

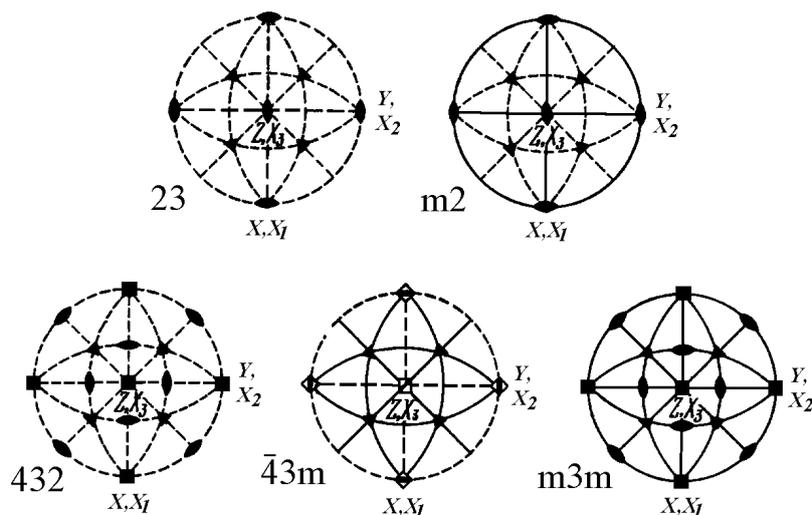
Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

В.Н. Давыдов

МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

*Учебное методическое пособие
с примерами решения задач и задачами
для самостоятельной работы студентов*



Томск - 2019

Давыдов Валерий Николаевич

доктор физико-математических наук,
профессор кафедры электронных приборов
Томского государственного университета
систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР)

МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ. Учебное методическое пособие с примерами решения задач и задачами для самостоятельной работы студентов. Томск, 2019. - 62 с.

Данное учебное методическое пособие предназначено для усвоения студентами теоретического материала дисциплины, изложенного в учебном пособии, приобретения навыков по выбору материалов электронной техники для создания элементов электронной техники и расчету их основных параметров. Для удобства и лучшего запоминания теоретической материала дисциплины каждая глава пособия предваряется кратким изложением теории, необходимой для решения задач этого раздела, за которым следуют примеры решения типовых задач и задачи для самостоятельного решения. Приведенные в пособии примеры решения задач также направлены на приобретение навыков математического описания структуры кристаллов.

Приведенные в пособии примеры решения задач, а также задачи для самостоятельного решения также направлены на приобретение навыков математического описания симметричных свойств кристаллических материалов. В пособии рассматриваются вопросы практического выбора материалов электронной техники по заданным параметрам, симметричным свойствам, возможности вариации свойств материалов наложением внешних воздействий различной природы. На примерах решения конкретных задач практической направленности показаны возможности управления физическими свойствами кристаллов выбором их точечной симметрии, направлением приложения внешнего воздействия для наблюдения выбранного физического свойства, определения симметричных ограничений по наблюдению физического свойства, а также его численных значений в различных кристаллографических направлениях. Пособие написано простым языком с выполнением всех аналитических и численных расчетов с получением конечного результата. Оно будет полезно студентам, изучающим указанную дисциплину, а также другие дисциплины близкой направленности.

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ	6
2. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ	8
2.1. Краткое содержание теории	8
2.2. Матричное представление элементов симметрии.....	11
2.3. Примеры решения задач на составление матриц преобразования	13
2.4. Варианты заданий по матричному представлению элементов симметрии	20
3. ПРЕДЕЛЬНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ. ПРИНЦИП НЕЙМАНА И ПРИНЦИП КЮРИ	22
3.1. Краткое изложение теории	22
3.2. Примеры решения задач на принципы кристаллофизики.....	25
3.3. Варианты заданий по принципам кристаллофизики и наложению элементов симметрии	31
4. ТЕНЗОРЫ ВТОРОГО РАНГА	34
4.1. Краткое изложение теории	34
4.2. Примеры решения задач по определению физического свойства в заданном направлении	37
4.3. Варианты заданий по определению физического свойства в заданном направлении	39
4.4. Примеры решения задач по определению вида тензора в новой системе координат	44
4.5. Варианты заданий по определению вида тензора в новой системе координат	47

5. ЛИТЕРАТУРА	55
ПРИЛОЖЕНИЕ	56
Таблица 1. Стандартные установки кристаллофизической системы координат	57
Таблица 2. Стереографические проекции кристаллов различной точечной симметрии	58

1. ВВЕДЕНИЕ

Данное учебно-методическое пособие включает в себя материалы, необходимые для усвоения теоретической части дисциплины «Кристаллография» решением задач по конкретным вопросам, а также для приобретения навыков в решении задач по курсу «Кристаллофизика» путем вычисления параметров и величин физических свойств кристаллов, возникающих при создании элементов электронной техники.

Структурно пособие состоит из двух частей, в которых рассматриваются вопросы физического и математического описания структуры кристаллических материалов, а также их фундаментальных свойств. Каждый раздел курса предваряется кратким изложением теории, необходимой для решения задач этого раздела, за которым следуют примеры решения типичных задач и затем задачи для самостоятельного решения.

В первой части пособия решаются задачи по преобразованию системы координат элементами точечной симметрии, определению вида тензора в новой системе координат, применению принципов Неймана и Кюри для определения выполнения условий, накладываемых теорией симметрии, необходимых для наблюдения физического свойства, вычислению величины физического свойства в заданном кристаллографическом направлении.

Во второй части данного пособия приведены примеры решения задач по вычислению физических свойств первого ранга, второго ранга с вычислением как экстремальных значений физических свойств и направления его реализации, так и величины физического свойства в заданном кристаллографическом направлении, составления тензоров упругих напряжений, вычисления физических свойств третьего и четвертого рангов.

В приложении к пособию помещены таблицы с указанием выбора стандартной установки кристаллографической системы координат, вида стереографической проекции кристаллов, вида тензоров третьего и четвертого ранга в матричной форме кристаллов различных сингоний и точечных групп. Данные материалы необходимы при решении задач на определение физических свойств, описываемых тензорами различных рангов.

Данное учебное методическое пособие составлено по результатам более чем 25-летнего опыта преподавания дисциплины в техническом университете. При составлении программы курса автор основывался на структуре фундаментальной монографии Ю.И. Сиротина и М.П. Шаскольской «Основы кристаллофизики» М.: 1979. и учебно-методическом пособии по кристаллофизике Н.В. Переломова, М.М. Тагиева. «Задачник по кристаллофизике». М.: Наука, 1972. Исходя из опыта преподавания дисциплины,

материалы указанных монографии и задачника значительно переработаны и дополнены автором как по структуре разделов, математическому изложению материала, так и физическому содержанию математических операций, основных терминов, понятий, принципов.

2. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

2.1. Краткое содержание теории

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

Все возможные фигуры материального мира могут быть представлены в виде комбинации конечного числа простых геометрических фигур: куб, пирамида, тетраэдр, шар, конус и т.д. Для описания формы геометрических фигур этого набора используется конечное число элементов симметрии теории симметрии. Поэтому, описав на языке математики эти фигуры, мы получаем возможность математически точно передать форму любого объекта. Ввиду специфики рассматриваемых в кристаллографии и кристаллофизике объектов, далее рассматриваются только объекты неживой природы и их симметрия. Рассмотрим базовые элементы симметрии.

Плоскость симметрии (её наличие обозначают символом « m ») – это плоскость, которая делит фигуру на две зеркально равные части (рис.1). Плоскость симметрии можно представлять себе как зеркало внутри фигуры. Примерами плоскости симметрии являются плоскость, делящая яблоко по его сердцевине на две равные части, вертикальная плоскость, проходящая посередине через человека с лицевой стороны и т.д. Если нормаль к плоскости направлена по оси X (рис.2), то эту плоскость обозначают как m_x , если по оси Y , то m_y и т.д. Возможны более сложные индексы, например, или например, m_{xy} или m_{xyz} .

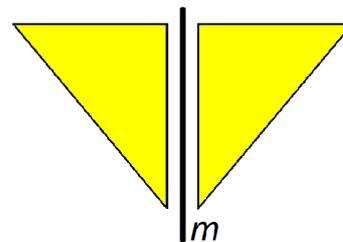


Рис.1.

На рисунках плоскость симметрии изображают толстой линией в виде прямой, окружности или эллипса в зависимости от ориентации плоскости симметрии.

