = d_{1jk}\sigma_{jk}.$$

Если представить себе, что одноосное напряжение прикладывается поочередно

вдоль осей  $X_1, X_2, X_3$ , то можно выяснить физический смысл коэффициентов  $d_{ijk}$  с индексами  $j = k$ . Предположим, что к кристаллу приложено чисто сдвиговое напряжение  $\sigma_{21}$ . Согласно третьему закону Ньютона наряду с компонентой  $\sigma_{21}$  появится компонента  $\sigma_{12}$ . Тогда получим

$$P_1 = d_{112}\sigma_{12} + d_{121}\sigma_{21} = (d_{112} + d_{121})\sigma_{12}.$$

Аналогичные уравнения можно написать для  $P_2$  и  $P_3$ . Сумма  $(d_{121} + d_{112})$  имеет определенный физический смысл, но невозможно придумать эксперимент, с помощью которого можно было бы отделить  $d_{112}$  от  $d_{121}$ , также как невозможно придумать эксперимент по разделению компонент  $\sigma_{21}$  и  $\sigma_{12}$ . Эта неопределенность в численных значениях компонент тензора пьезомодулей устраняется соответствующим выбором значения компонент тензора о чем будет сказано далее. Тензор пьезомодулей симметричен по второй паре индексов:  $d_{ijk} = d_{ikj}$  из-за внутренней симметрии тензора упругих напряжений  $\epsilon_{ji} = \sigma_{ij}$ . В общем случае для анизотропной среды выражение для прямого пьезоэлектрического эффекта имеет вид:

$$P_i = d_{ijk}\sigma_{jk}. \quad (3.9)$$

Коэффициенты  $d_{ijk}$ , называемые **пьезомодулями**, число которых равно 27, образуют тензор третьего ранга. Если выписать их полностью, то они образуют не квадратную таблицу, как в случае тензора второго ранга, а таблицу в форме куба (кубик Рубика). Если первый индекс в  $d_{ijk}$  означает слой, второй индекс строку, а третий - столбец, то эти три слоя будут выглядеть так, как это показано в Таблице 7. Благодаря тому, что тензор  $d_{ijk}$  симметричен по индексам  $j$  и  $k$ , из числа независимых компонент можно исключить коэффициенты, стоящие в скобках. Таким образом, из 27 остается 18 независимых компонент.

Отсюда же следует возможность использования более коротких так

называемых **матричных обозначений** (или обозначений Фохта). До сих пор мы приводили все уравнения в тензорной форме записи, т.к. такой способ позволяет обнаружить

Таблица 3. Тензор пьезомодулей в тензорных обозначениях

$i=1$	$i=2$	$i=3$
$d_{111}$ $d_{112}$ $d_{113}$	$d_{211}$ $d_{212}$ $d_{213}$	$d_{311}$ $d_{312}$ $d_{313}$
$(d_{121})$ $d_{122}$ $d_{123}$	$(d_{221})$ $d_{222}$ $d_{223}$	$(d_{321})$ $d_{322}$ $d_{323}$
$(d_{131})$ $(d_{132})$ $d_{133}$	$(d_{231})$ $(d_{232})$ $d_{233}$	$(d_{331})$ $(d_{332})$ $d_{333}$

их действительный характер, в частности, свойства преобразования. Однако при решении конкретных задач выгодно по возможности уменьшить число индексов с тем, чтобы можно было представить тензор на плоскости - записать на листе. Это достигается путем использования обозначений Фохта за счёт введения новых символов:  $d_{11}$ ,  $d_{12}$  и т.д. Методологической основой для введения матричных обозначений Фохта является симметрия тензора по двум соседним индексам. Логика составления этих обозначений проста: при равных индексах тензорного обозначения в обозначениях Фохта ставится этот индекс, а при разных индексах - тот, который отсутствует в тензорных индексах, плюс три. Так, матричный индекс 4 получается при отсутствии  $X_1$ , что соответствует  $1+3=4$ , матричный индекс 5 получается при отсутствии  $X_2$ , что соответствует  $2+3=5$  и т.д. Таблица перевода тензорных обозначений в матричные обозначения приведена ниже:

Тензорное обозначение:

11	22	33	23, 32	31, 13	12, 21
1	2	3	4	5	6

Матричное обозначение:

Нетрудно видеть, что первые индексы при обеих формах записи одинаковы, а второй и третий индексы тензорного обозначения заменяются в новой записи одним индексом, пробегающим значения от 1 до 6. В этих обозначениях приведённая выше таблица 5 будет иметь вид, показанный ниже (см. Таблицу 3). Обратимся к ней и рассмотрим множители перед недиагональными компонентами тензора. Так как  $d_{ijk} = d_{ikj}$ , то по причине их неразличимости полагаем, что недиагональные элементы матрицы  $d_{i\alpha}$  равны удвоенному значению соответствующей компоненты тензора  $d_{ijk}$ , например,  $d_{14} = 2d_{123}$ .

Два последних индекса в тензорной записи  $d_{ijk}$  соответствуют индексам компонент напряжения, поэтому для согласования тензора пьезомодулей и тензора упругих напряжений необходимо переписать его в обозначениях Фохта:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{pmatrix}.$$

Для иллюстрации пользования матричными обозначениями запишем выражение для  $X_1$  - компоненты вектора поляризации. Оно будет следующим:

$$P_1 = d_{11}\sigma_1 + d_{12}\sigma_2 + d_{13}\sigma_3 + d_{14}\sigma_4 + d_{15}\sigma_5 + d_{16}\sigma_6.$$

Для компонент вектора поляризации  $P_2$  и  $P_3$  выражения аналогичны, поэтому в сокращённой форме это уравнение имеет вид:

Таблица 4. Тензор пьезомодулей в обозначениях Фохта

$i=1$	$i=2$	$i=3$
$d_{11}$	$d_{21}$	$d_{11}$
$\frac{1}{2}d_{16}$	$\frac{1}{2}d_{26}$	$\frac{1}{2}d_{16}$
$\frac{1}{2}d_{15}$	$\frac{1}{2}d_{25}$	$\frac{1}{2}d_{15}$
$d_{12}$	$d_{22}$	$d_{12}$
$\frac{1}{2}d_{14}$	$\frac{1}{2}d_{24}$	$\frac{1}{2}d_{14}$
$d_{13}$	$d_{23}$	$d_{13}$

$$P_i = d_{ij}\sigma_j,$$

причём если индекс  $i$  принимает значения 1, 2, 3, то  $j=1, 2, \dots, 6$ . Таблица из коэффициентов  $d_{i\alpha}$ , выписанная в виде:

$$\|d_{i\alpha}\| = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{pmatrix}$$

является матрицей. Легко видеть, что строки этой матрицы соответствуют слоям таблицы 4.

Матричные обозначения используются потому, что по сравнению с тензорными обладают большей компактностью и позволяют расположить пьезомодули на листе в таблицу. Но при пользовании необходимо всегда помнить, что  $d_{i\alpha}$  не преобразуются подобно компонентам тензора второго ранга, несмотря на кажущееся сходство с ним.