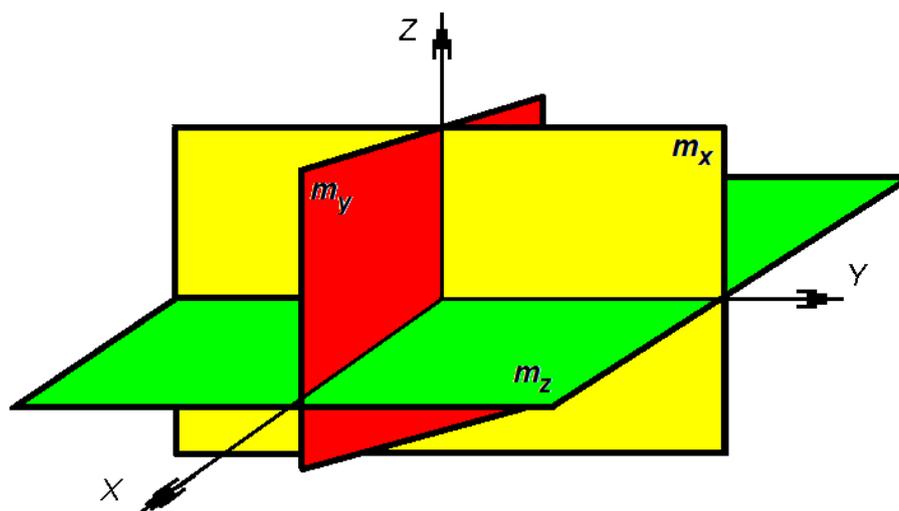


Рис.2

В чем же польза от знания того, что в рассматриваемой фигуре есть плоскость симметрии? Она в том, что описывая форму этой фигуры, нет необходимости описывать ее полностью, можно описать только ее половину, т.к. вторая половина полностью аналогична первой – плоскость симметрии является зеркалом внутри фигуры, которая

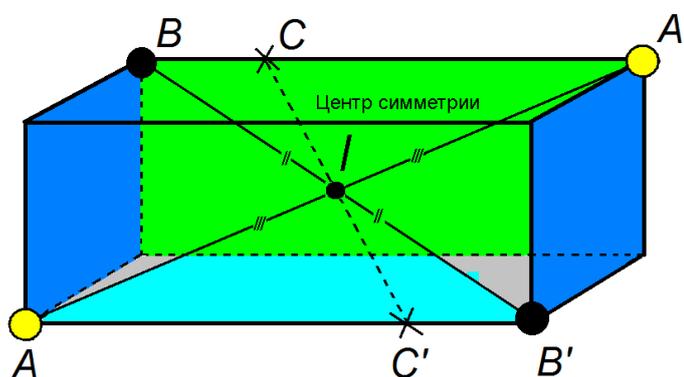


Рис. 3

ориентирована в соответствии с тем, как направлена нормаль к этой плоскости.
ориентирована в соответствии с тем, как направлена нормаль к этой плоскости.

Центром симметрии (его обозначают латинской буквой I и иногда называют центром инверсии) - называется особая точка внутри фигуры, характеризующаяся тем, что любая проведенная через нее прямая встречает одинаковые (говорят «гомологичные») точки по обе стороны от нее и на равных расстояниях (рис.3): $A - A'$, $B - B'$. Таким образом, действие симметрии центра инверсии - это отражение в точке, в которой он находится. Обычно это геометрический центр фигуры.

Ось симметрии n -го порядка (её наличие обозначают символом « n ») – это прямая линия, проходящая внутри рассматриваемой фигуры, при повороте вокруг которой на

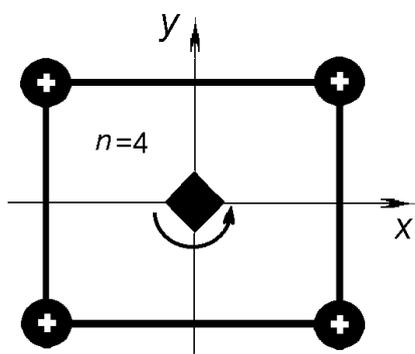


Рис. 4

некоторый угол или несколько углов фигура совмещается сама с собой (рис. 4). Наименьший угол поворота определяется порядком оси и равен: $\alpha=2\pi$

$/n$, всего поворотов у оси n - штук: $\alpha, 2\alpha, 3\alpha, \dots, n\alpha$.

Примером оси четвертого порядка является ось, проходящая через две противоположные грани куба.

В элементах симметрии кристаллов n не может быть равно пяти и быть больше шести. Таким образом, в

реальных кристаллах $n=1, 2, 3, 4, 6$. Доказательством

этого является следующее обстоятельство: фигура (в нашем случае элементарная ячейка кристалла) должна быть такой симметрии, чтобы укладывая их рядом, можно было бы

плотно заполнить всю плоскость. Если это удастся, то элементарные ячейки такой симметрии будут плотно прилегать друг к другу, образуя механически прочный кристалл.

Для этой цели можно применить плоские фигуры: неправильной формы (имеет ось симметрии порядка $n = 1$), прямоугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 2$),

равносторонний треугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 3$), квадрат (имеет ось симметрии порядка $n = 4$) и шестиугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 6$).

Примером последней ситуации является пчелиный улей, составленный из шестиугольных сот. Но невозможно провести плотную упаковку плоскости пятиугольниками,

семиугольниками, восьмиугольниками и т.д. – между отдельными фигурами обязательно будут пустоты. Это утверждение легко проверить, вырезав пятиугольники и складывая их

на плоскости до плотного её заполнения. Такого не получится - фигуры не будут прилегать друг к другу без пустот. Отсутствие плотной упаковки между элементарными

ячейками кристалла приведет к тому, что ячейки будут слабо связаны друг с другом. Как следствие этого, такой кристалл окажется, во-первых, с нарушенной трансляционной

симметрией, а с другой, из-за наличия промежутков между элементарными ячейками структурно непрочен, так что любое слабое воздействие разрушит его до размеров

элементарных ячеек.

Вывод о возможных значениях порядка оси симметрии для реальных кристаллов, полученный здесь логическим путем, можно доказать строго математически (см. Учебное

пособие по курсу). На рис. 4 в качестве демонстрации оси симметрии показана фигура в виде правильного четырехугольника, обладающего осью симметрии четвертого порядка, проходящей через центр фигуры перпендикулярно плоскости рисунка.

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

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

Каждый элемент симметрии может породить несколько операций симметрии: ось симметрии третьего порядка - повороты на углы 120^0 , 240^0 и 360^0 ; ось 6 - на 60^0 , 120^0 , 180^0 , 240^0 , 360^0 . Таким образом, ось 6 порождает оси порядка 3 (углы поворота 120^0 , 240^0 и 360^0) и 2 (углы поворота 180^0 и 360^0). Другие элементы симметрии также способны образовать новые элементы.

2.2. Матричное представление элементов симметрии

В данном параграфе показано как математически описать действие элементов симметрии.

Операции симметрии могут быть описаны аналитически как преобразование системы координат, вызванное действием рассматриваемого элемента симметрии. Это обусловлено тем, что при вращении или отражении какого - либо объекта есть две основные возможности описания совершённого действия: либо перевести объект в новое положение в исходной системе координат (этот случай соответствует неподвижному наблюдателю фигуры), либо оставить объект неподвижным, а переместить наблюдателя этой фигуры, т.е. переместить систему координат. При первом подходе требуется записать математические выражения, описывающие перемещение каждой точки объекта в новое положение. В этом случае требуется также знание координат каждой точки объекта, что громоздко и требует больших затрат времени и вычислительных действий. Поэтому второй путь оказывается предпочтительнее, т.к. он технически проще и к тому же

позволяет воспользоваться уже имеющимися методами аналитической геометрии. В этом случае точку, остающуюся неподвижной, выбирают за начало координат ортогональной системы $X_1 X_2 X_3$. Тогда действие любой операции точечной симметрии будет представлять собой перевод осей координат $X_1 X_2 X_3$ в новые ортогональные положения $X_1' X_2' X_3'$. Углы между новыми ($X_1' X_2' X_3'$) и старыми ($X_1 X_2 X_3$) осями определяются таблицей направляющих косинусов, которая и представляет собой матрицу преобразования координат.

Таблица косинусов

	X_1	X_2	X_3
X_1'	C_{11}	C_{12}	C_{13}
X_2'	C_{21}	C_{22}	C_{23}
X_3'	C_{31}	C_{32}	C_{33}

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

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

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

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

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

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

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

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

2.3. Примеры решения задач на составление матриц преобразования

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

Задача 1. Записать матричные представления операций симметрии, входящих в точечную группу *mmm*.

Решение. Точечная группа *mmm* описывает симметрию элементарной ячейки кристаллов ромбической сингонии. Геометрической фигурой, имеющей такую группу симметрии, является прямоугольный параллелепипед (например, кирпич). Согласно правилам составления международного символа этой сингонии в кристалле имеется три плоскости симметрии, лежащие в координатных плоскостях. Другие элементы симметрии, входящие в данную группу, можно выявить, применяя пять свойств элементов симметрии.

По первому свойству линия пересечения двух плоскостей - это ось симметрии с

двойным углом: $90^0 \cdot 2 = 180^0$, т.е. это оси второго порядка. По второму свойству элементов симметрии пересечение оси симметрии порядка 2 перпендикулярно

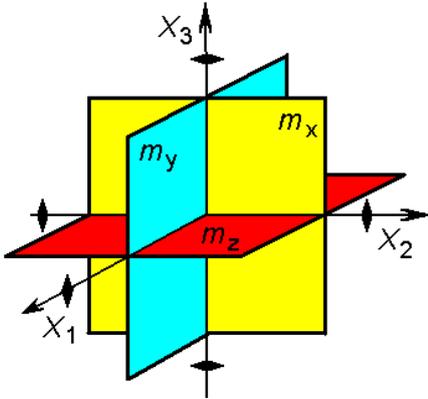


Рис.5

(обозначим это состояние символом « \perp ») плоскости симметрии m дает центр инверсии. Третье и четвертое свойства дополнительных элементов симметрии не дают. В итоге имеем три плоскости симметрии, три оси второго порядка и центр симметрии I, т.е. три отражения в плоскости, три поворота на 180^0 и центр инверсии, а также поворот на 360^0 - поворот вокруг осей X_i ($i = 1, 2, 3$).