### 3.2.3. Обратный пьезоэлектрический эффект

Ввиду того, что согласно выражению (3.9) прямой пьезоэффект является линейным, то из простых соображений следует существование обратного ему эффекта: при помещении кристалла в электрическое поле он должен испытать упругую деформацию. Математическое выражение, описывающее обратный пьезоэлектрический эффект, должно связывать деформацию кристалла (наблюдать внешне упругое напряжение, фигурирующее в прямом эффекте, затруднительно) и величину внешнего электрического поля. Однако деформация в общем случае является тензором второго ранга, а электрическое поле – вектором, поэтому это выражение должно выглядеть так:

$$\varepsilon_{ij} = f_{ijk}E_k.$$

Однако интересной особенностью обратного пьезоэффекта является то обстоятельство, что в обратном эффекте коэффициенты пропорциональности

являются пьезомодулями, фигурирующими в прямом пьезоэффекте -  $d_{ijk}$  :

$$\varepsilon_{ij} = d_{kij}E_k. \quad (3.10)$$

Чтобы записать выражение (6.10) в матричных обозначениях, необходимо ввести один индекс вместо двух для компонент деформаций. Тогда получим:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \frac{1}{2}\varepsilon_5 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_5 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{pmatrix};$$

Тогда уравнение, например, для  $\varepsilon_{11}$ , получаемое из (3.10), будет

$$\varepsilon_{11} = d_{111}E_1 + d_{211}E_2 + d_{311}E_3$$

при переходе к матричным обозначениям принимает вид:

$$\varepsilon_1 = d_{11}E_1 + d_{21}E_2 + d_{31}E_3.$$

Уравнение для определения  $\varepsilon_{23}$ , например,

$$\varepsilon_{23} = d_{123}E_1 + d_{223}E_2 + d_{323}E_3$$

принимает вид:

$$\frac{1}{2}\varepsilon_4 = \frac{1}{2}d_{14}E_1 + \frac{1}{2}d_{24}E_2 + \frac{1}{2}d_{34}E_3.$$

Сократив множитель "1/2", в общем случае будем иметь:

$$\varepsilon_j = d_{ij} \cdot E_i. \quad (i=1, 2, 3; j=1, 2, 3, \dots, 6).$$

### 3.2.4. Симметрия пьезоэлектрического эффекта

Если кристалл обладает симметрией, то имеет место дальнейшее уменьшение числа независимых пьезомодулей. Тензор  $\underline{d}$  - это тензор третьего

ранга, его внутренняя симметрия  $V \sqrt{2}$ . Как и все материальные тензоры *нечетного типа*, он тождественно равен нулю для всех centrosимметричных кристаллов. Таким образом, в centrosимметричных кристаллах пьезоэффект невозможен. Вид, который принимает тензор  $\epsilon$  в неcentrosимметричных кристаллах можно определить с помощью метода прямой проверки. В настоящее время имеются таблицы, в которых приведены тензоры  $\epsilon$  для 23 кристаллографических классов и трех предельных классов пьезоэлектриков.

Принадлежность конкретного класса к одному из пьезоэлектрических классов вовсе не означает, что этот кристалл действительно проявляет пьезоэлектрические свойства. Известны кристаллы, принадлежащие к пьезоэлектрическим классам, но не проявляющие пьезоэффекта. Принадлежность же к не пьезоэлектрикам - надежная гарантия отсутствия пьезоэффекта.

а) Отдельные разновидности пьезоэффекта разрешены для одних пьезоэлектрических классов и запрещены для других. Таков, например, пьезоэффект, возникающий при гидростатическом давлении:  $\sigma_{kl} = -\rho \cdot \delta_{kl}$ . Тогда

$$P_i = -d_{ikk} \cdot \rho .$$

Таким образом, пьезоэлектрическая поляризация в данной ситуации возникает только тогда, когда компоненты  $d_{ikk}$  отличны от нуля или другими словами, когда отличны от нуля компоненты вектора  $\bar{d} = \epsilon : \epsilon$ . Значит, вектор  $\bar{d}$  - это материальный вектор, а материальные векторы отличны от нуля, когда они описывают свойства пьезоэлектрических кристаллов. Поэтому гидростатический пьезоэффект возможен только в пьезоэлектриках.

б) Обнаружена пьезополяризация на той же грани, на которую действует одноосное упругое напряжение сжатия: это так называемый **продольный**

**пьезоэффект.** Компоненты тензора упругих напряжений для продольного сжатия можно представить в виде:  $\sigma_{kl} = p \cdot n_k \cdot n_l$  ( $\bar{n}$  – единичный вектор нормали к грани). Тогда поверхностная плотность зарядов по уравнению Пуассона будет равна

$$\rho_{\text{пов}} = -\frac{1}{4\pi} \bar{n} \cdot \bar{D} = p \cdot d_{ikl} n_i n_k n_l,$$

так как  $\bar{D} = 4\pi \bar{P} = 4\pi \hat{\epsilon} \cdot \bar{E}$ . Можно видеть, что правая часть этого выражения представляет собой вычисление симметричной части тензора  $\hat{d}$

$$f_{ikl} = d_{(ikl)} = \frac{1}{3} (d_{ijk} + d_{kil} + d_{lik}).$$

Таким образом, продольный пьезоэффект определяется только симметричной частью тензора пьезомодулей.

Рассматривая влияние симметрии кристаллов на их пьезоэлектрические свойства, обычно вычисляют  $d_{ikl}$  для различных кристаллографических классов. Между тем, некоторые результаты можно получить, исходя только из принципа Кюри и теоремы Германа. Этим сейчас и займемся.

Для того чтобы в кристалле под влиянием внешнего воздействия могла возникнуть электрическая поляризация, в кристалле должно существовать единственное полярное направление. Последнее возможно, если группа симметрии кристалла  $\infty m$  или любая его подгруппа:

$$\infty m \supseteq G_{\text{кристалла под воздействием}}.$$

Но группа симметрии среды, подвергнутой воздействию, по принципу Кюри не ниже, чем общая часть группы симметрии недеформированного кристалла –  $G_{\text{крист}}$  и группы симметрии воздействия –  $G_{\text{воздействия}}$

$$G_{\text{крист под воздейст}} \supseteq G_{\text{крист}} \cap G_{\text{воздействия}}$$

что приводит к условию:

$$\infty m \supseteq G_{\text{крист}} \cap G_{\text{воздействия}} \quad (3.11)$$

Таким образом, для того, чтобы в однородной среде под влиянием внешнего воздействия могла возникнуть электрическая поляризация, необходимо, чтобы пересечение группы симметрии среды и группы симметрии воздействия было бы группой  $\infty m$  или одной из ее подгрупп.

При пьезоэффекте симметрия воздействия в выражении (3.11) описывается одной из трех групп:  $\infty\infty m$  – при всестороннем сжатии,  $\infty/mmm$  – при одноосном сжатии – растяжении,  $mmm$  – во всех других случаях. В общем случае, когда  $G_{\text{воздействия}} = mmm$ , необходимое условие возникновения пьезополяризации принимает вид:

$$\infty m \supseteq G_{\text{крист}} \cap mmm \quad (3.12)$$

Так как группа  $mmm$  – centrosymmetric (имеет центр симметрии), а группа  $\infty m$  – неcentrosymmetric, то данное условие выполняется только для неcentrosymmetric кристаллов, т.е.  $G_{\text{крист}}$  не должна иметь центра симметрии.