Начнем рассмотрение с операции отражения в плоскости $X_1O X_2$ (или сокращенно: $m \perp X_3$) (рис. 5). В этом случае ось X_3 , отразившись в зеркале, сменит свое направление на обратное. Две другие оси лежат в плоскости симметрии (в плоскости зеркала) и потому никак не изменяют свою ориентацию. Эта ситуация с расположением осей координат новой и старой систем математически описывается следующим образом:

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

В развернутом виде это можно представить в виде разложения новых осей по старым, т.е. не подвергнутых действию элемента симметрии

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

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

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

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

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

Рассмотрим теперь преобразование системы координат осью симметрии второго порядка, например, проходящей по оси X_3 . Происходящие при операции поворота на 180^0 вокруг оси X_3 (обозначим эту ситуацию так: $X_3, 180^0$) изменения в положении координатных осей показаны на рис.6. Здесь ось X_3 не изменит своего положения, т.к. вращение производится вокруг этой оси.

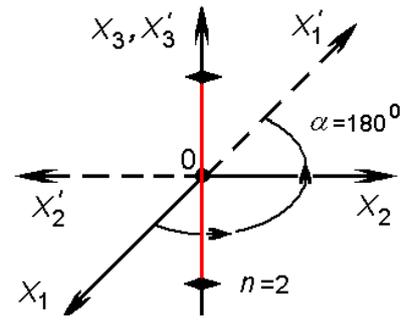


Рис.6

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

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

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

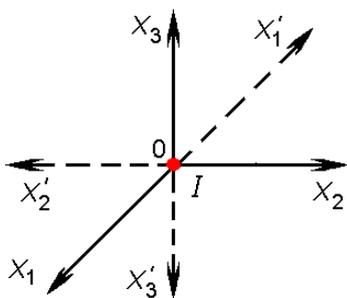


Рис.7.

Для двух других осей симметрии второго порядка, проходящих по координатным осям X_1 и X_2 : $(X_2, 180^0)$ и $(X_1, 180^0)$, матрицы преобразования можно записать по аналогии

$$C_{ij}(X_2, 180^0) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad C_{ij}(X_1, 180^0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

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

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

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

И наконец, матричное представление операции инверсии I (рис. 7). В этом случае все оси координат меняют свое направление на обратное и потому «-1» будет стоять во всех позициях диагонали матрицы

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

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

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

Решение. В соответствии с правилами выбора кристаллофизических осей относительно элементов симметрии (см. табл.1) оси X_1, X_2, X_3 точечной группы симметрии 32 ориентируются, как показано на рис.8. Здесь изображена стереографическая проекция точечной группы 32 с выбранной системой координат (см. таблицу Приложения 1). Ось симметрии третьего порядка расположена перпендикулярно рисунку и направлена по оси X_3 . Ось симметрии второго порядка по пятому свойству элементов симметрии «размножится» осью симметрии третьего порядка и их станет три - все будут перпендикулярны оси $n = 3$. Эти оси находятся в плоскости рисунка, так что угол между ними равен $2\pi/n = 120^0$. Других элементов симметрии в данной группе нет, в чем нетрудно убедиться перебирая свойства элементов симметрии при известных: оси симметрии третьего порядка и трех осей симметрии второго порядка. Для составления матрицы преобразования системы координат, осуществляемого осью симметрии третьего порядка, важно помнить, что этот элемент симметрии совершает поворот системы координат вокруг оси X_3 на углы $120^0, 240^0$ и 360^0 .

Запишем сначала матрицу для поворота на угол 120^0 вокруг оси X_3 . Для корректного решения поставленной задачи обратимся вновь к рис.8 и отметим на нем положение новых осей X_1', X_2' . Теперь несложно посчитать косинусы углов между новыми и старыми осями

координат, учитывая, что ось X_3 своего положения не изменила. Опуская простые геометрические вычисления проекций новых осей на старые, запишем матрицу преобразования при повороте на 120^0 вокруг оси X_3 в следующем виде:

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

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

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

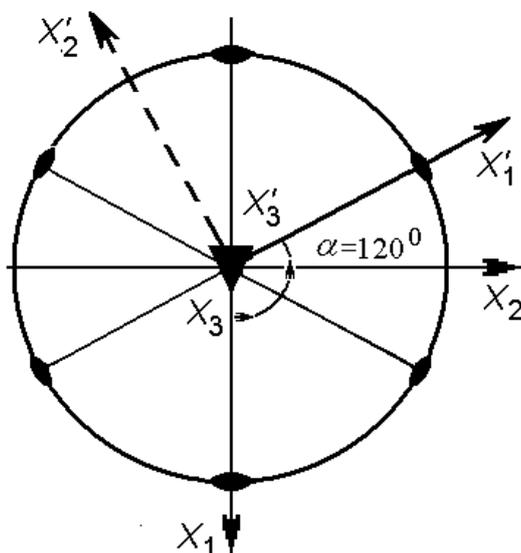


Рис.8

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Запишем матрицу, соответствующую повороту на 90^0 вокруг оси X_3 :

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

Матрица, соответствующая повороту на 180^0 вокруг оси X_1 , имеет вид

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

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

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

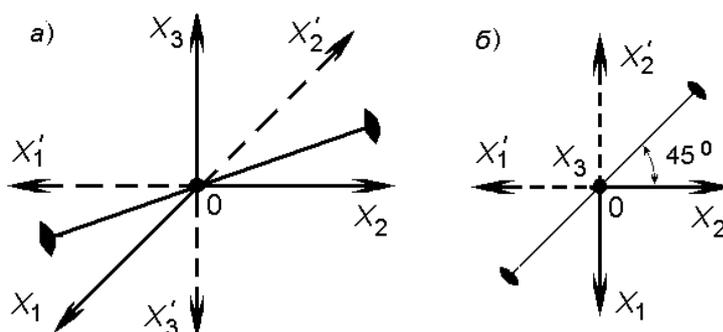


Рис.9

Из вида полученной матрицы делаем вывод: результирующий элемент симметрии C - это такая симметрическая операция, которая переводит (расшифровываем первую строку) ось X_1 в «- X_2 », ось X_2 (расшифровываем вторую строку) - в «- X_1 », а ось X_3 (расшифровываем третью строку) - в «- X_3 ». Таким элементом симметрии является ось второго порядка, располагающаяся под углом 45^0 к осям X_1 и X_2 и проходящая перпендикулярно оси X_3 (рис.9а.). Рисунок 9б поясняет положение оси симметрии второго порядка. Аналогично взяв поочередно произведение всех матриц, соответствующих поворотам на 90 , 180 , 270 , 360^0 вокруг оси X_3 , на матрицу, соответствующую повороту на 180^0 вокруг оси X_1 ($2||X_1$), получим, что перпендикулярно оси симметрии четвертого порядка расположатся четыре оси второго порядка.

В заключение на основании рассмотрения решений типовых задач на определение матриц преобразования системы координат элементами симметрии отметим два важных обстоятельства. При перемножении матриц, соответствующих нескольким преобразованиям системы координат, матрицы располагаются в следующем порядке: справа стоит та матрица, преобразование по которой сделано раньше. Следующее важное обстоятельство: при составлении матрицы нескольких последовательных преобразований второе и далее по счету преобразование системы координат следует проводить с исходной системой координат независимо от того, сколько преобразований симметрии до этого проведено. Если же каждое последующее преобразование в системе координат, измененное предыдущим преобразованием, то последнее преобразование будет учитывать все проведенные преобразования, и, следовательно, будет являться результирующим преобразованием.

2.5. Варианты заданий по матричному представлению элементов симметрии

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

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

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

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

5. Найти матрицу преобразования системы координат осью симметрии второго порядка, лежащей в координатной плоскости X_1OX_2 и располагающейся под произвольным углом φ к оси X_1 .

6. Найти матрицу преобразования системы координат осью симметрии второго порядка, лежащей в координатной плоскости X_1OX_2 и располагающейся под произвольным углом φ к оси X_2 .

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

же результату.

8. Кристалл поворачивают на 120^0 , затем отражают в центре инверсии. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату, и определить какой элемент симметрии даст такое же преобразование.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

18. Кристалл поворачивают на 45^0 , затем отражают в плоскости симметрии, проходящей перпендикулярно оси поворота. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

19.. Кристалл поворачивают на 240^0 , затем отражают в плоскости симметрии, проходящей параллельно оси поворота. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

20. Кристалл сначала поворачивают на угол 90^0 , затем на 180^0 вокруг направления, перпендикулярного оси первого поворота. Найти матричное представление операции симметрии, которое приводит к тому же результату.

3. ПРЕДЕЛЬНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ. ПРИНЦИП НЕЙМАНА И ПРИНЦИП КЮРИ

3.1. Краткое изложение теории

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

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

Группа симметрии физического свойства кристалла должна включать в себя в качестве подгруппы или совпадать с точечной группой симметрии этого кристалла.

Этот принцип утверждает, что группа симметрии физического свойства кристалла, определяемая независимо от симметрии его формы, может быть более высокой, чем точечная группа симметрии элементарной ячейки кристалла. В соответствии с принципом Неймана физическое свойство кристалла должно иметь хотя бы часть или все элементы симметрии, которыми обладает элементарная ячейка кристалла. Точечная группа кристалла является подгруппой группы симметрии физического свойства. Как это понимать?

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

одновременно, но обязательно ось должна лежать в плоскости симметрии ($3m$, $4mm$, $6mm$, ∞m). Таким образом, имеется двенадцать указанных выше точечных групп, в которых возможна поляризация.

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

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

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

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

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

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

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

воздействия, или, во-вторых, поочередно накладывая элементы симметрии внешнего воздействия на элементы симметрии кристалла.

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

Второй способ. При наложении оси симметрии бесконечного порядка и оси симметрии четвертого порядка друг на друга результирующим элементом будет ось симметрии четвертого порядка. Поясним этот вывод: если в цилиндр вдоль его оси ввести четырехугольную пирамиду так чтобы их оси совпадали, то результирующая фигура (цилиндр, из которого по его длине выступают четыре ребра пирамиды) будет иметь ось симметрии четвертого порядка. Теперь будем совмещать плоскости симметрии: во внешнем воздействии их бесконечное количество вдоль оси, а в пирамиде только четыре (две по осям X_1 и X_2 , а также две по диагонали между осями X_1 и X_2). Поскольку должны остаться только общие плоскости, то в результирующей фигуре будет четыре плоскости симметрии, совпадающие с плоскостями пирамиды. Оставшийся набор элементов симметрии будет такой же, что и в группе $4mm$. Значит, симметрия исходной фигуры при указанном внешнем воздействии не изменится.

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

3.2. Примеры решения задач на принципы кристаллофизики

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

* Какие из ориентированных кварцевых пластинок: пластинки, перпендикулярные оси симметрии третьего порядка или оси второго порядка, следует выбрать в качестве чувствительных элементов пьезоэлектрических датчиков одноосного давления?

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

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

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

Начнем рассмотрение первого вопроса, поставленного в задаче. В кристаллах может наблюдаться поляризация, если в результате наложения симметрии воздействия на симметрию кристалла, согласно принципу Кюри, останется симметрия одного из 10 полярных классов. При этом неважно, будет ли это достигнуто за счет симметрии кристалла при самой высокой симметрии воздействия (пироэлектрический эффект), или, наоборот, за счет полярной симметрии воздействия, когда поляризация может наблюдаться в кристалле любой симметрии и даже в изотропном теле. Это с одной стороны. А с другой, поляризация кристаллов под действием одноосного сжатия возникает в том случае, если в кристалле имеется единичное направление, являющееся одновременно и полярным. В классе 32 ось третьего порядка является единичным, но не полярным направлением из-за наличия перпендикулярных этой оси осей второго порядка =- они своим действием совмещают противоположные концы оси третьего порядка. Это означает,

что если по каким-то причинам вдоль этого направления появится электрическое поле поляризации, то оси второго порядка, замкнув концы поля, уничтожат его. Напомним, что полярное направление это такое направление, концы которого не могут быть совмещены никакими элементами симметрии, входящими в группу симметрии кристалла.

Действуем на кристалл кварца одноосным сжатием, обладающим группой симметрии ∞/mmm , вдоль оси третьего порядка. Результирующая симметрия кристалла под воздействием вычисляется как произведение точечных групп симметрии кристалла и воздействия следующим образом:

$$32 \cap_{\parallel 3} \infty/mmm,$$

где \cap - знак, обозначающий пересечение (или произведение) групп. Правый нижний индекс у знака произведения групп показывает, что воздействие приложено параллельно оси симметрии третьего порядка. Группа симметрии воздействия содержит в себе не только ось симметрии бесконечного порядка и бесконечное число плоскостей симметрии, проходящих через эту ось, но и плоскость симметрии, перпендикулярную оси. Наличие этой плоскости, пересекающейся с бесконечным числом параллельных плоскостей, согласно первому и второму свойству элементов симметрии, приводит к появлению в группе симметрии воздействия бесконечного числа осей второго порядка, перпендикулярных оси симметрии бесконечного порядка, а также центра симметрии на этой оси. Набор элементов симметрии кристалла невелик: одна ось симметрии третьего порядка, перпендикулярные ей три оси симметрии второго порядка и центр симметрии. Эти два набора надо сопоставить (перемножить) на предмет выявления одинаковых элементов.

Произведя произведение групп путем наложения элементов симметрии воздействия на элементы симметрии кристалла видим, что бесконечно большое число плоскостей симметрии воздействия не войдут в результирующую группу. Ось симметрии бесконечного порядка, будучи параллельной оси симметрии третьего порядка, даст ось симметрии третьего порядка. Бесконечное число перпендикулярных осей симметрии второго порядка пересекутся с тремя осями второго порядка из группы симметрии кристалла, центры симметрии также пересекутся и войдут в группу симметрии кристалла под воздействием как один центр. Таким образом, получаем, что при такой ориентации упругого воздействия на кристалл кварца его симметрия не изменяется:

$$32 \cap_{\parallel 3} \infty/mmm = 32.$$

Группа симметрии 32 не является подгруппой группы симметрии полярного вектора. Следовательно, сжимая кварцевую пластинку, вырезанную так, что ее рабочие грани перпендикулярны оси симметрии третьего порядка (пластинка Z-среза; см. рис.10), эффекта поляризации не будет.

Теперь попробуем сжать кристалл кварца вдоль одной из осей 2:

$$32 \cap \parallel_2 \infty/mmm = 2.$$

Произведя перемножение этих групп по описанной выше методике, увидим, что только ось симметрии бесконечного порядка даст ось симметрии второго порядка в группу симметрии кристалла под воздействием. Другие элементы воздействия вклада не дадут. Итак, при сжатии вдоль оси симметрии второго порядка симметрия кварца понижается до группы 2 и из всех полярных направлений кристалла, располагающихся в плоскости, перпендикулярной оси симметрии порядка 3, выделяется одно. оно оказывается единичным и полярным. Значит, вдоль него может располагаться вектор поляризации.

Вывод из проведенного рассмотрения следующий. Для получения пьезоэлектрического эффекта при действии одноосного сжатия кварцевую пластину следует вырезать так, чтобы её рабочие грани были перпендикулярны одной из осей 2 (пластинка X-среза; см. рис. 10). Таков наш ответ на первый поставленный в задаче ответ.

Перейдем к рассмотрению второго вопроса задачи. При этом также воспользуемся принципом Неймана, рассматривая произведение точечных групп 32 и группу симметрии воздействия ∞m . Это группа симметрии шара: бесконечное число осей симметрии бесконечного порядка и бесконечное число плоскостей симметрии, ориентированных во всех направлениях пространства. Это рассмотрение дает основание для следующего вывода. В качестве датчиков гидростатического давления, симметрия которого характеризуется группой ∞m , могут использоваться кристаллы, которые обладают единичным полярным направлением в отсутствии воздействия. Их в группе 32 нет. Поэтому для создания датчиков всестороннего сжатия - расширения кристаллы кварца не годятся – они не поляризуются при таком воздействии.

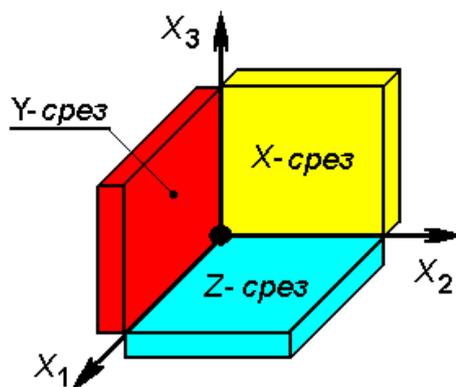


Рис.10

Задача 2. Для исследования физических свойств кристалла сегнетовой соли при температуре выше 24°C были изготовлены пластинки X -, Y -, Z - и L -срезов. Будут ли эти пластинки поляризоваться при действии одноосного сжатия перпендикулярно их торцам? X -срезом пластины называется пластина, поверхность которой перпендикулярна оси X , Y -срезом называется пластина, поверхность которой перпендикулярна оси Y и т.д. (рис.10). L -срез кристалла - это пластина, поверхность которой перпендикулярна пространственной диагонали куба (кристаллографическому направлению $[111]$).

Решение. Кристаллы сегнетовой соли принадлежат классу 222, для которого все направления, лежащие в координатных плоскостях, не являются полярными. Сжатие пластинок X -, Y - и Z -срезов перпендикулярно их торцам означает, что механическое напряжение симметрией ∞/mmm поочередно действуют вдоль направлений $[100]$, $[010]$ и $[001]$. Применяя принцип Кюри, получаем, что при действии одноосного механического напряжения вдоль указанных направлений симметрия кристалла не понижается. Действительно, если вдоль оси симметрии второго порядка (симметрия кристалла) направить ось симметрии бесконечного порядка с бесконечным количеством плоскостей, проходящим через неё, то в результате проявится только ось симметрии (плоскостей симметрии в кристалле в данном направлении нет). Её порядок будет равен двум, т.к. такая ось имеется в оси симметрии бесконечного порядка. Итак, в соответствии с принципом Неймана, такие пластинки не могут поляризоваться при сжимающем напряжении, перпендикулярном их торцам.