Но все ли неcentrosymmetric группы  $G_{\text{крист}}$  удовлетворяют условию (3.12)? Оказывается нет. Так, группа  $\infty\infty$  выпадает из этого правила, хотя и не имеет центра симметрии. Действительно, пересечение этой группы с группой  $mmm$  дает:  $\infty\infty \cap mmm = 222$ , а эта группа не является подгруппой группы  $\infty m$ . Значит, в неcentrosymmetric группе  $\infty\infty$  тем не менее пьезоэффект невозможен.

Теперь рассмотрим возможность пьезоэффекта в кристаллах точечной симметрии  $432$ . Легко найти такое направление, чтобы  $432 \cap mmm = 1$ . Для этого достаточно приложить упругое напряжение так, чтобы ни одна из осей симметрии тензора упругих напряжений не совпадала бы с какой-либо из осей симметрии кристалла. Точечная группа  $1$  является подгруппой группы полярного вектора. Но, несмотря на то, что условие (3.12) при этом выполняется, линейный пьезоэффект в кристаллах  $432$  невозможен.

Действительно, этот эффект описывается тензором третьего ранга  $d_{ijk}$ . По теореме Германа для этого тензора оси симметрии четвертого порядка превращаются в оси бесконечного порядка, и они проходят по всем трем координатным осям. Следовательно, для линейного (по  $\sigma_{ij}$ ) пьезоэффекта кристаллы симметрии 432 не отличаются от сред  $\infty\infty$ , в которых пьезоэффект, как только что установлено, запрещен.

Однако, наряду с линейным пьезоэффектом в кристаллах возможен более слабый квадратный пьезоэффект, при котором поляризация квадратично зависит от тензора упругих напряжений:

$$P_i = Q_{ijklm} \sigma_{jk} \sigma_{lm}.$$

Так как квадратичный эффект определяется тензором пятого ранга  $\mathcal{Q}$ , а порядок осей симметрии в группе 432 не превышает четырех, и теорема Германа к нему уже неприменима. Следовательно, пьезоэффект такого типа в кристаллах точечной симметрии 432 принципами симметрии не запрещен.

Таким образом, запреты, налагаемые принципом Кюри и теоремой Германа, не совпадают по содержанию. Принцип Кюри исключает возможность возникновения в средах с симметрией 432 поляризации при действии упругих напряжений. Но из равенства нулю всех компонент пьезотензора для среды определенной симметрии следует, что в ней невозможен линейный пьезоэффект, а более сложный (квадратичный, кубичный и т.д.) вполне возможен.

### **3.2.5. Линейный электрооптический эффект, пьезомагнетизм и электрогирация**

Рассмотренными прямым и обратным пьезоэффектом не ограничивается набор физических свойств кристаллов, описываемых тензором третьего ранга. Рассмотрим другие явления, для описания которых используют тензоры

третьего ранга.

**Электрооптический эффект** состоит в изменении оптических свойств кристаллов под действием электрического поля: компонент тензора диэлектрической непроницаемости  $\eta$ . Физическая интерпретация этого эффекта заключается в деформации оптической индикатрисы кристалла внешним электрическим полем. Так, приложение электрического поля к кубическому кристаллу делает из оптически изотропного кристалла оптически одноосный. Если к кристаллу средней категории приложить электрическое поле не в направлении главной оси симметрии, то кристалл из оптически одноосного становится оптически двуосным. Только кристаллы низшей категории во внешнем поле остаются двухосными, но с оптическими осями, ориентация которых отличается от исходной.

При описании электрооптического эффекта устанавливаются аналитические соотношения не между показателями преломления и полем, а между так называемыми **поляризационными константами**  $a$  и электрическим полем. Величины  $a$  связаны с показателем преломления  $n$  соотношением:

$$a = \frac{1}{n^2},$$

что для веществ с электронной поляризуемостью даёт:  $a = \eta$ . Для изотропных сред (в том числе кристаллов высшей категории) величина  $a$  постоянна во всех направлениях, т.е. является скаляром. В анизотропных средах величина  $a$  является тензором второго ранга с компонентами  $a_{ji}$ . При описании электрооптических свойств ограничимся случаем, когда эти тензоры симметричны.

Для общего случая (кристаллов низшей категории) в собственной (главной) системе координат имеют место соотношения, записанные в обозначениях Фохта:

$$a_1^0 = \frac{1}{n_1^2}, a_2^0 = \frac{1}{n_2^2}, a_3^0 = \frac{1}{n_3^2}, a_4^0 = 0, a_5^0 = 0, a_6^0 = 0,$$

где верхний индекс «0» указывает на выбор системы координат, построенной на собственных векторах.

В результате наложения электрического поля исходный эллипсоид показателей преломления может деформироваться так, что его главная система координат не будет совпадать со старой системой. Обозначив через  $a_i$  значения поляризационных констант, отнесённых с исходной (старой) системе координат, получим общую связь между  $a^0$ ,  $a_i$  и  $\Delta a_j$ :

$$\Delta a_1 = a_1 - a_1^0, \Delta a_2 = a_2 - a_2^0, \Delta a_3 = a_3 - a_3^0,$$

$$\Delta a_4 = a_4, \Delta a_5 = a_5, \Delta a_6 = a_6 .$$

Таким образом, уравнения линейного электрооптического эффекта в координатной форме можно представить следующим образом:

$$\Delta a_{ij} = r_{ijk} E_k .$$

Тензор  $r_{ijk}$  является тензором третьего ранга, по форме совпадающим с тензором пьезоэлектрических модулей  $\epsilon$ . Компоненты  $r_{ijk}$  называются **коэффициентами линейного электрооптического эффекта**. Симметричные свойства этого эффекта полностью аналогичны свойствам обратного пьезоэффекта. Эти два эффекта сопутствуют друг другу. Линейным электрооптическим эффектом могут обладать кристаллы двадцати трех точечных групп симметрии:

$$1, 2, 3, 4, 6, \bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}, m, 23, 222, 32, 3m, mm2, 4mm,$$

$$422, 6mm, 622, \bar{6}m2, \bar{4}2m, \bar{4}3m .$$

Из того факта, что линейный электрооптический эффект возможен только в пьезоэлектриках, следует, что он и обратный пьезоэффект реализуются в кристалле одновременно. Последнее обстоятельство требует при описании электрооптического эффекта учитывать пьезооптический эффект: изменение оптических констант в результате деформаций, вызванных обратным

пьезоэффектом. Изменение поляризационных констант при наложении электрического поля, не связанное с обратным пьезоэффектом, представляет собой **истинный линейный электрооптический эффект**. Он является результатом прямого воздействия электрического поля на заряды диэлектрика и заключается в перераспределении плотности электронных оболочек образующих его частиц. Под **ложным линейным электрооптическим эффектом** понимают изменения поляризационных констант, вызванные обратным пьезоэффектом.

**Пьезомагнетизм** есть явление, связанное с намагничиванием кристаллов под действием механических воздействий. Если рассматривать связь между деформациями (симметричный тензор второго ранга) и напряжённостью магнитного поля  $\overset{\circ}{H}$ , то уравнение пьезомагнетизма будет

$$B_i = K_{ijk} \sigma_{jk},$$

где  $K_{ijk}$  - аксиальный тензор третьего ранга (тензор **пьезомагнитных коэффициентов**). Этим эффектом могут обладать кристаллов всех точечных групп симметрии за исключением  $m\bar{3}m$ ,  $432$  и  $\bar{4}3m$ .

**Электрогирация.** Можно предвидеть существование ещё одного явления, описываемого аксиальным тензором третьего ранга. Это явление должно состоять в изменении (появлении) оптической активности кристаллов под действием электрического поля. Этот эффект называют **электрогирацией** или эффектом электрооптической активности. Обозначая удельное вращение плоскости поляризации света под действием электрического поля  $\bar{E}$  через  $\rho$ , получаем связь между аксиальным тензором второго ранга  $\rho_{ij}$  и компонентами электрического поля в виде:

$$\rho_{ij} = l_{ijk} E_k,$$

где  $l_{ijk}$  - коэффициенты электрооптической активности. Этот эффект может существовать во всех классах кристаллов за исключением  $m\bar{3}m$ ,  $432$  и  $\bar{4}3m$ .

В заключение этого раздела обратим внимание на то, что, пользуясь тензорным представлением, можно достаточно просто предсказывать различные физические явления и уровень сложности связи между физическими характеристиками кристаллов. Знание же точечной симметрии кристалла, принципов кристаллофизики и теоремы Германа позволяют определить ранг и вид описывающего тензора.

### 3.3. Физические свойства, описываемые тензорами четвертого ранга

#### 3.3.1. Обобщенный закон Гука.

##### Тензор упругих постоянных

Под действием упругого напряжения форма твердого тела изменяется. Этот экспериментальный факт известен всем из повседневной практики. Если величина упругого тела ниже определенного предельного значения, называемого **пределом упругости**, эта деформация будет обратимой, т.е. после снятия упругого напряжения тело принимает первоначальную форму. Далее известно, что при достаточно малых упругих напряжениях деформация пропорциональна величине приложенного напряжения:

$$\varepsilon \approx \varepsilon_0 + \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} \right)_0 \cdot \sigma + \dots \approx S \cdot \sigma.$$

Это зависимость называется законом Гука. Проиллюстрируем его на простом примере. Пусть на изотропный твердый стержень действует чистое растяжение  $\sigma$ , приложенное к граням стержня. Продольная деформация  $\varepsilon$  по определению равна  $\Delta L/L$ , где  $\Delta L$  приращение длины и  $L$  - первоначальная длина. Согласно закону Гука:

$$\varepsilon = S \cdot \sigma,$$

где  $S$  - некоторый коэффициент пропорциональности, называемый

**константой упругой податливости** или просто податливостью. Вместе с тем мы можно записать обратное соотношение:

$$\sigma = C \cdot \varepsilon,$$

где  $C = 1/S$ ,  $C$  - **константа упругой жесткости** или модуль Юнга.

Обобщим эти утверждения и определения на анизотропную среду. Мы знаем, что однородное напряжение и однородная деформация определяются в общем виде тензорами второго ранга. Если к кристаллу приложено произвольное однородное упругое напряжение  $\sigma_{ij}$ , то возникающая однородная деформация такова, что каждая ее компонента  $\varepsilon_{ij}$  линейно связана со всеми компонентами тензора упругих напряжений. Так, например:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} = & S_{1111}\sigma_{11} + S_{1112}\sigma_{12} + S_{1113}\sigma_{13} + S_{1121}\sigma_{21} + \\ & + S_{1122}\sigma_{22} + S_{1123}\sigma_{23} + S_{1131}\sigma_{31} + S_{1132}\sigma_{32} + S_{1133}\sigma_{33}. \end{aligned}$$

Следовательно, закон Гука в обобщенной форме запишется так:

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl}, \quad (3.17)$$

где  $S_{ijkl}$ - податливости кристалла. Уравнение (3.17) заменяет девять уравнений, в каждом из которых справа стоит девять слагаемых. Всего же имеется 81 коэффициент  $S_{ijkl}$ .

Можно поступить иначе, выразив напряжение через деформации с помощью уравнений:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \quad . \quad (3.18)$$

Если уравнения (3.17) решить как систему совместных уравнений относительно  $\sigma_{ij}$ , то получатся решения в форме (3.18) с коэффициентами  $C_{ijkl}$ , являющимися линейными функциями  $S_{ijkl}$ .

Физический смысл  $S_{ijkl}$  можно понять, представив себе, что на кристалл действуют различные простые напряжения. Если бы было приложено

сдвиговое напряжение  $\sigma_{12}$ , то вспоминая, что в отсутствие объемных моментов  $\sigma_{12}$  не может быть приложено без  $\sigma_{21}$ , получили бы:

$$\varepsilon_{11} = S_{1112}\sigma_{12} + S_{1121}\sigma_{21} = S_{1112} + S_{1121} \underline{\sigma}_{12}.$$

Коэффициенты  $S_{1112}$  и  $S_{1121}$  всегда появляются вместе; если не принимать во внимание объемные моменты, то в принципе невозможно представить себе эксперимент, при котором можно было бы отделить  $S_{1112}$  от  $S_{1121}$  или, в более общем виде,  $S_{ijkl}$  от  $S_{ijlk}$ . Поэтому, чтобы избежать появления произвольных постоянных, будем считать их равными:

$$S_{ijkl} = S_{ijlk}. \quad (3.19)$$

Вместе с тем, если бы было приложено одноосное растягивающее напряжение параллельно  $X_3$ , то компоненты деформации задавались бы в виде:  $\varepsilon_{11} = S_{1133}\sigma_{33}$ ,  $\varepsilon_{22} = S_{2233}\sigma_{33}$ , и т.д. В частности:  $\varepsilon_{12} = S_{1233}\sigma_{33}$  и  $\varepsilon_{21} = S_{2133}\sigma_{33}$ . Но из определения компонент тензора деформации следует, что  $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}$ . Поэтому  $S_{1233} = S_{2133}$  и в общем случае получаем:

$$S_{ijkl} = S_{jikl}. \quad (3.20)$$

Благодаря соотношениям (6.19), (6.20) только 36 компонент из 81  $S_{ijkl}$  являются независимыми. Для определения конкретного физического смысла коэффициентов  $C_{ijkl}$  в уравнении (3.18) представим себе совокупность напряжений, приложенных к кристаллу и выбранных таким образом, что все компоненты деформаций исчезли за исключением одной нормальной или двух сдвиговых компонент. Таким образом, чтобы возникли компоненты  $\varepsilon_{12}$  и  $\varepsilon_{21}$  необходимо задать напряжения

$$\sigma_{ij} = C_{ij12}\varepsilon_{12} + C_{ij21}\varepsilon_{21} = C_{ij12} + C_{ij21} \underline{\varepsilon}_{12}.$$

Мы принимаем, что коэффициенты, появляющиеся вместе, попарно равны друг другу. Тогда в общем случае имеем:

$$C_{ijkl} = C_{ijlk}. \quad (3.21)$$

Аналогично рассуждая, можно получить, что

$$C_{ijkl} = C_{jikl}. \quad (3.22)$$

Благодаря соотношениям (3.21) и (3.22) число независимых компонент тензора  $C_{ijkl}$  с 81 уменьшается до 36.