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

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

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

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

Решение. По условию задачи внешнее воздействие симметрии ∞/mmm приложили к кубу симметрии $m\bar{3}m$ вдоль направления $[100]$, которое является осью симметрии четвертого порядка. Будем решать задачу двумя способами.

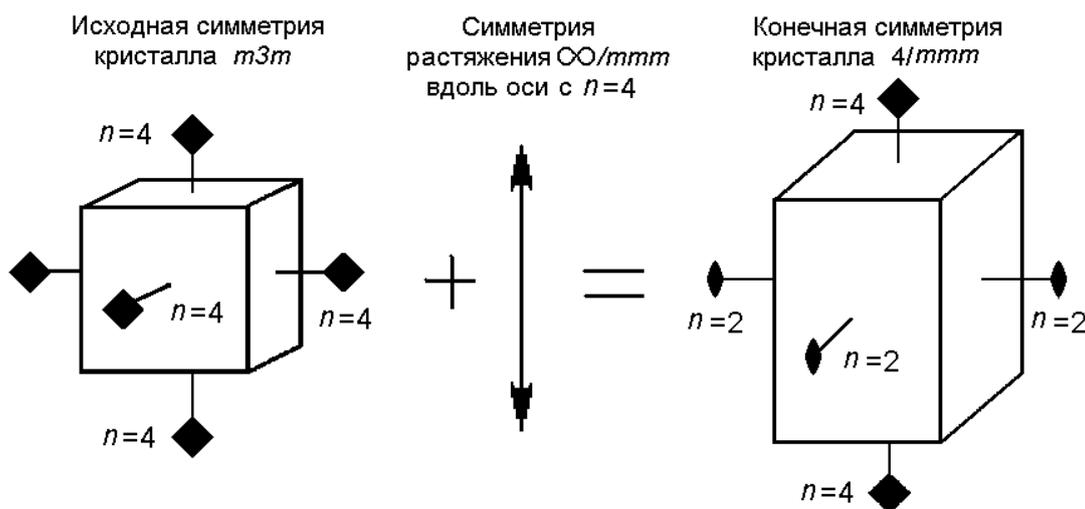


Рис.11

По первому способу представим себе куб, который растягивают за две противоположные грани. В результате такого воздействия куб превратится в прямоугольный параллелепипед. Для лучшего понимания на рис.11 приведена графическая интерпретация принципа Неймана по воздействию упругого напряжения растяжения кристалла кубической симметрии с указанием начальной и конечной симметрии кристалла. Можно видеть, что его симметрия будет $4/mmm$. Действительно, согласно второму способу, вертикальная ось симметрии четвертого порядка (элемент симметрии куба) сохранится при наложении на неё оси симметрии бесконечного порядка (элемент симметрии воздействия). Плоскость симметрии, перпендикулярная оси четвертого порядка присутствует и в фигуре ($m\bar{3}m$), и в воздействии (∞/mmm) (здесь и далее в символе группы жирным шрифтом выделены элементы симметрии, о которых идет речь в тексте). Поэтому она сохранится также. Из бесконечного количества плоскостей симметрии в воздействии (∞/mmm) совпадут только 4 плоскости: две по осям координат и две по диагонали между осям координат. При растяжении кристалла вдоль пространственной диагонали куба (направление $[111]$) куб изменит свой первоначальный вид (см. рис.12). Получившуюся

при этом фигуру нетрудно представить себе, если мысленно растянуть куб, взявшись за его противоположные вершины. Ясно, что поскольку растягивающее усилие направлено по оси симметрии третьего порядка, то в результирующей фигуре этот элемент симметрии сохранится и будет направлен также как и до воздействия: по пространственной диагонали куба. Ось была инверсионной. Таковой она и останется, т.к. в растягивающем действии есть плоскость, перпендикулярная оси симметрии бесконечного порядка (∞/mmm).

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

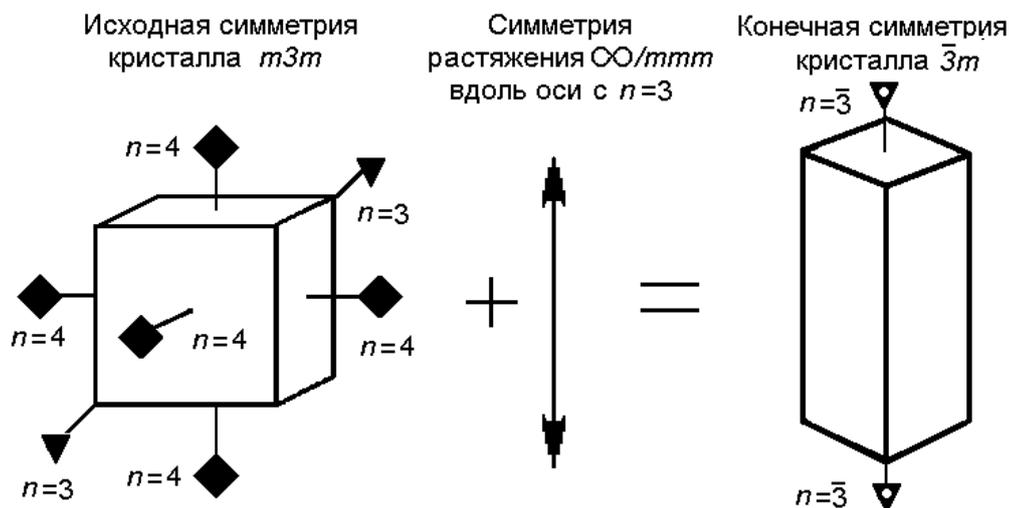


Рис.12.

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

Таким образом, группа симметрии кубического кристалла при одноосном растяжении по пространственной диагонали куба понизится до $\bar{3}m$. Демонстрация этого вывода на стереографической проекции довольно громоздка, нуждается в дополнительных пояснениях и потому не приводится.

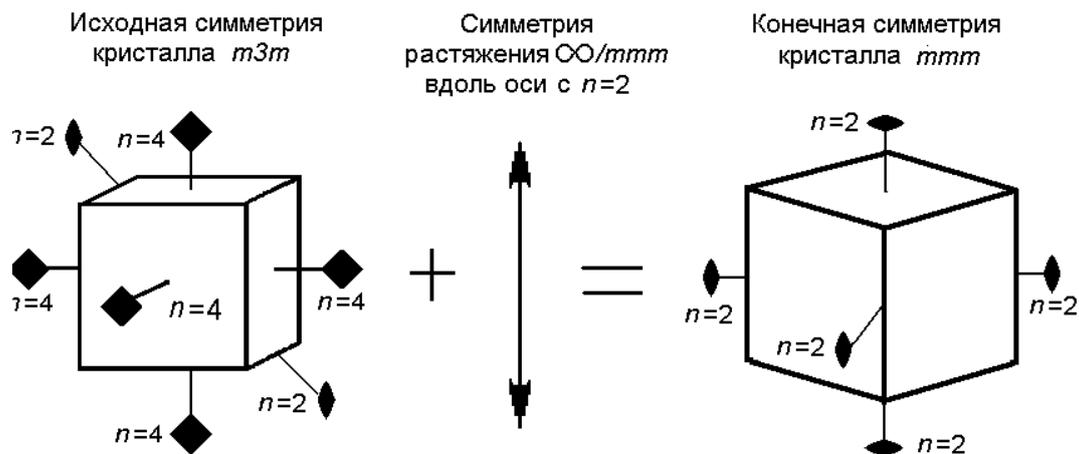


Рис.13

Теперь рассмотрим растяжение куба по направлению $[110]$. Такое растяжение создается, если взяться за середины противоположно расположенных ребер (по диагонали куба) и приложить растягивающее усилие (рис.13). В результате куб превращается в ромбоэдрическую фигуру. У ромбоэдрической сингонии точечная группа симметрии только одна - mmm . Следовательно, в результате растягивающего действия на кристалл группы симметрии $m3m$ группа симметрии понижается до mmm . Этот же результат можно получить по второму способу, накладывая поочередно элементы симметрии воздействия на элементы симметрии кристалла в указанном направлении и учитывая первое свойство элементов симметрии.

3.3. Варианты заданий по принципам кристаллофизики и наложению элементов симметрии

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

6. К кристаллу рубина (точечная группа симметрии $\bar{3}m$) приложили постоянное электрическое поле в направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
7. К кристаллу рубина (точечная группа симметрии $\bar{3}m$) приложили постоянное электрическое поле в направлении $[010]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
8. К кристаллу сульфида кадмия (точечная группа симметрии $6mm$) приложили постоянное электрическое поле в направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
9. К кристаллу сульфида кадмия (точечная группа симметрии $6mm$) приложили постоянное электрическое поле в направлении $[001]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
10. К кристаллу графита (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили постоянное магнитное поле в направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
11. К кристаллу графита (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили постоянное магнитное поле в направлении $[001]$. Как изменится симметрия кристалла в поле?
12. Кристаллы какой симметрии обнаруживают пьезоэлектрический эффект при всестороннем сжатии - растяжении?
13. К кристаллу рубина (точечная группа симметрии $\bar{3}m$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
14. К кристаллу рубина (точечная группа симметрии $\bar{3}m$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[010]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
15. К кристаллу сульфида кадмия (точечная группа симметрии $6mm$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
16. К кристаллу сульфида кадмия (точечная группа симметрии $6mm$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[010]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?
17. К кристаллу алмаза (точечная группа симметрии $6/mmm$) приложили одноосное растягивающее упругое напряжение в кристаллографическом направлении $[100]$. Как изменится симметрия кристалла при таком воздействии?