Теперь покажем, что 81 коэффициент  $S_{ijkl}$  действительно образует тензор четвертого ранга. Когда рассматривались тензора высших рангов, было установлено: если компоненты тензора  $a_{ij, \dots}$  линейно зависят от компонента тензора в  $b_{kl, \dots}$ , то коэффициенты пропорциональности в этой линейной зависимости образуют тензор ранга:  $R = r_a + r_b$ . В нашем случае  $a_{ij} = \varepsilon_{ij}$ ,  $b_{kl} = \sigma_{kl}$ . Поэтому  $S_{ijkl}$  и  $C_{ijkl}$  - тензоры четвертого ранга.

Благодаря симметричности  $S_{ijkl}$  и  $C_{ijkl}$  по первым двум индексам, можно использовать обозначения Фохта, введенные при рассмотрении пьезоэффекта. Компоненты напряжений и компоненты деформаций, как и ранее, записываются теперь уже с одним индексом, принимающим поочередно значения от 1 до 6:

$$\begin{aligned} \left\| \begin{array}{ccc} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{array} \right\| &\rightarrow \left\| \begin{array}{ccc} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{array} \right\|; \\ \left\| \begin{array}{ccc} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{array} \right\| &\rightarrow \left\| \begin{array}{ccc} \varepsilon_1 & \frac{1}{2} \varepsilon_6 & \frac{1}{2} \varepsilon_5 \\ \frac{1}{2} \varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \frac{1}{2} \varepsilon_4 \\ \frac{1}{2} \varepsilon_5 & \frac{1}{2} \varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{array} \right\|;. \end{aligned}$$

В  $S_{ijkl}$  и  $C_{ijkl}$  два первых индекса можно объединить в один, пробегающий значения от 1 до 6; два последних можно объединить тем же способом; в итоге получается уже знакомая нам схема замены индексов - обозначения Фохта. При

этом вводятся множители 2 и 4 следующим образом:

$$\begin{aligned} S_{ijkl} &= S_{mn}, \text{ когда } m \text{ и } n \text{ равны } 1, 2 \text{ и } 3; \\ 2 S_{ijkl} &= S_{mn}, \text{ когда } m \text{ или } n \text{ равны } 4, 5, 6; \\ 4 S_{ijkl} &= S_{mn}, \text{ когда и } m, \text{ и } n \text{ равны } 4, 5, 6. \end{aligned}$$

В качестве примера рассмотрим выражение для  $S_{11}$  и  $S_{23}$ , записанные в развернутом виде:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= S_{1111}\sigma_{11} + S_{1112}\sigma_{12} + S_{1113}\sigma_{13} + S_{1121}\sigma_{21} + \\ &+ S_{1122}\sigma_{22} + S_{1123}\sigma_{23} + S_{1131}\sigma_{31} + S_{1132}\sigma_{32} + S_{1133}\sigma_{33}; \\ \varepsilon_{23} &= S_{2311}\sigma_{11} + S_{2312}\sigma_{12} + S_{2313}\sigma_{13} + S_{2321}\sigma_{21} + \\ &+ S_{2322}\sigma_{22} + S_{2323}\sigma_{23} + S_{2331}\sigma_{31} + S_{2332}\sigma_{32} + S_{2333}\sigma_{33}. \end{aligned}$$

В матричном обозначении эти два уравнения принимают вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= S_{11}\sigma_1 + \frac{1}{2}S_{16}\sigma_6 + \frac{1}{2}S_{15}\sigma_5 + \frac{1}{2}S_{16}\sigma_6 + S_{12}\sigma_2 + \frac{1}{2}S_{14}\sigma_4 + \frac{1}{2}S_{15}\sigma_5 + \\ &+ \frac{1}{2}S_{14}\sigma_4 + \frac{1}{2}S_{13}\sigma_3 = S_{11}\sigma_1 + S_{16}\sigma_6 + S_{15}\sigma_5 + S_{12}\sigma_2 + S_{14}\sigma_4 + S_{13}\sigma_3; \\ \frac{1}{2}\varepsilon_4 &= \frac{1}{2}\varepsilon_{41}\sigma_1 + \frac{1}{4}\varepsilon_{46}\sigma_6 + \frac{1}{4}\varepsilon_{45}\sigma_5 + \frac{1}{4}\varepsilon_{46}\sigma_6 + \frac{1}{2}\varepsilon_{42}\sigma_2 + \frac{1}{4}\varepsilon_{44}\sigma_4 + \\ &+ \frac{1}{4}\varepsilon_{45}\sigma_5 + \frac{1}{4}\varepsilon_{44}\sigma_4 + \frac{1}{2}\varepsilon_{43}\sigma_3 = \frac{1}{2}\varepsilon_{41}\sigma_1 + \frac{1}{2}\varepsilon_{42}\sigma_2 + \frac{1}{2}\varepsilon_{43}\sigma_3 + \frac{1}{2}\varepsilon_{44}\sigma_4 + \\ &+ \frac{1}{2}\varepsilon_{45}\sigma_5 + \frac{1}{2}\varepsilon_{46}\sigma_6. \end{aligned}$$

Или сокращенно:

$$\varepsilon_1 = S_{1j}\sigma_j \text{ и } \varepsilon_4 = S_{4j}\sigma_j.$$

Следовательно, в общем виде можно записать:

$$\varepsilon_i = S_{ij}\sigma_j. \quad (i, j=1, 2, \dots, 6). \quad (3.23)$$

Множители 2 и 4 вводятся в определения  $S_{ij}$  потому, что таким путем удастся избежать появления этих множителей в уравнении (3.23) и его можно записать в компактной форме.

Для  $C_{ijkl}$  множителей 2 и 4 вводить не нужно. Поэтому, если мы запишем просто:

$$C_{ijkl} = C_{mn} \quad (i, j, k = 1, 2, 3; m, n = 1, 2, \dots, 6),$$

то развертывая некоторые члены можно показать, что уравнения:  $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl}$  принимают вид:

$$\sigma_i = C_{ij}\epsilon_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6).$$

Таблицы  $S_{ij}$  и  $C_{ij}$ , записанные в виде квадратов

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

образуются матрицы  $(S_{ij})$  и  $(C_{ij})$ . Заметим, что, как и в случае пьезоэлектрических модулей,  $S_{ij}$  и  $C_{ij}$ , не являются компонентами тензора второго ранга - это тензор четвертого ранга.

### 3.3.2. Влияние симметрии кристалла на его упругие свойства

Вследствие симметрии кристалла число независимых компонентов  $S_{ij}$  и  $C_{ij}$  уменьшается еще больше. Следует отметить, что упругость является centrosymmetric свойством. Это означает, что если оси координат преобразованы действием центра симметрии, то компоненты  $S_{ij}$  и  $C_{ij}$  остаются неизменными. Доказательство этого положения весьма простое. Элементы  $C_{ij}$  матрицы преобразования в данном случае равны  $\delta_{ij}$ . Поэтому

для новой системы координат имеем:

$$S'_{ijkl} = \epsilon_{1234} \delta_{im} \delta_{jn} \delta_{ko} \delta_{lp} S_{mnop} = S_{ijkl},$$

в соответствии со свойствами символа Кронекера. Однако другие элементы симметрии налагают на упругие константы дополнительные ограничения, которые далее рассмотрим.