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

4. ТЕНЗОРЫ ВТОРОГО РАНГА

4.1. Краткое изложение теории

Понятие тензора. Внешне тензор второго ранга представляет собой квадратную матрицу с числом элементов по строкам и столбцам, равным трем. Однако от матриц с аналогичным числом элементов тензор отличается тем, что численные значения его компонент относятся к заданной системе координат и определяют величину какого-либо физического свойства (электропроводность кристалла, удельное сопротивление кристалла, диэлектрическая проницаемость, магнитная проницаемость и другие) в выбранном направлении регистрации физического свойства при заданном направлении внешнего воздействия. Так, численное значение компоненты тензора электропроводности кристалла σ_{23} говорит о том, что при приложении по оси X_3 единичного электрического поля по оси X_2 будет течь ток плотностью σ_{23} . Отличить тензор от матрицы можно по закону преобразования их компонент при смене системы координат: компоненты тензора в новой системе координат $T_{i'j'}$ будут связаны с компонентами тензора в старой системе T_{kl} соотношением

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

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

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

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

Диагональные элементы антисимметричного тензора равны нулю.

Тензорные поверхности. Каждый тензор можно представить в наглядной форме, нарисовав его в трехмерном пространстве как какую-то фигуру, поверхность. Существует два способа отображения тензора в виде объемной фигуры (поверхности).

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

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

$$T_{ij} X_i X_j = 1.$$

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

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

где $T_{11} = T_1, T_{22} = T_2, T_{33} = T_3$. Число возможных видов характеристической поверхности ограничено и определяется величинами собственных значений тензора T_1, T_2, T_3 :

* эллипсоид общего вида (значения T_1, T_2, T_3 положительны и неравны друг другу);

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

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

Если тензор \hat{T} действует на векторное поле \bar{E} (представьте его себе как поле с пшеницей, колоски которой под действием ветра как-то улеглись, образовав некоторую картину распределения направлений стеблей), то в соответствии с выражением $\bar{j} = \hat{T} \bar{E}$ это векторное поле преобразуется в другое векторное поле \bar{j} . Конечно второе поле отличается от первого как одно поле пшеницы от другого - каждый вектор \bar{E} будет преобразован тензором \hat{T} . Если сопоставить между собой векторные поля \bar{j} и \bar{E} , то можно будет обнаружить, что отдельные векторы \bar{j} (их не более трех), полученные из векторов \bar{E} , совпадают с ними по направлению - тензор не изменил их направления, хотя у всех других он это сделал. Вот эти векторы \bar{E} , которые не подверглись переориентации под действием тензора, называют собственными векторами тензора \hat{T} . Число T_1 , указывающее во сколько раз изменилась длина собственного вектора \bar{E}_1 в результате действия на него тензора, называется собственным для вектора \bar{E}_1 . В трехмерном пространстве при решении физических задач число собственных векторов и собственных значений не может быть больше трех. Их находят из решения тензорного уравнения:

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

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

4.2. Примеры решения задач по определению физического свойства в заданном направлении

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

$$\begin{vmatrix} 9.5 & 4.8 & 0 \\ 4.8 & 9.5 & 0 \\ 0 & 0 & 45.8 \end{vmatrix} \cdot 10^{-4}, \text{K}^{-1}$$

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

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

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

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

Величина физического свойства в заданном направлении определяется с помощью выражения

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

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

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

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

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

Теперь в данное выражение вместо α_{ij} подставим значения компонент тензора, а также

значение изменения температуры

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

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

$$\left\| \begin{array}{ccc} 15 & 4.5 & 0 \\ 4.5 & 15 & 0 \\ 0 & 0 & 88.8 \end{array} \right\| \cdot 10^{-7}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\left\| \begin{array}{ccc} 16 & 2.2 & 7.4 \\ 2.2 & 18 & 5.6 \\ 7.4 & 5.6 & 24 \end{array} \right\|.$$

Решение. Величина абсолютной диэлектрической проницаемости ε_a связана с относительной диэлектрической проницаемостью через диэлектрическую проницаемость вакуума $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$

$$\varepsilon_a = \varepsilon_{отн} \cdot \varepsilon_0.$$

Значит, требуемая величина определится с помощью следующего выражения

$$\varepsilon_{an} = \varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_{11} \cdot n_1^2 + \varepsilon_{12} n_1 n_2 + \varepsilon_{13} n_1 n_3 + \varepsilon_{21} n_2 n_1 + \varepsilon_{22} n_2^2 + \varepsilon_{23} n_2 n_3 + \varepsilon_{31} n_3 n_1 + \varepsilon_{32} n_3 n_2 + \varepsilon_{33} n_3^2).$$

Его упрощение возможно за счет использования симметричности тензора диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon_{an} = \varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_{11} \cdot n_1^2 + 2\varepsilon_{12} n_1 n_2 + 2\varepsilon_{13} n_1 n_3 + \varepsilon_{22} n_2^2 + 2\varepsilon_{23} n_2 n_3 + \varepsilon_{33} n_3^2).$$

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

$$\begin{aligned} \varepsilon_{an} &= \varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_{11} \cdot n_1^2 + 2\varepsilon_{13} n_1 n_3 + \varepsilon_{33} n_3^2) = 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot (16 \cdot \frac{2}{4} + 2 \cdot 7.4 \cdot \frac{2}{4} + 24 \cdot \frac{2}{4}) = \\ &= 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot (8 + 7.4 + 12) = 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot 27.4 = 2.4 \cdot 10^{-10} (\text{Ф/м}). \end{aligned}$$

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

4.3. Варианты заданий по определению физического свойства в заданном направлении

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

$$\left\| \begin{array}{ccc} 68 & 0 & 0 \\ 0 & 88 & 0 \\ 0 & 0 & 78 \end{array} \right\| \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

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

$$\begin{vmatrix} 88 & 0 & 0 \\ 0 & 78 & 0 \\ 0 & 0 & 68 \end{vmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}.$$

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

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

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

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

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

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

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

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

7. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии btt в направлении единичного вектора $\vec{n}(\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3)$, если тензор электропроводности кристалла в

кристаллофизической системе координат имеет вид:

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

8. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\vec{n}\left(\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3\right)$, если тензор электропроводности кристалла в

кристаллофизической системе координат имеет вид:

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

9. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\vec{n}\left(\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2, 0\right)$, если тензор электропроводности кристалла в

кристаллофизической системе координат имеет вид:

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

10. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\vec{n}\left(\sqrt{2}/2, 0, \sqrt{2}/2\right)$, если тензор электропроводности кристалла в

кристаллофизической системе координат имеет вид:

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

11. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 2 в направлении единичного вектора $\vec{n}\left(0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2\right)$, если тензор электропроводности кристалла в

кристаллофизической системе координат имеет вид:

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

12. Вычислить значение электропроводности кристалла симметрии 4 в направлении

единичного вектора $\vec{n}\left(0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2\right)$, если тензор электропроводности кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

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

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

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

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

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

15. Вычислить значение абсолютной диэлектрической проницаемости кристалла симметрии 4 в направлении единичного вектора $\vec{n}\left(\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3\right)$, если тензор относительной диэлектрической проницаемости кристалла в кристаллофизической системе координат имеет вид:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.4. Примеры решения задач по определению вида тензора при смене системы координат

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

В данном выражении отбрасываем слагаемые, содержащие недиагональные элементы тензора:

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

Но недиагональные элементы матрицы преобразования равны нулю, поэтому $T_{1'2'} = 0$.

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

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

Отбросим слагаемые, которые содержат недиагональные элементы тензора:

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

Поскольку недиагональные элементы матрицы преобразования системы координат равны нулю, то $T_{1'3'} = 0$.