Симметрия кристалла. Условия, налагаемые на  $S_{ij}$  и  $C_{ij}$ , часто можно получить учетом точечной симметрии без применения аналитических методов (как в методе прямой проверки).

Рассмотрим в качестве примера податливость  $S_{34}$  в кристаллах точечной группы симметрии 222. Она характеризует растяжение в направлении оси  $X_3$ , когда к кристаллу приложены сдвиговые силы в плоскости, перпендикулярной  $X_1$  (рис. 31):

$$\epsilon_{33} = S_{3323} \sigma_{23} + S_{3332} \sigma_{32}.$$

Подействуем теперь на всю систему (кристалл плюс сдвиговые силы) осью второго порядка, параллельной  $X_2$ . Кристалл при этом остается неизменным, так как его симметрия включает ось

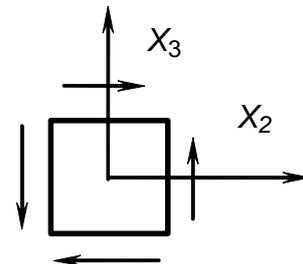


Рис.31

симметрии второго порядка. То же будет и с растяжением, параллельным  $X_3$ . Однако силы, приложенные к граням, заменяются на силы, противоположно направленные силам, показанным на рис. 31. Следовательно, имеем этот же кристалл, по-прежнему растянутый вдоль направления  $X_3$ , но под действием

противоположных сил (рис. 32). Это возможно только в том случае, если растяжение равно нулю. Таким образом,  $S_{34} = 0$ .

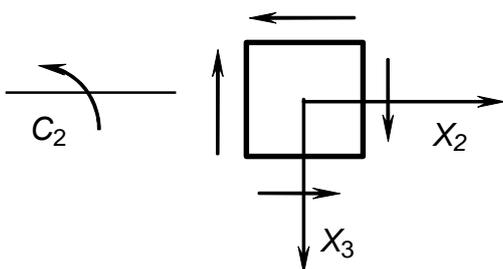


Рис.32

Метод прямой проверки. С помощью этого метода можно определить независимые упругие постоянные для всех точечных групп симметрии, исключая группы тригональной и гексагональной сингоний. Для иллюстрации этого метода выберем точечную группу  $\bar{4}$ . Так как ось  $\bar{4}$  параллельна  $X_3$ , то оси координат преобразуются следующим образом:  $1 \rightarrow -2$ ,  $2 \rightarrow 1$ ,  $3 \rightarrow -3$ . Следовательно, при четырех индексном (тензорном) обозначении пары индексов преобразуются по правилу:

$$11 \rightarrow 22, 22 \rightarrow 11, 33 \rightarrow 33, 23 \rightarrow -13,$$

$$31 \rightarrow 32, 12 \rightarrow -21.$$

При двух индексном (фохтовском) обозначении эти же преобразования индексов имеют вид:

$$1 \rightarrow 2; 2 \rightarrow 1; 3 \rightarrow 3; 4 \rightarrow -5;$$

$$5 \rightarrow 4; 6 \rightarrow -6.$$

Таблица индексов, выписанная в виде матрицы, преобразуется тогда так:

$$\begin{array}{cccccc} 22 & 21 & 23 & 25 & -24 & -26 \\ & 11 & 13 & 15 & -14 & -16 \\ & & 33 & 35 & -34 & -36 \\ & & & 55 & -54 & -56 \\ & & & & 44 & 46 \\ & & & & & 66 \end{array}$$

Здесь опущена нижняя ее левая половина, т.к. она симметрична относительно диагонали. Приравнивая эту таблицу, компоненту за компонентой к первоначальной, можно найти все соотношения между компонентами.

Энергия деформации. Этим не исчерпываются требования, накладываемые на компоненты тензоров  $S_{ijkl}$ ,  $C_{ijkl}$ . Энергия деформации кристалла

$$W = \frac{1}{2} \sigma_{kl} \epsilon_{kl} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}$$

должна быть положительна – только тогда кристалл, подвергнутый внешнему упругому воздействию, устойчив. Поэтому условие  $W > 0$  для кубических кристаллов дает:  $C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|; C_{11} + 2C_{12} > 0$ ; гексагональных кристаллов же -  $C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|; C_{11} + C_{12} > C_{33} > C_{13}^2$ .

Обычно, обсуждая внешнюю симметрию тензора, мы рассматривали его характеристическую поверхность. Упругие свойства кристалла нельзя полностью представить одной поверхностью – это поверхность, описываемая уравнением четвертой степени оказывается достаточно сложной и потому ненаглядна. Практически оказывается полезной поверхность, изображающая изменение модуля Юнга с направлением. Модуль Юнга определяется как отношение продольного напряжения к продольной деформации.

### 3.3.3. Фотоупругость кристаллов, квадратичный электрооптический эффект и электрострикция

**1. Фотоупругостью** называется явление изменения оптических свойств кристаллов в результате механического воздействия на него. В качестве упругих свойств в данном эффекте выступают поляризационные константы. Изменение поляризационных констант  $a = 1/n^2$ , где  $n$  - показатель преломления оптического излучения, связывают с тензором деформации  $\epsilon_{kl}$  или тензором напряжения  $\sigma_{kl}$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta a_{ij} = \pi_{ijkl} \cdot \sigma_{kl} \\ \Delta a_{ij} = \rho_{ijkl} \cdot \epsilon_{kl} \end{array} \right.,$$

где пьезооптические коэффициенты  $\pi_{ijkl}$  и упругооптические коэффициенты  $\rho_{ijkl}$  образуют тензоры четвертого ранга. Между собой эти коэффициенты связаны соотношениями, которые в обозначениях Фохта имеют вид:

$$\begin{cases} \rho_{mn} = \pi_{mr} \cdot C_{rn} \\ \pi_{mn} = \rho_{mr} \cdot S_{rn} \end{cases},$$

где  $C$  – модули упругости, а  $S$  - константы податливости. Коэффициенты  $\pi_{ijkl}$  и  $\rho_{ijkl}$  симметричны по внутренним индексам пар ( $\pi_{ijkl} = \pi_{jikl} = \pi_{ijlk}$ ). В этой связи максимальное число независимых коэффициентов равно 36.

По аналогии с этим эффектом можно рассматривать эффект магнитоупругости:

$$\mu_{ij} = M_{ijkl} \sigma_{kl},$$

который заключается в изменении магнитной проницаемости твердого тела за счет приложенного упругого напряжения.

**2. Квадратичный электрооптический эффект.** Наряду с линейным электрооптическим эффектом, который свойственен только пьезоэлектрикам, все кристаллы диэлектриков обладают квадратичным электрооптическим эффектом. Он заключается в изменении оптических свойств кристаллов, пропорциональном квадрату напряжённости внешнего электрического поля:

$$\Delta a_{ij} = L_{ijkl} E_k E_l$$

где  $L_{ijkl}$  - коэффициенты квадратичного электрооптического эффекта, образующие тензор четвертого ранга.