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

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

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

Отбросим слагаемые, содержащие недиагональные элементы тензора:

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

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

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

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

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

По тем же причинам, что и в предыдущих вычислениях получим

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

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

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

Отбрасываем все слагаемые, содержащие недиагональные элементы тензора:

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

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

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

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

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

4.5. Варианты заданий по определению вида тензора в новой системе координат

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

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 20 \end{pmatrix},$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{pmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 1.0 \end{pmatrix},$$

а матрица преобразования кристаллофизической системы координат в новую систему

имеет следующий вид:

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

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

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 1.0 \end{vmatrix},$$

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

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

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

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 4.8 & 0 \\ 0 & 0 & 10 \end{vmatrix},$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 5.8 & 0 \\ 0 & 0 & 6.8 \end{vmatrix},$$

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

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

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

$$\begin{vmatrix} 4.8 & 0 & 0 \\ 0 & 3.8 & 0 \\ 0 & 0 & 2.8 \end{vmatrix},$$

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

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

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

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

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

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

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

системе координат он имеет вид:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

15. Определить вид и значения компонент тензора \hat{T} ромбоэдрического кристалла

точечной симметрии mmm в новой системе координат, если в кристаллофизической системе координат он имеет вид:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

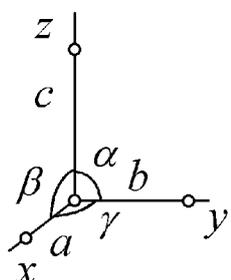
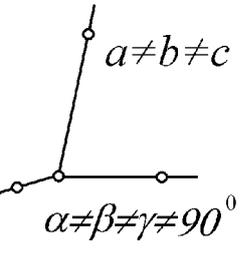
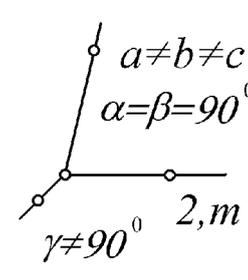
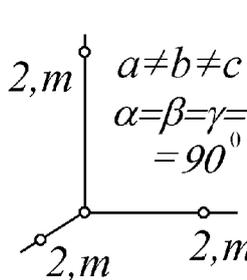
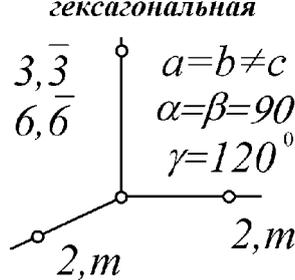
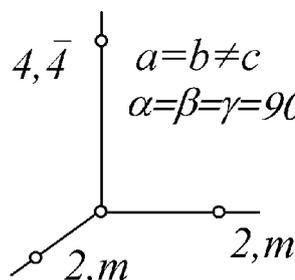
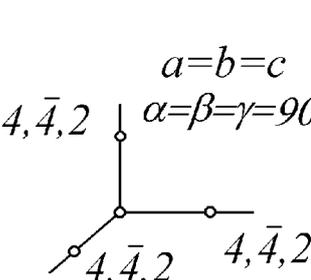
9. ЛИТЕРАТУРА

1. Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. – 639 с.
2. Н.В. Переломова, М.М. Тагиева. Задачник по кристаллофизике. М.: Наука, 1972. – 142 с.
3. Б.А. Струков. Сегнетоэлектричество. М.: Наука, 1979.
4. И. Костов. Кристаллография. М.: Мир, 1965.
5. И.С. Желудев. Симметрия и её приложения. М.: Атомиздат, 1976.
6. В.Н. Давыдов В.Н. Материалы и элементы электронной техники. Часть 1. Фундаментальные свойства кристаллических материалов. Томск, ТМЦ ДО, 2003. – 231 с.

ПРИЛОЖЕНИЯ

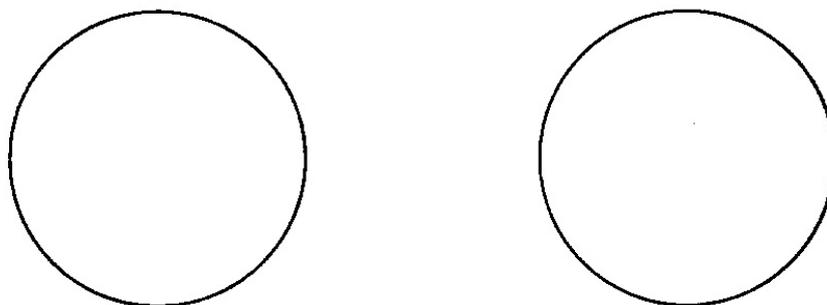
Таблица 1

Стандартные установки кристаллографической системы координат в кристаллах различных систем

<p>Обозначения:</p> 	<p>Триклинная</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$</p>	<p>Моноклинная</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma \neq 90^\circ$</p>	<p>Ромбическая</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>
<p>Тригональная и гексагональная</p>  <p>$3, \bar{3}$ $6, \bar{6}$</p> <p>$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$</p>	<p>Тетрагональная</p>  <p>$4, \bar{4}$</p> <p>$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>	<p>Кубическая</p>  <p>$4, \bar{4}, 2$</p> <p>$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>	

Стереографические проекции кристаллов
различной точечной симметрии

1 Триклинная сингония $\bar{1}$

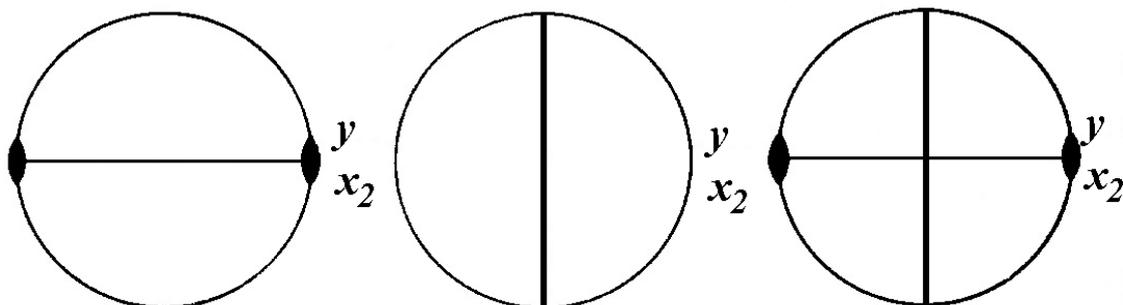


Моноклиная сингония

2

m

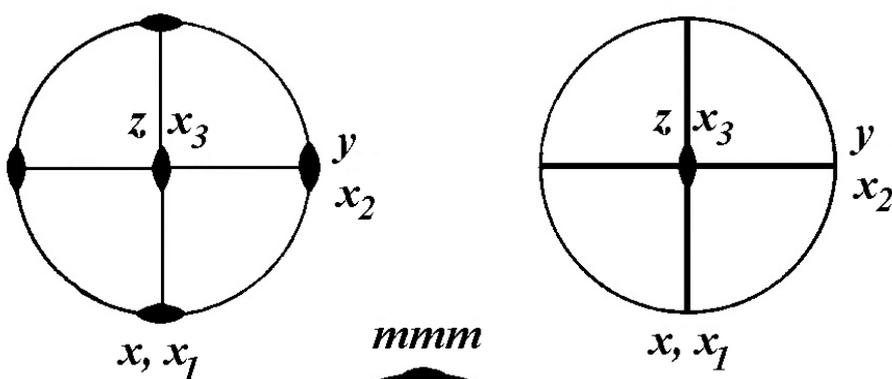
$2/m$



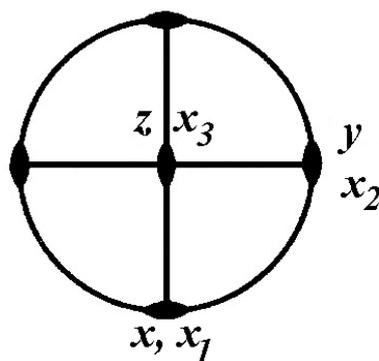
Ромбическая сингония

222

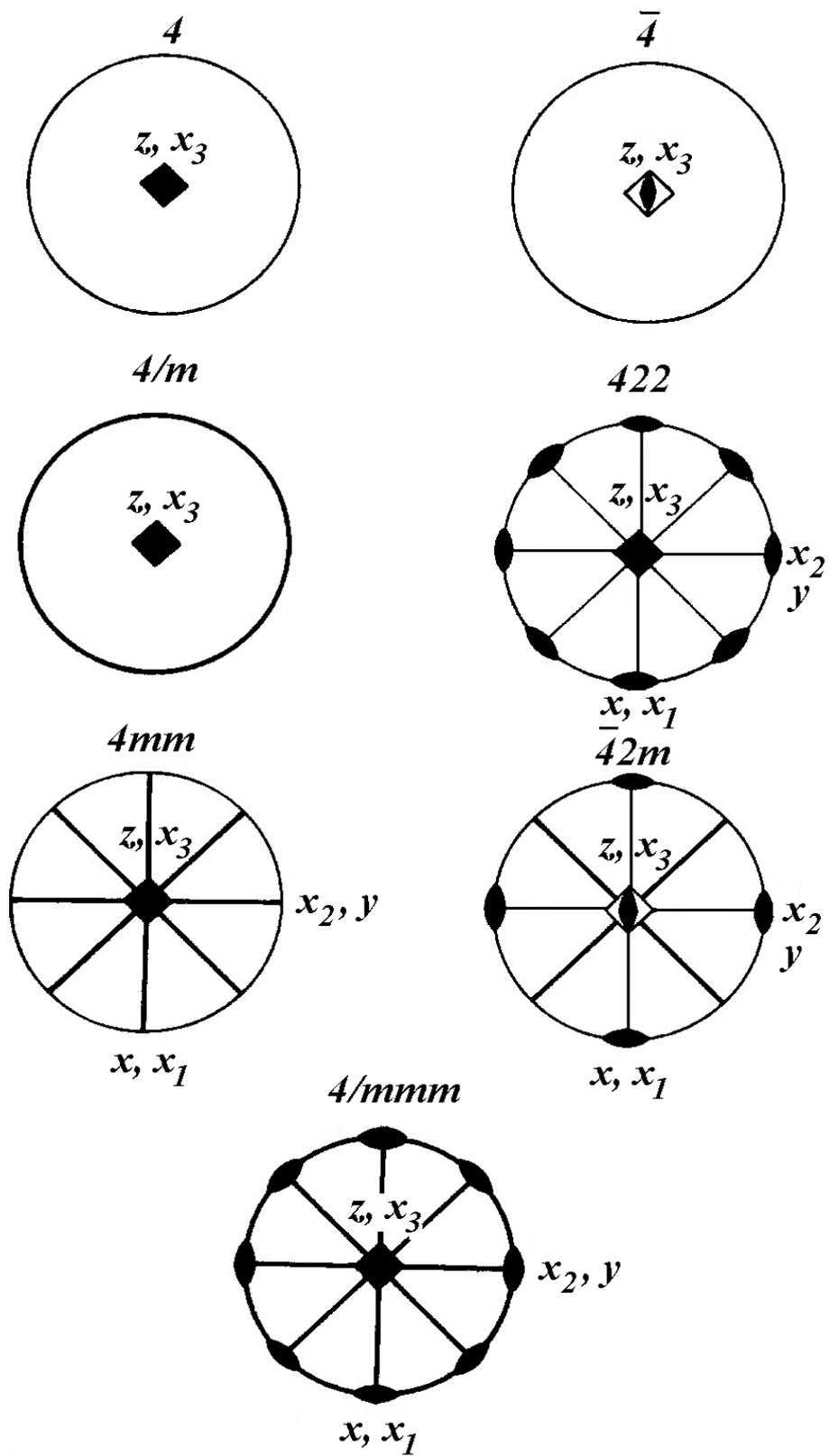
$mm2$



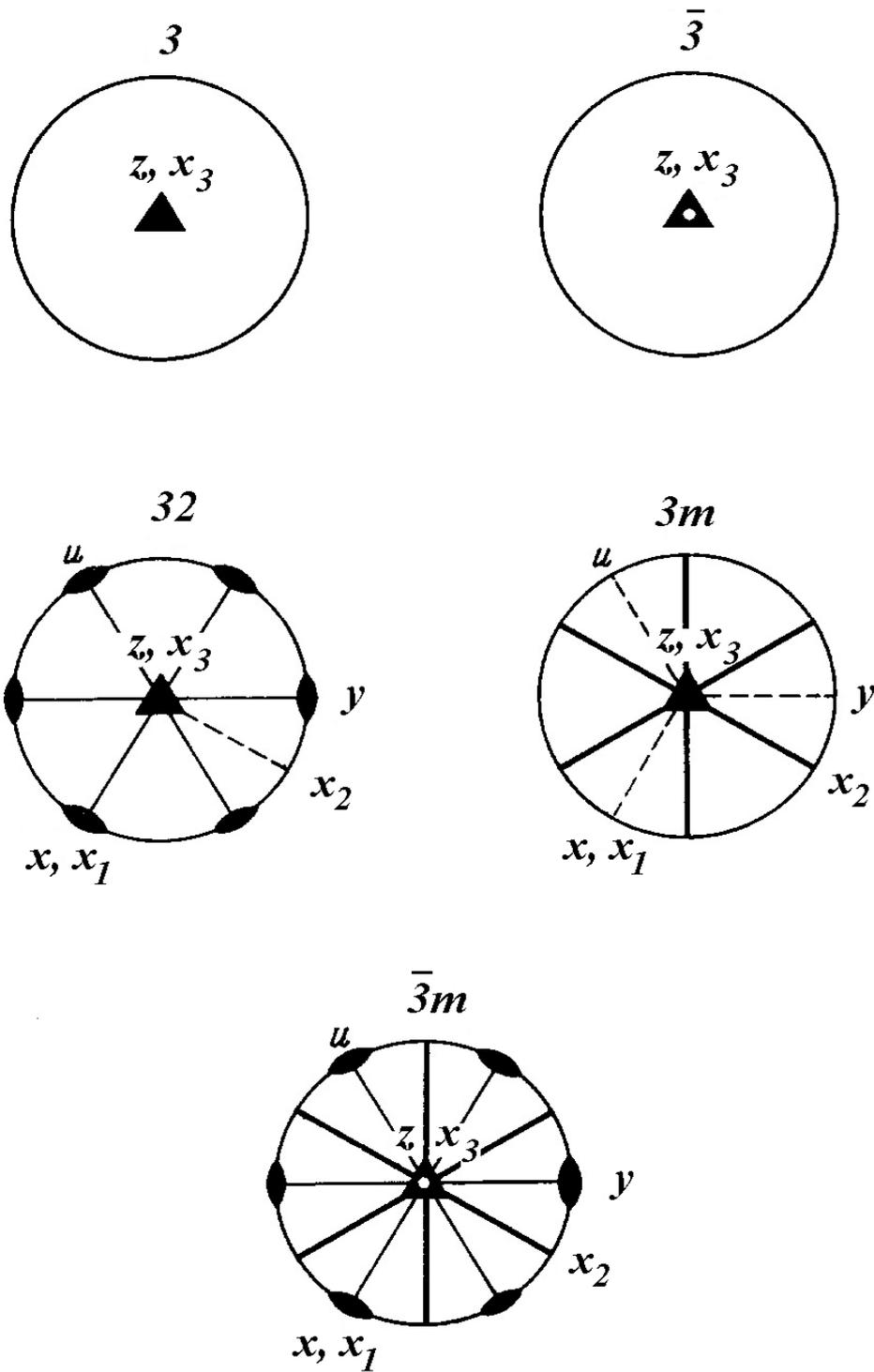
mmm



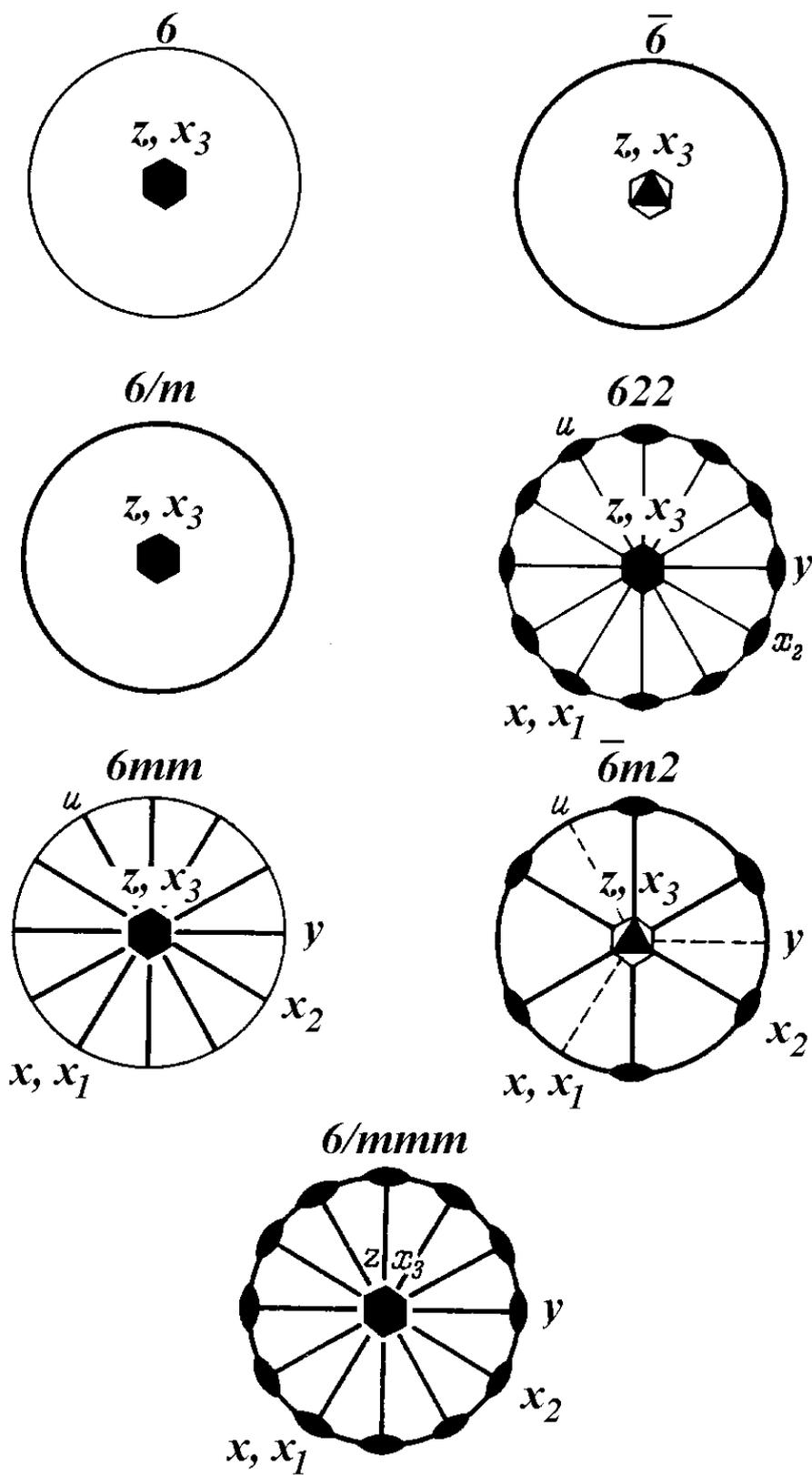
Тетрагональная сингония



Тригональная сингония



Гексагональная сингония



Кубическая сингония