Квадратичный электрооптический эффект (как и электро-стрикция), являясь эффектом второго порядка, дает малые (по сравнению с линейным электрооптическим эффектом) изменения оптических свойств диэлектриков.

Как и в предыдущем случае возможен подобный эффект для магнитных свойств твердых тел: **квадратичный магнито-оптический эффект**, демонстрирующий изменение магнитной проницаемости пропорциональном квадрату внешнего магнитного поля:

$$\mu_{ij} = \chi_{ijkl} \overset{0}{H}_k \overset{0}{H}_l.$$

который заключается в изменении магнитной проницаемости твердого тела за счет приложенного упругого напряжения.

**3. Электрострикция.** Деформация диэлектрика  $\varepsilon_{ij}$ , пропорциональная квадрату приложенного поля  $\vec{E}$ , называется электрострикцией:

$$\varepsilon_{ij} = R_{ijkl} E_k E_l,$$

где  $R_{ijkl}$  - коэффициенты электрострикции, которые образуют полярный тензор четвертого ранга. Электрострикцию следует отличать от обратного пьезоэффекта. Последний является линейным эффектом по полю, а электрострикция - эффект слабый, квадратичный, т.е. в этом случае знак деформации не зависит от направления электрического поля. В пьезоэффекте же изменение направления электрического поля меняет направление деформации кристалла на обратное.

Явление **магнитоэлектричества** будет представлять деформацию кристалла в магнитном поле, пропорциональную квадрату внешнего магнитного поля:

$$\varepsilon_{ij} = \phi_{ijkl} H_k H_l.$$

### 3.4. Упругие волны в кристаллах

Распространение упругих волн в кристаллах имеет ряд характерных отличий от их распространения в изотропных средах. Эти отличия в известной степени напоминают отличия между распространением света в кристаллах и изотропных средах.

Плоская упругая волна описывается полем вектора смещения:

$$\vec{U}(\vec{r}, t) = A \cdot \vec{p} \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t). \quad (3.26)$$

Здесь  $A$  - амплитуда волны;  $\vec{p}$  - единичный вектор поляризации волны, т.е. вектор вдоль направления смещения частиц из положения равновесия;

$\bar{k} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)\bar{m}$  – волновой вектор;  $\omega = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) \cdot v$  – циклическая частота;  $\lambda$  – длина

волны;  $v$  – её фазовая скорость;  $\bar{m}$  – единичный вектор волновой нормали.

Действительные смещения равны вещественной части этого комплексного выражения (3.26). Для удобства перепишем (3.26) в виде:

$$\bar{U}(\bar{r}, t) = A \cdot \bar{\rho} \cdot \exp \left[ i \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right) \cdot (\bar{m} \cdot \bar{r} - \omega \cdot t) \right]. \quad (3.27)$$

Поле смещений должно удовлетворять уравнениям эластодинамики:

$$C_{ijkl} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x_j \partial x_k} = \rho \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2}, \quad (3.28)$$

где  $C_{ijkl}$  – коэффициенты упругости кристалла,  $\rho$  – его плотность. Подставив

в уравнение (3.28) смещение в форме (3.27) и заметив, что дифференцирование

экспоненты по  $t$  сводится к умножению на  $-\frac{2\pi}{\lambda} i \omega$ , а по  $x_j$  – на  $\frac{2\pi}{\lambda} i \cdot m_j$ ,

получим основное уравнение теории упругих волн в кристалле, именуемое уравнением Кристоффеля:

$$C_{ijkl} m_j m_k \rho_l = \rho v^2 \rho_i. \quad (3.29)$$

Учитывая внутреннюю симметрию тензора  $\mathfrak{C}$ , введем симметричный тензор Кристоффеля, определив его следующим образом:

$$M_{il} = C_{ijkl} m_j m_k.$$

Поскольку тензор  $\mathfrak{M}$  зависит не только от материального тензора  $\mathfrak{C}$ , но и направления распространения упругой волны, он не является материальным тензором, и поэтому его внешняя симметрия может быть ниже симметрии кристалла. Подставив этот тензор в (3.29), получим уравнение Кристоффеля в виде:

$$M_{il} \rho_l = \rho v^2 \rho_i \quad \text{или} \quad \mathfrak{M} \cdot \bar{\rho} = \rho v^2 \bar{\rho}.$$

Часто пользуются приведенным тензором коэффициентов упругости:  $\lambda_{ijkl} = C_{ijkl} / \rho$  и приведенным тензором Кристоффеля:  $\Lambda_{ij} = \lambda_{ijkl} m_j m_k$ .

Уравнение Кристоффеля принимает вид:

$$\Lambda_{ij} \rho_j = v^2 \rho_i, \quad \epsilon \bar{\rho} = v^2 \bar{\rho}.$$

Оно показывает, что векторы поляризации  $\bar{\rho}$  упругих волн, распространяющихся в кристалле в направлении  $\bar{m}$ , являются собственными векторами тензора Кристоффеля. Если тензор Кристоффеля имеет три различных собственных значения, то в данном направлении  $\bar{m}$  могут распространяться три взаимно перпендикулярные упругие волны. Фазовая скорость  $v(k)$  каждой из этих волн будет определяться собственным значением  $\rho_0 v(k)$ , соответствующим данному собственному вектору  $\bar{\rho}(k)$ . То, что через кристалл могут распространяться лишь волны строго определенной поляризации, роднит кристаллоакустику с кристаллооптикой. В отличие от электромагнитных волн, в данном случае в каждом направлении  $\bar{m}$  распространяются три упругих волны, а не две. Та из них, вектор поляризации которой составляет наименьший угол с вектором волновой нормали, называется квазипродольной, а две другие – квазипоперечными. Может оказаться, что вектор поляризации одной из волн совпадает с вектором волновой нормали ( $\bar{U}(k) \parallel \bar{m}$ ). Тогда она будет называться чисто продольной. При этом две другие обязательно чисто поперечные  $\bar{U}(k) \perp \bar{m}$ , т.к. собственные векторы обязательно взаимно перпендикулярны. Такое направление вектора  $\bar{m}$  называется **продольной нормалью**. Может случиться, что только одна волна поперечна. При этом угол между вектором поляризации квазипродольной волны и волновой нормалью равен углу между вектором поляризации квазипоперечной волны и плоскостью волнового фронта. В этом случае направление  $\bar{m}$  называют **поперечной нормалью** (см. рис. 42), где  $\bar{\rho}_l$  – вектор смещения квазипродольной волны, а  $\bar{\rho}_T$  – вектор квазипоперечной

волны. Если два собственных значения тензора Кристоффеля совпадают, то в данном направлении  $\vec{m}$  может распространяться квазипродольная волна с вектором поляризации  $\vec{p}_Q$ , фазовая скорость которой  $u_Q$  определяется однократным собственным значением  $\rho u^2_Q$ , а также множество квазипоперечных волн с одинаковыми фазовыми скоростями  $u_Q$ , векторы поляризации которых имеют всевозможные направления, перпендикулярные  $\vec{p}_Q$ . Одна из этих волн чисто поперечная. Ее вектор поляризации  $\vec{p}_Q \parallel \vec{p}_0 \times \vec{m}$ . Направление  $\vec{m}$  в этом случае называется **акустической осью**. Если при этом  $\vec{m}$  оказывается еще и продольной нормалью, т.е., то все упругие волны, поляризованные перпендикулярно  $\vec{p}_Q$ , поперечны и направление  $\vec{m}$  называется **продольной акустической осью**.

Чтобы вычислить фазовую скорость упругой волны, следует найти соответствующее собственное значение тензора Кристоффеля. По своей сути схема отыскания фазовых

скоростей упругих волн и их векторов поляризаций аналогична той, что использовалась в кристаллооптике.

Таким образом, существует много общего в распространении упругих и световых волн. Однако имеются и различия. В первую очередь они связаны с тем, что оптические волны всегда поперечны чего нельзя утверждать относительно упругих волн. Наиболее важным следствием этого явилось наличие трех, а не двух как в оптике, упругих волн в кристалле.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основной задачей, которая ставилась при написании данного учебного пособия, являлось ознакомление студентов технических специальностей,

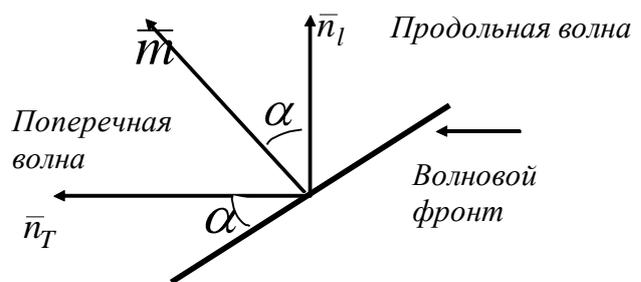


Рис.33

изучающих курс «Материалы и элементы электронной техники» с основами кристаллографии и кристаллофизики, традиционно читаемых в классических университетах. Отсутствие подходящего учебника по данным дисциплинам поставило автора перед необходимостью переработать имеющийся материал без существенного ущерба строгости его изложения и полноте раскрытия вопросов, ориентируясь на уровень знаний студентов технических вузов. Это предполагало дополнительные пояснения физической сущности рассматриваемых явлений и математических преобразований тензоров, демонстрации действий с тензорными выражениями и т.д. Автор отдаёт себе отчет в том, что значительная часть важных для электронной техники вопросов кристаллофизики, в частности вопросы о структуре и свойствах жидких кристаллов, основы зонной теории полупроводников и диэлектриков, элементы теории сверхпроводимости осталась за рамками данного пособия.

Если после изучения данного учебного пособия студент способен ориентироваться в законах симметрии, сможет в рассуждениях и вычислениях применить эти принципы и теоремы кристаллофизики, а также использовать тензорное описание свойств для рассмотрения физических явлений в кристаллах и их предсказаний, то автор будет считать свою задачу в значительной степени выполненной.

## 5. ЛИТЕРАТУРА

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.С. Желудев. Электрические кристаллы. М.: Наука, 1969.
6. И.С. Желудев. Симметрия и её приложения. М.: Атомиздат, 1976.

ФОРМА МАТРИЦ ПЬЕЗОМОДУЛЕЙ КРИСТАЛЛОВ  
РАЗЛИЧНЫХ СИНГОНИЙ

**Триклинная сингония**

Класс 1

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

**Моноклинная сингония**

Класс 2,  $2 \parallel X_2$  (обычн. ориентация)

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & 0 & d_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{34} & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

Класс 2,  $2 \parallel \perp X_3$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & d_{25} & 0 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

Класс  $m$ ,  $m \perp X_2$  (обыч. ориентация)

$$\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & 0 & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & d_{35} & 0 \end{pmatrix}$$

Класс  $m$ ,  $m \perp X_3$

$$\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & 0 & 0 & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & 0 & 0 & d_{26} \\ 0 & 0 & 0 & d_{34} & d_{35} & 0 \end{pmatrix}$$

**Ромбическая сингония**

Класс 222

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{33} \end{pmatrix}$$

Класс  $mm2$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

**Тетрагональная сингония**

Класс 4

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & -d_{14} & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Класс  $\bar{4}$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -d_{15} & d_{14} & 0 \\ d_{31} & -d_{31} & 0 & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

Класс 422

Класс  $4mm$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & -d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

Класс  $\bar{4}2m$ ,  $2 \parallel X_1$  (обычная ориентация)

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

### Тригональная сингония

Класс 3	Класс 32
$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & -d_{14} & 2d_{11} \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Класс  $3m$ ,  $m \perp X_1$  (обыч.ориентац.)

Класс  $3m$ ,  $m \perp X_2$

$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & -2d_{11} \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
--	--

### Гексагональная сингония

Класс 6	Класс $6mm$
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & -d_{14} & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Так же, как класс 4

класс 622

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Так же, как класс  $4mm$

класс 6

$$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & 0 & 2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

## Кубическая сингония

$$\begin{array}{cc} \text{Класс } 432 & \text{Класс } \bar{4}3m \text{ и класс } 23 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} \end{pmatrix} \end{array}$$

### Форма матриц пьезомодулей для некоторых пьезоэлектрических текстур

$$\begin{array}{cc} \text{Группа } \infty & \text{Группа } \infty m \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & -d_{14} & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \\ \text{Группа } \infty 2 & \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \end{array}$$

ФОРМА МАТРИЦ УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ  
КРИСТАЛЛОВ РАЗЛИЧНЫХ СИНГОНИЙ

**Триклинная сингония**

Оба класса

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{31} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix}$$

**Моноклинная сингония**

Все классы,  $2 \parallel X_2$  (обычная ориентация)

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & C_{15} & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & C_{25} & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & C_{35} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{46} & 0 & C_{66} \end{pmatrix}$$

**Ромбическая сингония**

Все классы

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}$$

## Тетрагональная сингония

Классы  $4, \bar{4}, 4/m$

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & C_{16} \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & -C_{16} \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ C_{16} & -C_{16} & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}$$

Классы  $4mm, \bar{4}2m, 422, 4/mmm$

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}$$

## Гексагональная сингония (тригональная система)

Классы  $3, \bar{3}$

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & -C_{25} & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & C_{25} & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ C_{14} & -C_{14} & 0 & C_{44} & 0 & C_{25} \\ -C_{25} & C_{25} & 0 & 0 & C_{44} & C_{14} \\ 0 & 0 & 0 & C_{25} & C_{14} & 1/2(C_{11} - C_{12}) \end{pmatrix}$$

Классы  $32, \bar{3}m, 3m$

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ C_{14} & -C_{14} & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ -C_{25} & C_{25} & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & C_{14} \end{pmatrix}$$

## Гексагональная сингония

$$\begin{array}{c}
 \text{Все классы} \\
 \left( \begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

## Кубическая сингония

$$\begin{array}{c}
 \text{Все классы} \\
 \left( \begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\
 C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\
 C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\
 \bar{0} & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\
 0 & 0 & \bar{0} & 0 & 0 & C_{44}
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

## Однородные непрерывные среды (текстуры), описываемые группами

$\infty m, \infty, \infty/m, \infty/mmm, \infty 2$

$$\left( \begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})
 \end{array} \right)$$